

Aus dem Institut für Mathematik
der Universität zu Lübeck
Direktor: Prof. Dr. Jürgen Prestin

Ein Finite-Volumen-Verfahren zur numerischen Simulation der
Temperaturverteilungen in Frühgeborenen

Inauguraldissertation
zur
Erlangung der Doktorwürde
der Universität zu Lübeck
- Aus der Technisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät -

Vorgelegt von
Martin Ludwig
aus Bad Oldesloe (Schleswig-Holstein)

Lübeck im November 2005

Erstberichterstatter: Herr Prof. Dr. Bernd Fischer (Universität zu Lübeck / Inst. f. Mathematik)

Zweitberichterstatter: Herr Prof. Dr. Jörg-Uwe Meyer (Drägerwerk AG, Lübeck)

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Mathematik der Universität zu Lübeck in Zusammenarbeit mit der Drägerwerk AG, Lübeck, im Rahmen des Förderprojektes „Entwicklung eines Verfahrens zur virtuellen Simulation von Wärmetherapien bei Früh- und Neugeborenen“ der Technologiestiftung Schleswig-Holstein.

Im Verlauf dieser Arbeit habe ich von verschiedenen Leuten Unterstützung erhalten, bei denen ich mich an dieser Stelle bedanken möchte.

Bei Herrn Prof. Dr. Bernd Fischer (Universität zu Lübeck / Institut für Mathematik) bedanke ich mich für die Betreuung und Begutachtung dieser Arbeit. Insbesondere danke ich ihm für das mir entgegengebrachte Vertrauen und die Möglichkeit zum selbständigen Arbeiten.

Bei Herrn Prof. Dr. Jörg-Uwe Meyer (Drägerwerk AG, Lübeck) bedanke ich mich für die Begutachtung dieser Arbeit.

Bei Herrn Dr. Jochim Koch (Drägerwerk AG, Lübeck) bedanke ich mich für die gute Zusammenarbeit und das rege Interesse an dieser Arbeit.

Bei meinem ehemaligen Diplomanden Herrn Dipl.-Inf. Michael Wronna und bei der System-Administratorin Frau Dipl.-Inf. Maike Wolf bedanke ich mich für die Unterstützung in technischen Fragen bei dieser Arbeit.

Bei den Mitarbeitern des Instituts für Mathematik der Universität zu Lübeck bedanke ich mich für die entspannte und offene Arbeitsatmosphäre.

Bei der Technologiestiftung Schleswig-Holstein bedanke ich mich für die Förderung dieser Arbeit.

Lübeck, 15. November 2005

Martin Ludwig

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	3
Einleitung	7
1 Modell der Thermoregulation	13
1.1 Modellbeschreibung	13
1.2 Modellgleichungen	16
2 Stabile Mehrschrittverfahren zur Zeitintegration	27
2.1 Einführung in die Stabilitätstheorie gewöhnlicher Differentialgleichungen	28
2.2 Vorbemerkungen über Differenzgleichungen	38
2.3 Der Begriff der absoluten Stabilität bei Mehrschrittverfahren	40
2.4 Semi-implizite Mehrschrittverfahren	55
3 Das Finite-Volumen-Verfahren	59
3.1 Ein einfaches Beispiel für ein vollständiges Finite-Volumen-Verfahren	59
3.2 Die Evolutionsgleichung der Zellmittelwerte	62
3.3 Die räumliche Diskretisierung	64
3.3.1 Struktur des Volumennetzes	64
3.3.2 Diskretisierung der inneren Flüsse	68
3.3.3 Diskretisierung der Randflüsse	70
3.3.4 Diskretisierung der Quellterme	73
3.3.5 Vorbereitungen für die zeitliche Diskretisierung	75
3.3.5.1 Vorbereitung der inneren Flüsse	75
3.3.5.2 Vorbereitung der Randflüsse	79
3.4 Die zeitliche Diskretisierung	80
3.4.1 Zeitdiskrete Bezeichner	81
3.4.2 Zeitintegration mit dem Einschrittverfahren CNEE	83
3.4.3 Zeitintegration mit dem Mehrschrittverfahren SBDF(3)	84
3.4.4 Das Finite-Volumen-Schema	86
4 Simulationsrechnungen	87
4.1 Netzgenerierung	87
4.2 Die Fundamentallösung der Wärmeleitungsgleichung als numerisches Testbeispiel	91
4.2.1 Anfangsrandwertproblem und Finite-Volumen-Verfahren	91
4.2.2 Numerische Resultate	94
4.3 Die Thermoregulation des Frühgeborenen als numerisches Testbeispiel	98
4.3.1 Physikalische und physiologische Eingangsdaten	98
4.3.2 Numerische Resultate	100

Zusammenfassung und abschließende Bemerkungen	121
Anhang A: Oberflächentriangulierung	123
Anhang B: Die Fundamentallösung der Wärmeleitungsgleichung	125
Bezeichnungen	133
Literatur	135
Erklärung	139
Lebenslauf	141

Einleitung

Als Frühgeborenes gilt jedes Kind, das vor dem Ende der 37. Schwangerschaftswoche zur Welt kommt, während 37-40 Wochen als normal angesehen werden. Die Schwangerschaftsdauer wird auch als Gestationsalter des Kindes bezeichnet. Neben ihr ist auch das Geburtsgewicht g zur Klassifikation von Frühgeborenen von Bedeutung. Man unterscheidet die drei Gruppen

1. LBW (low birth weight) mit $g \leq 2.5$ kg entsprechend einem ungefähren Gestationsalter von 31-35 Wochen.
2. VLBW (very low birth weight) mit $g \leq 1.5$ kg entsprechend einem ungefähren Gestationsalter von 27-30 Wochen.
3. ELBW (extreme low birth weight) mit $g \leq 1.0$ kg entsprechend einem ungefähren Gestationsalter von 22-27 Wochen,

(vgl. [25]). In Deutschland kommen ca. 7% aller Kinder zu früh auf die Welt, das sind ca. 55000 von jährlich ca. 800000 geborenen Babies.

Ursache für eine Frühgeburt können gesundheitliche Probleme der Mutter sein wie z. B. Bluthochdruck, Diabetes, Suchtprobleme oder chronische Herz- oder Nierenleiden. Aber auch plötzlich eintretende Komplikationen wie Fehlbildungen der Gebärmutter, Funktionsstörungen der Nieren / Leber oder Infektionen können der Grund sein. Ebenso können psychische Probleme, Stress- oder Schocksituationen für eine Frühgeburt verantwortlich sein. Bei ca. der Hälfte aller Frühgeburten kann jedoch keine eindeutige Ursache angegeben werden.

Durch die Fortschritte in der Medizin und der Medizintechnik sowie in der Betreuung von Frühgeborenen haben sich deren Überlebenschancen enorm verbessert. So liegt z. B. die Überlebensrate von Frühchen mit einem Geburtsgewicht von 0.5-0.75 kg inzwischen bei über 70%. Trotz aller Fortschritte sind aber mit der vorzeitigen Geburt Risiken verbunden. Ein Frühchen ist nunmal ein Mensch mit einem noch nicht ausgereiften Körper. Es muß vor allem geschützt werden vor

- Wärme- und Feuchtigkeitsverlusten an die Umgebung,
- Infektionen,
- Hypoxie (Sauerstoffunterversorgung).

Die Durchschnittstemperaturen in Intensivstationen für Früh- und Neugeborene liegen meistens unter 25°C . Für das Wohlbefinden des Pflegepersonals sind diese ausreichend, für Früh- oder kranke Neugeborene sind sie dagegen aufgrund von Auskühlungsgefahr lebensbedrohlich, selbst wenn sie durch Kleidung geschützt wären. Frühgeborene weisen im Vergleich zu reifen Neugeborenen oder Erwachsenen wesentlich höhere Wärmeverluste pro Kilogramm Körpergewicht auf (ca. Faktor 4). Gleichzeitig ist ihre Fähigkeit zur Reaktion auf Schwankungen des Umgebungsklimas (Thermoregulation des Körpers) stark eingeschränkt. Die thermoregulatorischen Maßnahmen Steigerung der Wärmeproduktion, Vasomotorik der Haut und Schweißsekretion entwickeln sich erst in den ersten Lebenswochen. Außerdem werden Wärmeverluste begünstigt durch die geringe Dicke der Körperschale, insbesondere des subkutanen Fettgewebes. Daher müssen besonders kleine oder unreife Frühchen in einer konstanten, warmen und feuchten Umgebung behandelt werden, um ihre Wärme- und Feuchtigkeitsverluste zu reduzieren und ihre Thermoregulation zu unterstützen. Hierfür kommen als Wärmetherapiegeräte Inkubatoren zum Einsatz. Dies sind abgeschlossene, einsehbare Areale aus Plexiglas („Brutkästen“), in denen unreife Neugeborene während der Risikophase behandelt und gepflegt werden, um ihnen ein Nachreifen unter künstlichen Bedingungen

außerhalb des Mutterleibes zu ermöglichen. Inkubatoren stellen ein luftbakteriengefiltertes Mikroklima bereit, welches im wesentlichen über die Parameter Lufttemperatur, Luftgeschwindigkeit, Feuchtigkeit und Sauerstoffkonzentration geregelt werden kann. Zusätzlich können Strahlungslampen zur Erhöhung der Wandtemperaturen angebracht werden. Das Kind kann unbekleidet im Inkubator liegen, was die Behandlung vereinfacht (uneingeschränkte Beobachtung, Überwachung der Atmung und Hautfarbe, schneller Zugriff, Anbringen von Meßfühlern und Überwachung ihrer korrekten Fixierung). Der Zugang zum Kind erfolgt über Handdurchgriffsöffnungen und Inkubatorklappen, die im Normalzustand geschlossen sind, um das Mikroklima nicht zu stören. Zur vollständigen Ausrüstung eines Inkubators gehören sowohl Therapiegeräte wie Beatmungs- und Anfeuchtungsgeräte und Infusionspumpen als auch Überwachungsgeräte wie Sauerstoffmeßgeräte, Herzfrequenz-, EKG-, Blutdruck- und Temperatur-Monitoring und Waagen.

Neben Inkubatoren sind auch Wärmestrahlungsgeräte, die zur Reanimation oder Behandlung (diagnostische Maßnahmen, intensivmedizinische Tätigkeiten) von unreifen Neugeborenen dienen, weit verbreitet. Es handelt sich um offene Pflegeeinheiten, die aus einem Bettchen mit einer isolierten oder beheizbaren Matratze sowie einer oberhalb angebrachten Strahlungslampe bestehen. Hier werden also die Wärmeverluste über Strahlung und Konduktion reduziert und eine gleichmäßige Wärmeverteilung auf der Liegefläche ist gewährleistet. Das Kind kann unbekleidet bleiben und ist jederzeit frei zugänglich. Da die Wärmezufuhr durch Strahlung schnell von statten geht und somit die Gefahr der Überhitzung besteht, sind offene Pflegeeinheiten mit Temperaturüberwachungssensoren und Regel- und Alarmsystemen ausgestattet.

Eine Einführung in die Entwicklung und Technik von Inkubatoren und offenen Pflegeeinheiten sowie in die Grundlagen der Thermoregulation von Frühgeborenen findet man in [24] und [17].

Modelle der Thermoregulation von Frühgeborenen mit einem entsprechenden Simulationstool dienen dazu, zu einem tieferen Verständnis ihres Wärmehaushalts in Interaktion mit dem sie umgebenden Mikroklima zu gelangen. Sie ermöglichen Einblick in die beteiligten Prozesse und deren Zusammenwirken. Weiterhin bieten sie sich als ein systematisches Hilfsmittel bei der Planung und Verbesserung von Wärmetherapien und Wärmetherapiegeräten an. Sie erlauben die Simulation von klinischen Situationen und die Vorhersage der Wirkung von Maßnahmen, ohne daß reale Patienten zu Versuchen herangezogen werden brauchen.

Eine Möglichkeit, die Thermoregulation zu simulieren, besteht in der Konstruktion von Hardware-Simulatoren (Manikins, Dummies). In der Arbeit [25] wurde auf der Grundlage von CT-Daten eines Frühgeborenen ein Kunststoffmodell gefräst. Basierend hierauf wurden Tonhüllen für die einzelnen Körperkompartimente gefertigt, die durch elektrische Heizwendeln im Inneren erwärmt werden konnten. Die Wasserverluste wurden nachgebildet durch die Diffusion von Wasserdampf aus Gore-Tex-Beuteln, die unter der Tonschicht angebracht wurden. An diesem Modell gemessene Oberflächentemperaturverteilungen wurden dann mit Thermographiedaten (Wärmebildkamera) aus einer klinischen Studie verglichen. Die Nachteile dieses Modells liegen auf der Hand. Zum einen ist die Realisierung extrem aufwendig. Zum anderen ist man mit einer Realisierung festgelegt auf genau eine Darstellung genau eines Kindes. Es besteht keine Flexibilität, um andere Körpergrößen, Gewichte oder thermoregulatorische Reifegrade zu simulieren.

Als Alternative zur Hardware-Simulation bietet sich die mathematische Modellierung und rechnergestützte Simulation an. Die Abbildung 1 auf S. 9 veranschaulicht dieses Vorgehen. Sie ist unterteilt in die reale, nicht-mathematische Ebene (unten) und die mathematische Ebene (oben). Außerdem zerfällt sie in die Problemseite (links) und die Lösungsseite (rechts). Ausgangspunkt der mathematischen Modellierung ist das reale Problem der Thermoregulation. Hieraus wird ein mathematisches Problem entwickelt, welches ein Bild der Wirklichkeit ist. Dies ist hier die aus der Physik bekannte Wärmeleitungsgleichung, welche durch geeignete Modifikationen zur sog. bio-heat-transfer-equation (BHTE) wird. Diese beschreibt die Temperaturverteilungen im Frühchen.

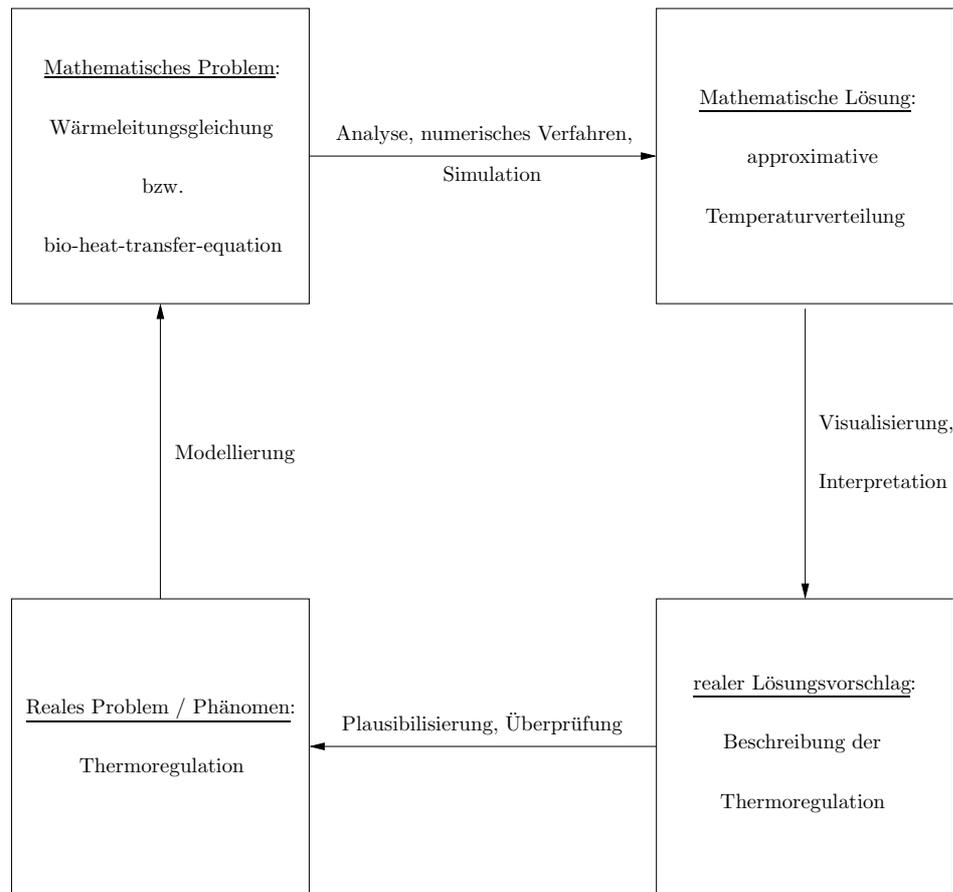


Abbildung 1: Der Modellierungsprozeß der Thermoregulation

Anschließend wird das so vorliegende, mathematische Problem analysiert und mit einem numerischen Verfahren simuliert. Letzteres liefert als mathematische Lösung eine approximative Temperaturverteilung für das Innere des Frühchens. Diese wird wiederum visualisiert und dann hinsichtlich ihrer realen Bedeutung interpretiert. Diese Interpretation liefert als realen Lösungsvorschlag eine Beschreibung der Thermoregulation, welche schließlich auf ihre Gültigkeit und Relevanz für das reale Problem plausibilisiert und überprüft wird.

Die hier vorliegende Arbeit entstand im Rahmen des Förderprojektes „Entwicklung eines Verfahrens zur virtuellen Simulation von Wärmetherapien bei Früh- und Neugeborenen“ der Technologiestiftung Schleswig-Holstein in Zusammenarbeit mit der Drägerwerk AG, Lübeck. Zu ihr gibt es einige Vorarbeiten, die im folgenden kurz zusammengefaßt werden.

In der Arbeit [9] wurde nach einer Synopse des physiologischen Wissens über die Temperaturregelung beim Menschen und neben der Entwicklung eines Hauttemperaturreglers erstmalig ein Programm zur Simulation des dynamischen Wärmeverhaltens von Früh- und Neugeborenen unter Inkubatorbedingungen entwickelt. Die reale Geometrie des Kindes wurde ersetzt durch ein Kompartimentmodell. Dies besteht aus 6 räumlich separierten Kompartimenten: Einer Kugel als Abbild des Kopfes und 5 Zylindern für Rumpf, Arme und Beine. Jedes von ihnen ist in 3 - 4 Materialschichten unterteilt, welche wiederum zur räumlichen Diskretisierung in Unterschichten aufgeteilt sind. Der Rumpf beispielsweise besteht aus konzentrischen Zylinderröhren. Das eigentliche mathematische Modell ist so parametrisiert, daß sowohl Kinder mit verschiedenen Größen,

Gewichten, Gestationsaltern und thermischen Reifegraden als auch unterschiedliche Inkubatorbedingungen (Lufttemperatur, Feuchte) abgebildet werden können. Modelliert wurden die wesentlichen, am Wärmehaushalt beteiligten Prozesse molekulare Wärmeleitung, Wärmeproduktion, Blutfluß, Konvektion, Radiation, transepidermale und respiratorische Wasserverluste sowie die thermoregulatorischen Mechanismen zitterfreie Thermogenese und Vasomotorik der Haut. Der Wärmeaustausch zwischen den einzelnen Kompartimenten wurde über einen zentralen Blutpool modelliert. Die Gesamtmodellierung weist allerdings auch Nachteile auf. Die reale Geometrie eines Kindes ist durch ein Kompartimentmodell nur unzureichend dargestellt. Außerdem können nur radialsymmetrische Temperaturabhängigkeiten berechnet werden, sodaß nur eindimensionale Wärmeleitungsprozesse in jedem Kompartiment betrachtet werden können. Hinzu kommt, daß in jeder Unterschicht nur ein Temperaturmittelwert für die ganze Schicht errechnet wird, sodaß sich nur homogene Temperaturprofile ergeben. Aus diesen Nachteilen ergibt sich ferner die Unmöglichkeit einer visuellen Aufbereitung und plausiblen, dreidimensionalen Darstellung der Temperaturverteilungen im Körper.

In der Arbeit [49] wurden erste Schritte unternommen, um die genannten Beschränkungen aufzulösen. Es wurden stationäre Temperaturverteilungen in zweidimensionalen Schnitten durch das Kind errechnet. Die Geometrie wurde wieder durch Kreis- und Rechteckgebiete approximiert, allerdings so, daß sich ein zusammenhängendes Rechengebiet ergab. So war es prinzipiell möglich, beliebig komplexe Real-Geometrien zumindest in 2D-Schnitten abzubilden. Berücksichtigt wurden die grundlegenden Wärmehaushaltsprozesse molekulare Wärmeleitung, Wärmeproduktion und Blutfluß bei fest vorgegebenen Außentemperaturen. Zur numerischen Lösung der bio-heat-transfer-equation wurde ein Finite-Volumen-Verfahren entwickelt und implementiert, das durch Beweis eines diskreten Hopf'schen Maximumprinzips in theoretischer Hinsicht abgesichert wurde. Ein wesentliches Ergebnis der durchgeführten numerischen Testläufe war die Bestätigung, daß eine selektive Kopfkühlung zur neuroprotektiven Hypothermie des Gehirns (s. [9]) nicht erfolgversprechend ist.

In der Arbeit [18] wurden erste Schritte unternommen in Richtung dreidimensionaler Simulationen. Die wesentliche Relevanz dieser Arbeit für die hier vorliegende besteht in der Gang- und Nutzbarmachung eines Volumennetzgenerators aus der numerischen Strömungsmechanik zur Erzeugung von räumlichen Diskretisierungen vorgegebener Gebiete des \mathbb{R}^3 sowie in der Bereitstellung von Visualisierungstools zur Darstellung räumlicher Temperaturverteilungen.

Die Arbeit [72] beschäftigt sich etwas allgemeiner mit der numerischen Simulation von instationären, also zeitabhängigen Wärmeleitungsvorgängen in Festkörpern. In ihr wurde auf der einfachen Geometrie eines Würfels die reine Wärmeleitungsgleichung, also die denkbar einfachste bio-heat-transfer-equation approximativ gelöst. Das Ziel dabei war, bei Beschränkung auf sehr einfache Geometrien und sehr einfache Modellierung die verfahrenstechnischen Grundlagen der numerischen Zeitintegration zu erarbeiten, um sie später für die Simulation der Thermoregulation zur Verfügung zu haben.

Die hier vorliegende, aus vier Kapiteln und zwei Anhängen bestehende Arbeit verfolgt das Ziel, ein numerisches Verfahren / Softwarepaket zur zeitgenauen Berechnung der Temperaturverteilungen im Körper eines Frühchens zu entwickeln. Dabei wird auf eine ganzheitliche Darstellung Wert gelegt, d. h. es wird detailliert auf die Modellierung der Thermoregulation eingegangen, die Entwicklung des numerischen Verfahrens wird ausführlich beschrieben und theoretisch begründet und es werden ausgiebig numerische Testergebnisse präsentiert.

Das hier verwendete Modell der Thermoregulation ist eine Weiterentwicklung des in [9] aufgestellten Modells und wird in Kapitel 1 ausführlich diskutiert. Die wesentliche Erweiterung besteht darin, daß es nun möglich ist, Simulationen auf realen, dreidimensionalen Frühchen-Geometrien durchzuführen, d. h. beliebig komplexe Geometrien können diskretisiert werden. Somit ist die Be-

schränkung auf vereinfachte Geometrien aus Zylinder- und Kugelmodellen aufgehoben. Außerdem wird gleichzeitig dafür gesorgt, daß instationäre Wärmehaushaltsprozesse, also die zeitliche Entwicklung der Temperaturverteilungen in Frühchen abgebildet werden können. Das Modell wird ferner dahingehend erweitert, daß Simulationen eines Frühchens sowohl unter Inkubatorbedingungen als auch unter den Umgebungsbedingungen einer offenen Pflegeeinheit möglich sind. Für die radiativen Wärmeverluste im Inkubatorfall wird zusätzlich eine Modellgleichung verwendet, mit der die Wandtemperaturen des Inkubators berechnet und damit die entsprechenden Strahlungstemperaturen simuliert werden können. Im Fall der offenen Pflege wird stattdessen die Wärmeenergie einer Strahlungs Lampe modelliert. Als weitere Modell-Modifikation ist im Hinblick auf die konvektiven Wärmeverluste die Berücksichtigung der Luftströmungsgeschwindigkeiten zu nennen, die im Inkubator oder im Raum der Pflegeeinheit vorliegen. Ferner wird eine neue Randbedingung in das Modell eingeführt, um konduktive Wärmeverluste simulieren zu können. Hierbei sind die Simulation sowohl von Isolier- als auch von Heizmatratzen möglich. Im übrigen wird zusätzlich die Kern- und damit die Solltemperatur des Frühchens als Funktion des Gestationsalters modelliert. Die gesamte Modellierung wird am Ende des ersten Kapitels in einem Anfangsrandwertproblem (ARWP) formuliert, welches aus der bio-heat-transfer-equation und zugehörigen Anfangs- und Randbedingungen besteht. Die bio-heat-transfer-equation beschreibt dabei die zeitlichen Entwicklungen der molekularen Wärmeleitung, der Wärmeproduktion, des Blutflusses und der Respiration innerhalb des Frühchens. Zur numerischen Lösung dieses Anfangsrandwertproblems wird (nach einem vorbereitenden zweiten Kapitel) in Kapitel 3 ein Finite-Volumen-Verfahren (FVV) entwickelt. Die Klasse der Finite-Volumen-Verfahren wurde aus zwei Gründen ausgewählt. Zum einen kommen sie der bio-heat-transfer-equation in natürlicher Weise entgegen, da sie auf einer diskreten Formulierung der Integralform dieser Gleichung beruhen. Damit zum anderen das numerische Verfahren auf realen Geometrien arbeiten kann, ist die Verwendung von körperangepaßten und nicht strukturierten Netzen geboten. Finite-Volumen-Verfahren stellen keine Forderungen an die Gestalt der einzelnen Netzzellen, sodaß hier eine hohe Flexibilität gewährleistet ist. Kapitel 3 beschreibt zunächst als ersten wesentlichen Schritt die räumliche Diskretisierung im Rahmen eines Finite-Volumen-Verfahrens. Hierbei wird das Rechengebiet der Frühchen-Geometrie in zahlreiche, kleine Teilgebiete zerlegt. Auf jedem Teilgebiet wird dann eine lokale Energiebilanz aufgestellt, welche durch die sogenannte Evolutionsgleichung der Zellmittelwerte quantitativ gefaßt wird. Dies ist eine gewöhnliche Differentialgleichung in der Zeit (ODE), sodaß also das gegebene Anfangsrandwertproblem in ein großes System gewöhnlicher Differentialgleichungen überführt wird. Anschließend nimmt die Approximation der durch dieses System beschriebenen inneren Wärmeflüsse, Randwärmeflüsse und Wärmeproduktions- bzw. Verteilungsprozesse einen breiten Platz innerhalb des dritten Kapitels ein. Die wesentliche, sich daran anschließende Schwierigkeit ist, die gefundenen Approximationsfunktionen zusammenfassend und kompakt zu formulieren. Es ist gelungen, für fast alle von ihnen kurze lineare oder affin-lineare Darstellungen herzuleiten, sodaß die anschließende zeitliche Diskretisierung des Evolutionssystems überhaupt formuliert werden konnte. Da ODE-Systeme, die aus Diffusionsprozessen wie hier dem Wärmeleitungsproblem stammen, bekanntermaßen numerisch schwer zu integrieren sind („steife“ Systeme), kam der gezielten Auswahl eines Zeitintegrationsverfahrens als zweitem wesentlichen Schritt im Rahmen des zu entwickelnden Finite-Volumen-Verfahrens besondere Bedeutung zu. Deswegen wird in einem vorbereitenden zweiten Kapitel die Theorie der stabilen Mehrschrittverfahren erarbeitet. Um hier zu einem tiefen und grundlegenden Verständnis zu gelangen, ist es nötig, sich mit der Stabilitätstheorie gewöhnlicher Differentialgleichungen und der Stabilität von Mehrschrittverfahren im Zusammenhang zu beschäftigen. In der Literatur werden diese beiden Gebiete meist getrennt voneinander und ohne weiteren Bezug zueinander dargestellt. Deshalb wird in Kapitel 2 zunächst ein Einblick in das erstgenannte der beiden Gebiete gegeben, speziell der Begriff der asymptotischen Stabilität von linear-autonomen Systemen wird studiert. Bei der Darstellung wird auf große Ausführlichkeit, detaillierte, vereinfachte Beweise und vollständig durchgerechnete Beispiele Wert

gelegt, sodaß der Abschnitt 2.1 als mustergültige Einführung in dieses Teilgebiet der Theorie der gewöhnlichen Differentialgleichungen bezeichnet werden kann. Anschließend wird ein klarer Bezug vom Begriff der asymptotischen Stabilität zum Begriff der absoluten Stabilität von Mehrschrittverfahren hergestellt. Die Vererbung der asymptotischen Stabilität an Mehrschrittverfahren spielt dabei eine entscheidende Rolle, denn durch sie werden Mehrschrittverfahren ausgezeichnet, die besondere Stabilitätseigenschaften aufweisen und deswegen geeignet sind, um das Evolutionssystem numerisch zu lösen. Dieser Vererbungsprozeß von ODE-Systemen an Mehrschrittverfahren scheint in der numerischen Literatur selten klar herausgearbeitet und selten auf elementare Weise dargestellt zu werden. Um diesen Mißstand zu beheben, wird jener in Abschnitt 2.3 vollständig erarbeitet. Wesentlicher Verständnissgewinn dabei ist, daß die impliziten BDF-Verfahren (backward-differentiation-formula) aufgrund ihrer großen Stabilitätsbereiche zur Zeitintegration verwendet werden sollten. Da durch das erhaltene Evolutionssystem allerdings nicht nur Diffusionsprozesse, sondern auch global von allen Körpertemperaturen abhängige Produktions- und Verteilungsprozesse beschrieben werden, würde eine direkte Anwendung eines impliziten BDF-Verfahrens zu schweren Speicherplatzproblemen führen. Daher sind noch Weiterentwicklungen von Mehrschrittverfahren nötig, um zu direkt anwendbaren Zeitintegrationsverfahren zu gelangen. Daher werden in Abschnitt 2.4 noch exemplarisch die semi-impliziten Mehrschrittverfahren (IMEX-Verfahren), speziell auch das semi-implizite BDF(3)-Verfahren eingeführt. Nachdem dann mit Kapitel 2 und 3 die vollständige Entwicklung eines Finite-Volumen-Verfahrens für das Anfangsrandwertproblem der Thermoregulation abgeschlossen ist, wird in Kapitel 4 zunächst erläutert, wie die 3D-Geometrie eines realen Frühchens computergerecht umgesetzt werden kann. Anschließend werden numerische Tests präsentiert, die an einem Wärmeleitungsproblem gemacht wurden, dessen exakte Lösung bekannt ist. Diese verliefen sehr zufriedenstellend, sodaß die Herleitung und auch die Implementierung des Finite-Volumen-Verfahrens in einem C++-Code als validiert angesehen werden konnten und somit das Verfahren / der Code auf das eigentliche Problem der Thermoregulation angewendet werden konnte. Die so erzeugten und in Abschnitt 4.3.2 farblich visualisierten numerischen Testergebnisse entsprechen stets den physikalischen Erwartungen aus der Realität und spiegeln klar die Mechanismen des Thermoregulationsmodells wider, wobei die benötigten Rechenzeiten für die gewählte hohe räumliche Auflösung akzeptabel sind. Das implementierte Verfahren ist somit ein geeignetes Werkzeug, um systematische Untersuchungen zur Thermoregulation von Frühgeborenen zu machen. Abschließend enthält diese Arbeit noch zwei Anhänge. Der Anhang A beschreibt kurz die für Kapitel 4 nötigen technischen Vorbereitungen. Um die reale Geometrie eines Frühchens abbilden zu können, wurden MRT-Aufnahmen von einem solchen gemacht. Mit Hilfe von Techniken aus der medizinischen Bildverarbeitung konnte aus diesen die Oberfläche des Frühchens extrahiert und mit einer Triangulierung versehen werden. Hieraus wiederum wurde mit einem Netzgenerator aus der numerischen Strömungsmechanik ein Volumennetz des Säuglings für die räumliche Diskretisierung des Finite-Volumen-Verfahrens erzeugt (Kapitel 3 und 4). Im Anhang B wird ein erstes analytisches Hintergrundwissen zur Wärmeleitungsgleichung bereitgestellt, insbesondere wird die Bedeutung ihrer Fundamentallösung studiert, da diese in Kapitel 4 für Testzwecke verwendet wurde.

1 Modell der Thermoregulation

In diesem Kapitel wird zunächst eine Beschreibung des Modells der Thermoregulation eines Frühgeborenen vorgenommen, um eine Vorstellung von den beteiligten Prozessen zu ermöglichen und einen Überblick über das ganze Modell zu geben. Anschließend wird es durch Aufstellung der Modellgleichungen detailliert festgelegt.

1.1 Modellbeschreibung

Homoiothermie ist die Fähigkeit eines Lebewesens, seine Körpertemperatur auf hohem Niveau, d. h. weit über der mittleren Temperatur seines Lebensraumes, konstant zu halten. Sie garantiert einen gleichmäßig aktiven Stoffwechsel, erfordert aber auch eine entsprechende Nahrungszufuhr. Ihr Gegenteil ist die Poikilothermie, bei der die Körpertemperatur von der Umgebungstemperatur abhängt. Der Mensch ist ein homoiothermes Wesen mit einem Temperaturniveau von $36.5^{\circ}\text{C} - 37^{\circ}\text{C}$ unter normalen Bedingungen. Er verfügt über einen hohen Ruheenergieumsatz (Wärmeproduktion) sowie über einen Energieverteilungsmechanismus (Blutfluß). Diesen gegenüber stehen die Wärmeverluste über die Hautoberfläche und über die Atmung. Außerdem ist er in der Lage, diese Mechanismen in gewissen Grenzen zu regeln (autonome Thermoregulation). Das Gesagte gilt insbesondere auch für Frühgeborene, allerdings mit quantitativen Unterschieden. Die hier vorgenommene Modellierung bezieht sich auf die reale 3D-Geometrie eines frühgeborenen Säuglings bestehend aus den 4 Materialschichten Haut, Fett, Schädelknochen und Kern. Der Säugling liegt in einem Inkubator oder in einer offenen Pflegeeinheit mit Strahlungs Lampe. Im folgenden werden die insgesamt sieben modellierten Wärmeaustauschprozesse kurz erläutert. Fast alle gehen als Quelle oder als Randbedingung ein. Dabei ist unter einer Quelle eine Stelle im Körper zu verstehen, an der Wärmeenergie „entsteht“ oder „vernichtet“ wird, d.h. aus anderen oder in andere Energieformen umgewandelt wird. Randbedingungen beschreiben die „Kommunikation“, d. h. die Wechselwirkung des Säuglings mit seiner Umgebung.

Wärmeleitung, -produktion und -verteilung

1. Die molekulare Wärmeleitung geht weder als Quelle noch als Randbedingung in das Modell ein, sondern als Diffusionsvorgang. Sie beschreibt die Wärmeausbreitung auf kurzen Wegen durch das vor Ort vorliegende Gewebe und ist somit von dessen Wärmeleitfähigkeit abhängig. In den Randschichten des Kindes, z.B. den Knochen, wo weder Blut fließt noch Wärme produziert wird, ist sie dominierend, im Körperkern spielt sie eine geringere Rolle.
2. Die Wärmeproduktion durch Stoffwechseltätigkeit geht als Quelle in das Modell ein, d.h. die Wärmeproduktion des Gewebes wird in jedem Punkt des Körpers angegeben. In den Zellen wird beim Abbau der Nährstoffe ständig Wärme frei. Die größten Wärmemengen entstehen in dem metabolisch aktivsten Organ Gehirn (mindestens 60%), ferner auch in der Leber, im Herz und in den Nieren (vgl. [25]). Das Vermögen des Säuglings zur Produktion von Wärme ist von seinem Lebensalter und seinem Körpergewicht abhängig.
3. Der Blutfluß geht ebenfalls als Quelle in das Modell ein, d.h. die Durchblutung des Gewebes und damit der Wärmeumsatz in jedem Punkt des Körpers wird angegeben. Der Blutfluß ist die wichtigste Wärmeübertragungsmöglichkeit innerhalb des Körpers, durch Blutflußsteuerung kann der Wärmetransport geregelt werden. Hier wird also die Verteilung von Wärmemengen modelliert, die groß sind oder über relativ weite Distanzen im Körper transportiert werden müssen. Im Körperkern ist die Durchblutung der entscheidende Träger für den Wärmetransport, in den Randbereichen Fett oder Knochen ist sie vernachlässigbar klein, während sie in der Haut für die Vasomotorik verantwortlich ist (s. u.).

Wärmeverluste

Die Wärmeverluste werden durch die fünf Prozesse respiratorische Wasserverluste (RW), extraglanduläre transepidermale Wasserverluste (TW), Radiation, Konvektion und Konduktion modelliert (vgl. Abbildung 2).

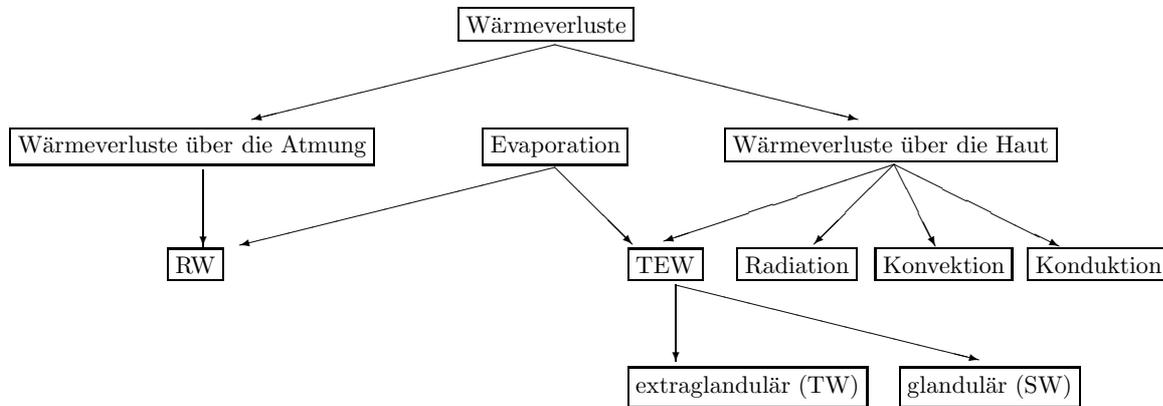


Abbildung 2: Unterschiedliche Möglichkeiten des Wärmeverlusts

1. Die respiratorischen Wasserverluste (RW) und die transepidermalen Wasserverluste (TEW) werden zusammen auch als Evaporation bezeichnet (Verdunstung von Wasser).
 - (a) Bei den transepidermalen Wasserverlusten (TEW) unterscheidet man die extraglandulären und die glandulären transepidermalen Wasserverluste (vgl. [24]).
 - i. Die extraglandulären transepidermalen Wasserverluste (TW) beruhen auf der Diffusion von Wasser durch die Haut und werden auch als passive Wärmeverluste bezeichnet. Da die Haut beim Frühchen noch sehr dünn ist („Pfrsichhaut“), geht die Diffusion leicht von statten. Die Wärmeverluste hierüber müssen daher auf jeden Fall berücksichtigt werden. Die extraglandulären transepidermalen Wasserverluste sind u. a. abhängig vom Gestationsalter (Schwangerschaftsdauer) und vom Lebensalter und damit von der Reife der Haut. Sie gehen als Randbedingung in das Modell ein.
 - ii. Die glandulären transepidermalen Wasserverluste (SW) bestehen in der Absonderung von Wasser durch die Schweißdrüsen (Schwitzen) und werden auch als aktive Wärmeverluste bezeichnet. Durch die Verdunstung des Wassers auf der Hautoberfläche wird dem Körper Wärmeenergie entzogen. Die glandulären transepidermalen Wasserverluste treten erst dann ein, wenn die sonstigen Wärmeverluste nicht mehr zur Kühlung ausreichen. Sie werden in diesem Modell nicht weiter betrachtet, da Frühgeborene aufgrund noch unterentwickelter Schweißdrüsen nicht oder nur in sehr geringem Umfang in der Lage sind, zu schwitzen.
 - (b) Unter respiratorischen Wasserverlusten (RW) versteht man die Verdunstung über den Atem. Die eingeatmete Luft wird in den Atemwegen und der Lunge befeuchtet (und erwärmt). Die Feuchtigkeit wird dann beim Ausatmen an die Umgebung abgegeben. Die respiratorischen Wasserverluste hängen von der Lufttemperatur und der Luftfeuchtigkeit ab und gehen als Quelle in das Modell ein.
2. Durch die Radiation, d.h. die Wärmeübertragung durch Temperaturstrahlung, wird die elektromagnetische Wirkung der Umgebung auf den Körper beschrieben. Mit der von der

Haut ausgehenden, langwelligen Infrarotstrahlung ist ein Verlust von Wärmeenergie verbunden. Umgekehrt kann natürlich auch eine Wärmeaufnahme durch Strahlung erfolgen, die z. B. von umgebenden Inkubator- oder Raumwänden oder von einer Strahlungslampe ausgesandt wird. Die Radiation geht als Randbedingung in das Modell ein.

3. Durch die Konvektion wird die Wärmeübertragung zwischen dem Körper und der ihn umströmenden Luft beschrieben. Sie wird nicht als Diffusionsvorgang modelliert. Stattdessen führen empirische Gleichungen aus Strömungsversuchen zu einer sachgerechteren Modellierung. Die Wärmeübertragung durch Konvektion hängt u. a. von der Lufttemperatur und der Luftgeschwindigkeit ab und geht als Randbedingung in das Modell ein.
4. Durch die Konduktion wird der Wärmestrom zwischen dem Körper und der Matratze, auf der er liegt, beschrieben. Dabei kommen sowohl unbeheizte Matratzen in Frage, die lediglich als Isolierung wirken, als auch beheizte Matratzen zur Erwärmung des Patienten. Die Konduktion hängt u. a. von der Matratzen-Temperatur ab und geht als Randbedingung in das Modell ein.

Regelungsmechanismen

Dem Frühchen ist dann thermisch behaglich, wenn sich seine Wärmeproduktion und seine Wärmeverluste ausgleichen, d. h. wenn eine minimale Wärmeproduktion ausreicht, um die Verluste aufzuwiegen. Hierfür hat der Körper die Thermoregulation entwickelt, mit der die beiden Prozesse Wärmeproduktion und Blutfluß geregelt werden können. Dies ist ein Steuermechanismus, der das bisher als passiv beschriebene System zu einem aktiven macht, d. h. die Reaktionen des Säuglings auf Abkühlung oder Erwärmung werden modelliert (vgl. [58]). Die Regelgröße dieses Systems ist die Körpertemperatur. Es wird davon ausgegangen, daß sowohl im Körperinneren als auch in der Haut Temperatursensoren vorhanden sind, die ihre Messungen dem Hypothalamus als zentralem Regler zuführen (vgl. Abbildung 3). Dieser integriert diese afferenten Temperatursignale zu einem Gesamtsignal, welches die mittlere Körpertemperatur darstellt und als afferente Temperatur bezeichnet wird (afferent - zuführend, zuleitend; lat. affere - herbeitragen). Dabei werden die Signale aus dem Körperinnern viel stärker gewichtet als die Hauttemperatursignale. Weicht die afferente Temperatur von einem gegebenen Sollwert ab (Regelabweichung), so kann das Frühchen zwei thermoregulatorische Effektormassnahmen ergreifen: Veränderung der Hautdurchblutung (Vasomotorik der Haut) und Steigerung der Wärmeproduktion.

1. Einer geringen Regelabweichung wird zunächst nur durch die Vasomotorik entgegengewirkt. Dies kann in zwei Richtungen geschehen:
 - (a) Bei Abkühlung führt eine Reduzierung der Hautdurchblutung (Vasokonstriktion) zu einer geringeren Hauttemperatur und damit zu geringeren Wärmeverlusten. Hiermit wird einer Hypothermie, d. h. einer zu starken Kältebelastung vorgebeugt.
 - (b) Bei Erwärmung führt eine Verstärkung der Hautdurchblutung (Vasodilatation) zu einer höheren Hauttemperatur und damit zu höheren Wärmeverlusten. Hiermit wird einer Hyperthermie, d. h. einer zu starken Wärmebelastung vorgebeugt.

Der Bereich der Umgebungstemperatur, in dem allein die Vasomotorik ausreicht, um eine ausgeglichene Wärmebilanz wiederherzustellen, wird als thermische Neutralzone bezeichnet (vgl. [58]).

2. Bei einer stärkeren (negativen) Regelabweichung im Abkühlungsfall wird nicht nur die Vasomotorik in Gang gesetzt, sondern auch eine Steigerung der Wärmeproduktion im Rumpfkern vorgenommen. Hierbei erzeugt das braune Fettgewebe, welches hauptsächlich im Rumpfkern vorhanden ist, durch die sogenannte zitterfreie Thermogenese Stoffwechselwärme. Damit wird einer Hypothermie vorgebeugt. Der Prozeß des Kältezitterns wird hier nicht betrachtet, da die Fähigkeit dazu Frühgeborenen noch nicht gegeben ist.

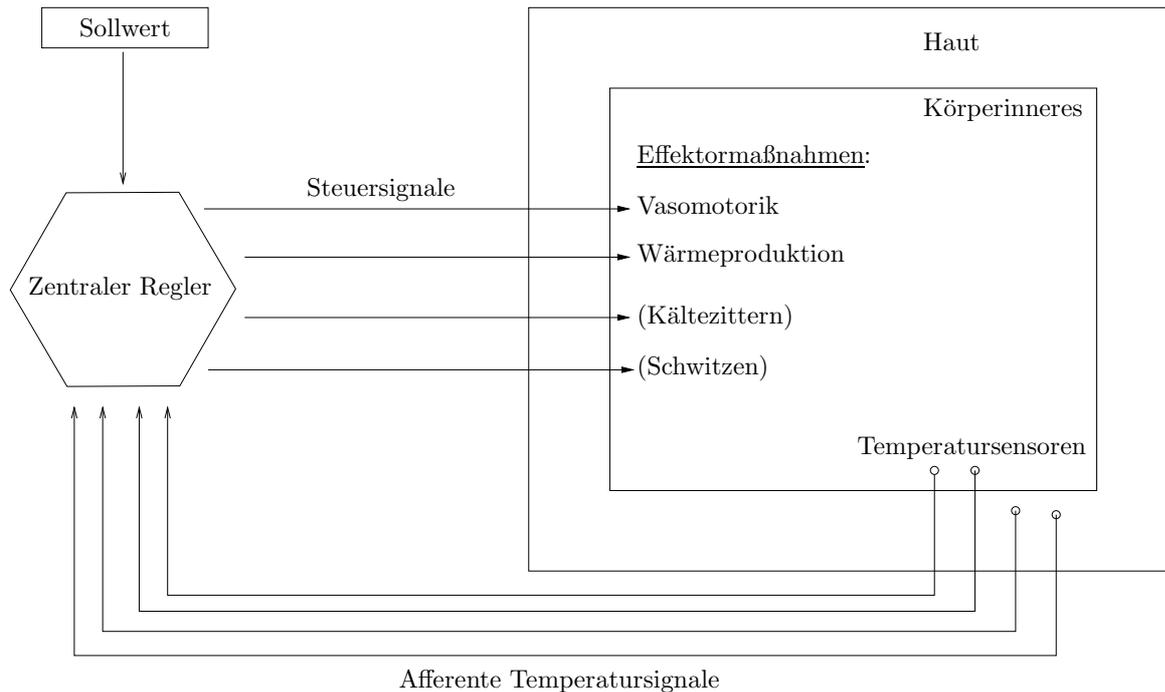


Abbildung 3: Einfaches Regelschema der Thermoregulation

Diese beiden Effektormassnahmen hängen von der thermoregulatorischen Reife des Frühchens ab. Es hat sich gezeigt, daß mit ihnen die Thermoregulation gut beschrieben werden kann (siehe [9]).

1.2 Modellgleichungen

In diesem Abschnitt soll die mathematische Formulierung des Modells vorgenommen werden. Dazu werde mit $D \subset \mathbb{R}^3$ der Körper des Säuglings bezeichnet, wobei D ein beschränkter, einfach zusammenhängender C^1 -Polyeder des \mathbb{R}^3 sei. Hierzu sei angemerkt, daß man eine offene Menge $G \subset \mathbb{R}^3$ als C^1 -Polyeder bezeichnet, falls ihr singulärer Rand $\partial_s G \subset \partial G$ eine 2-Nullmenge ist (vgl. [41]). Der Säugling teilt sich in die Segmente Kopf, Rumpf und Peripherie (Arme und Beine) auf. Der Kopf setzt sich aus den Schichten Haut, Fett, Knochen und Kern zusammen, der Rumpf und die Peripherie nur aus den Schichten Haut, Fett und Kern. Eine einzelne Segmentschicht wird mit $D_{Segment, Schicht}$ bezeichnet. Die Vereinigung aller Segmentschichten derselben Schichtart erhält den Namen $D_{Schicht}$ (z. B. D_{Haut}). Der reguläre Rand $\partial_r D \subset \partial D$ wird disjunkt in zwei Teile $\partial_r D_m$ und $\partial_r D_l$ zerlegt, welche Kontaktflächen des Säuglings zur Matratze sind, auf der er liegt, bzw. zur Inkubator- oder Raumluft, die ihn umgibt:

$$\partial_r D = \partial_r D_m \cup \partial_r D_l, \quad \partial_r D_m \cap \partial_r D_l = \emptyset.$$

$n : \partial_r D \rightarrow \mathbb{R}^3$ sei das äußere Einheitsnormalenfeld auf diesem regulären Rand. Grundlegende Modellparameter sind

- das Gestationsalter (Schwangerschaftsdauer) $ga \in \mathbb{R}_+$, $[ga] = \text{Woche}$,
- das Lebensalter (postnatales Alter) $tag \in \mathbb{R}_+$, $[tag] = \text{Tag}$,
- das Körpergewicht $g \in \mathbb{R}_+$, $[g] = kg$.

Mit $T(x, t) > 0$ wird stets die Temperatur am Ort $x \in \mathbb{R}^3$ zum Zeitpunkt $t \geq 0$ bezeichnet ($[T(x, t)] = K, [x] = m^3, [t] = sec.$; da in Kelvin gerechnet wird, ist die Voraussetzung der Positivität von T aufgrund der zu erwartenden Modelltemperaturen völlig plausibel).

1. Molekulare Wärmeleitung

- (a) Zunächst wird vorausgesetzt, daß drei nur ortsabhängige, positive Funktionen

$$\begin{aligned} \lambda, c, \rho &: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R} \\ x &\mapsto \lambda(x), c(x), \rho(x) \end{aligned}$$

gegeben sind, welche die Wärmeleitfähigkeit, die spezifische Wärmekapazität bzw. die Dichte der beteiligten Gewebe beschreiben. Es wird hier davon ausgegangen, daß die auftretenden Temperaturänderungen so moderat sind, daß die Temperaturabhängigkeit dieser Materialeigenschaften nicht berücksichtigt werden braucht. Das Produkt der beiden Funktionen für spezifische Wärmekapazität und Dichte wird bezeichnet mit

$$\begin{aligned} \kappa &: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R} \\ \kappa(x) &:= c(x)\rho(x), \end{aligned}$$

$$([\lambda(x)] = \frac{W}{mK}, [c(x)] = \frac{J}{kgK}, [\rho(x)] = \frac{kg}{m^3}, [\kappa(x)] = \frac{J}{m^3K}).$$

- (b) Nach dem Fourierschen Grundgesetz des molekularen Wärmetransports ist der Wärmefluß gegeben durch

$$\begin{aligned} J &: \bar{D} \times \mathbb{R}_+^* \rightarrow \mathbb{R}^3 \\ J(x, t) &:= -\lambda(x) \cdot \nabla T(x, t). \end{aligned} \tag{1.2.1}$$

Die molekulare Wärmeleitung wird dann durch die räumliche Divergenz des Feldes $-J$ gegeben (vgl. z. B. [26], [10]). (Die hier und im folgenden verwendeten Differentialoperatoren ∇ und div beziehen sich, wenn nichts anderes ausdrücklich gesagt wird, nur auf die Differentiation nach x .)

2. Wärmeproduktion

- (a) Ruheumsatz

Der Ruheumsatz M_{Ges} eines Neugeborenen errechnet sich aus Körpergewicht und Lebensalter nach dem folgenden, statistisch gefundenen Gesetz:

$$M_{Ges} := \begin{cases} (1.7 + 0.1 \cdot tag) \cdot g, & tag < 10, \\ [2.7 + 0.01 \cdot (tag - 9)] \cdot g, & tag \geq 10, \end{cases}$$

(s. [9]; $[M_{Ges}] = W$).

- (b) Leistungsdichte

Der Ruheumsatz verteilt sich im Verhältnis 60:34:6 auf die Kernschichten von Kopf, Rumpf und Peripherie, dort jeweils homogen auf das jeweilige Volumen; in den Schichten Haut, Fett und Knochen ist die Wärmeproduktion vernachlässigbar klein (vgl. [9]). Man erhält somit zunächst eine nur ortsabhängige Funktion

$$\begin{aligned} \tilde{Q}^{Met} &: D \rightarrow \mathbb{R} \\ \tilde{Q}^{Met}(x) &:= \begin{cases} 0.60 \cdot M_{Ges} \cdot \frac{1}{|D_{Kopf, Kern}|}, & x \in D_{Kopf, Kern}, \\ 0.34 \cdot M_{Ges} \cdot \frac{1}{|D_{Rumpf, Kern}|}, & x \in D_{Rumpf, Kern}, \\ 0.06 \cdot M_{Ges} \cdot \frac{1}{|D_{Peripherie, Kern}|}, & x \in D_{Peripherie, Kern}, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \end{aligned}$$

Die Terme $|D_{Segment,Schicht}| > 0$ stehen dabei jeweils für das Volumen der Segment-schichten. ($[\tilde{Q}^{Met}(x)] = \frac{W}{m^3}$). Diese unregelmäßige Leistungsdichte gibt noch nicht den tatsächlichen Energieumsatz an, denn dieser hängt außerdem noch von den Reaktionen des Neugeborenen auf seine afferente Temperatur ab.

(c) Leistungsdichte nach Thermoregulation

- i. Zur Beschreibung der thermoregulatorischen Effektormassnahmen wird zunächst die afferente Temperatur zum Zeitpunkt t definiert:

$$\mathcal{T}_{aff}(t) := \frac{\int_D w(x)T(x,t) dx}{\int_D w(x) dx}, t > 0. \quad (1.2.2)$$

Dabei dienen die Werte der nur ortsabhängigen Funktion w als Gewichtungsfaktoren für die lokalen Temperaturen ($w(x) \geq 0 \forall x \in D$, $[\mathcal{T}_{aff}(t)] = K$).

- ii. Ausserdem wird ein Sollwert $T_{Soll} \in \mathbb{R}$ für die afferente Temperatur benötigt. Dieser ist durch die Kerntemperatur in Abhängigkeit des Gestationsalters wie folgt gegeben:

$$T_{Kern} := \begin{cases} 310.25, & 0 \leq ga \leq 26, \\ 310.05, & 26 < ga < 32, \\ 309.65, & 32 \leq ga < 36, \\ 308.95, & 36 \leq ga. \end{cases}$$

$$T_{Soll} := T_{Kern},$$

([46]; $[T_{Kern}] = K, [T_{Soll}] = K$).

- iii. Die Abweichung der afferenten Temperatur von diesem Sollwert ist entsprechend definiert als

$$\Delta\mathcal{T}_{aff}(t) := \mathcal{T}_{aff}(t) - T_{Soll}, t > 0. \quad (1.2.3)$$

Sie ist die einzige (direkte) Steuergröße der Thermoregulation, wobei $\Delta\mathcal{T}_{aff}(t) < 0$ einer Abkühlung (im Extremfall einer Hypothermie) und $\Delta\mathcal{T}_{aff}(t) > 0$ einer Erwärmung (im Extremfall einer Hyperthermie) entspricht (s. [58]); ($[\Delta\mathcal{T}_{aff}(t)] = K$).

- iv. Weiterhin wird eine sogenannte „cold-response“ für $x \in D, t > 0$ wie folgt definiert:

$$\Delta\mathcal{M}(x,t) := \begin{cases} 0, & x \notin D_{Rumpf,Kern} \\ maxmet, & x \in D_{Rumpf,Kern}, \Delta\mathcal{T}_{aff}(t) \leq \Delta T_{maxmet}, \\ \frac{maxmet \cdot \Delta\mathcal{T}_{aff}(t)}{\Delta T_{maxmet}}, & x \in D_{Rumpf,Kern}, \Delta T_{maxmet} < \Delta\mathcal{T}_{aff}(t) < 0, \\ 0, & x \in D_{Rumpf,Kern}, \Delta\mathcal{T}_{aff}(t) \geq 0. \end{cases} \quad (1.2.4)$$

Dabei seien $\Delta T_{maxmet} \in \mathbb{R}_-$ und $maxmet \in \mathbb{R}_+$ Modellparameter, die der thermoregulatorischen Reife des Säuglings entsprechend gewählt sein müssen (vgl. S. 19, Abb. 4; $[\Delta T_{maxmet}] = K$).

Schließlich kann nun der der Wärmeproduktion entsprechende Quellterm definiert werden:

$$Q^{Met} : D \times \mathbb{R}_+^* \rightarrow \mathbb{R}$$

$$Q^{Met}(x,t) := 2^{0.1 \cdot \Delta\mathcal{T}_{aff}(t)} \cdot [1 + \Delta\mathcal{M}(x,t)] \cdot \tilde{Q}^{Met}(x), \quad (1.2.5)$$

(s. [9]; $[Q^{Met}(x,t)] = \frac{W}{m^3}$).

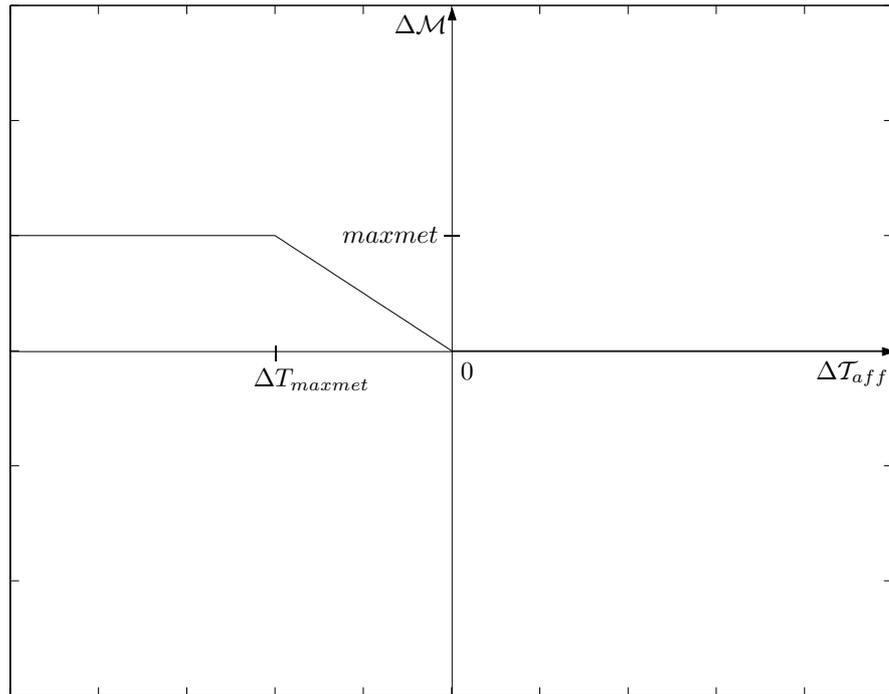


Abbildung 4: „cold-response“ der Wärmeproduktion

Erläuterung:

Die Wärmeproduktion kann also nur im Rumpfkern geändert werden. Dort tritt im Fall einer Abkühlung zunächst ein linearer Regler in Kraft, der die Wärmeproduktion hochfährt; fällt die Abweichung $\Delta\mathcal{T}_{aff}(t)$ unter ΔT_{maxmet} , so wird die maximal mögliche Steigerung $maxmet$ erreicht. Im Fall einer Erwärmung wird die Wärmeproduktion durch $\Delta\mathcal{M}(x, t)$ nicht geändert.

Ferner wird durch den Faktor $2^{0.1 \cdot \Delta\mathcal{T}_{aff}(t)}$ der kalorische Effekt der Temperatur nach der van't Hoff-Regel berücksichtigt. Damit ist gemeint, daß alle chemischen Reaktionen im Körper und damit auch alle Stoffwechselvorgänge temperaturabhängig sind. Dies äußert sich darin, daß bei zunehmender Temperatur der Energieumsatz ansteigt. Die Thermoregulation und dieser Effekt sind hier einander überlagert, wobei allerdings erstere die Hauptrolle spielt.

3. Blutfluß

(a) Durchblutungsfunktion

Zunächst wird vorausgesetzt, daß eine nur ortsabhängige Funktion

$$\begin{aligned} \widetilde{\mathcal{BF}} &: D \rightarrow \mathbb{R} \\ x &\mapsto \widetilde{\mathcal{BF}}(x) \end{aligned}$$

bekannt ist, welche die neutrale, unregulierte Durchblutung des Gewebes in jedem Punkt des Körpers angibt ($[\widetilde{\mathcal{BF}}(x)] = \frac{m^3}{m^3s}$, Kubikmeter Blut pro Sekunde bei einem Kubikmeter Gewebe).

(b) Durchblutung nach Thermoregulation

Als einzige Steuergröße geht auch hier die schon eingeführte Abweichung $\Delta\mathcal{T}_{aff}(t)$ ein. Mit deren Hilfe wird zur Modellierung der Vasomotorik eine weitere „cold-response“

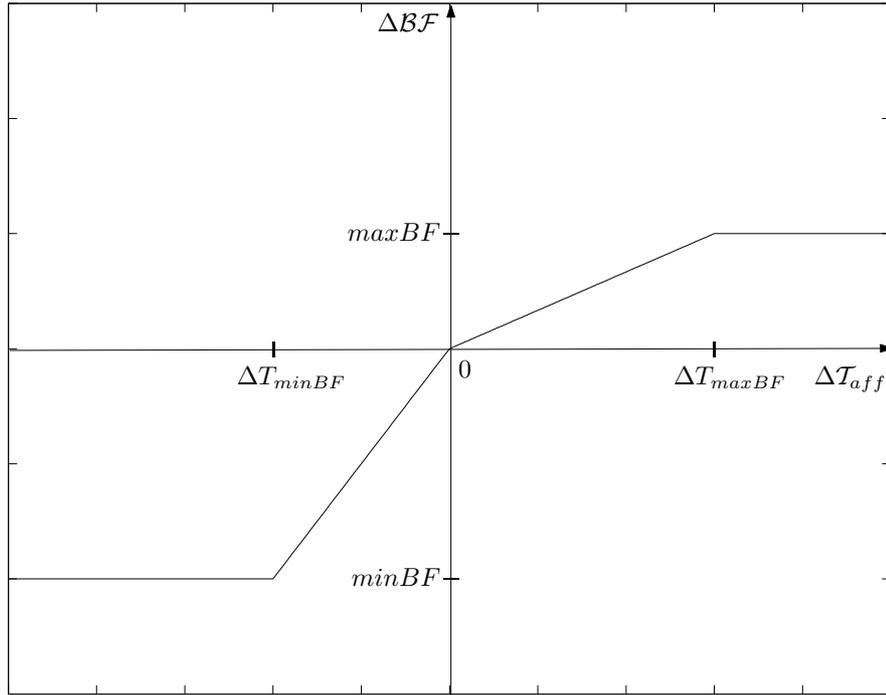


Abbildung 5: „cold-response“ der Vasomotorik

für $x \in D, t > 0$ wie folgt definiert:

$$\Delta\mathcal{BF}(x, t) := \begin{cases} 0, & x \notin D_{Haut} \\ \min BF, & x \in D_{Haut}, \Delta\mathcal{T}_{aff}(t) \leq \Delta T_{\min BF}, \\ \min BF \frac{\Delta\mathcal{T}_{aff}(t)}{\Delta T_{\min BF}}, & x \in D_{Haut}, \Delta T_{\min BF} < \Delta\mathcal{T}_{aff}(t) < 0, \\ \max BF \frac{\Delta\mathcal{T}_{aff}(t)}{\Delta T_{\max BF}}, & x \in D_{Haut}, 0 \leq \Delta\mathcal{T}_{aff}(t) < \Delta T_{\max BF}, \\ \max BF, & x \in D_{Haut}, \Delta T_{\max BF} \leq \Delta\mathcal{T}_{aff}(t). \end{cases} \quad (1.2.6)$$

Dabei seien $\Delta T_{\min BF} \in \mathbb{R}_-, \Delta T_{\max BF} \in \mathbb{R}_+, \min BF \in [-1, 0], \max BF \in \mathbb{R}_+$ Modellparameter, die wieder entsprechend der thermoregulatorischen Reife des Säuglings gewählt sein müssen (vgl. Abbildung 5; $[\Delta T_{\min BF}] = [\Delta T_{\max BF}] = K$). Nun kann die geregelte Blutflußfunktion definiert werden:

$$\begin{aligned} \mathcal{BF} &: D \times \mathbb{R}_+^* \rightarrow \mathbb{R} \\ \mathcal{BF}(x, t) &:= [1 + \Delta\mathcal{BF}(x, t)] \cdot \widetilde{\mathcal{BF}}(x), \end{aligned} \quad (1.2.7)$$

(s. [9]); ($[\mathcal{BF}(x, t)] = \frac{m^3}{m^3 s}$).

Erläuterung:

Im Fall einer Abkühlung wird also durch $\Delta\mathcal{BF}(x, t)$ die Vasokonstriktion beschrieben. Zunächst fährt ein linearer Regler die Hautdurchblutung runter; fällt die Abweichung $\Delta\mathcal{T}_{aff}(t)$ unter $\Delta T_{\min BF}$, so wird die minimal mögliche Hautdurchblutung erreicht. Im Fall einer Erwärmung wird durch $\Delta\mathcal{BF}(x, t)$ die Vasodilatation beschrieben. Zunächst fährt ein linearer Regler die Hautdurchblutung rauf; steigt die Abweichung $\Delta\mathcal{T}_{aff}(t)$ über $\Delta T_{\max BF}$, so wird die maximal mögliche Hautdurchblutung erreicht.

(c) K-Faktoren

Weiterhin wird die nur ortsabhängige Funktion

$$K : D \rightarrow \mathbb{R}$$

$$K(x) := \begin{cases} 0.9, & x \in D_{Haut}, \\ 1.0, & \text{sonst,} \end{cases}$$

benötigt, die als „Gegenstromfaktor“ dienen wird. Hierzu sei erläutert, daß hinfließendes, arterielles Blut vor Eintritt in eine bestimmte Geweberegion durch in benachbarten Gefäßen rückfließendes, venöses Blut gekühlt wird („Gegenstromwärmetauscher“). Um die Wirkung des Blutflusses in der Haut nicht zu überschätzen, wird dieser mit Hilfe des Gegenstromfaktors K dort zu einem effektiven Blutfluß gemindert werden (vgl. [9], [63]).

(d) Mittlere Bluttemperatur

Die zeitabhängige, über den ganzen Körper gemittelte Bluttemperatur ist definiert als

$$\mathcal{T}_{Blut}(t) := \frac{\int_D K(x) \mathcal{BF}(x, t) T(x, t) dx}{\int_D K(x) \mathcal{BF}(x, t) dx}, \quad t > 0, \quad (1.2.8)$$

$$([\mathcal{T}_{Blut}(t)] = K).$$

(e) Resultierende Leistungsdichte

Mit der Dichte ρ_{Blut} und der spezifischen Wärmekapazität c_{Blut} des Blutes kann nun schließlich der dem Blutfluß entsprechende Quellterm definiert werden:

$$\mathcal{Q}^{Blut} : D \times \mathbb{R}_+^* \rightarrow \mathbb{R} \quad (1.2.9)$$

$$\mathcal{Q}^{Blut}(x, t) = \rho_{Blut} c_{Blut} K(x) \mathcal{BF}(x, t) (\mathcal{T}_{Blut}(t) - T(x, t)),$$

$$([\rho_{Blut}] = \frac{kg}{m^3}, [c_{Blut}] = \frac{J}{kgK}, [\mathcal{Q}^{Blut}(x, t)] = \frac{W}{m^3}).$$

Die Leistungsdichte, welche sich aus dem Wärmeaustausch über den Blutfluß ergibt, ist also proportional zur effektiv in eine Geweberegion einströmenden Blutmenge sowie zur Differenz zwischen deren (arterieller) Temperatur und der lokalen Gewebetemperatur („Ficksches Prinzip“, vgl. [52], [9], [63]).

4. Evaporation

(a) Extraglanduläre transepidermale Wasserverluste (TW)

i. Sättigungsdampfdrücke

Der Sättigungsdruck des Wasserdampfes errechnet sich nach der Magnus-Formel für $x \in \mathbb{R}^3, t > 0$ zu

$$p^*(x, t) = 0.6107 \cdot 10^{\frac{7.5 \cdot (T(x, t) - 273.15)}{237 + (T(x, t) - 273.15)}} = 0.6107 \cdot 10^{\frac{7.5 \cdot (T(x, t) - 273.15)}{T(x, t) - 36.15}}, \quad (1.2.10)$$

(vgl. z. B. [4]; $[p^*(x, t)] = kPa$).

Die Lufttemperatur $T_{Luft} \in \mathbb{R}$ geht als konstanter Modellparameter ein ($[T_{Luft}] = K$). Daher ergibt sich für einen Punkt $x \in \mathbb{R}^3$, der in der Luft liegt, ein konstanter Sättigungsdruck des Wasserdampfes, welcher mit p_a^* bezeichnet wird:

$$p_a^* := 0.6107 \cdot 10^{\frac{7.5 \cdot (T_{Luft} - 273.15)}{T_{Luft} - 36.15}},$$

$$([p_a^*] = kPa).$$

Ausserdem sei die relative Luftfeuchtigkeit $rH \in [0, 100]$ auch als konstanter Modellparameter gegeben. Es sei vorausgesetzt, daß T_{Luft} und rH so gewählt sind, daß gilt $10133 - rH \cdot p_a^* \neq 0$ (dies wird später bei den respiratorischen Wasserverlusten benötigt).

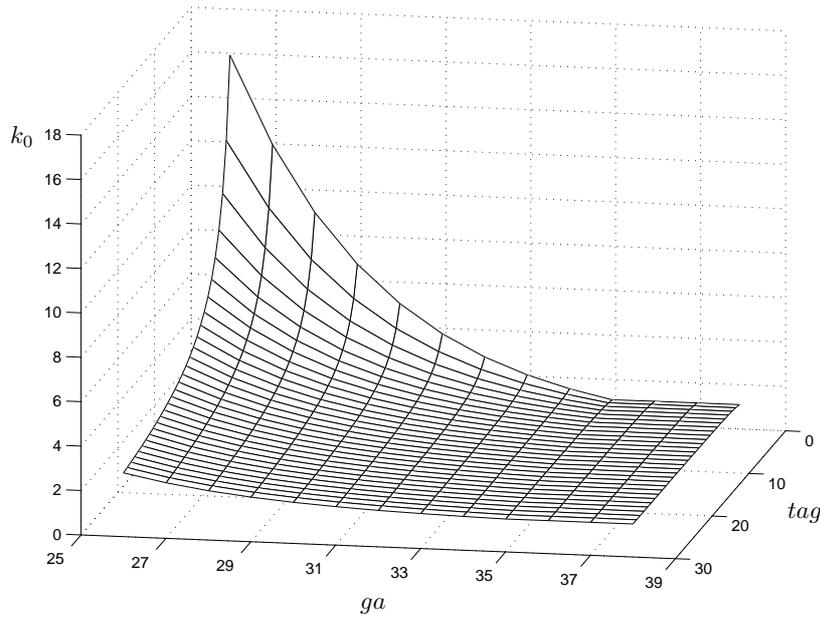


Abbildung 6: Diffusivitätsniveau k_0 in Abhängigkeit des Gestations- und Lebensalters

ii. Diffusivität

Die transepidermalen Wasserverluste in Abhängigkeit des Gestations- und Lebensalters werden durch die Sedinschen Kurven beschrieben (vgl. [31], [56]). Hierauf aufbauend kann die Diffusivität k der äußersten Teilschicht der Hautschicht wie folgt modelliert werden (vgl. [67]):

$$\begin{aligned}
 k_{01} &= \begin{cases} 1.3, & ga > 35, \\ 24000 \cdot e^{-0.281 \cdot ga}, & ga \leq 35, \end{cases} \\
 k_0 &= 1.5 \cdot \left(1 + \frac{2 \cdot k_{01} - 3}{2 + tag} \right) > 0, \\
 k(x, t) &= k_0 \cdot e^{9.119 - \frac{2809}{T(x, t)}}, x \in \partial_r D, t > 0, \quad (1.2.11)
 \end{aligned}$$

$$([k(x, t)] = \frac{g}{hm^2 kPa}).$$

Man erkennt das Ansteigen des Diffusivitätsniveaus k_0 bei geringeren Gestations- und Lebensaltern, d. h. bei unreiferen und jüngeren Kindern, bei denen der Reife-prozeß der Haut noch nicht soweit fortgeschritten ist (vgl. Abb. 6).

iii. Transepidermale Wasserverluste

Die transepidermalen Wasserverluste in Abhängigkeit der Hautreife, der Hauttemperatur, der Luftfeuchtigkeit und der Lufttemperatur werden nach folgender Formel berechnet:

$$TW(x, t) := k(x, t) \cdot \left(p^*(x, t) - \frac{rH}{100} \cdot p_a^* \right), x \in \partial_r D, t > 0. \quad (1.2.12)$$

Sie sind somit proportional zur Differenz aus dem Sättigungsdruck des Wasserdampfes in der Haut und dem Partialdruck in der darüberliegenden Luft. Diese Druck-Differenz stellt quasi den Antrieb der Wasserverluste dar, während die Diffusivität $k(x, t)$ als Proportionalitätsfaktor fungiert (vgl. [67]; $[TW(x, t)] = \frac{g}{m^2 h}$).

iv. Leistungsfluß

Mit der spezifischen Verdampfungswärme e_{Wasser} berechnet sich der Leistungsfluß dann zu

$$M^{TW} : \partial_r D \times \mathbb{R}_+^* \rightarrow \mathbb{R}$$

$$M^{TW}(x, t) := \begin{cases} e_{Wasser} \cdot TW(x, t), & x \in \partial_r D_l, t > 0, \\ 0, & x \in \partial_r D_m, t > 0, \end{cases} \quad (1.2.13)$$

$$(e_{Wasser} = 0.63 \frac{Wh}{g}, \text{ vgl. [42]; } [M^{TW}(x, t)] = \frac{W}{m^2}).$$

(b) Respiratorische Wasserverluste (RW)

i. Masse der respiratorischen Wasserverluste

Der Verlust an Wasser über die Atemluft ist das Produkt aus dem Atem-Minuten-Volumen und der Differenz der absoluten Feuchtigkeiten von ausgeatmeter und eingeatmeter Luft. Er errechnet sich nach [67] mit der folgenden, empirisch gefundenen Formel:

$$RW = - \left(0.411 + 0.000968 \cdot (T_{Luft} - 273.15) - \frac{7.4 \cdot rH \cdot p_a^*}{10133 - rH \cdot p_a^*} \right) \cdot g,$$

$$([RW] = \frac{g}{h}).$$

Hierfür ist es also nur notwendig, vorweg die Lufttemperatur und Luftfeuchtigkeit zu messen und den Sättigungsdruck des Wasserdampfes aus der Lufttemperatur zu bestimmen.

ii. Resultierende Leistungsdichte

Die Wasserverluste sollen zu einer Leistungsdichte im Rumpfkern verarbeitet werden (vgl. [20]). Der die Wärmeverluste über die Atmung beschreibende, nur ortsabhängige Quellterm wird daher wie folgt definiert:

$$Q^{RW} : D \rightarrow \mathbb{R}$$

$$Q^{RW}(x) := \begin{cases} \frac{e_{Wasser} \cdot RW}{|D_{Rumpf, Kern}|}, & x \in D_{Rumpf, Kern} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases},$$

$$([Q^{RW}(x)] = \frac{W}{m^3}).$$

5. Radiation

- (a) Um den Wärmeaustausch mit der Umgebung durch Temperaturstrahlung zu beschreiben, wird zunächst vorausgesetzt, daß eine Funktion

$$h^r : \partial_r D_l \rightarrow \mathbb{R}$$

$$x \mapsto h^r(x)$$

gegeben ist, deren Werte die Wärmeübergangskoeffizienten für die Radiation im Rand $\partial_r D_l$ sind ($[h^r(x)] = \frac{W}{m^2 K}$).

- (b) Als weiterer konstanter Parameter soll die Umgebungstemperatur $T_{Umg} \in \mathbb{R}$ in das Modell eingehen. Dies ist die Temperatur des Raumes, in dem der Inkubator bzw. die offene Pflegeeinheit steht. Im Inkubatorfall berechnet sich aus dieser und der Lufttemperatur des Inkubators seine Innenwandtemperatur $T_{ic} \in \mathbb{R}$ nach der folgenden, von [46] bereitgestellten, empirisch gefundenen Formel:

$$T_{ic} = T_{Luft} \cdot [1 - 0.00234 \cdot (T_{Luft} - T_{Umg})],$$

$$([T_{Umg}] = K, [T_{ic}] = K).$$

Die Strahlungstemperatur $T_{MRT} \in \mathbb{R}$ des Inkubators wird als identisch mit der Innenwandtemperatur angenommen. Im Fall der offenen Pflege werden Strahlungstemperatur, Lufttemperatur und Umgebungstemperatur als identisch angenommen, also insgesamt

$$T_{MRT} := \begin{cases} T_{ic}, & \text{Inkubatorfall} \\ T_{Luft} = T_{Umg}, & \text{offene Pflege} \end{cases}$$

$$([T_{MRT}] = K).$$

Als weiterer Modellparameter geht die Strahlungsleistungsdichte $S_{MRT} \in \mathbb{R}$ ein. Sie ist im Inkubatorfall Null und im Fall der offenen Pflege durch die Leistung der Strahlungslampe gegeben ($[S_{MRT}] = \frac{W}{m^2}$).

(c) Schließlich wird der Leistungsfluß durch folgende Funktion beschrieben:

$$M^r : \partial_r D \times \mathbb{R}_+^* \rightarrow \mathbb{R}$$

$$M^r(x, t) := \begin{cases} h^r(x) \cdot [T(x, t) - T_{MRT}] - S_{MRT}, & x \in \partial_r D_l, t > 0 \\ 0, & x \in \partial_r D_m, t > 0 \end{cases} \quad (1.2.14)$$

$$(\text{s. [9], } [M^r(x, t)] = \frac{W}{m^2}).$$

6. Konvektion

- (a) Um den Wärmeaustausch des Körpers mit der ihn umströmenden Luft zu beschreiben, wird als weiterer konstanter Modellparameter die Strömungsgeschwindigkeit $FL \in \mathbb{R}$ der Luft verwendet. ($[FL] = \frac{cm}{sec}$).
- (b) Der Leistungsfluß wird dann mit dem empirisch gefundenen Wert

$$c_{FL} := 1.901 \cdot (1 + 0.0461143 \cdot FL)$$

durch folgende Funktion beschrieben ([46]):

$$M^{cv} : \partial_r D \times \mathbb{R}_+^* \rightarrow \mathbb{R}$$

$$M^{cv}(x, t) := \begin{cases} c_{FL} \cdot [T(x, t) - T_{Luft}], & x \in \partial_r D_l, t > 0 \\ 0, & x \in \partial_r D_m, t > 0 \end{cases} \quad (1.2.15)$$

$$([c_{FL}] = \frac{W}{m^2 K}, [M^{cv}(x, t)] = \frac{W}{m^2}).$$

7. Konduktion

- (a) Um den Wärmeaustausch des Körpers mit der unter ihm liegenden Matratze zu beschreiben, wird zunächst vorausgesetzt, daß ein konstanter Wärmeübergangskoeffizient $k_{mat} \in \mathbb{R}$ gegeben ist. Geringe Werte von k_{mat} (z. B. 0.05) entsprechen einer isolierten Matratze (Schaumstoff), große Werte (z. B. 14) dagegen einer Matratzenheizung (Gelmatratze) ($[k_{mat}] = \frac{W}{m^2 K}$).
- (b) Als weiterer konstanter Parameter soll die Matratzentemperatur $T_{mat} \in \mathbb{R}$ in das Modell eingehen. Dabei entsprechen $308.15K$ erfahrungsgemäß einer leichten Kühlung des Patienten, $312.15K$ dagegen einer leichten Erwärmung ($[T_{mat}] = K$).

(c) Der Leistungsfluß wird dann durch folgende Funktion beschrieben:

$$M^{cd} : \partial_r D \times \mathbb{R}_+^* \rightarrow \mathbb{R}$$

$$M^{cd}(x, t) := \left\{ \begin{array}{ll} 0, & x \in \partial_r D_l, t > 0 \\ k_{mat} \cdot [T(x, t) - T_{mat}], & x \in \partial_r D_m, t > 0 \end{array} \right\}, \quad (1.2.16)$$

$$([M^{cd}(x, t)] = \frac{W}{m^2}).$$

Damit sind alle Komponenten der Modellierung im einzelnen beschrieben und können zum Gesamtmodell integriert werden. Die Temperaturverteilung

$$T : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$$

$$(x, t) \mapsto T(x, t)$$

genügt im offenen Raum-Zeit-Halbzyylinder $D \times \mathbb{R}_+^*$ der Wärmeleitungsgleichung oder bio-heat-transfer-equation (BHTE)

$$\kappa(x) \frac{\partial T}{\partial t}(x, t) = \operatorname{div}(-J)(x, t) + \mathcal{Q}^{Met}(x, t) + \mathcal{Q}^{Blut}(x, t) + \mathcal{Q}^{RW}(x), \quad (x, t) \in D \times \mathbb{R}_+^*, \quad (1.2.17)$$

(vgl. [52], [34]) unter den Anfangs- und Randbedingungen

$$T(x, 0) = T_0(x), \quad x \in D, \quad (1.2.18)$$

$$\langle J(x, t), n(x) \rangle = M^{TW}(x, t) + M^r(x, t) + M^{cv}(x, t) + M^{cd}(x, t), \quad (x, t) \in \partial_r D \times \mathbb{R}_+^*, \quad (1.2.19)$$

wobei $T_0 : D \rightarrow \mathbb{R}$ eine Starttemperaturverteilung in D beschreibe. Die Gleichung (1.2.17) kann nur in sehr wenigen Spezialfällen exakt gelöst werden, sodaß eine numerische Integration notwendig ist. Für theoretisches (z. T. aber auch numerisches) Hintergrundwissen zur Wärmeleitungsgleichung kann man auf [38], [54] und [66] zurückgreifen, eine kurze Einführung findet sich im Anhang B dieser Arbeit.

2 Stabile Mehrschrittverfahren zur Zeitintegration

Mit der bio-heat-transfer-equation (1.2.17) und ihren zugehörigen Anfangs- und Randbedingungen (1.2.18) und (1.2.19) ist ein Anfangsrandwertproblem (ARWP) gegeben, welches numerisch gelöst werden muß. Hierzu wird in Kapitel 3 ein Finite-Volumen-Verfahren entwickelt werden. Da die bio-heat-transfer-equation (1.2.17) sowohl orts- als auch zeitabhängig ist, wird die Entwicklung des Verfahrens grob gesprochen aus zwei Schritten bestehen, nämlich einer räumlichen und einer zeitlichen Diskretisierung. Erstere wird auf ein System $y'(t) = f(t, y(t))$ gewöhnlicher Differentialgleichungen (ODE) führen, die nur noch von der Zeit abhängen. Jede einzelne Gleichung entspricht dabei einem Teilgebiet des Gebietes D und beschreibt die zeitliche Entwicklung des Temperaturmittelwertes in diesem Teilgebiet. An dieser Stelle wird sich dann also die Aufgabe stellen, das erhaltene System mit einem geeigneten Verfahren einer zeitlichen Diskretisierung zu unterwerfen. Die begründete Auswahl eines Verfahrens bzw. einer Verfahrensklasse soll vorab in diesem Kapitel geschehen. Prinzipiell bieten sich zwei Klassen von numerischen Verfahren zur Lösung einer gewöhnlichen Differentialgleichung $y'(t) = f(t, y(t))$ an: Die Runge-Kutta-Verfahren (RKV) sowie die linearen Mehrschrittverfahren (MSV) (s. z. B. [29], [15], [36], [14]).

Runge-Kutta-Verfahren sind Einschrittverfahren, d. h. sie verwenden zur Berechnung des Näherungswertes an einem zukünftigen Punkt t_{n+1} der diskretisierten Zeitachse nur die aktuelle Information über die rechte Seite f am Punkt t_n . Informationen zu früheren Zeitpunkten werden vergessen, Runge-Kutta-Verfahren haben in diesem Sinne kein „Gedächtnis“. Ein weiterer Nachteil ist, daß bei ihnen in jedem Schritt Zwischeninformationen bereitgestellt werden müssen, und zwar umso mehr, je höher die Forderung an die Ordnung des Verfahrens ist. Daher müssen in jedem Schritt mehrere Auswertungen der rechten Seite vorgenommen werden (explizite Runge-Kutta-Verfahren) bzw. mehrere gekoppelte, gegebenenfalls hochdimensionale, (nicht-)lineare Gleichungssysteme gelöst werden (implizite Runge-Kutta-Verfahren).

Die grundlegende Idee der Mehrschrittverfahren, auch k -Schrittverfahren, $k \in \mathbb{N}^*$, besteht darin, Verfahren mit „Gedächtnis“ zu konstruieren, d. h. es werden auch die evtl. unter erheblichem Aufwand berechneten Informationen zu früheren Zeitpunkten als t_n mitverwendet, um zu einer besseren Approximation der exakten Lösung zu gelangen. Außerdem benötigen explizite Mehrschrittverfahren nur eine f -Auswertung pro Zeitschritt, während implizite Mehrschrittverfahren nur die Lösung eines einzigen Gleichungssystems pro Zeitschritt erfordern. Ein weiterer Vorteil der Mehrschrittverfahren liegt in ihrer leichten Implementierbarkeit, was bei der hier getroffenen Entscheidung zu ihren Gunsten umso schwerer gewogen hat, als daß natürlich vorweg die räumliche Diskretisierung der partiellen Differentialgleichung (1.2.17) bereits einen beträchtlichen Entwicklungsaufwand erfordert. Ein nicht unbedingt schwerwiegender Nachteil von Mehrschrittverfahren besteht darin, daß sie Anlaufprotokolle zur Berechnung von Startwerten benötigen. Damit Mehrschrittverfahren für den praktischen Einsatz überhaupt brauchbar sind, müssen sie konsistent und nullstabil sein. Dabei bedeutet Konsistenz des Verfahrens, daß seine Fehlerordnung mindestens eins ist, während die Nullstabilität garantiert, daß die Fortpflanzung der lokalen Fehler beschränkt bleibt. Diese beiden Bedingungen zusammen sind äquivalent dazu, daß das Mehrschrittverfahren auf jedem kompakten Zeitintervall bei Verfeinerung der Diskretisierung gegen die exakte Lösung konvergiert. Diese Äquivalenz ist der Inhalt des sogenannten „Fundamentalsatzes der numerischen Analysis“ speziell für Mehrschrittverfahren und taucht auch in den Kontexten „Numerik partieller Differentialgleichungen“ (Lax-Equivalence-Theorem) und „Numerik linearer Gleichungssysteme“ auf (vgl. [29], [33], [55], [65], [59]). Die Standard-Mehrschrittverfahren nach Adams-Bashforth und Adams-Moulton sowie die BDF-Methoden nach Gear (backward-differentiation-formula) der Ordnung $k \leq 6$ erfüllen sämtlich diese beiden Grundvoraussetzungen. Ferner ist anzumerken, daß die Ordnung von nullstabilen Mehrschrittverfahren nicht beliebig hoch getrieben werden kann, sondern eine obere Schranke in Abhängigkeit von k besitzt („First Dahlquist barrier“, s. [29]).

Bei der weiteren Verfahrensauswahl aus der Klasse der Mehrschrittverfahren ist zu beachten, daß Diffusionsprozesse wie der die molekulare Wärmeleitung beschreibende Divergenzterm in der bio-heat-transfer-equation (1.2.17) bei der räumlichen Diskretisierung erfahrungsgemäß auf Systeme $y'(t) = f(t, y(t))$ führen, die in einem gewissen Sinne numerisch schwer zu integrieren sind („steife“ Systeme, vgl. [30], [14], [36], [35]). Damit ist gemeint, daß bei der sich anschließenden zeitlichen Diskretisierung starke Zeitschrittweitenrestriktionen bestehen und somit ein evtl. viel zu hoher Rechenaufwand entsteht, es sei denn man wählt ein Mehrschrittverfahren mit gewissen Stabilitätseigenschaften, speziell der absoluten und der sog. A-Stabilität aus. Dies sind Verfahren, die für die numerische Integration von Diffusionsprozessen, aber auch von z.B. „steifen“ chemischen Reaktionsgleichungssystemen, besonders geeignet sind. In den Abschnitten 2.1 bis 2.3 wird der theoretische Hintergrund hierfür ausführlich dargestellt. Hierzu wird in Abschnitt 2.1 eine Einführung in die Stabilitätstheorie gewöhnlicher Differentialgleichungen $y'(t) = f(t, y(t))$ gegeben. Speziell wird das Langzeitverhalten von linear-autonomen Systemen studiert. Der Abschnitt 2.2 ist rein technischer Natur und stellt die später benötigten Tatsachen über Differenzgleichungen bereit. Der Abschnitt 2.3 beschäftigt sich mit der absoluten Stabilität von Mehrschrittverfahren. Hier wird es darum gehen, wie man qualitative Eigenschaften einer gewöhnlichen Differentialgleichung, speziell die asymptotische Stabilität eines linear-autonomen Systems an ein Mehrschrittverfahren vererbt und ob dabei obere Schranken $h \leq h_{max}$ bei der Wahl der Zeitschrittweite zu beachten sind. Zur Erläuterung: Der Begriff der absoluten Stabilität in der Numerik ist das diskrete Analogon des Begriffes der asymptotischen Stabilität bei stetigen Problemen. Gelingt dieser Vererbungsprozeß möglichst vollständig, so erhält man Mehrschrittverfahren, welche die gewünschten Stabilitätseigenschaften besitzen. Dabei handelt es sich um die bereits erwähnten BDF-Verfahren, welche zur numerischen Integration „steifer“ Systeme empfehlenswert sind. Damit ist dann geklärt, wie man die aus dem Divergenzterm der bio-heat-transfer-equation (1.2.17) resultierenden Systeme numerisch stabil integrieren könnte, wenn auf der rechten Seite nicht noch zusätzlich drei Quellterme vorhanden wären. Da diese leider und natürlich auch numerisch integriert werden müssen, ist eine direkte Anwendung eines BDF-Verfahrens zur zeitlichen Diskretisierung aufgrund von Speicherplatzproblemen nicht möglich, wie sich später (Kapitel 3) noch zeigen wird. Eine gängige Vorgehensweise zur Behandlung von Gleichungen, deren rechte Seite in „steife“ und „nicht-steife“ Anteile zerfällt, ist die Anwendung von gemischt implizit-expliziten Verfahren (IMEX-Verfahren), speziell den semi-impliziten BDF-Verfahren (SBDF-Verfahren). Diese Verfahren bauen auf möglichst stabilen Mehrschrittverfahren als Basisverfahren auf, sind also Modifikationen derselben. Sie werden in Abschnitt 2.4 kurz eingeführt. Damit werden dann sämtliche, die numerische Zeitintegration betreffenden Vorüberlegungen für Kapitel 3 abgeschlossen und die entsprechenden Verfahren bereitgestellt sein.

2.1 Einführung in die Stabilitätstheorie gewöhnlicher Differentialgleichungen

Bei der Untersuchung gewöhnlicher Differentialgleichungen ist neben Kriterien für Existenz, Eindeutigkeit und stetiger Abhängigkeit der Lösungen (s. z. B. [69], [53]) auch das Langzeitverhalten letzterer von Interesse. Damit ist gemeint, daß die gewöhnliche Differentialgleichung auf einem nach rechts unbeschränkten Intervall $[t_0, \infty[$ betrachtet und dann der Frage nachgegangen wird, wie ihre Lösungen langfristig auf Störungen der Anfangswerte reagieren, d. h. ob diese für „große“ Zeiten t „explodieren“ oder prinzipiell berechenbar sind, also beschränkt bleiben oder sogar konvergent sind. Dies führt auf die Begriffe der Stabilität und der asymptotischen Stabilität, welche in diesem Abschnitt eingeführt werden. Nach ihrer Definition für gewöhnliche Differentialgleichungen $y' = f$ mit beliebiger, rechter Seite f wird die Darstellung auf den linear-autonomen Fall spezialisiert, für welchen leicht eine vollständige Charakterisierung der Stabilität angegeben werden kann. Eine erste Erweiterung auf schwach-nichtlineare Probleme findet man in [69], während [11] und [28] allgemeinere und breitere Darstellungen beinhalten. Die hier gegebene Darstellung der

ersten Schritte in die Stabilitätstheorie gewöhnlicher Differentialgleichungen ist eine ausführliche Ausarbeitung des in [69] gegebenen sehr dünnen roten Fadens zu diesem Thema. Sie ist formal sauber, es wurden ein Lemma und einige Bemerkungen hinzugefügt und Beispiele vollständig durchgerechnet und z.T. mit Abbildungen versehen. Außerdem wurden die Beweise detailliert erarbeitet, vereinfacht und damit leicht verständlich gemacht.

Definition 2.1

Gegeben seien ein Startzeitpunkt $t_0 \in \mathbb{R}$ sowie eine Abbildung $f : [t_0, \infty[\times \mathbb{C}^d \rightarrow \mathbb{C}^d$. Mit

$$\mathbb{L} := \left\{ y \in \text{ABB} \left([t_0, \infty[, \mathbb{C}^d \right) : y \text{ ist differenzierbar in } [t_0, \infty[, y'(t) = f(t, y(t)) \forall t \in [t_0, \infty[\right\}$$

sei die Lösungsmenge der gewöhnlichen Differentialgleichung $y' = f$ bezeichnet.

1. Eine Abbildung $y \in \mathbb{L}$ heißt stabil im Sinne von Lyapunov, kurz: stabil, falls gilt:

$$\forall \epsilon > 0 \exists \delta > 0 : \left[\left(\|z(t) - y(t)\|_2 < \epsilon \forall t \in [t_0, \infty[\right) \forall z \in \mathbb{L} : \|z(t_0) - y(t_0)\|_2 < \delta \right]. \quad (2.1.1)$$

2. Eine Abbildung $y \in \mathbb{L}$ heißt instabil, falls sie nicht stabil ist.

3. Eine Abbildung $y \in \mathbb{L}$ heißt asymptotisch stabil, falls sie stabil ist und ein $\delta > 0$ existiert mit

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|z(t) - y(t)\|_2 = 0 \quad \forall z \in \mathbb{L} : \|z(t_0) - y(t_0)\|_2 < \delta. \quad (2.1.2)$$

Zur Erläuterung:

- Stabilität einer Lösung y bedeutet also, daß jede Lösung z , die zum Zeitpunkt t_0 hinreichend dicht bei y startet, auch zu allen späteren Zeitpunkten dicht bei y bleibt. Mit anderen Worten: Jede Lösung z mit hinreichend kleiner Anfangsstörung $\|z(t_0) - y(t_0)\|_2$ gegenüber y verläßt eine ϵ -Umgebung von y nicht.
- Asymptotische Stabilität einer Lösung y bedeutet zusätzlich zur Stabilität, daß jede Lösung z , die zum Zeitpunkt t_0 hinreichend dicht bei y startet, für $t \rightarrow \infty$ y wieder beliebig nahe kommt. Mit anderen Worten: Hinreichend kleine Anfangsstörungen $\|z(t_0) - y(t_0)\|_2$ werden mit $t \rightarrow \infty$ herausgedämpft.

Ferner sei angemerkt, daß bei beiden Stabilitätsbegriffen aufgrund der Normäquivalenz in endlich-dimensionalen \mathbb{K} -Vektorräumen (s. z. B. [41]) die Bedingungen auch mit anderen Normen überprüft werden können.

Beispiel 2.2

Es sei $d = 1$ und $f \equiv 1$ die konstante 1-Funktion auf $[t_0, \infty[\times \mathbb{C}$. Die Lösungsmenge \mathbb{L} hat dann die Darstellung

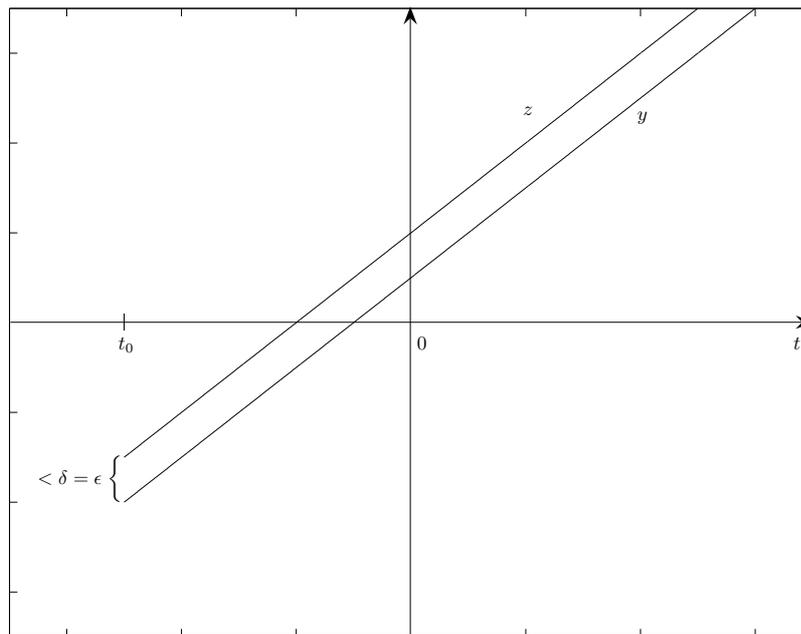
$$\mathbb{L} = \left\{ y \in \text{ABB} \left([t_0, \infty[, \mathbb{C} \right) : y(t) = t + y(t_0) - t_0 \forall t \in [t_0, \infty[\right\}$$

und besteht somit nur aus affin-linearen Funktionen. Jede beliebig gewählte Lösung $y \in \mathbb{L}$ ist stabil, wie sich durch die Wahl $\delta := \epsilon$ in (2.1.1) zeigt (vgl. Abbildung 7).

Lemma 2.3

Gegeben seien ein Startzeitpunkt $t_0 \in \mathbb{R}$ sowie eine stetige Abbildung $A : [t_0, \infty[\rightarrow M(d \times d, \mathbb{C})$. Mit

$$\mathbb{L}_H := \left\{ y \in \text{ABB} \left([t_0, \infty[, \mathbb{C}^d \right) : y \text{ ist differenzierbar in } [t_0, \infty[, y'(t) = A(t) y(t) \forall t \in [t_0, \infty[\right\}$$

Abbildung 7: Stabilität einer beliebigen reellen Lösung $y \in \mathbb{L}$

sei der d -dimensionale \mathbb{C} -Vektorraum aller Lösungen der linear-homogenen (i. allg. nicht-autonomen) Differentialgleichung $y'(t) = A(t)y(t)$ bezeichnet. Dann ist die Nulllösung $\underline{0} \in \mathbb{L}_H$ genau dann stabil / instabil / asymptotisch stabil / nicht asymptotisch stabil, wenn alle Lösungen stabil / instabil / asymptotisch stabil / nicht asymptotisch stabil sind.

Beweis:

Der Beweis ergibt sich direkt aus der Definition 2.1 unter Ausnutzung der Vektorraumstruktur von \mathbb{L}_H .

□

Bemerkung:

Man nennt ein linear-homogenes System $y'(t) = A(t)y(t)$ stabil, falls alle seine Lösungen stabil sind. Es heißt instabil, falls es nicht stabil ist. Instabilität ist natürlich äquivalent dazu, daß alle Lösungen instabil sind. Schließlich nennt man ein linear-homogenes System $y'(t) = A(t)y(t)$ asymptotisch stabil, falls alle seine Lösungen asymptotisch stabil sind.

Beispiel 2.4

Es seien $d = 2$, $t_0 = 0$ und die stetige Abbildung

$$A : \mathbb{R}_+ \rightarrow M(2 \times 2, \mathbb{C})$$

$$A(t) = \begin{pmatrix} \cos^2(3t) - 5 \sin^2(3t) & -6 \cos(3t) \sin(3t) + 3 \\ -6 \cos(3t) \sin(3t) - 3 & \sin^2(3t) - 5 \cos^2(3t) \end{pmatrix}$$

gegeben. Die Lösungsmenge der linear-nicht-autonomen Differentialgleichung $y'(t) = A(t)y(t)$ ist dann der 2-dimensionale \mathbb{C} -Vektorraum

$$\mathbb{L}_H := \left\{ y \in \text{ABB}(\mathbb{R}_+, \mathbb{C}^2) : y \text{ ist differenzierbar in } \mathbb{R}_+, y'(t) = A(t)y(t) \forall t \in \mathbb{R}_+ \right\}.$$

Um die Instabilität der Nulllösung $\underline{0} \in \mathbb{L}_H$ zu erkennen, sei $\epsilon := 1$ gewählt (z. B.). Zu jedem $\delta > 0$ ist dann durch

$$z(t) := \frac{1}{2} \delta \exp(t) \begin{pmatrix} \cos(3t) \\ -\sin(3t) \end{pmatrix}, \quad t \in \mathbb{R}_+,$$

eine Lösung $z \in \mathbb{L}_H$ gegeben, für deren Anfangsstörung und asymptotisches Verhalten gilt

$$\|z(0)\|_2 < \delta \quad \text{bzw.} \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \|z(t)\|_2 = \infty.$$

Die Stabilitätsbedingung (2.1.1) ist also für $\epsilon = 1$ nicht erfüllbar und die Nulllösung somit instabil (vgl. Abbildung 8).

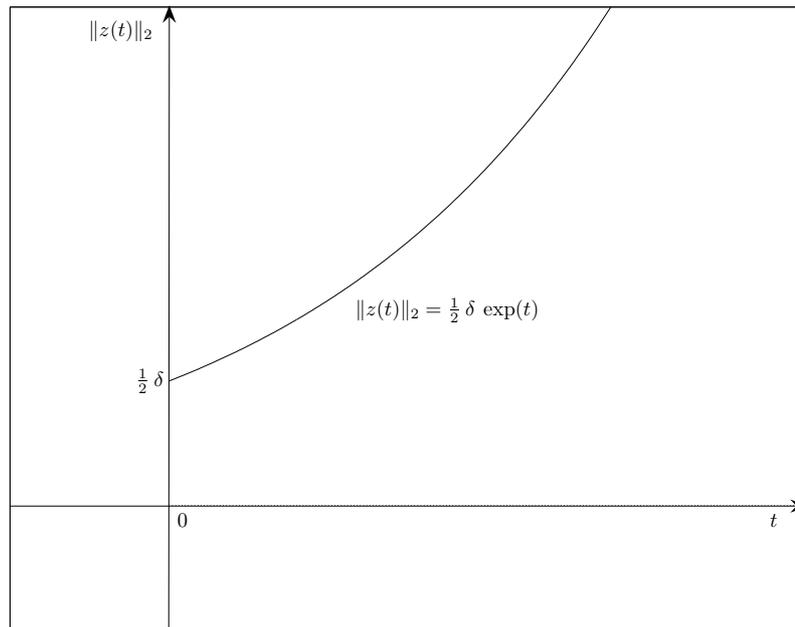


Abbildung 8: Instabilität der Nulllösung $\underline{0} \in \mathbb{L}_H$

Bemerkung:

Die Beispiele 2.2 und 2.4 zeigen, daß Beschränktheit weder notwendig noch hinreichend für Stabilität ist.

Im folgenden sei stets der linear-autonome Fall angenommen, d. h.:

- Es sei ein Startzeitpunkt $t_0 \in \mathbb{R}$ gegeben.
- Es sei eine (konstante) Matrix $A \in M(d \times d, \mathbb{C})$ gegeben.
- Es sei der d -dimensionale \mathbb{C} -Vektorraum

$$\mathbb{L}_H := \left\{ y \in \text{ABB} \left([t_0, \infty[, \mathbb{C}^d \right) : y \text{ ist differenzierbar in } [t_0, \infty[, y'(t) = Ay(t) \forall t \in [t_0, \infty[\right\}$$

zugrundegelegt.

Diese Einschränkung ist nicht wesentlich, da genau der linear-autonome Fall geeignet ist, um die Stabilitätstheorie vorab soweit zu beleuchten, daß später der Gedanke der Vererbung der Stabilität an ein Mehrschrittverfahren durchsichtig werden kann. Wie bereits in der Einleitung zu diesem Kapitel erwähnt, ist es angemessen, Mehrschrittverfahren mit geerbter Stabilität zur numerischen Integration von steifen ODE-Systemen, wie sie aus den Diffusionsprozessen innerhalb der bio-heat-transfer-equation (1.2.17) resultieren, zu verwenden.

Die folgenden Beispiele sind sehr instruktiv für das tiefere Verständnis der Stabilitätsbegriffe im linear-autonomen Fall.

Beispiel 2.5

Es sei $d = 1$ und $A = (\lambda) \in M(1 \times 1, \mathbb{C})$ mit einem $\lambda \in \mathbb{C}$. Dann hat \mathbb{L}_H die Darstellung

$$\mathbb{L}_H = \left\{ y \in \text{ABB}([t_0, \infty[, \mathbb{C}) : y(t) = y(t_0) \exp(\lambda(t - t_0)) \forall t \in [t_0, \infty[\right\}.$$

Es sei $y \in \mathbb{L}_H$ eine beliebige, dann aber fest gewählte Lösung. Um sie auf Stabilität zu untersuchen, werden folgende Abstandsfunktionen betrachtet:

$$d_z(t) := |z(t) - y(t)|, \quad t \in [t_0, \infty[, z \in \mathbb{L}_H.$$

Durch einfache Umformungen erhält man die Darstellung

$$d_z(t) = |z(t_0) - y(t_0)| \exp(\operatorname{Re}(\lambda)(t - t_0)), \quad t \in [t_0, \infty[, z \in \mathbb{L}_H.$$

1. Im Fall $\operatorname{Re}(\lambda) < 0$ gelten

$$\exp(\operatorname{Re}(\lambda)(t - t_0)) \leq 1 \quad \forall t \in [t_0, \infty[\quad \text{und} \quad \lim_{t \rightarrow \infty} d_z(t) = 0 \quad \forall z \in \mathbb{L}_H.$$

Mit ersterem ergibt sich die Stabilität von y - man kann $\delta := \epsilon$ in (2.1.1) wählen - und mit letzterem dann auch die asymptotische Stabilität (vgl. Abbildung 9).

2. Im Fall $\operatorname{Re}(\lambda) = 0$ sind die Funktionen d_z Konstanten:

$$d_z(t) = |z(t_0) - y(t_0)| \quad \forall t \in [t_0, \infty[\quad \forall z \in \mathbb{L}_H.$$

Hiermit folgt, daß y zwar stabil, aber nicht mehr asymptotisch stabil ist.

3. Im Fall $\operatorname{Re}(\lambda) > 0$ gilt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} d_z(t) = \infty \quad \forall z \in \mathbb{L}_H \setminus \{y\},$$

womit folgt, daß y instabil ist.

Offensichtlich hängt das asymptotische Verhalten der Lösung y im Intervall $[t_0, \infty[$ nach Störung ihres Anfangswertes vom Realteil des Parameters (Eigenwertes) λ ab. Sein Vorzeichen entscheidet über die Ausbreitung der Anfangsstörung.

Beispiel 2.6

Es sei $d = 2$ und

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

die Nullmatrix. Aus dem zu lösenden System $y' = 0$ erhält man die Konstanz

$$z(t) = z(t_0) \quad \forall t \in [t_0, \infty[\quad \forall z \in \mathbb{L}_H,$$

also auch

$$\|z(t)\|_2 = \|z(t_0)\|_2 \quad \forall t \in [t_0, \infty[\quad \forall z \in \mathbb{L}_H.$$

Hieraus ergibt sich die Stabilität der Nulllösung $\underline{0} \in \mathbb{L}_H$, denn eine hinreichend kleine Anfangsstörung bleibt konstant, man kann in (2.1.1) einfach $\delta := \epsilon$ wählen.

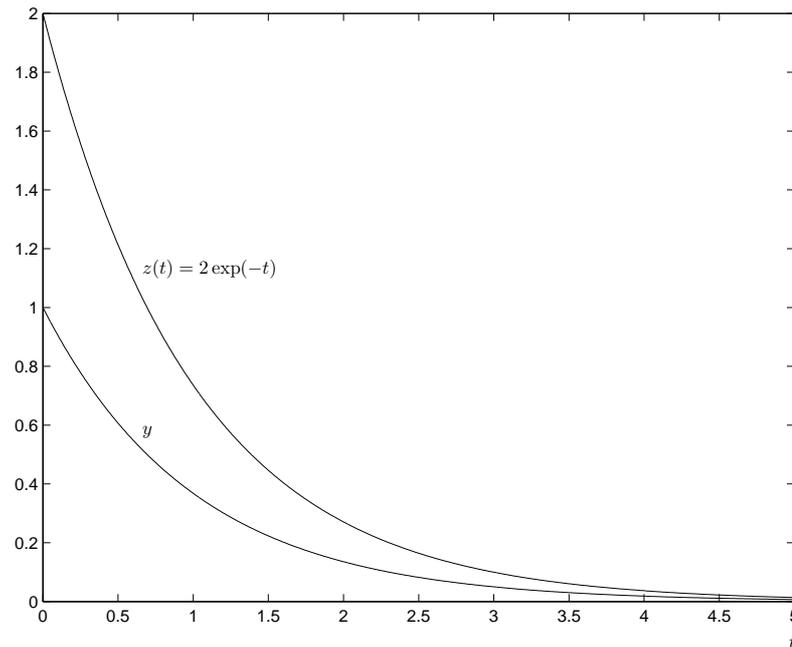


Abbildung 9: Asymptotische Stabilität von y , $y(t) = \exp(\lambda t) = \exp(-t)$, $t_0 = 0$, $\lambda = -1$

Beispiel 2.7

Es sei $d = 2$ und

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Da A aus einem einzelnen Jordan-Block besteht, ist die Familie (y^1, y^2) mit

$$\begin{aligned} y^1 &: [t_0, \infty[\rightarrow \mathbb{C}^2 & y^2 &: [t_0, \infty[\rightarrow \mathbb{C}^2 \\ y^1(t) &:= (1, 0)^T & y^2(t) &:= (t, 1)^T \end{aligned}$$

ein Hauptsystem von \mathbb{L}_H . Um die Instabilität der Nulllösung $\underline{0} \in \mathbb{L}_H$ zu erkennen, sei $\epsilon := 1$ gewählt. Zu jedem $\delta > 0$ ist dann durch

$$z := \frac{1}{2} \frac{\delta}{\sqrt{t_0^2 + 1}} y^2 \in \mathbb{L}_H$$

eine Lösung mit Anfangsstörung $\|z(t_0)\|_2 < \delta$ und asymptotischem Verhalten $\lim_{t \rightarrow \infty} \|z(t)\|_2 = \infty$ gegeben. Somit ist also für $\epsilon = 1$ die Stabilitätsbedingung (2.1.1) nicht erfüllbar, was also die Instabilität der Nulllösung bedeutet.

Um Aussagen über das asymptotische Verhalten von Lösungen zu gewinnen, wird das Lemma 2.8 zunächst das asymptotische Verhalten eines Hauptsystems von \mathbb{L}_H in Abhängigkeit der Eigenwerte von A klären. Dieses Lemma, die nachfolgenden Sätze 2.9 und 2.10 sowie die zugehörigen Beweise orientieren sich an den in [69] gegebenen Sätzen und Beweisen. Da jene jedoch implizit den nicht mehr trivialen Begriff der Potenzreihen in Banach-Algebren verwenden, wurden sie hier vereinfacht neuformuliert, ohne sie dadurch im geringsten zu verlängern.

Lemma 2.8

Es seien $\|\cdot\| : M(d \times d, \mathbb{C}) \rightarrow \mathbb{R}$ eine beliebige Norm auf dem \mathbb{C} -Vektorraum $M(d \times d, \mathbb{C})$ und $\alpha \in \mathbb{R}$ eine strikte, obere Schranke für die Realteile der Eigenwerte von A , d.h.

$$\operatorname{Re}(\lambda) < \alpha \quad \forall \lambda \in \sigma(A).$$

Außerdem sei (y^1, \dots, y^d) ein Hauptsystem von \mathbb{L}_H mit den zugehörigen Fundamentalmatrizen

$$Y(t) = \left(y^1(t), \dots, y^d(t) \right) \in M(d \times d, \mathbb{C}), \quad t \in [t_0, \infty[.$$

Dann existiert ein $c \in \mathbb{R}_+^*$ mit

$$\|Y(t)\| \leq c \exp(\alpha t) \quad \forall t \in [t_0, \infty[.$$

Beweis:

Es seien $\lambda_1, \dots, \lambda_r \in \mathbb{C}$ die paarweise verschiedenen Eigenwerte von A , $\sigma(A) = \{\lambda_1, \dots, \lambda_r\}$, $r \in \{1, \dots, d\}$. Aus einer Jordan-Normalform von A erhält man ein Hauptsystem (w^1, \dots, w^d) von \mathbb{L}_H , dessen einzelne Abbildungen folgende Gestalt haben:

$$\begin{aligned} w^j &: [t_0, \infty[\rightarrow \mathbb{C}^d \\ w^j(t) &= \exp(\lambda_{k(j)} t) p^j(t). \end{aligned}$$

Dabei sind für ein $j \in \{1, \dots, d\}$ $\lambda_{k(j)} \in \sigma(A)$ mit $k(j) \in \{1, \dots, r\}$ ein Eigenwert von A und

$$\begin{aligned} p^j &: \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}^d \\ p^j(t) &= \begin{pmatrix} p_1^j(t) \\ \vdots \\ p_d^j(t) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

eine Abbildung, deren einzelne Komponenten p_ν^j , $\nu \in \{1, \dots, d\}$, Polynome vom Höchstgrad $d-1$ sind. Es seien

$$W(t) := \left(w^1(t), \dots, w^d(t) \right) \in M(d \times d, \mathbb{C}), \quad t \in [t_0, \infty[,$$

die entsprechenden Fundamentalmatrizen und als Abkürzung

$$\epsilon_j := \alpha - \operatorname{Re}(\lambda_{k(j)}) \in \mathbb{R}_+^*, \quad j \in \{1, \dots, d\}.$$

Für $j, \nu \in \{1, \dots, d\}$ kann $c_{\nu j} \in \mathbb{R}_+^*$ so gewählt werden, daß gilt

$$|p_\nu^j(t)| \leq c_{\nu j} \exp(\epsilon_j t) \quad \forall t \in [t_0, \infty[.$$

Die Existenz einer solchen Konstanten ist aufgrund des stärkeren Wachstumsverhaltens der Exponentialfunktion für $t \rightarrow \infty$ im Vergleich zu Potenzfunktionen gesichert (s. z. B. [40]). Damit erhält man

$$\begin{aligned} |w_\nu^j(t)| &= |\exp(\lambda_{k(j)} t)| |p_\nu^j(t)| \leq |\exp(\lambda_{k(j)} t)| c_{\nu j} \exp(\epsilon_j t) \\ &= \exp\left[(\operatorname{Re}(\lambda_{k(j)}) + \epsilon_j) t\right] c_{\nu j} = \exp(\alpha t) c_{\nu j}, \quad t \in [t_0, \infty[. \end{aligned}$$

Daraus erhält man mit

$$C := \sqrt{\sum_{\nu=1}^d \sum_{j=1}^d c_{\nu j}^2} \in \mathbb{R}_+^*$$

in der Frobenius-Norm (s. z. B. [8])

$$\|W(t)\|_F = \sqrt{\sum_{\nu=1}^d \sum_{j=1}^d |w_{\nu}^j(t)|^2} \leq C \exp(\alpha t), \quad t \in [t_0, \infty[.$$

Mit der Transformationsmatrix $S \in GL(d, \mathbb{C})$ des Basiswechsels $(y^1, \dots, y^d) \rightarrow (w^1, \dots, w^d)$ gilt

$$Y(t) = W(t) S \quad \forall t \in [t_0, \infty[.$$

Mit $\tilde{C} := C \|S\|_F \in \mathbb{R}_+^*$ ergibt sich unter Ausnutzung der Submultiplikativität der Frobeniusnorm

$$\|Y(t)\|_F \leq \|W(t)\|_F \|S\|_F \leq C \exp(\alpha t) \|S\|_F = \tilde{C} \exp(\alpha t), \quad t \in [t_0, \infty[.$$

Mit Hilfe der Normäquivalenz in endlich-dimensionalen \mathbb{K} -Vektorräumen folgt dann die Korrektheit des Lemmas. \square

Der folgende Satz stellt den Zusammenhang zwischen den Eigenwerten der Matrix A und dem asymptotischen Verhalten sämtlicher Lösungen her.

Satz 2.9

Die folgenden beiden Aussagen sind äquivalent:

1. $\lim_{t \rightarrow \infty} y(t) = 0 \quad \forall y \in \mathbb{L}_H.$
2. $\operatorname{Re}(\lambda) < 0 \quad \forall \lambda \in \sigma(A).$

Beweis:

Es sei zunächst die Korrektheit der zweiten Aussage vorausgesetzt. Mit der Spektralabzisse

$$\gamma := \max\{\operatorname{Re}(\lambda) : \lambda \in \sigma(A)\} \in \mathbb{R}_-^*$$

und $\alpha := \frac{1}{2}\gamma \in \mathbb{R}_-^*$ gilt

$$\operatorname{Re}(\lambda) < \alpha \quad \forall \lambda \in \sigma(A).$$

(y^1, \dots, y^d) sei ein Hauptsystem von \mathbb{L}_H mit den zugehörigen Fundamentalmatrizen

$$Y(t) = \begin{pmatrix} y^1(t), \dots, y^d(t) \end{pmatrix} \in M(d \times d, \mathbb{C}), \quad t \in [t_0, \infty[.$$

Nach Lemma 2.8 sei $c \in \mathbb{R}_+^*$ mit

$$\|Y(t)\|_2 \leq c \exp(\alpha t) \quad \forall t \in [t_0, \infty[$$

gewählt. Ist nun $y \in \mathbb{L}_H$ eine beliebige Lösung, so kann sie mit einem $\beta \in \mathbb{C}^d$ dargestellt werden durch

$$y(t) = Y(t) \beta \quad \forall t \in [t_0, \infty[.$$

Nun gilt

$$\|y(t)\|_2 = \|Y(t) \beta\|_2 \leq \|Y(t)\|_2 \|\beta\|_2 \leq c \exp(\alpha t) \|\beta\|_2, \quad t \in [t_0, \infty[.$$

Wegen $\alpha < 0$ folgt hieraus $\lim_{t \rightarrow \infty} y(t) = 0$, also die erste Aussage des Satzes.

Nun sei die erste Aussage des Satzes als korrekt vorausgesetzt. Um einen Widerspruch zu erzeugen, sei angenommen, daß ein Eigenwert $\lambda \in \sigma(A)$ existiert mit $\operatorname{Re}(\lambda) \geq 0$. Mit einem zugehörigen Eigenvektor $v \in \mathbb{C}^d \setminus \{0\}$ ist dann

$$\begin{aligned} y &: [t_0, \infty[\rightarrow \mathbb{C}^d \\ y(t) &:= \exp(\lambda t) v \end{aligned}$$

eine Lösung, d. h. $y \in \mathbb{L}_H$. Sei $\nu \in \{1, \dots, d\}$ mit $v_\nu \neq 0$. Aus

$$|y_\nu(t)| = |\exp(\lambda t)| |v_\nu| = \exp(\operatorname{Re}(\lambda)t) \underbrace{|v_\nu|}_{>0}, \quad t \in [t_0, \infty[$$

folgt dann der Widerspruch, daß y nicht gegen $0 \in \mathbb{C}^d$ konvergiert für $t \rightarrow \infty$. \square

Der Inhalt des folgenden Satzes stellt die eingangs erwähnte Charakterisierung der Stabilität dar. Dabei reicht es nach Lemma 2.3 aus, sich auf eine Stabilitätsuntersuchung der Nulllösung zu beschränken.

Satz 2.10 (Stabilitätssatz für linear-autonome Systeme)

Es seien $\gamma := \max\{\operatorname{Re}(\lambda) : \lambda \in \sigma(A)\}$ die Spektralabzisse der Matrix A und $\underline{Q} \in \mathbb{L}_H$ die Nulllösung.

1. Falls $\gamma < 0$ gilt, so ist \underline{Q} asymptotisch stabil.
2. Falls $\gamma = 0$ gilt, so ist \underline{Q} nicht asymptotisch stabil.
3. Falls $\gamma > 0$ gilt, so ist \underline{Q} instabil.

Beweis:

1. Es sei $\gamma < 0$.

(a) Zunächst wird die Stabilität der Nulllösung nachgewiesen. Mit $\alpha := \frac{1}{2}\gamma < 0$ gilt wieder

$$\operatorname{Re}(\lambda) < \alpha \quad \forall \lambda \in \sigma(A).$$

Die Fundamentalmatrizen

$$Y(t) = \left(y^1(t), \dots, y^d(t) \right) \in M(d \times d, \mathbb{C}), \quad t \in [t_0, \infty[$$

eines Hauptsystems (y^1, \dots, y^d) von \mathbb{L}_H können nach Lemma 2.8 mit einer Konstanten $c \in \mathbb{R}_+^*$ wieder abgeschätzt werden zu

$$\|Y(t)\|_2 \leq c \exp(\alpha t) \quad \forall t \in [t_0, \infty[.$$

Es seien die Abkürzungen

$$\tilde{c} := c \|(Y(t_0))^{-1}\|_2 \in \mathbb{R}_+^* \quad \text{und} \quad s := \sup \{ \exp(\alpha t) : t \in [t_0, \infty[\} = \exp(\alpha t_0) \in \mathbb{R}_+^*$$

eingeführt. Seien nun

$$\epsilon > 0, \quad \delta := \frac{\epsilon}{\tilde{c} s} > 0.$$

Es sei $z \in \mathbb{L}_H$ eine beliebige Lösung, für deren Anfangswert $\|z(t_0)\| < \delta$ gilt. Sie hat die Darstellung

$$z(t) = Y(t) (Y(t_0))^{-1} z(t_0) \quad \forall t \in [t_0, \infty[.$$

Man erhält

$$\begin{aligned} \|z(t)\|_2 &\leq \|Y(t)\|_2 \|(Y(t_0))^{-1}\|_2 \|z(t_0)\|_2 \leq c \exp(\alpha t) \|(Y(t_0))^{-1}\|_2 \|z(t_0)\|_2 \\ &\leq \tilde{c} s \|z(t_0)\|_2 < \tilde{c} s \delta = \epsilon, \quad t \in [t_0, \infty[, \end{aligned}$$

was die Stabilität der Nulllösung impliziert.

(b) Die asymptotische Stabilität ergibt sich wie folgt: Aus

$$\operatorname{Re}(\lambda) < 0 \quad \forall \lambda \in \sigma(A)$$

ersieht man mit Hilfe von Satz 2.9

$$\lim_{t \rightarrow \infty} z(t) = 0 \quad \forall z \in \mathbb{L}_H.$$

Mit z. B. $\delta := 1$ ist dann die Bedingung (2.1.2) erfüllt.

2. Es sei $\gamma = 0$. Zu einem Eigenwert λ mit $\operatorname{Re}(\lambda) = 0$ und einem zugehörigem Eigenvektor $v \in \mathbb{C}^d \setminus \{0\}$ ist

$$z : [t_0, \infty[\rightarrow \mathbb{C}^d$$

$$z(t) := \exp(\lambda t) v$$

eine Lösung, d. h. $z \in \mathbb{L}_H$. Für jedes $\mu \in \mathbb{R}_+^*$ ist $z^\mu := \mu z \in \mathbb{L}_H$ ebenfalls eine Lösung, für welche gilt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|z^\mu(t)\|_2 = \mu \|v\|_2 \neq 0.$$

Sei nun $\delta > 0$ gewählt. Dann ist speziell mit

$$\mu := \frac{1}{2} \frac{\delta}{\|v\|_2} \in \mathbb{R}_+^*$$

eine Lösung $z^\mu \in \mathbb{L}_H$ gegeben, für deren Anfangswert gilt $\|z^\mu(t_0)\|_2 < \delta$ und für die der Grenzwert $\lim_{t \rightarrow \infty} \|z^\mu(t)\|_2$ existiert und von Null verschieden ist. Somit ist die Bedingung (2.1.2) der asymptotischen Stabilität für kein $\delta > 0$ erfüllbar.

3. Es sei $\gamma > 0$. Zu einem Eigenwert λ mit $\operatorname{Re}(\lambda) > 0$ und zugehörigem Eigenvektor $v \in \mathbb{C}^d \setminus \{0\}$ ist wie eben

$$z : [t_0, \infty[\rightarrow \mathbb{C}^d$$

$$z(t) := \exp(\lambda t) v$$

eine Lösung, d. h. $z \in \mathbb{L}_H$. Für jedes $\mu \in \mathbb{R}_+^*$ ist $z^\mu := \mu z \in \mathbb{L}_H$ ebenfalls eine Lösung, für welche nun aber gilt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|z^\mu(t)\|_2 = \lim_{t \rightarrow \infty} \mu \exp(\operatorname{Re}(\lambda)t) \|v\|_2 = \infty.$$

Sei nun $\epsilon := 1$ gewählt. Für jedes $\delta > 0$ ist dann speziell mit

$$\mu := \frac{1}{2} \frac{\delta}{\exp(\operatorname{Re}(\lambda)t_0) \|v\|_2} \in \mathbb{R}_+^*$$

eine Lösung $z^\mu \in \mathbb{L}_H$ gegeben, für die gilt

$$\|z^\mu(t_0)\|_2 < \delta \quad \text{und} \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \|z^\mu(t)\|_2 = \infty.$$

Somit ist die Bedingung (2.1.1) für $\epsilon = 1$ nicht erfüllbar, was die Instabilität der Nulllösung bedeutet. □

Bemerkung:

Im zweiten Fall $\gamma = 0$ des Satzes 2.10 kann sowohl Stabilität als auch Instabilität vorliegen, wie die beiden Beispiele 2.6 und 2.7 zeigen.

Bemerkung:

Aus den Sätzen 2.9 und 2.10 folgt direkt, daß die Nulllösung genau dann asymptotisch stabil ist, wenn

$$\lim_{t \rightarrow \infty} y(t) = 0 \quad \forall y \in \mathbb{L}_H$$

gilt.

Als direkte Folgerung des bisherigen ergibt sich nachstehendes Corollar.

Corollar 2.11

Ein linear-autonomes System $y' = Ay$ ist genau dann asymptotisch stabil, falls gilt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} y(t) = 0 \quad \forall y \in \mathbb{L}_H.$$

Bemerkung:

Eine entsprechende Aussage des Satzes 2.10 im linear-nicht-autonomen Fall gilt nicht mehr, denn man kann bei zeitabhängiger Matrix nicht mehr aus einer negativen Spektralabzisse auf Stabilität schließen, wie das Beispiel 2.4 zeigt. Für die dort gegebene Abbildung $A : \mathbb{R}_+ \rightarrow M(2 \times 2, \mathbb{C})$ gilt zwar

$$\sigma(A(t)) = \{-2\} \quad \forall t \in \mathbb{R}_+,$$

aber trotzdem hatte sich die Nulllösung als instabil herausgestellt.

2.2 Vorbemerkungen über Differenzgleichungen

Bei der Diskretisierung von Differentialgleichungen wird man in natürlicher Weise zu Differenzgleichungen geführt. Insbesondere bei der Untersuchung von Mehrschrittverfahren tauchen lineare, homogene Differenzgleichungen mit konstanten Koeffizienten auf. Die dafür benötigten Grundbegriffe werden in diesem vorbereitenden Abschnitt kurz eingeführt. Für eine ausführliche Darstellung der Theorie der Differenzgleichungen kann [43] empfohlen werden.

Definition 2.12

Mit $S_\infty := \mathbb{C}^\mathbb{N} = \text{ABB}(\mathbb{N}, \mathbb{C})$ wird der \mathbb{C} -Vektorraum aller komplexen Zahlenfolgen bezeichnet.

Zu einer natürlichen Zahl $k \in \mathbb{N}$ und gegebenen Koeffizienten $a_j \in \mathbb{C}, j = 0, \dots, k, a_k \neq 0$, werden die Gleichungen

$$\sum_{j=0}^k a_j y_{n+j} = 0, \quad n \in \mathbb{N}, \quad (2.2.1)$$

betrachtet. Es handelt sich bei (2.2.1) um eine lineare, homogene Differenzgleichung k -ter Ordnung mit konstanten Koeffizienten. Ihre Lösungsmenge wird mit

$$L_H := \left\{ (y_n)_{n \in \mathbb{N}} \in S_\infty : \sum_{j=0}^k a_j y_{n+j} = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N} \right\} \quad (2.2.2)$$

bezeichnet. L_H ist als Untervektorraum von S_∞ selber ein \mathbb{C} -Vektorraum. Ferner ist (2.2.1) stets ein charakteristisches Polynom

$$\phi : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C} \quad (2.2.3)$$

$$\phi(z) := \sum_{j=0}^k a_j z^j$$

zugeordnet.

Lemma 2.13

Es sei $k \in \mathbb{N}^*$. Dann existiert zu gegebenen Startwerten $y_0, \dots, y_{k-1} \in \mathbb{C}$ genau eine Lösungsfolge, deren Startabschnitt mit den Startwerten übereinstimmt, d. h.

$$\forall (y_0, \dots, y_{k-1}) \in \mathbb{C}^k \exists_1 (z_n)_{n \in \mathbb{N}} \in L_H : z_n = y_n \forall n \in \{0, \dots, k-1\}.$$

Insbesondere ist also eine Lösungsfolge durch ihre Startwerte eindeutig bestimmt.

Beweis:

Die Korrektheit der Aussage ergibt sich schlichtweg aus der Voraussetzung, daß der Höchstkoeffizient a_k von Null verschieden ist, denn dies sichert die eindeutige Berechenbarkeit der weiteren Folgenglieder für $n \geq k$. \square

Das Lemma 2.14 wird die „Größe“ des Raumes L_H klären. Die Idee, den zugehörigen Beweis kurz und elegant über einen dimensionerhaltenden Isomorphismus zu führen, stammt aus der Theorie der gewöhnlichen Differentialgleichungen (s. [69]) und kann hier für den diskreten Fall adaptiert werden.

Lemma 2.14

Für $k \in \mathbb{N}$ gilt $\text{DIM}_{\mathbb{C}}(L_H) = k$.

Beweis:

Für $k = 0$ besteht L_H nur aus der konstanten Nullfolge, die Aussage ist in diesem Fall also korrekt. Es sei also nun $k \geq 1$. Der nach Lemma 2.13 wohldefinierte „Anfangswertehomomorphismus“

$$\begin{aligned} F : \mathbb{C}^k &\rightarrow L_H \\ F(y_0, \dots, y_{k-1}) &:= (z_n)_{n \in \mathbb{N}} \\ \text{mit } z_n &= y_n \forall n \in \{0, \dots, k-1\} \end{aligned}$$

entpuppt sich unter Zuhilfenahme desselben Lemmas sogar als ein \mathbb{C} -Isomorphismus, sodaß L_H zunächst endlichdimensional und dann aber auch von gleicher \mathbb{C} -Dimension wie der \mathbb{C}^k ist. \square

Der Satz 2.15 wird zeigen, daß ähnlich wie bei gewöhnlichen Differentialgleichungen über die Nullstellen des charakteristischen Polynoms (2.2.3) eine Basis des Lösungsraumes L_H gegeben ist. Einen ausführlichen Beweis dieser Tatsache findet man in [43], Abschnitt 2.3.

Satz 2.15

Die Folgen-Familie $((z_n(u, q))_{n \in \mathbb{N}})_{(u, q) \in I}$ mit der Indexmenge

$$I := \{(u, q) : u \in N(\phi), q \in \{0, \dots, \mu_\phi(u) - 1\}\}$$

und mit

$$z_n(u, q) := n^q u^n, \quad n \in \mathbb{N},$$

bildet eine Basis von L_H . Dabei bezeichnen $N(\phi) \subset \mathbb{C}$ die Nullstellenmenge des charakteristischen Polynoms ϕ und $\mu_\phi(u) \in \mathbb{N}^*$ die algebraische Vielfachheit einer Nullstelle $u \in N(\phi)$.

Auf einen Beweis dieses Satzes wird hier verzichtet, da er wortwörtlich an der angegebenen Literaturstelle nachgelesen werden kann. Um aber die rein formale Anwendung des Satzes in Abschnitt 2.3 vorzubereiten, werden jetzt zwei konkrete Beispiele durchgerechnet. Das Beispiel 2.16 ist zunächst ein simples Beispiel, da nur einfache Nullstellen auftauchen, während in Beispiel 2.17 die Behandlung mehrfacher Nullstellen illustriert wird.

Beispiel 2.16

Für $k = 2$ sei eine Basis von

$$L_H := \{(y_n)_{n \in \mathbb{N}} \in S_\infty : 6y_n - 5y_{n+1} + y_{n+2} = 0 \forall n \in \mathbb{N}\}$$

gesucht. Es ist $\dim_{\mathbb{C}}(L_H) = k = 2$ und das charakteristische Polynom ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \phi : \mathbb{C} &\rightarrow \mathbb{C} \\ \phi(z) &= z^2 - 5z + 6 \end{aligned}$$

und zerfällt zu

$$\phi(z) = (z - 3)(z - 2) \quad \forall z \in \mathbb{C}.$$

Mit den nach Satz 2.15 gefundenen Basis-Folgen

$$(z_n(3, 0))_{n \in \mathbb{N}}, \quad z_n(3, 0) = 3^n, \quad n \in \mathbb{N},$$

und

$$(z_n(2, 0))_{n \in \mathbb{N}}, \quad z_n(2, 0) = 2^n, \quad n \in \mathbb{N},$$

ist die allgemeine Lösung gegeben durch

$$(y_n)_{n \in \mathbb{N}} = \alpha(3^n)_{n \in \mathbb{N}} + \beta(2^n)_{n \in \mathbb{N}}, \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C}.$$

Beispiel 2.17

Für $k = 3$ sei eine Basis von

$$L_H := \{(y_n)_{n \in \mathbb{N}} \in S_\infty : 4y_n - 3y_{n+2} + y_{n+3} = 0 \forall n \in \mathbb{N}\}$$

gesucht. Es ist $\dim_{\mathbb{C}}(L_H) = k = 3$ und das charakteristische Polynom ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \phi : \mathbb{C} &\rightarrow \mathbb{C} \\ \phi(z) &= z^3 - 3z^2 + 4 \end{aligned}$$

und zerfällt zu

$$\phi(z) = (z + 1)(z - 2)^2 \quad \forall z \in \mathbb{C}.$$

Mit den nach Satz 2.15 gefundenen Basis-Folgen

$$(z_n(-1, 0))_{n \in \mathbb{N}}, \quad z_n(-1, 0) = (-1)^n, \quad n \in \mathbb{N},$$

$$(z_n(2, 0))_{n \in \mathbb{N}}, \quad z_n(2, 0) = 2^n, \quad n \in \mathbb{N},$$

$$(z_n(2, 1))_{n \in \mathbb{N}}, \quad z_n(2, 1) = n2^n, \quad n \in \mathbb{N},$$

ist die allgemeine Lösung gegeben durch

$$(y_n)_{n \in \mathbb{N}} = \alpha((-1)^n)_{n \in \mathbb{N}} + \beta(2^n)_{n \in \mathbb{N}} + \gamma(n2^n)_{n \in \mathbb{N}}, \quad \alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{C}.$$

2.3 Der Begriff der absoluten Stabilität bei Mehrschrittverfahren

In diesem Abschnitt wird der Prozeß der Vererbung der asymptotischen Stabilität an Mehrschrittverfahren dargestellt. Das Ziel dabei ist, zu verstehen, warum Mehrschrittverfahren mit großen Stabilitätsbereichen, insbesondere die impliziten BDF-Verfahren, geeignet sind, um steife Systeme, wie sie bei der räumlichen Diskretisierung der bio-heat-transfer-equation (1.2.17) auftreten,

numerisch zu integrieren. Zunächst wird ein kurzer Abriß der Grundbegriffe der Mehrschrittverfahren gegeben und anschließend der Vererbungsprozeß in aller Ausführlichkeit besprochen.

Mehrschrittverfahren dienen zur numerischen Lösung eines gegebenen Anfangswertproblems

$$y'(t) = f(t, y(t)) \quad \forall t \in [t_0, \infty[, \quad (2.3.1)$$

$$y(t_0) = y^{(0)}. \quad (2.3.2)$$

Dabei seien $f : [t_0, \infty[\times \mathbb{C}^d \rightarrow \mathbb{C}^d$ eine gegebene Abbildung und $y^{(0)} \in \mathbb{C}^d$ ein Startvektor, welcher gegebene Anfangswerte zu einem Startzeitpunkt $t_0 \in \mathbb{R}$ enthält. Es sei vorausgesetzt, daß (2.3.1) / (2.3.2) eine eindeutige Lösung $y : [t_0, \infty[\rightarrow \mathbb{C}^d$ besitzt. Da hier die absolute Stabilität von Mehrschrittverfahren, also ihr Langzeitverhalten, erörtert werden soll, wird (2.3.1) / (2.3.2) von vornherein auf einem nach rechts unbeschränkten Zeitintervall $[t_0, \infty[$ betrachtet. Dieses wird mit einer Zeitschrittweite $h = \Delta t \in \mathbb{R}_+^*$ gemäß $t_n = t_0 + nh$, $n \in \mathbb{N}$, diskretisiert. Durch geeignete Anlaufrouitinen (Einschrittverfahren) müssen für die Anwendung eines Mehrschrittverfahrens Startvektoren $y^{(0)}, \dots, y^{(k-1)} \in \mathbb{C}^d$, $k \in \mathbb{N}^*$, vorweg bereitgestellt werden. Ein Mehrschrittverfahren, präziser k -Schritt-Verfahren, ist dann festgelegt durch einen Satz von Koeffizienten

$$\alpha_j, \beta_j \in \mathbb{R} : j = 0, \dots, k, \quad \alpha_0^2 + \beta_0^2 \neq 0, \quad \alpha_k \neq 0 \quad (2.3.3)$$

mit einer zugehörigen Rekursionsvorschrift

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j y^{(n+j)} = h \sum_{j=0}^k \beta_j f(t_{n+j}, y^{(n+j)}), \quad n \in \mathbb{N}, \quad (2.3.4)$$

wobei $y^{(n)} \in \mathbb{C}^d$ stets eine Approximation an $y(t_n) \in \mathbb{C}^d$ ist. Für $\beta_k = 0$ handelt es sich um ein explizites Verfahren, sonst um ein implizites. Die Bedingungen an die Koeffizienten sorgen dafür, daß tatsächlich ein Verfahren mit k Schritten vorliegt. Das Verfahren heißt wohldefiniert, falls ein neu zu iterierender Vektor $y^{(n+k)} \in \mathbb{C}^d$ eindeutig aus seinen k Vorgängern $y^{(n+j)}$, $j = 0, \dots, k-1$, berechnet werden kann. Dies ist bei expliziten Verfahren per se gegeben und kann im impliziten Fall wegen $\alpha_k \neq 0$ durch Wahl hinreichend kleiner Zeitschrittweiten garantiert werden (s. [15]). Das Mehrschrittverfahren wird genauer auch als lineares Mehrschrittverfahren bezeichnet aufgrund der Linearität bzgl. der rechten Seite f . Außerdem werden Einschrittverfahren ebenfalls unter Mehrschrittverfahren subsummiert ($k = 1$), sofern es sich nicht um Runge-Kutta-Verfahren handelt. Die Polynome

$$\rho(z) = \sum_{j=0}^k \alpha_j z^j, \quad z \in \mathbb{C},$$

$$\sigma(z) = \sum_{j=0}^k \beta_j z^j, \quad z \in \mathbb{C},$$

werden 1. und 2. charakteristisches Polynom des Mehrschrittverfahrens genannt. Die beiden Hauptklassen von Mehrschrittverfahren sind die Adams-Verfahren und die BDF-Verfahren (auch Gear'sche Verfahren). Erstere können sehr einsichtig über numerische Integration, letztere über numerische Differentiation hergeleitet werden (vgl. [29], [59]). Im folgenden werden beispielhaft einige Mehrschrittverfahren konkret angegeben.

1. Θ -Verfahren:

$$y^{(n+1)} - y^{(n)} = h \left[(1 - \Theta) f(t_n, y^{(n)}) + \Theta f(t_{n+1}, y^{(n+1)}) \right], \quad n \in \mathbb{N},$$

wobei $\Theta \in [0, 1]$ ein Steuerungsparameter ist. Für $\Theta = 0$ erhält man das explizite Euler-Verfahren (1. Ordnung), für $\Theta > 0$ implizite Verfahren, speziell für $\Theta = \frac{1}{2}$ die Trapez-Methode (auch Crank-Nicolson-Verfahren im Kontext PDE; 2. Ordnung), und speziell für $\Theta = 1$ das implizite Euler-Verfahren (1. Ordnung).

2. Adams-Bashforth-Verfahren (2.Ordnung):

$$y^{(n+2)} - y^{(n+1)} = h \left[-\frac{1}{2} f(t_n, y^{(n)}) + \frac{3}{2} f(t_{n+1}, y^{(n+1)}) \right], \quad n \in \mathbb{N}.$$

3. Adams-Moulton-Verfahren (5.Ordnung):

$$y^{(n+4)} - y^{(n+3)} = h \left[-\frac{19}{720} f(t_n, y^{(n)}) + \frac{106}{720} f(t_{n+1}, y^{(n+1)}) - \frac{264}{720} f(t_{n+2}, y^{(n+2)}) \right. \\ \left. + \frac{646}{720} f(t_{n+3}, y^{(n+3)}) + \frac{251}{720} f(t_{n+4}, y^{(n+4)}) \right], \quad n \in \mathbb{N}.$$

4. Implizites BDF(2)-Verfahren (2.Ordnung):

$$\frac{3}{2}y^{(n+2)} - 2y^{(n+1)} + \frac{1}{2}y^{(n)} = h f(t_{n+2}, y^{(n+2)}), \quad n \in \mathbb{N}.$$

5. Implizites BDF(3)-Verfahren (3.Ordnung):

$$\frac{11}{6}y^{(n+3)} - 3y^{(n+2)} + \frac{3}{2}y^{(n+1)} - \frac{1}{3}y^{(n)} = h f(t_{n+3}, y^{(n+3)}), \quad n \in \mathbb{N}.$$

Sämtliche angegebenen Verfahren sind konsistent und nullstabil und somit konvergent auf jedem Zeitkompaktum $[t_0, t_E]$.

Das Beispiel 2.18 wird zeigen, daß die unbedarfte Anwendung eines beliebig herausgegriffenen Mehrschrittverfahrens auf ein asymptotisch stabiles, linear-autonomes System nicht unbedingt zu vernünftigen Ergebnissen führen muß.

Beispiel 2.18

Mit $t_0 \in \mathbb{R}$, der Matrix

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \in M(2 \times 2, \mathbb{C})$$

und einem Startvektor

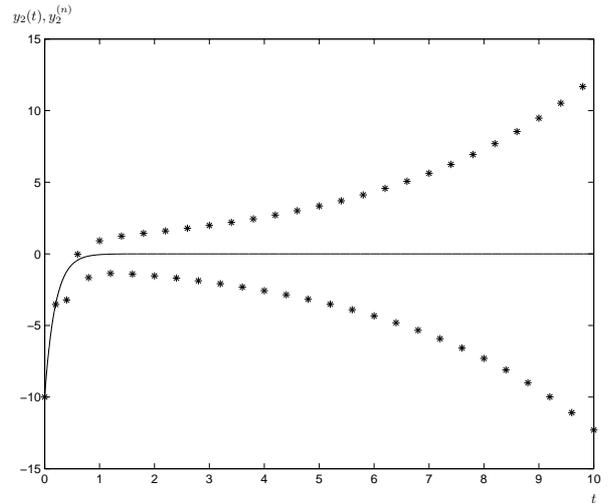
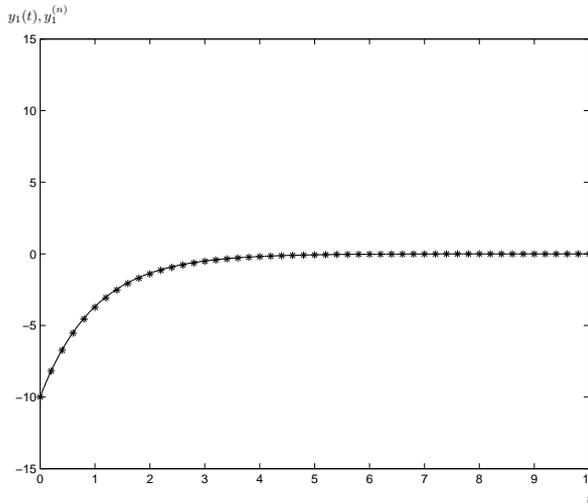
$$y^{(0)} = \begin{pmatrix} y_1^{(0)} \\ y_2^{(0)} \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2$$

wird das Anfangswertproblem

$$y'(t) = A y(t) \quad \forall t \in [t_0, \infty[\\ y(t_0) = y^{(0)}$$

mit der exakten Lösung

$$y(t) = \begin{pmatrix} y_1^{(0)} \exp(\lambda_1(t - t_0)) \\ y_2^{(0)} \exp(\lambda_2(t - t_0)) \end{pmatrix}, \quad t \in [t_0, \infty[.$$

Abbildung 10: Stabile Integration, $\lambda_1 = -1$ Abbildung 11: Instabile Integration, $\lambda_2 = -5.2$

betrachtet. Die Anwendung des Adams-Bashforth-Verfahrens 2. Ordnung ergibt

$$y^{(n+2)} - y^{(n+1)} = h \left(-\frac{1}{2} A y^{(n)} + \frac{3}{2} A y^{(n+1)} \right), \quad n \in \mathbb{N}.$$

In Komponentenschreibweise lautet dies

$$y_1^{(n+2)} = \frac{1}{2} h \lambda_1 \left(3y_1^{(n+1)} - y_1^{(n)} \right) + y_1^{(n+1)}, \quad n \in \mathbb{N},$$

$$y_2^{(n+2)} = \frac{1}{2} h \lambda_2 \left(3y_2^{(n+1)} - y_2^{(n)} \right) + y_2^{(n+1)}, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Mit den konkreten Werten

$$t_0 = 0, \quad \lambda_1 = -1, \quad \lambda_2 = -5.2, \quad y_1^{(0)} = -10, \quad y_2^{(0)} = -10$$

und der Schrittweite $h = 0.2$ ergeben sich die in den Abbildungen 10 und 11 dargestellten Funktionsverläufe und Näherungswerte. Da λ_1 sich stark von λ_2 unterscheidet, erreicht die erste Lösungsfunktion y_1 den stationären Zustand viel langsamer als y_2 . Das Adams-Bashforth-Verfahren ist also mit der Schwierigkeit konfrontiert, simultan eine sich langsam ändernde und eine sich schnell ändernde Lösungskomponente zu integrieren. Während es für y_1 eine stabile Integration gewährleistet, versagt es bei y_2 völlig.

Anknüpfend an Abschnitt 2.1 wird das ODE-System (2.3.1) zu einem linear-autonomen System spezialisiert, d. h. $f(t, y) = Ay$ mit $A \in M(d \times d, \mathbb{C})$. Um allerdings den Begriff der absoluten Stabilität transparent, d. h. durch Reduktion auf das Wesentliche darstellen zu können, ist eine weitere Spezialisierung auf den Fall $d = 1$ nötig. Für diesen wird die eingeführte Notation für Folgen $(y^{(n)})_{n \in \mathbb{N}}$ beibehalten, also mit Index rechts oben, auch wenn dies von der üblichen Notation von Zahlenfolgen abweicht.

Bezeichnung 2.19

Die skalar-komplexe ODE

$$y'(t) = \lambda y(t) \quad \forall t \in [t_0, \infty[, \quad (2.3.5)$$

mit $\lambda \in \mathbb{C}$, $t_0 \in \mathbb{R}$ wird als Dahlquist'sche Testgleichung bezeichnet. Ihr Lösungsraum ist gegeben durch

$$\mathbb{L}_H = \left\{ y \in ABB([t_0, \infty[, \mathbb{C}) : y(t) = y^{(0)} \exp(\lambda(t - t_0)) \quad \forall t \in [t_0, \infty[, y^{(0)} \in \mathbb{C} \right\}.$$

Ein Mehrschrittverfahren nimmt bei Anwendung auf (2.3.5) die Gestalt

$$\sum_{j=0}^k (\alpha_j - h\lambda\beta_j) y^{(n+j)} = 0, \quad n \in \mathbb{N}, \quad (2.3.6)$$

an und ist genau dann wohldefiniert, falls $\alpha_k - h\lambda\beta_k \neq 0$ gilt. Betrachtet wird jetzt eine Dahlquist'sche Testgleichung, die als asymptotisch stabil vorausgesetzt sei. Dies ist nach Corollar 2.11 äquivalent dazu, daß gilt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} y(t) = 0 \quad \forall y \in \mathbb{L}_H \quad (2.3.7)$$

und außerdem auch dazu, daß gilt $\operatorname{Re}(\lambda) < 0$. Um die asymptotische Stabilität an ein Mehrschrittverfahren zu vererben, ist es also eine natürliche Forderung an selbiges, daß jede von der Rekursionsformel (2.3.6) generierte Folge $(y^{(n)})_{n \in \mathbb{N}}$ in \mathbb{C} die Eigenschaft

$$\lim_{n \rightarrow \infty} y^{(n)} = 0 \quad (2.3.8)$$

besitzt. Das folgende Beispiel wird zeigen, daß diese Vererbung keineswegs selbstverständlich ist, sondern von der Wahl der Zeitschrittweite $h > 0$ entscheidend abhängt.

Beispiel 2.20

Gegeben sei eine asymptotisch stabile Dahlquist'sche Testgleichung

$$y'(t) = \lambda y(t) \quad \forall t \in [t_0, \infty[$$

mit $\lambda \in \mathbb{R}_-^*$. Zu einem beliebigen Startwert $y^{(0)} \in \mathbb{C}$ und einer gegebenen Zeitschrittweite $h \in \mathbb{R}_+^*$ lautet das explizite Euler-Verfahren

$$y^{(n+1)} = (1 + h\lambda) y^{(n)} \quad \forall n \in \mathbb{N},$$

also

$$y^{(n)} = (1 + h\lambda)^n y^{(0)} \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

Unter der Voraussetzung $y^{(0)} \neq 0$ erhält man für die numerische Asymptotik folgende Äquivalenzen

$$\lim_{n \rightarrow \infty} y^{(n)} = 0 \iff |1 + h\lambda| < 1 \iff h < -\frac{2}{\lambda}.$$

Für die Vererbung der asymptotischen Stabilität an das explizite Euler-Verfahren ist also eine Zeitschrittweiten-Restriktion durch die obere Schranke

$$\hat{h} := -\frac{2}{\lambda} \in \mathbb{R}_+^*$$

zu beachten:

1. Wählt man $h < \hat{h}$, so besitzt jede vom expliziten Euler-Verfahren gelieferte Folge $(y^{(n)})_{n \in \mathbb{N}}$ die Eigenschaft

$$\lim_{n \rightarrow \infty} y^{(n)} = 0,$$

(auch die konstante Nullfolge, die sowieso). Der Vererbungsprozeß ist in diesem Fall also erfolgreich.

2. Verletzt man diese Restriktion durch $h := \hat{h}$ (z. B.), so gilt für jede vom expliziten Euler-Verfahren gelieferte Folge $(y^{(n)})_{n \in \mathbb{N}}$

$$y^{(n)} = (-1)^n y^{(0)} \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

Alle Folgen mit Startwert $y^{(0)} \neq 0$ sind also alternierende, nicht null-konvergente Folgen und man kann in diesem Fall keineswegs von einem Vererbungsprozeß sprechen (vgl. Abbildung 12).

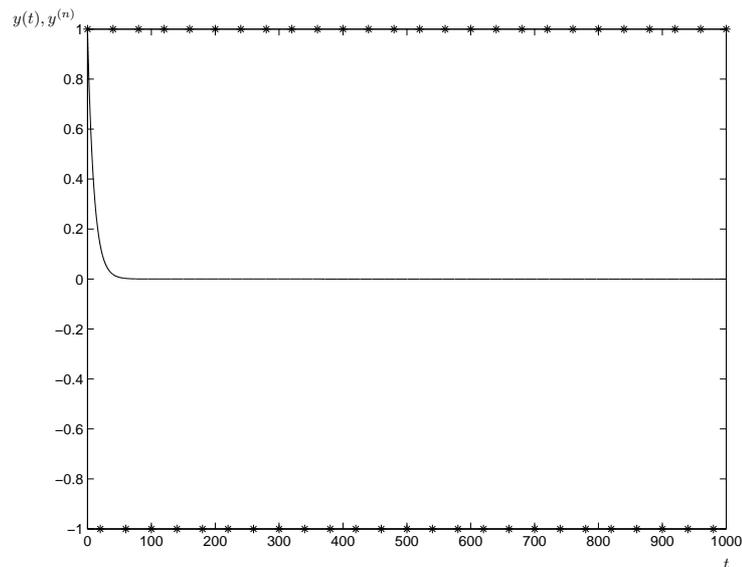


Abbildung 12: Exakte und alternierende Lösung für $t_0 = 0$, $\lambda = -\frac{1}{10}$, $h = \hat{h} = 20$, $y^{(0)} = 1$

Die Restriktion durch

$$\hat{h} = -\frac{2}{\lambda}$$

ist umso einschneidender, je größer $|\lambda|$ bzw. je „negativer“ λ ist. Letzteres impliziert nämlich ein stärkeres Abfallverhalten der exakten Lösungen

$$y : [t_0, \infty[\rightarrow \mathbb{C}$$

$$y(t) = y^{(0)} \exp(\lambda(t - t_0)).$$

Diesem muß insbesondere in der Anfangsphase - der sogenannten transienten Phase mit großen Änderungen der Funktionswerte - durch kleinere Zeitschrittweiten bei der Diskretisierung Genüge getan werden. Die Zeitschrittweiten müssen also gar nicht so sehr aus Genauigkeitsgründen, sondern schon aus Stabilitätsgründen verringert werden.

Um auf (2.3.6) später die Theorie der Differenzgleichungen anwenden zu können, ist die Definition eines weiteren charakteristischen Polynoms notwendig (s. [70], [2]).

Definition 2.21

Gegeben sei ein Mehrschrittverfahren. Zu einer beliebigen Zahl $H \in \mathbb{C}$ heißt

$$\phi_H : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$$

$$\phi_H(z) := \sum_{j=0}^k (\alpha_j - H\beta_j) z^j$$

das charakteristische Polynom des Mehrschrittverfahrens bzgl. H oder auch Stabilitätspolynom bzgl. H .

Bemerkung:

Mit dem 1. und 2. charakteristischen Polynom des Mehrschrittverfahrens besteht der Zusammenhang

$$\phi_H(z) = \rho(z) - H\sigma(z) \quad \forall z \in \mathbb{C} \quad \forall H \in \mathbb{C}.$$

Definition 2.22

Ein Mehrschrittverfahren heißt absolut stabil in einem Punkt $H \in \mathbb{C}$, falls alle Nullstellen seines charakteristischen Polynoms ϕ_H bzgl. H in der offenen Einheitskreisscheibe der komplexen Ebene liegen:

$$|u| < 1 \quad \forall u \in N(\phi_H).$$

Der folgende Satz wird die Bedeutung des Stabilitätspolynoms und des Stabilitätsbegriffes im Hinblick auf die gewünschte Vererbung klären.

Satz 2.23

Gegeben sei eine asymptotisch stabile Dahlquist'sche Testgleichung

$$y'(t) = \lambda y(t) \quad \forall t \in [t_0, \infty[, \quad (2.3.9)$$

($\lambda \in \mathring{\mathbb{C}}_-$) und ein Mehrschrittverfahren, welches auf sie angewendet werde. Es sei $h \in \mathbb{R}_+^*$ eine Zeitschrittweite, sodaß das Mehrschrittverfahren wohldefiniert ist. Dann sind die folgenden beiden Aussagen äquivalent:

1. Das Mehrschrittverfahren ist absolut stabil im Punkt $h\lambda \in \mathbb{C}$.
2. Für jede vom Mehrschrittverfahren generierte Folge $(y^{(n)})_{n \in \mathbb{N}}$ in \mathbb{C} gilt $\lim_{n \rightarrow \infty} y^{(n)} = 0$.

Beweis:

Es seien

$$\alpha_j, \beta_j \in \mathbb{R} : j = 0, \dots, k, \quad \alpha_0^2 + \beta_0^2 \neq 0, \quad \alpha_k \neq 0$$

die Koeffizienten des Mehrschrittverfahrens. Es gilt $\alpha_k - h\lambda\beta_k \neq 0$ aufgrund seiner Wohldefiniertheit. Mit

$$L := \left\{ (y^{(n)})_{n \in \mathbb{N}} \in \mathcal{S}_\infty : \sum_{j=0}^k (\alpha_j - h\lambda\beta_j) y^{(n+j)} = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N} \right\} \quad (2.3.10)$$

werde der k -dimensionale \mathbb{C} -Vektorraum der vom Mehrschrittverfahren generierten Folgen in \mathbb{C} bezeichnet. Weiter sei

$$\begin{aligned} \phi_{h\lambda} &: \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C} \\ \phi_{h\lambda}(z) &:= \sum_{j=0}^k (\alpha_j - h\lambda\beta_j) z^j \end{aligned}$$

das charakteristische Polynom des Mehrschrittverfahrens bzgl. $h\lambda$. Die Folgen-Familie

$$\left((z^{(n)}(u, q))_{n \in \mathbb{N}} \right)_{(u, q) \in I}$$

mit der Indexmenge

$$I := \{(u, q) : u \in N(\phi_{h\lambda}), q \in \{0, \dots, \mu_{\phi_{h\lambda}}(u) - 1\}\}$$

und mit

$$z^{(n)}(u, q) := n^q u^n, \quad n \in \mathbb{N},$$

ist nach Satz 2.15 eine Basis von L .

1. Es sei nun die erste Aussage des Satzes als korrekt vorausgesetzt. Dann gilt nach der Stabilitätsdefinition

$$|u| < 1 \quad \forall u \in N(\phi_{h\lambda}). \quad (2.3.11)$$

Es sei nun $(y^{(n)})_{n \in \mathbb{N}} \in L$ eine vom Mehrschrittverfahren erzeugte Folge in \mathbb{C} . Sie hat eine Darstellung

$$(y^{(n)})_{n \in \mathbb{N}} = \sum_{u \in N(\phi_{h\lambda})} \sum_{q=0}^{\mu_{\phi_{h\lambda}}(u)-1} c_{u,q} (z^{(n)}(u, q))_{n \in \mathbb{N}}$$

mit eindeutig bestimmten Koeffizienten $c_{u,q} \in \mathbb{C}$. Aus der Definition der Basisfolgen folgt mit (2.3.11)

$$\lim_{n \rightarrow \infty} y^{(n)} = 0,$$

was zu zeigen war.

2. Es sei nun die zweite Aussage des Satzes als korrekt vorausgesetzt. Unter der Annahme, daß ein

$$\hat{u} \in N(\phi_{h\lambda}) \text{ mit } |\hat{u}| \geq 1$$

existierte, wäre die spezielle Basisfolge $(z^{(n)}(\hat{u}, 0))_{n \in \mathbb{N}} \in L$ wegen

$$z^{(n)}(\hat{u}, 0) = \hat{u}^n \quad \forall n \in \mathbb{N}$$

nicht null-konvergent, was ein Widerspruch wäre. Somit ist das Mehrschrittverfahren absolut stabil in $h\lambda$.

□

Dieser Satz gebietet also, die Zeitschrittweite $h > 0$ so zu wählen, daß im Punkt $h\lambda$ absolute Stabilität vorliegt. Dies ist notwendig und hinreichend für den beabsichtigten Vererbungsprozeß. Die nächste Aufgabe besteht also darin, für ein Mehrschrittverfahren alle Stabilitätspunkte zu kollektieren. Dies ist aufgrund der hier gewählten Definition der absoluten Stabilität problemlos möglich, da jene nicht explizit von h oder λ abhängt, und führt zu folgender Definition.

Definition 2.24

Der Bereich der absoluten Stabilität eines Mehrschrittverfahrens ist die Menge aller Punkte in \mathbb{C} , in denen es absolut stabil ist:

$$\begin{aligned} S &:= \{H \in \mathbb{C} : \text{Das Mehrschrittverfahren ist absolut stabil in } H\} \\ &= \{H \in \mathbb{C} : |u| < 1 \quad \forall u \in N(\phi_H)\} \subset \mathbb{C}. \end{aligned}$$

Beispiel 2.25

Betrachtet man das explizite Euler-Verfahren

$$y^{(n+1)} - y^{(n)} = h f(t_n, y^{(n)}), \quad n \in \mathbb{N},$$

so ist sein Stabilitätspolynom bzgl. $H \in \mathbb{C}$ gegeben durch

$$\begin{aligned} \phi_H &: \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C} \\ \phi_H(z) &= z - (1 + H) \end{aligned}$$

mit der Nullstellenmenge

$$N(\phi_H) = \{1 + H\}.$$

Der Bereich der absoluten Stabilität ist dann der offene Kreis in \mathbb{C} mit Mittelpunkt -1 und Radius 1 (s. Abbildung 13):

$$S = \{H \in \mathbb{C} : |1 + H| < 1\} = B(-1, 1).$$

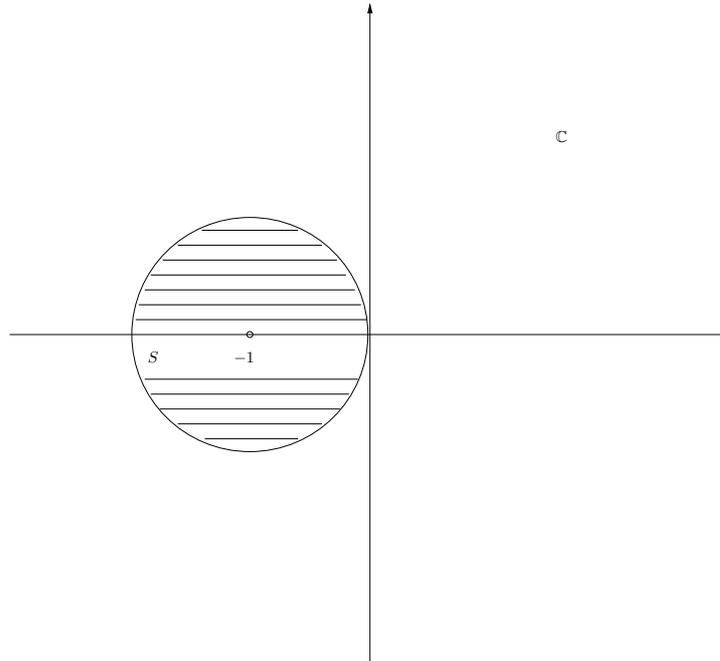


Abbildung 13: Bereich der absoluten Stabilität des expliziten Euler-Verfahrens

Bemerkung:

Das explizite Euler-Verfahren hat mit $B(-1, 1)$ einen beschränkten und im Vergleich zur ganzen, komplexen Ebene sehr kleinen Stabilitätsbereich. Ist nun eine asymptotisch stabile Dahlquist'sche Testgleichung

$$y'(t) = \lambda y(t) \quad \forall t \in [t_0, \infty[$$

gegeben ($\lambda \in \overset{\circ}{\mathbb{C}}_-$), so muß die Zeitschrittweite $h > 0$ so gewählt werden, daß $h\lambda \in B(-1, 1)$ sichergestellt ist. Insbesondere wenn λ betragsmäßig sehr groß ist, muß h sehr klein gewählt werden, vgl. auch Beispiel 2.20. Das explizite Euler-Verfahren unterliegt in einem solchen Fall also einer starken Zeitschrittweiten-Restriktion, um stabil arbeiten zu können. Diese führt aber durch die dann notwendige, große Anzahl von Zeitschritten zu einem hohen Gesamtrechnenaufwand. Wünschenswert sind also eher Mehrschrittverfahren mit großen Stabilitätsbereichen.

Definition 2.26

Ein Mehrschrittverfahren heißt *A-stabil* (unbeschränkt absolut stabil), falls sein Bereich S der absoluten Stabilität die offene, linke, komplexe Halbebene umfaßt:

$$\overset{\circ}{\mathbb{C}}_- \subset S.$$

Bemerkung:

Sind eine asymptotisch stabile Dahlquist'sche Testgleichung

$$y'(t) = \lambda y(t) \quad \forall t \in [t_0, \infty[$$

($\lambda \in \overset{\circ}{\mathbb{C}}_-$) und ein A-stabiles Mehrschrittverfahren gegeben, so gilt also

$$h\lambda \in S \quad \forall h \in \mathbb{R}_+^*.$$

Die Zeitschrittweite h unterliegt also keiner Einschränkung. In diesem Sinne liegt unbeschränkte absolute Stabilität vor.

Bemerkung:

Das explizite Euler-Verfahren ist also weit davon entfernt, A-stabil zu sein.

Beispiel 2.27

Die Θ -Verfahren sind für $\Theta \in [\frac{1}{2}, 1]$ A-stabil, wie dieses Beispiel zeigen wird. Aus der Rekursionsformel

$$y^{(n+1)} - y^{(n)} = h \left[(1 - \Theta) f(t_n, y^{(n)}) + \Theta f(t_{n+1}, y^{(n+1)}) \right], \quad n \in \mathbb{N},$$

erhält man das Stabilitätspolynom bzgl. $H \in \mathbb{C}$

$$\begin{aligned} \phi_H : \mathbb{C} &\rightarrow \mathbb{C} \\ \phi_H(z) &= (1 - H\Theta)z - [1 + H(1 - \Theta)] \end{aligned}$$

mit der Nullstellenmenge

$$N(\phi_H) = \left\{ \begin{array}{ll} \left\{ \frac{1+H(1-\Theta)}{1-H\Theta} \right\}, & H\Theta \neq 1, \\ \emptyset, & H\Theta = 1 \end{array} \right\}.$$

Um $\overset{\circ}{\mathbb{C}}_- \subset S$ nachzuweisen, sei $H \in \overset{\circ}{\mathbb{C}}_-$ beliebig, dann aber fest gewählt. Aus $\operatorname{Re}(H) < 0$ folgt zunächst $H\Theta \neq 1$, also

$$N(\phi_H) = \left\{ \frac{1 + H(1 - \Theta)}{1 - H\Theta} \right\}.$$

Durch einfaches Rechnen in \mathbb{C} ersieht man

$$\left| \frac{1 + H(1 - \Theta)}{1 - H\Theta} \right| < 1,$$

also $H \in S$. Da $H \in \overset{\circ}{\mathbb{C}}_-$ beliebig war, gilt also $\overset{\circ}{\mathbb{C}}_- \subset S$ und es liegt A-Stabilität vor.

Bemerkung:

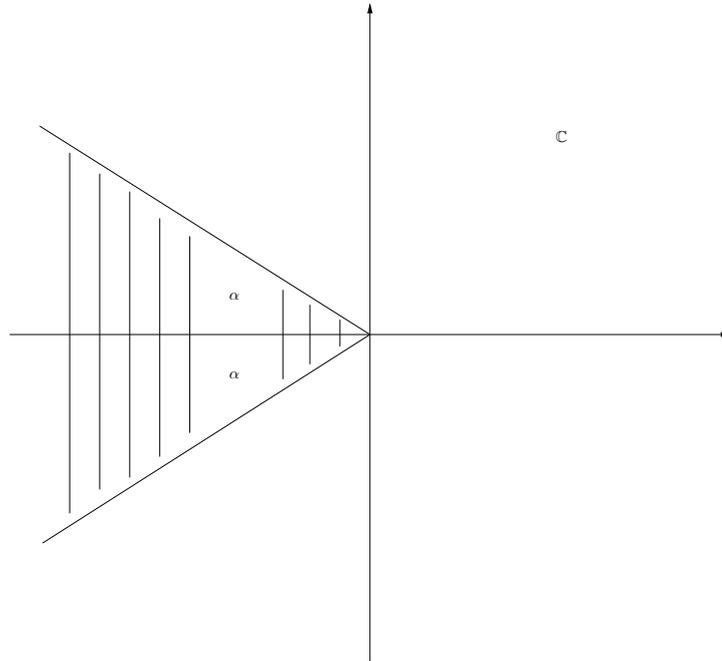
Sämtliche Adams-Bashforth-Verfahren und die Adams-Moulton-Verfahren mit $k \geq 2$ sind nicht A-stabil. Die impliziten BDF(k)-Verfahren sind für $k = 1, 2$ A-stabil, für $k \geq 3$ nicht mehr. Die konkrete Vorgehensweise zur Absteckung von Stabilitätsbereichen und entsprechende Graphiken von selbigen findet man in [30], Kap. V und [36], Kap. II.

Bemerkung:

Die Forderung der A-Stabilität an ein Mehrschrittverfahren ist sehr stark, denn A-stabile Mehrschrittverfahren besitzen höchstens die Konsistenzordnung 2 (s. z. B. [30], [15], „The second Dahlquist barrier“). Es ist also nicht möglich, A-stabile Mehrschrittverfahren höherer Ordnung zu konstruieren. Außerdem haben explizite Mehrschrittverfahren stets einen beschränkten Stabilitätsbereich und können somit nicht A-stabil sein (s. [64]). Ein A-stabiles Mehrschrittverfahren ist also stets implizit. Die Definition 2.28 wird eine Abschwächung der A-Stabilität einführen. Für sie werden vorher noch zwei Bezeichnungen festgelegt:

1. Für $z \in \mathbb{C}^*$ sei $\arg(z) := \omega$ der Winkel aus der eindeutigen Polardarstellung

$$z = r \exp(i\omega), \quad r \in \mathbb{R}, \omega \in [0, 2\pi[.$$

Abbildung 14: Sektor mit Öffnungswinkel 2α

2. Für $\alpha \in]0, \frac{\pi}{2}[$ sei

$$S_\alpha := \{z \in \mathbb{C}^* : \pi - \alpha < \arg(z) < \pi + \alpha\} = \{z \in \mathbb{C}^* : |\arg(-z)| < \alpha\} \subset \overset{\circ}{\mathbb{C}}_-$$

der offene Sektor mit Öffnungswinkel 2α in der offenen, linken, komplexen Halbebene (vgl. Abbildung 14).

Definition 2.28

Ein Mehrschrittverfahren heißt $A(\alpha)$ -stabil für ein $\alpha \in]0, \frac{\pi}{2}[$, wenn sein Bereich S der absoluten Stabilität den Sektor S_α umfaßt:

$$S_\alpha \subset S.$$

Bemerkung:

Gegeben sei wieder eine asymptotisch stabile Dahlquist'sche Testgleichung

$$y'(t) = \lambda y(t) \quad \forall t \in [t_0, \infty[$$

($\lambda \in \overset{\circ}{\mathbb{C}}_-$) und ein $A(\alpha)$ -stabiles Mehrschrittverfahren. Der halbe Öffnungswinkel $\alpha \in]0, \frac{\pi}{2}[$ sei so groß bzw. der Eigenwert λ liege so weit von der imaginären Achse entfernt, daß gilt $\lambda \in S_\alpha$. Dann folgt

$$h\lambda \in S_\alpha \quad \forall h \in \mathbb{R}_+^*,$$

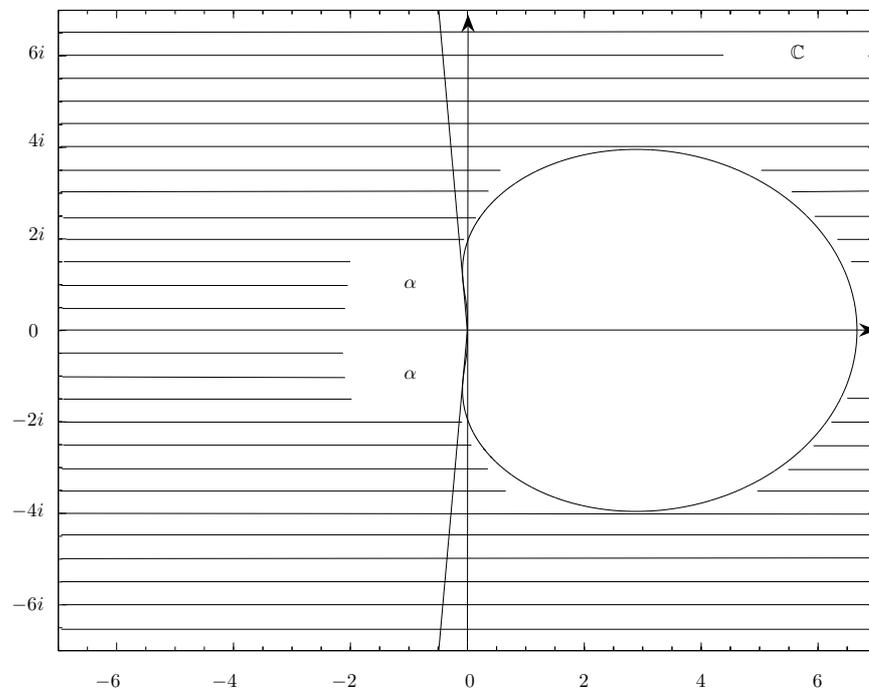
also auch

$$h\lambda \in S \quad \forall h \in \mathbb{R}_+^*.$$

Die Zeitschrittweite h unterliegt also in diesem Fall keiner Einschränkung. Bei vielen praktischen Problemen, insbesondere bei den gewöhnlichen Differentialgleichungen, die bei der Semi-Diskretisierung von parabolischen Differentialgleichungen (Wärmeleitungsprobleme) auftreten, ist

die Bedingung $\lambda \in S_\alpha$ wegen achsenferner Eigenwerte erfüllt, sodaß man nicht unbedingt auf A-Stabilität bestehen muß, sondern sich mit $A(\alpha)$ -Stabilität zufrieden geben kann, natürlich in der Hoffnung, daß α für das jeweilige Problem ausreichend groß ist. Die impliziten BDF(k)-Verfahren sind für $k \in \{3, \dots, 6\}$ $A(\alpha)$ -stabil und von höherer Ordnung als 2, nämlich jeweils k (s. [64]). Mit ihnen ist es also möglich, die zweite Dahlquist-Schranke zu durchbrechen bei Verzicht auf volle A-Stabilität. Insbesondere mit dem impliziten BDF(3)-Verfahren hat man noch ein fast A-stabiles Mehrschrittverfahren (vgl. Tabelle 1 und Abbildung 15). Das BDF(6)-Verfahren ist zwar immer noch null-stabil und eben von 6. Ordnung, wird aber aufgrund seines eher kleinen, halben Öffnungswinkels in der Praxis selten genutzt.

k	3	4	5	6
α	86°	73°	51°	17°

Tabelle 1: Halbe Öffnungswinkel der impliziten BDF(k)-VerfahrenAbbildung 15: BDF(3)-Verfahren: Bereich der absoluten Stabilität (schraffiert) und $A(86^\circ)$ -Stabilität

Im folgenden sollen die bisher für den skalar-komplexen Fall gewonnenen Ergebnisse soweit wie möglich auf den d -dimensionalen Fall verallgemeinert werden. Dazu wird das linear-autonome ODE-System

$$y'(t) = Ay(t) \quad \forall t \in [t_0, \infty[\quad (2.3.12)$$

mit $A \in M(d \times d, \mathbb{C})$ und $t_0 \in \mathbb{R}$ betrachtet. Der zugehörige Lösungsraum wird wieder mit

$$\mathbb{L}_H := \left\{ y \in \text{ABB} \left([t_0, \infty[, \mathbb{C}^d \right) : y \text{ ist differenzierbar in } [t_0, \infty[, y'(t) = Ay(t) \quad \forall t \in [t_0, \infty[\right\}$$

bezeichnet. Ein Mehrschrittverfahren nimmt bei Anwendung auf (2.3.12) die Gestalt

$$\sum_{j=0}^k (\alpha_j E - h\beta_j A) y^{(n+j)} = 0, \quad n \in \mathbb{N}, \quad (2.3.13)$$

an und ist genau dann wohldefiniert, falls

$$\alpha_k E - h\beta_k A \in GL(d, \mathbb{C})$$

gilt ($E = d \times d$ -Einheitsmatrix). Das System (2.3.12) sei als asymptotisch stabil vorausgesetzt. Dies ist nach Corollar 2.11 äquivalent dazu, daß gilt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} y(t) = 0 \quad \forall y \in \mathbb{L}_H$$

und außerdem auch dazu, daß mit der Spektralabzisse

$$\gamma = \max\{\operatorname{Re}(\lambda) : \lambda \in \sigma(A)\}$$

gilt $\gamma < 0$. Wünschenswert ist also wieder, daß jede von (2.3.13) gelieferte Folge $(y^{(n)})_{n \in \mathbb{N}}$ im \mathbb{C}^d die Eigenschaft

$$\lim_{n \rightarrow \infty} y^{(n)} = 0$$

besitzt. Der folgende Satz stellt die d -dimensionale Verallgemeinerung des Satzes 2.23 für diagonalisierbare Matrizen dar.

Satz 2.29

Gegeben sei ein asymptotisch stabiles ODE-System

$$y'(t) = Ay(t) \quad \forall t \in [t_0, \infty[$$

mit einer diagonalisierbaren Matrix $A \in M(d \times d, \mathbb{C})$ und ein Mehrschrittverfahren, welches darauf angewendet werde. Es sei $h \in \mathbb{R}_+^$ eine Zeitschrittweite, sodaß das Mehrschrittverfahren wohldefiniert ist. Dann sind die folgenden beiden Aussagen äquivalent:*

1. *Das Mehrschrittverfahren ist absolut stabil in allen Punkten $h\lambda \in \mathbb{C}$, $\lambda \in \sigma(A)$, d. h.*

$$h\lambda \in S \quad \forall \lambda \in \sigma(A).$$

2. *Für jede vom Mehrschrittverfahren generierte Folge $(y^{(n)})_{n \in \mathbb{N}}$ im \mathbb{C}^d gilt $\lim_{n \rightarrow \infty} y^{(n)} = 0$.*

Beweis:

Aufgrund der Diagonalisierbarkeit von A ist das gegebene ODE-System äquivalent zu einem entkoppelten System von d simultanen, asymptotisch stabilen Dahlquist'schen Testgleichungen. Genauso ist (2.3.13) äquivalent zu d simultan durchgeführten, skalaren, wohldefinierten Mehrschrittverfahren. Der Beweis ergibt sich daher schlichtweg aus der d -fachen Anwendung von Satz 2.23 auf die hier vorliegenden d Komponenten. \square

Bemerkung:

Eine Formulierung des Satzes 2.29 für den Fall beliebiger, nicht unbedingt diagonalisierbarer Matrizen scheint es in der Literatur nicht zu geben. Insbesondere reicht ein Rückgriff auf die Jordan-Normal-Form von A für einen allgemeinen Beweis nicht aus (vgl. auch [15], Abschnitt 7.2).

Bemerkung:

Im Satz 2.29 sei jetzt zusätzlich vorausgesetzt, daß sich die Eigenwerte der Matrix A betragsmäßig

stark unterscheiden. Wird jetzt ein Mehrschrittverfahren mit beschränktem Stabilitätsbereich S verwendet, so werden betragsmäßig große Eigenwerte zu einer starken Zeitschrittweiten-Restriktion führen, während betragsmäßig kleine Eigenwerte größere Zeitschrittweiten zulassen. Der betragsmäßig größte Eigenwert widerspricht also am stärksten einer effizienten Zeitintegration. Systeme mit stark unterschiedlichen Eigenwerten werden daher als „steif“ bezeichnet (s. z. B. [14], [30]). Explizite Mehrschrittverfahren, die also einen beschränkten Stabilitätsbereich haben, scheiden daher von vornherein zur Zeitintegration aus. Stattdessen sollten implizite Verfahren, die $A(\alpha)$ -stabil oder sogar A -stabil sind, speziell also die impliziten BDF(k)-Verfahren ($k \leq 5$) zum Einsatz kommen. Das Beispiel 2.30 wird zeigen, daß insbesondere die Semi-Diskretisierung von Diffusionsprozessen, speziell Wärmeleitungsproblemen, auf steife Systeme führen kann, was im Hinblick auf das zu entwickelnde Finite-Volumen-Verfahren für das Thermoregulationsproblem (Kapitel 3) natürlich von Interesse ist. Weitere Beispiele zu dem nur intuitiv eingeführten Begriff der „Steifheit“ findet man in [30], [14] und [36], eine umfassende Übersicht über steife Probleme und entsprechende Methoden in [1].

Beispiel 2.30

Betrachtet wird das räumlich-eindimensionale, instationäre Wärmeleitungsproblem

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t), \quad x \in]0, 1[, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, \\ u(x, 0) &= g(x), \quad x \in]0, 1[, \\ u(0, t) &= u(1, t) = 0, \quad t \in \mathbb{R}_+^*\end{aligned}$$

für eine (unbekannte) Funktion

$$u : [0, 1] \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R},$$

die in $[0, 1] \times \mathbb{R}_+$ stetig und in $]0, 1[\times \mathbb{R}_+^*$ zweimal stetig differenzierbar sei. Die Funktion

$$g :]0, 1[\rightarrow \mathbb{R}$$

sei eine vorgegebene Startverteilung für den Zeitpunkt $t = 0$. Das standardmäßige Vorgehen bei einem Finite-Differenzen-Verfahren (FDV) sieht zunächst eine Diskretisierung des räumlichen Bereiches $[0, 1]$ vor:

$$\begin{aligned}\Delta x &:= \frac{1}{d+1} \in \mathbb{R}_+^*, \quad d \in \mathbb{N}^*, \\ x_i &:= i \Delta x, \quad i = 0, \dots, d+1.\end{aligned}$$

Die zweite räumliche Ableitung von u wird durch einen Differenzenquotienten wie folgt approximiert:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t) = \frac{u(x_{i-1}, t) - 2u(x_i, t) + u(x_{i+1}, t))}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2, t), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, \quad i \in \{1, \dots, d\}.$$

Unter Verwendung der Differentialgleichung und der Randbedingungen ergibt sich

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_1, t) = \frac{-2u(x_1, t) + u(x_2, t))}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2, t), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, \quad (2.3.14)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t) = \frac{u(x_{i-1}, t) - 2u(x_i, t) + u(x_{i+1}, t))}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2, t), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, \quad i \in \{2, \dots, d-1\}, \quad (2.3.15)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_d, t) = \frac{u(x_{d-1}, t) - 2u(x_d, t)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2, t), \quad t \in \mathbb{R}_+^*. \quad (2.3.16)$$

Für jedes $i \in \{1, \dots, d\}$ wird mit

$$\begin{aligned} u_i &: \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R} \\ t &\mapsto u_i(t) \end{aligned}$$

eine C^1 -Approximation für $\mathbb{R}_+ \ni t \mapsto u(x_i, t)$ bezeichnet, d. h. $u_i(t) \approx u(x_i, t)$, $t \in \mathbb{R}_+$. Mit

$$u_i(0) := u(x_i, 0) = g(x_i), \quad i \in \{1, \dots, d\},$$

$$y(t) := \begin{pmatrix} u_1(t) \\ \vdots \\ u_d(t) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^d, \quad t \in \mathbb{R}_+,$$

$$A := \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \in M(d \times d, \mathbb{R})$$

wird man von (2.3.14), (2.3.15) und (2.3.16) auf das AWP

$$\begin{aligned} y'(t) &= Ay(t) \quad \forall t \in \mathbb{R}_+, \\ y(0) &= (g(x_1), \dots, g(x_d))^T \end{aligned} \quad (2.3.17)$$

geführt. Die Eigenwerte der Matrix A sind gegeben durch

$$\lambda_i = -\frac{4}{\Delta x^2} \sin^2 \left(i \Delta x \frac{\pi}{2} \right) = -4 (d+1)^2 \sin^2 \left(i \frac{1}{d+1} \frac{\pi}{2} \right), \quad i \in \{1, \dots, d\},$$

wobei gilt

$$\lambda_d < \dots < \lambda_1 < 0.$$

Aus

$$\lim_{d \rightarrow \infty} \lambda_1 = -\pi^2 \quad \text{und} \quad \lim_{d \rightarrow \infty} \lambda_d = -\infty$$

ersieht man, daß die Eigenwerte sich betragsmäßig stark unterscheiden, sodaß mit (2.3.17) ein steifes ODE-System vorliegt, welches umso steifer ist, je feiner die Ortsauflösung, d. h. je größer d ist.

2.4 Semi-implizite Mehrschrittverfahren

Die bio-heat-transfer-equation (1.2.17) enthält auf ihrer rechten Seite einen Divergenz-Term sowie drei Quellterme. Ersterer alleine würde bei der räumlichen Diskretisierung (vgl. Kapitel 3) bereits auf ein steifes ODE-System $y' = f$ führen. In Abschnitt 2.3 wurde die klassische Theorie der absoluten Stabilität von Mehrschrittverfahren dargestellt mit der essentiellen Aussage, daß implizite BDF-Verfahren für solche Systeme verwendet werden sollten. Eine direkte Anwendung eines impliziten BDF-Verfahrens oder allgemeiner eines impliziten Mehrschrittverfahrens auf das System $y' = f$ würde jedoch aufgrund der speziellen Struktur der Quellterme zu erheblichen Speicherplatzproblemen führen, wie in Kapitel 3 noch deutlich werden wird. Ein Ausweg ist die Verwendung von gemischt implizit-expliziten Mehrschrittverfahren (IMEX-Verfahren), die in diesem Abschnitt exemplarisch vorgestellt werden. Dazu wird allgemein das ODE-System

$$y'(t) = f^1(t, y(t)) + f^2(t, y(t)) \quad \forall t \in [t_0, \infty[\quad (2.4.1)$$

mit einer Anfangsbedingung

$$y(t_0) = y^{(0)} \in \mathbb{C}^d$$

betrachtet. Dabei seien $f^1, f^2 : [t_0, \infty[\times \mathbb{C}^d \rightarrow \mathbb{C}^d$ Abbildungen, die den steifen bzw. nicht-steifen Anteil der rechten Seite repräsentieren. Die räumlich diskretisierte Version der bio-heat-transfer-equation (1.2.17) wird sich hier in dieses allgemeine Konzept wie folgt einordnen: Die Steifheit produzierenden Diffusionsprozesse sind in f^1 enthalten, während die Quellterme durch f^2 beschrieben werden (vgl. Abschnitt 3.4). Bei der Anwendung eines Mehrschrittverfahrens auf (2.4.1) ist zu beachten, daß f^1 auf jeden Fall implizit behandelt wird, um starke Zeitschrittweiten-Restriktionen zu vermeiden. Dagegen soll f^2 explizit behandelt werden, um z.B. Speicherprobleme wegen einer vollbesetzten Jacobi-Matrix zu umgehen oder auch nur um die Implementierung des Verfahrens zu vereinfachen. Eine einsichtige Methode, um IMEX-Verfahren herzuleiten, kann wie folgt beschrieben werden: Ausgehend von einem impliziten Mehrschrittverfahren mit guten Stabilitätseigenschaften wird der nicht-steife Term f^2 an zukünftigen Zeitpunkten durch Extrapolation auf die bereits berechneten Näherungswerte zurückgeführt. Die folgenden Beispiele werden diese Idee illustrieren und die in Kapitel 3 zur Zeitintegration verwendeten Verfahren bereitstellen.

Beispiel 2.31

Das einfachste IMEX-Verfahren ist das sogenannte IMEX(Θ)-Verfahren, wobei $\Theta \in [\frac{1}{2}, 1]$ ein Steuerungsparameter ist. Ausgehend vom Θ -Verfahren (vgl. Abschnitt 2.3) angewandt auf (2.4.1) erhält man durch Extrapolation

$$\begin{aligned} y^{(n+1)} - y^{(n)} &= h \left[(1 - \Theta) \left[f^1(t_n, y^{(n)}) + f^2(t_n, y^{(n)}) \right] \right. \\ &\quad \left. + \Theta \left[f^1(t_{n+1}, y^{(n+1)}) + f^2(t_{n+1}, y^{(n+1)}) \right] \right] \\ &= h \left[(1 - \Theta) f^1(t_n, y^{(n)}) + (1 - \Theta) f^2(t_n, y^{(n)}) \right. \\ &\quad \left. + \Theta f^1(t_{n+1}, y^{(n+1)}) + \Theta f^2(t_{n+1}, y^{(n+1)}) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\approx h \left[(1 - \Theta) f^1(t_n, y^{(n)}) + (1 - \Theta) f^2(t_n, y^{(n)}) + \Theta f^1(t_{n+1}, y^{(n+1)}) + \Theta f^2(t_n, y^{(n)}) \right] \\ &= h \left[(1 - \Theta) f^1(t_n, y^{(n)}) + f^2(t_n, y^{(n)}) + \Theta f^1(t_{n+1}, y^{(n+1)}) \right], \quad n \in \mathbb{N}, \end{aligned}$$

und somit dann das IMEX(Θ)-Verfahren

$$y^{(n+1)} - y^{(n)} = h \left[(1 - \Theta) f^1(t_n, y^{(n)}) + \Theta f^1(t_{n+1}, y^{(n+1)}) + f^2(t_n, y^{(n)}) \right], \quad n \in \mathbb{N}.$$

Hier wird also das A-stabile Θ -Verfahren mit dem expliziten Euler-Verfahren kombiniert. Für $\Theta = \frac{1}{2}$ erhält man eine Kombination aus dem Crank-Nicolson-Verfahren und dem expliziten Euler-Verfahren, welche hier als CNEE-Verfahren betitelt wird. Für $\Theta = 1$ ergibt sich eine Kombination aus dem impliziten und dem expliziten Euler-Verfahren.

Beispiel 2.32

Das implizite BDF(3)-Verfahren (vgl. Abschnitt 2.3) angewandt auf (2.4.1) lautet

$$\frac{11}{6}y^{(n+3)} - 3y^{(n+2)} + \frac{3}{2}y^{(n+1)} - \frac{1}{3}y^{(n)} = h \left[f^1(t_{n+3}, y^{(n+3)}) + f^2(t_{n+3}, y^{(n+3)}) \right], \quad n \in \mathbb{N}.$$

Der Index $q \in \{1, \dots, d\}$ sei beliebig, aber fest gewählt und es werde die q -te Komponentenfunktion $f_q^2 : [t_0, \infty[\times \mathbb{C}^d \rightarrow \mathbb{C}$ betrachtet. Um durch eine Extrapolation von den Zeitpunkten t_n, t_{n+1} und t_{n+2} nach t_{n+3} einen Näherungswert für $f_q^2(t_{n+3}, y^{(n+3)}) \in \mathbb{C}$ zu berechnen, wird das eindeutig bestimmte Interpolationspolynom $P : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ vom Höchstgrad 2 zu den Punkten

$$\left(t_n, f_q^2(t_n, y^{(n)}) \right), \left(t_{n+1}, f_q^2(t_{n+1}, y^{(n+1)}) \right), \left(t_{n+2}, f_q^2(t_{n+2}, y^{(n+2)}) \right) \in \mathbb{C}^2$$

ermittelt. Dies kann mit Hilfe der Lagrange-Polynome $L_j : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}, j = 0, 1, 2$, wie folgt geschehen:

$$L_0(z) = \frac{z - t_{n+1}}{t_n - t_{n+1}} \frac{z - t_{n+2}}{t_n - t_{n+2}} = \frac{1}{2} \frac{(z - t_{n+1})(z - t_{n+2})}{h^2}, \quad z \in \mathbb{C},$$

$$L_1(z) = \frac{z - t_n}{t_{n+1} - t_n} \frac{z - t_{n+2}}{t_{n+1} - t_{n+2}} = -\frac{(z - t_n)(z - t_{n+2})}{h^2}, \quad z \in \mathbb{C},$$

$$L_2(z) = \frac{z - t_n}{t_{n+2} - t_n} \frac{z - t_{n+1}}{t_{n+2} - t_{n+1}} = \frac{1}{2} \frac{(z - t_n)(z - t_{n+1})}{h^2}, \quad z \in \mathbb{C},$$

$$P(z) = f_q^2(t_n, y^{(n)}) L_0(z) + f_q^2(t_{n+1}, y^{(n+1)}) L_1(z) + f_q^2(t_{n+2}, y^{(n+2)}) L_2(z), \quad z \in \mathbb{C}.$$

Mit Hilfe des Funktionswertes

$$P(t_{n+3}) = f_q^2(t_n, y^{(n)}) - 3f_q^2(t_{n+1}, y^{(n+1)}) + 3f_q^2(t_{n+2}, y^{(n+2)})$$

von P am zukünftigen Zeitpunkt t_{n+3} erhält man nach Übergang wieder zum vektorwertigen Fall das SBDF(3)-Verfahren

$$\begin{aligned} \frac{11}{6}y^{(n+3)} - 3y^{(n+2)} + \frac{3}{2}y^{(n+1)} - \frac{1}{3}y^{(n)} &= h \left[f^1(t_{n+3}, y^{(n+3)}) + 3f^2(t_{n+2}, y^{(n+2)}) \right. \\ &\quad \left. - 3f^2(t_{n+1}, y^{(n+1)}) + f^2(t_n, y^{(n)}) \right], \quad n \in \mathbb{N}. \end{aligned}$$

Natürlich sind auch andere Kombinationen denkbar, wie z. B. Crank-Nicolson mit Adams-Bashforth. Eine erste Einführung in IMEX-Verfahren findet man in [36], erste Ansätze zur Entwicklung einer Stabilitätstheorie in den Arbeiten [3] und [23].

3 Das Finite-Volumen-Verfahren

Finite-Volumen-Verfahren (FVV) bilden neben den Finite-Differenzen-Verfahren (FDV) und den Finite-Element-Methoden (FEM) eine weitere Klasse numerischer Verfahren zur Lösung partieller Differentialgleichungen (PDE). Da sie speziell für Gleichungen konstruiert sind, die in Divergenz-Form vorliegen oder Divergenz-Terme enthalten, bieten sie sich für die numerische Lösung der bio-heat-transfer-equation (1.2.17) an. Ihre Grundidee liegt darin, den Gauss'schen Integralsatz zur Beseitigung der Divergenz anzuwenden und so die Ordnung der Ableitungen um eins zu reduzieren. Da sie die Diskretisierung komplizierter Geometrien erlauben und unstrukturierte Gitter zulassen, eignen sie sich besonders für die Frühchen-Geometrie, welche der bio-heat-transfer-equation (1.2.17) ja als Rechengebiet D zugrunde liegt.

In diesem Kapitel wird ein Finite-Volumen-Verfahren zur numerischen Lösung des Anfangsrandwertproblems (ARWP) (1.2.17), (1.2.18), (1.2.19) entwickelt. Nachdem an einem einfachen Beispiel die wesentlichen Ideen eines Finite-Volumen-Verfahrens demonstriert wurden, wird in einem vorbereitenden Abschnitt zunächst das Ausgangsproblem der Thermoregulation geeignet transformiert und sodann eine Evolutionsgleichung für Temperaturmittelwerte auf Teilgebieten des Rechengebietes D aufgestellt. Als (räumliche) Semi-Diskretisierung wird die vertikale Linienmethode (MOL, method of lines) mit einem Primärnetzansatz verwendet, welche als Zwischenergebnis ein hochdimensionales System von gewöhnlichen Differentialgleichungen liefert. Nachdem dessen rechte Seite approximiert wurde, wird eine Zeitintegration mit einem semi-impliziten Mehrschrittverfahren (IMEX-Verfahren SBDF) vorgenommen, um zu einer Volldiskretisierung zu gelangen; hierbei entstehen in jedem Zeitschritt große, schwachbesetzte, lineare Gleichungssysteme (LGS), welche mit einer präkonditionierten Krylov-Unterraummethode (BICGSTAB / ILU) gelöst werden.

Einführende Darstellungen von Finite-Volumen-Verfahren findet man in [39], [19], [36] und [44], weiterführende Darstellungen oder spezielle Aspekte in [62], [5] und [21].

3.1 Ein einfaches Beispiel für ein vollständiges Finite-Volumen-Verfahren

Um die prinzipiellen Schritte der Entwicklung eines Finite-Volumen-Verfahrens zu verdeutlichen, wird ein solches in diesem Abschnitt beispielhaft anhand der instationären Wärmeleitungsgleichung als einfachstem Spezialfall der bio-heat-transfer-equation (1.2.17) hergeleitet. Dazu sei $\Omega :=]0, 1[^2 \subset \mathbb{R}^2$ das offene Einheitsquadrat in der x_1, x_2 -Ebene (vgl. Abbildung 16). Betrachtet wird das räumlich zweidimensionale, instationäre Wärmeleitungsproblem

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = \Delta u(x, t) = \operatorname{div} \nabla u(x, t), \quad (x, t) \in \Omega \times \mathbb{R}_+^*, \quad (3.1.1)$$

$$u(x, 0) = g(x), \quad x \in \Omega, \quad (3.1.2)$$

$$\langle \nabla u(x, t), n(x) \rangle = 0, \quad (x, t) \in \partial_r \Omega \times \mathbb{R}_+^* \quad (3.1.3)$$

für eine (unbekannte) stetige Funktion

$$u : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R},$$

welche in $\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}_+^*$ zweimal stetig differenzierbar sei. Die Abbildungen

$$g : \Omega \rightarrow \mathbb{R}, \quad n : \partial_r \Omega \rightarrow \mathbb{R}^2$$

seien eine vorgegebene Startverteilung für den Zeitpunkt $t = 0$ bzw. das äußere Einheitsnormalenfeld auf dem regulären Rand von Ω . Die beiden wesentlichen Schritte bei der Entwicklung eines

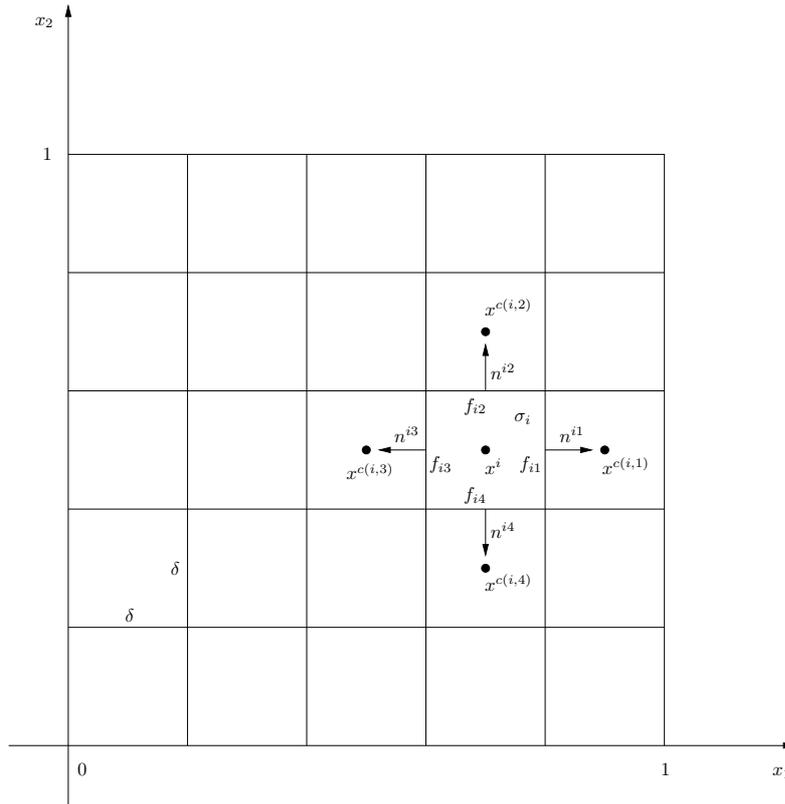


Abbildung 16: Diskretisierung des Einheitsquadrates

Finite-Volumen-Verfahrens für ein zeitabhängiges Problem wie (3.1.1) - (3.1.3) sind eine räumliche und eine zeitliche Diskretisierung. Für erstere wird das Rechengebiet Ω in offene Teilquadrate σ_i , $i = 1, \dots, N$, $N \in \mathbb{N}^*$, der Seitenlänge $\delta \in \mathbb{R}_+^*$ zerlegt. Das äußere Einheitsnormalenfeld auf dem regulären Rand $\partial_r \sigma_i \subset \partial \sigma_i$ einer Zelle σ_i erhält den Namen

$$n^{\sigma_i} : \partial_r \sigma_i \rightarrow \mathbb{R}^2$$

und dieser wird abgekürzt mit n^i . Der Flächeninhalt von σ_i wird mit $|\sigma_i| = \delta^2$ bezeichnet. Unter dem Zellmittelwert der Temperatur u auf σ_i zum Zeitpunkt $t \in \mathbb{R}_+^*$ versteht man

$$u_i(t) := u_{\sigma_i}(t) := \frac{1}{|\sigma_i|} \int_{\sigma_i} u(x, t) dx.$$

$N(i) \in \{2, 3, 4\}$ sei die Anzahl der inneren Randkanten, während unter $\overline{N}(i) \in \{0, 1, 2\}$ die Anzahl der äußeren Randkanten auf dem regulären Rand von Ω verstanden wird. Die inneren Randkanten werden mit

$$f_{ij} \subset \partial_r \sigma_i \cap \Omega, \quad j = 1, \dots, N(i),$$

die äußeren Randkanten mit

$$\overline{f}_{ij} \subset \partial_r \sigma_i \cap \partial_r \Omega, \quad j = 1, \dots, \overline{N}(i)$$

bezeichnet. Der Schwerpunkt von σ_i erhält den Namen x^i . Da das äußere Einheitsnormalenfeld n^i stückweise konstant ist, wird mit n^{ij} , $j \in \{1, \dots, N(i)\}$, der nach außen zeigende Einheits-

normalenvektor auf einer inneren Randkante f_{ij} bezeichnet. Die direkten Nachbarn des Schwerpunktes x^i werden mit $x^{c(i,j)}$, $j = 1, \dots, N(i)$, bezeichnet, wobei $c(i, j) \in \{1, \dots, N\} \setminus \{i\}$ der jeweils entsprechende Schwerpunkt- bzw. Zellenindex in der Nummernliste $\{1, \dots, N\}$ sei.

Die Integration der Wärmeleitungsgleichung (3.1.1) über eine Zelle σ_i , $i \in \{1, \dots, N\}$, ergibt

$$\frac{du_i}{dt}(t) = \frac{1}{|\sigma_i|} \int_{\sigma_i} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) dx = \frac{1}{|\sigma_i|} \int_{\sigma_i} \operatorname{div} \nabla u(x, t) dx, \quad t \in \mathbb{R}_+^*.$$

Hieraus folgt unter Anwendung des Gauss'schen Integralsatzes die sogenannte Evolutionsgleichung der Zellmittelwerte

$$\frac{du_i}{dt}(t) = \frac{1}{|\sigma_i|} \int_{\partial\sigma_i} \langle \nabla u(x, t), n^i(x) \rangle dS(x), \quad t \in \mathbb{R}_+^*. \quad (3.1.4)$$

Dies ist eine gewöhnliche Differentialgleichung, welche die zeitliche Entwicklung des Zellmittelwertes u_i beschreibt. Da für jede Zelle σ_i eine solche Differentialgleichung aufgestellt wird, ist das gegebene ARWP (3.1.1) - (3.1.3) durch die vorgenommene räumliche Zerlegung also in ein ODE-System in der Zeit überführt worden. Die Evolutionsgleichung (3.1.4) läßt sich unter Ausnutzung der Randbedingung (3.1.3) wie folgt umformen:

$$\begin{aligned} \frac{du_i}{dt}(t) &= \frac{1}{|\sigma_i|} \left(\sum_{j=1}^{N(i)} \int_{f_{ij}} \langle \nabla u(x, t), n^i(x) \rangle dS(x) + \sum_{j=1}^{\bar{N}(i)} \int_{\bar{f}_{ij}} \underbrace{\langle \nabla u(x, t), n^i(x) \rangle}_{=0} dS(x) \right) \\ &= \frac{1}{|\sigma_i|} \sum_{j=1}^{N(i)} \int_{f_{ij}} \langle \nabla u(x, t), n^i(x) \rangle dS(x), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, \quad i \in \{1, \dots, N\}. \end{aligned}$$

Die Approximation der Integrale durch die Mittelpunktsregel, die Anwendung von zentralen Differenzenquotienten und das Ersetzen der exakten Funktionswerte durch die Zellmittelwerte ergibt für $t \in \mathbb{R}_+^*$, $i \in \{1, \dots, N\}$

$$\begin{aligned} \frac{du_i}{dt}(t) &\approx \frac{1}{|\sigma_i|} \sum_{j=1}^{N(i)} \langle \nabla u \left(\frac{x^i + x^{c(i,j)}}{2}, t \right), n^i \left(\frac{x^i + x^{c(i,j)}}{2} \right) \rangle \delta \\ &= \frac{\delta}{|\sigma_i|} \sum_{j=1}^{N(i)} \frac{\partial u}{\partial n^{ij}} \left(\frac{x^i + x^{c(i,j)}}{2}, t \right) \approx \frac{\delta}{|\sigma_i|} \sum_{j=1}^{N(i)} \frac{u(x^{c(i,j)}, t) - u(x^i, t)}{\delta} \\ &= \frac{1}{|\sigma_i|} \sum_{j=1}^{N(i)} [u(x^{c(i,j)}, t) - u(x^i, t)] \approx \frac{1}{|\sigma_i|} \sum_{j=1}^{N(i)} [u_{c(i,j)}(t) - u_i(t)], \end{aligned}$$

also

$$\frac{du_i}{dt}(t) \approx \frac{1}{|\sigma_i|} \left(-N(i) u_i(t) + \sum_{j=1}^{N(i)} u_{c(i,j)}(t) \right), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, \quad i \in \{1, \dots, N\}. \quad (3.1.5)$$

Als nächster wesentlicher Schritt der Verfahrensentwicklung steht die zeitliche Diskretisierung von (3.1.5) an. Dazu sei die Zeitachse \mathbb{R}_+ durch $t_n := n\Delta t$, $n \in \mathbb{N}$, diskretisiert mit gegebener Zeitschrittweite $h = \Delta t \in \mathbb{R}_+^*$. Für jede Zelle σ_i , $i \in \{1, \dots, N\}$, sei $u_i^n \in \mathbb{R}$ stets eine Approximation an den Zellmittelwert $u_i(t_n) \in \mathbb{R}$, $n \in \mathbb{N}$. Als Startwerte werden entsprechend (3.1.2)

$$u_i^0 := g(x^i), \quad i \in \{1, \dots, N\},$$

gewählt. Als einfach anzuwendendes und A-stabiles Zeitintegrationsverfahren lautet das implizite Euler-Verfahren (Θ -Verfahren mit $\Theta = 1$, vgl. Abschnitt 2.3) angewandt auf (3.1.5)

$$u_i^{n+1} - u_i^n = \frac{\Delta t}{|\sigma_i|} \left(-N(i) u_i^{n+1} + \sum_{j=1}^{N(i)} u_{c(i,j)}^{n+1} \right), \quad n \in \mathbb{N}, i \in \{1, \dots, N\}.$$

Hieraus erhält man durch leichte Umformung

$$\left(1 + N(i) \frac{\Delta t}{|\sigma_i|} \right) u_i^{n+1} - \frac{\Delta t}{|\sigma_i|} \sum_{j=1}^{N(i)} u_{c(i,j)}^{n+1} = u_i^n, \quad n \in \mathbb{N}, i \in \{1, \dots, N\}. \quad (3.1.6)$$

Für alle Zellen zusammen betrachtet, stellt (3.1.6) ein lineares Gleichungssystem für die N Unbekannten u_i^{n+1} , $i \in \{1, \dots, N\}$ dar, welches in jedem Zeitschritt des Gesamtverfahrens gelöst werden muß. Damit sind alle wesentlichen Entwicklungsschritte eines Finite-Volumen-Verfahrens beschrieben worden. Die Entwicklung eines solchen Verfahrens für die bio-heat-transfer-equation (1.2.17) in den nachfolgenden Abschnitten wird sich prinzipiell genauso abspielen, natürlich mit den Unterschieden, daß die zu lösende Differentialgleichung viel komplexer strukturiert ist als diejenige dieses Beispiels, daß ein dreidimensionales, komplexes Rechengebiet vorliegt und daß kompliziertere Randbedingungen zu verarbeiten sind.

3.2 Die Evolutionsgleichung der Zellmittelwerte

Mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}(x, t) &:= \mathcal{Q}^{Met}(x, t) + \mathcal{Q}^{Blut}(x, t) + \mathcal{Q}^{RW}(x), \quad (x, t) \in D \times \mathbb{R}_+^*, \\ \varphi(x, t) &:= M^{TW}(x, t) + M^r(x, t) + M^{cv}(x, t) + M^{cd}(x, t), \quad (x, t) \in \partial_r D \times \mathbb{R}_+^*, \end{aligned} \quad (3.2.1)$$

lautet die bio-heat-transfer-equation (1.2.17) mit ihrer Anfangs- und ihrer Neumann-Randbedingung

$$\begin{aligned} \kappa(x) \frac{\partial T}{\partial t}(x, t) &= \operatorname{div}(-J)(x, t) + \mathcal{Q}(x, t), \quad (x, t) \in D \times \mathbb{R}_+^*, \\ T(x, 0) &= T_0(x), \quad x \in D, \\ \langle J(x, t), n(x) \rangle &= \varphi(x, t), \quad (x, t) \in \partial_r D \times \mathbb{R}_+^*. \end{aligned}$$

Um sie einem Finite-Volumen-Verfahren direkt zugänglich zu machen, ist es notwendig, sie in „reine“ Divergenzform zu transformieren. Damit ist hier gemeint, daß auf ihrer linken Seite nur eine partielle Zeitableitung und auf ihrer rechten ein Divergenzterm ohne ortsabhängigen Vorfaktor erscheinen (eine Division durch $\kappa(x)$ ist also nicht ausreichend). Mit der transformierten Temperatur

$$\begin{aligned} u &: \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R} \\ u(x, t) &:= \kappa(x) T(x, t) \end{aligned}$$

und dem transformierten Wärmestromfeld

$$\begin{aligned} v &: \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+^* \rightarrow \mathbb{R}^3 \\ v(x, t) &:= \frac{\lambda(x)}{\kappa(x)} \nabla u(x, t) - \frac{\lambda(x) u(x, t)}{\kappa^2(x)} \nabla \kappa(x) \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

ist sie äquivalent zu

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = \operatorname{div} v(x, t) + \mathcal{Q}(x, t), \quad (x, t) \in D \times \mathbb{R}_+^*. \quad (3.2.3)$$

Dies ist durch langwierige, aber einfache Rechnungen ersichtlich, welche für den zweidimensionalen Fall in [6] und [7] und für den dreidimensionalen in [72] durchexerziert wurden. Durch die Transformation ist also ein neuer Flußterm hinzugekommen, dessen Divergenz berücksichtigt werden muß.

Mit $u_0(x) := \kappa(x)T_0(x), x \in D$, ergibt die Transformation der Anfangsbedingung

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad x \in D. \quad (3.2.4)$$

Mit (1.2.1) lautet die Neumann-Randbedingung zunächst

$$\langle -\lambda(x)\nabla T(x, t), n(x) \rangle = \varphi(x, t), \quad (x, t) \in \partial_r D \times \mathbb{R}_+^*.$$

Aus $T(x, t) = \frac{u(x, t)}{\kappa(x)}, (x, t) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+$, erhält man für den Gradienten der Temperatur die Darstellung

$$\nabla T(x, t) = \frac{1}{\kappa(x)} \nabla u(x, t) - \frac{u(x, t)}{\kappa^2(x)} \nabla \kappa(x), \quad (x, t) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+,$$

also

$$\lambda(x)\nabla T(x, t) = v(x, t), \quad (x, t) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+^*,$$

und somit die transformierte Neumann-Randbedingung

$$\langle v(x, t), n(x) \rangle = -\varphi(x, t), \quad (x, t) \in \partial_r D \times \mathbb{R}_+^*. \quad (3.2.5)$$

Mit (3.2.3), (3.2.4) und (3.2.5) liegt jetzt also ein Anfangsrandwertproblem für die transformierte Temperatur u vor. Für das Folgende wird der Begriff des Kontrollvolumens benötigt, um die Anwendbarkeit des Gauss'schen Satzes zu sichern.

Definition 3.1

Unter einem Kontrollvolumen versteht man einen beschränkten C^1 -Polyeder $\sigma \subset \mathbb{R}^3$. Das zugehörige, äußere Einheitsnormalenfeld auf dem regulären Rand $\partial_r \sigma \subset \partial \sigma$ wird mit $n^\sigma : \partial_r \sigma \rightarrow \mathbb{R}^3$ bezeichnet (vgl. Seite 64, Abb. 17 und 18). Außerdem sei $|\sigma|$ das Volumen des Kontrollvolumens.

In diesem Sinne ist also das ganze Rechengebiet D ebenfalls ein Kontrollvolumen (dessen äußeres Einheitsnormalenfeld auf seinem regulären Rand allerdings mit n statt mit n^D bezeichnet wird).

Definition 3.2

Für ein nichtleeres Kontrollvolumen $\sigma \subset D$ ist der Zellmittelwert der Temperatur u auf σ zum Zeitpunkt $t > 0$ definiert durch

$$u_\sigma(t) := \frac{1}{|\sigma|} \int_\sigma u(x, t) dx, \quad t \in \mathbb{R}_+^*.$$

Mit anderen Worten: $u_\sigma(t)$ wird mit dem Kontrollvolumen σ assoziiert und repräsentiert dort zum Zeitpunkt t einen räumlichen Durchschnittswert der Funktion u . Dessen Lokalisierung innerhalb von σ ist hier im Moment noch nicht relevant.

Es sei $\sigma \subset D$ ein nichtleeres Kontrollvolumen. Die zeitliche Änderung des zugehörigen Zellmittelwertes wird beschrieben durch

$$\begin{aligned} \frac{du_\sigma}{dt}(t) &= \frac{1}{|\sigma|} \int_\sigma \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) dx \\ &= \frac{1}{|\sigma|} \left(\int_\sigma \operatorname{div} v(x, t) dx + \int_\sigma \mathcal{Q}(x, t) dx \right), \quad t \in \mathbb{R}_+^*. \end{aligned}$$

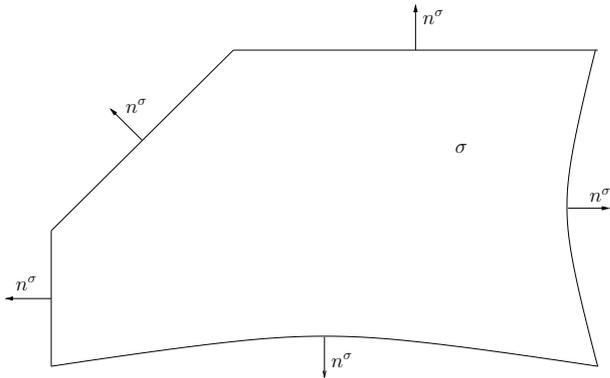


Abbildung 17: Kontrollvolumen mit äußerem Einheitsnormalenfeld (2D)

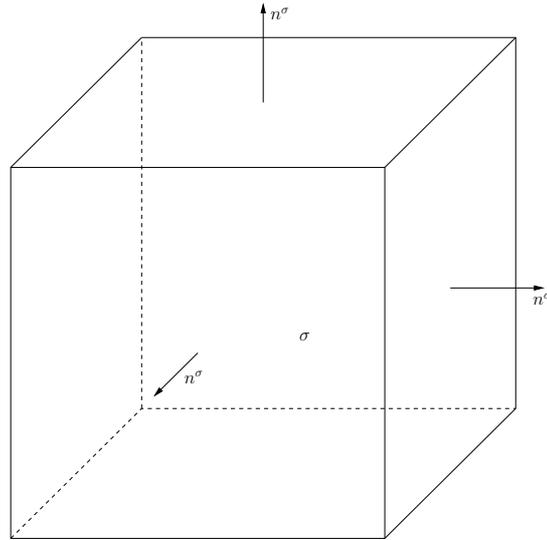


Abbildung 18: Würfel als einfachstes Kontrollvolumen im \mathbb{R}^3

Mit Hilfe des Gauss'schen Satzes erhält man hieraus die Evolutionsgleichung der Zellmittelwerte

$$\frac{du_\sigma}{dt}(t) = \frac{1}{|\sigma|} \left(\int_{\partial\sigma} \langle v(x,t), n^\sigma(x) \rangle dS(x) + \int_\sigma \mathcal{Q}(x,t) dx \right), t \in \mathbb{R}_+^*. \quad (3.2.6)$$

Definition 3.3

Ein Finite-Volumen-Verfahren ist eine Vorschrift zur Diskretisierung der Evolutionsgleichung der Zellmittelwerte (3.2.6) über einer Zerlegung des Gebietes D in Kontrollvolumina. Handelt es sich bei der Zerlegung um ein primäres Netz, so wird das entstehende Verfahren als Primärnetzverfahren bezeichnet. Verwendet man dagegen eine weitere Zerlegung, die aus dem Primärnetz erzeugt wurde, so spricht man von einem Sekundärnetzverfahren oder einer Boxmethode (vgl. [62], [49]).

3.3 Die räumliche Diskretisierung

In diesem Abschnitt wird zunächst die konkrete Zerlegung des Rechengebietes D mit einem Volumennetz beschrieben. Hierfür sei im folgenden zusätzlich vorausgesetzt, daß D nur durch ebene Flächenstücke berandet wird (der hierbei entstehende Gebietapproximationsfehler im Vergleich zur realen Berandung wird in Kauf genommen). Im weiteren Verlauf dieses Abschnittes werden dann die räumlichen Diskretisierungen der einzelnen Komponenten der Evolutionsgleichung der Zellmittelwerte beschrieben.

3.3.1 Struktur des Volumennetzes

Das Volumennetz zur Zerlegung des Gebietes D in Kontrollvolumina ist eine endliche Menge $\{\sigma_1, \dots, \sigma_N\}$ von Polyedern mit folgenden Eigenschaften (vgl. [62], [49]):

- Jedes σ_i , $i \in \{1, \dots, N\}$, ist nichtleer und offen.
- Die σ_i , $i = 1, \dots, N$, bilden eine Zerlegung des Gebietes D , d.h. $D = \bigcup_{i=1}^N \sigma_i$.
- Je zwei Polyeder überlappen sich nicht, d. h. $\sigma_i \cap \sigma_j = \emptyset \forall i, j \in \{1, \dots, N\} : i \neq j$.

- Jede begrenzende Fläche f eines Polyeders σ_i ist entweder Teil des Randes ∂D oder begrenzende Fläche genau eines weiteren Polyeders σ_j mit $j \neq i$.

Außerdem werden folgende Bezeichnungen für das Netz verwendet (s. S. 66, Abb. 19):

- $N(i)$, $i \in \{1, \dots, N\}$, sei die Anzahl der begrenzenden Flächen von σ_i , die ebenfalls begrenzende Fläche eines weiteren Polyeders σ_j mit $j \neq i$ sind (innere begrenzende Flächen).
- $\bar{N}(i)$, $i \in \{1, \dots, N\}$, sei die Anzahl der begrenzenden Flächen von σ_i , die Teil des Randes ∂D sind (äußere begrenzende Flächen).
- $f_{i1}, \dots, f_{iN(i)} \subset \partial_r \sigma_i \cap D$, $i \in \{1, \dots, N\}$, seien die inneren begrenzenden Flächen von σ_i .
- $\bar{f}_{i1}, \dots, \bar{f}_{i\bar{N}(i)} \subset \partial_r \sigma_i \cap \partial_r D$, $i \in \{1, \dots, N\}$, seien die äußeren begrenzenden Flächen von σ_i .
- $|\sigma_i|, |f_{ij}|, |\bar{f}_{ij}|$ bezeichne das Volumen bzw. die Flächeninhalte der jeweiligen Zelle bzw. Flächen.
- $z^{ij} \in f_{ij}$, $i \in \{1, \dots, N\}$, $j \in \{1, \dots, N(i)\}$, bezeichne den Schwerpunkt der inneren begrenzenden Fläche f_{ij} .
- $\bar{z}^{ij} \in \bar{f}_{ij}$, $i \in \{1, \dots, N\}$, $j \in \{1, \dots, \bar{N}(i)\}$, bezeichne den Schwerpunkt der äußeren begrenzenden Fläche \bar{f}_{ij} .
- $x^i \in \sigma_i$, $i \in \{1, \dots, N\}$, bezeichne den Schwerpunkt der Zelle σ_i .
- n^{ij} sei der Einheitsnormalenvektor der inneren begrenzenden Fläche f_{ij} . Die Orientierung sei so gewählt, daß er äußerer Normalenvektor auf dem Rand der Zelle σ_i ist.
- \bar{n}^{ij} sei der Einheitsnormalenvektor der äußeren begrenzenden Fläche \bar{f}_{ij} . Die Orientierung sei so gewählt, daß er äußerer Normalenvektor auf dem Rand der Zelle σ_i ist.
- Für $i \in \{1, \dots, N\}$, $j \in \{1, \dots, N(i)\}$ wird mit $c(i, j) := l \in \{1, \dots, N\}$ derjenige Index $l \neq i$ bezeichnet, für welchen gilt: f_{ij} ist begrenzende Fläche von σ_l und σ_i , also Trennfläche der beiden Zellen.
- $I_R := \{i \in \{1, \dots, N\} : \bar{N}(i) \geq 1\}$ sei die Menge der Indices aller Randzellen.

Ferner sei vorausgesetzt, daß für jede Randfläche \bar{f}_{ij} gilt: $\bar{f}_{ij} \subset \partial_r D_m \vee \bar{f}_{ij} \subset \partial_r D_l$. Aufgrund der vorausgesetzten Disjunktheit von $\partial_r D_m$ und $\partial_r D_l$ folgt hieraus, daß \bar{f}_{ij} auch nur Teilmenge genau eines der beiden Randanteile ist.

Die Zellmittelwerte als die Unbekannten des diskreten Problems werden stets abgekürzt durch

$$u_i(t) := u_{\sigma_i}(t), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, \quad i \in \{1, \dots, N\}.$$

Es wird angenommen, daß sie in den Schwerpunkten x^i der Zellen lokalisiert sind, sodaß sich ein „cell-centered“ Finite-Volumen-Verfahren ergeben wird (vgl. [5], [39]).

Das äußere Einheitsnormalenfeld auf dem regulären Rand einer Zelle wird für $i \in \{1, \dots, N\}$ abgekürzt durch

$$\begin{aligned} n^i &: \partial_r \sigma_i \rightarrow \mathbb{R}^3 \\ n^i(x) &:= n^{\sigma_i}(x). \end{aligned}$$

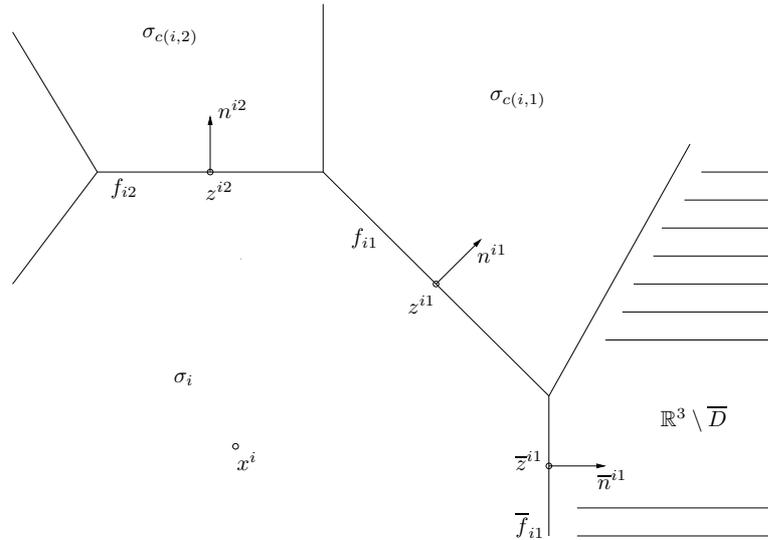


Abbildung 19: Randzelle mit Bezeichnungen (2D)

Die Bezeichnungen Zelle und Kontrollvolumen werden im folgenden synonym verwendet. Außerdem werden für $t \in \mathbb{R}_+^*$, $i \in \{1, \dots, N\}$ folgende Funktionen definiert:

$$\mathcal{L}_i^{IFL}(t) := \sum_{j=1}^{N(i)} \int_{f_{ij}} \langle v(x, t), n^i(x) \rangle dS(x) = \sum_{j=1}^{N(i)} \int_{f_{ij}} \langle v(x, t), n^{ij} \rangle dS(x), \quad (3.3.1)$$

$$\mathcal{L}_i^{RFL}(t) := \sum_{j=1}^{\bar{N}(i)} \int_{\bar{f}_{ij}} \langle v(x, t), n^i(x) \rangle dS(x),$$

$$\mathcal{L}_i^Q(t) := \int_{\sigma_i} Q(x, t) dx.$$

Dabei beschreiben \mathcal{L}_i^{IFL} und \mathcal{L}_i^{RFL} die Wärmeflüsse über die inneren Begrenzungsflächen bzw. die Randflächen, während sich \mathcal{L}_i^Q auf die Quellterme bezieht. Aus (3.2.6) ergibt sich nun für ein Kontrollvolumen σ_i , $i \in \{1, \dots, N\}$, und für $t \in \mathbb{R}_+^*$

$$\begin{aligned} \frac{du_i}{dt}(t) &= \frac{1}{|\sigma_i|} \left(\int_{\partial\sigma_i} \langle v(x, t), n^i(x) \rangle dS(x) + \int_{\sigma_i} Q(x, t) dx \right) \\ &= \frac{1}{|\sigma_i|} \left(\sum_{j=1}^{N(i)} \int_{f_{ij}} \langle v(x, t), n^i(x) \rangle dS(x) + \sum_{j=1}^{\bar{N}(i)} \int_{\bar{f}_{ij}} \langle v(x, t), n^i(x) \rangle dS(x) \right. \\ &\quad \left. + \int_{\sigma_i} Q(x, t) dx \right). \end{aligned}$$

Die Evolutionsgleichung der Zellmittelwerte erhält somit folgende Gestalt

$$\frac{du_i}{dt}(t) = \frac{1}{|\sigma_i|} \left(\mathcal{L}_i^{IFL}(t) + \mathcal{L}_i^{RFL}(t) + \mathcal{L}_i^Q(t) \right), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}. \quad (3.3.2)$$

Diese Gleichung gibt sehr schön wieder, daß die drei Modellierungsaspekte Wärmeleitung, Randbedingungen und Quellterme für die lokale Energiebilanz eines Kontrollvolumens und damit für

die zeitliche Entwicklung seines Temperaturmittelwertes verantwortlich sind. Mit (3.3.2) liegt nun ein System von gewöhnlichen Differentialgleichungen in der Zeit vor, dessen Dimension durch die Zellenanzahl N gegeben ist.

Für die spätere Formulierung des Finite-Volumen-Verfahrens ist es notwendig, die Funktionen \mathcal{L}_i^{RFL} und \mathcal{L}_i^Q weiter in ihre Bestandteile zu zerlegen. Hierzu werden zunächst folgende Definitionen für $t \in \mathbb{R}_+^*$, $i \in \{1, \dots, N\}$ eingeführt:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_i^{TW}(t) &:= - \sum_{j=1}^{\bar{N}(i)} \int_{\bar{f}_{ij}} M^{TW}(x, t) dS(x) = - \sum_{\substack{j=1 \\ \bar{f}_{ij} \subset \partial_r D_l}}^{\bar{N}(i)} \int_{\bar{f}_{ij}} M^{TW}(x, t) dS(x), \\ \mathcal{L}_i^r(t) &:= - \sum_{j=1}^{\bar{N}(i)} \int_{\bar{f}_{ij}} M^r(x, t) dS(x) = - \sum_{\substack{j=1 \\ \bar{f}_{ij} \subset \partial_r D_l}}^{\bar{N}(i)} \int_{\bar{f}_{ij}} M^r(x, t) dS(x), \\ \mathcal{L}_i^{cv}(t) &:= - \sum_{j=1}^{\bar{N}(i)} \int_{\bar{f}_{ij}} M^{cv}(x, t) dS(x) = - \sum_{\substack{j=1 \\ \bar{f}_{ij} \subset \partial_r D_l}}^{\bar{N}(i)} \int_{\bar{f}_{ij}} M^{cv}(x, t) dS(x), \\ \mathcal{L}_i^{cd}(t) &:= - \sum_{j=1}^{\bar{N}(i)} \int_{\bar{f}_{ij}} M^{cd}(x, t) dS(x) = - \sum_{\substack{j=1 \\ \bar{f}_{ij} \subset \partial_r D_m}}^{\bar{N}(i)} \int_{\bar{f}_{ij}} M^{cd}(x, t) dS(x).\end{aligned}$$

Dabei braucht aufgrund der abschnittswisen Definition der beteiligten Randbedingungen nur über eingeschränkte Indexmengen summiert werden.

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_i^{Met}(t) &:= \int_{\sigma_i} \mathcal{Q}^{Met}(x, t) dx, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}, \\ \mathcal{L}_i^{Blut}(t) &:= \int_{\sigma_i} \mathcal{Q}^{Blut}(x, t) dx, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}, \\ \mathcal{L}_i^{RW} &:= \int_{\sigma_i} \mathcal{Q}^{RW}(x) dx, \quad i \in \{1, \dots, N\}.\end{aligned}$$

Für \mathcal{L}_i^{RFL} erhält man unter Verwendung von (3.2.5)

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_i^{RFL}(t) &= \sum_{j=1}^{\bar{N}(i)} \int_{\bar{f}_{ij}} \langle v(x, t), n^i(x) \rangle dS(x) = \sum_{j=1}^{\bar{N}(i)} \int_{\bar{f}_{ij}} \langle v(x, t), n(x) \rangle dS(x) \\ &= - \sum_{j=1}^{\bar{N}(i)} \int_{\bar{f}_{ij}} \varphi(x, t) dS(x), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\},\end{aligned}$$

und mit der Definition (3.2.1) von φ dann

$$\mathcal{L}_i^{RFL}(t) = \mathcal{L}_i^{TW}(t) + \mathcal{L}_i^r(t) + \mathcal{L}_i^{cv}(t) + \mathcal{L}_i^{cd}(t), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}. \quad (3.3.3)$$

Außerdem gilt

$$\mathcal{L}_i^Q(t) = \mathcal{L}_i^{Met}(t) + \mathcal{L}_i^{Blut}(t) + \mathcal{L}_i^{RW}, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}. \quad (3.3.4)$$

3.3.2 Diskretisierung der inneren Flüsse

In diesem Abschnitt wird eine Approximation für die Funktion \mathcal{L}_i^{IFL} (vgl. (3.3.1)),

$$\mathcal{L}_i^{IFL}(t) = \sum_{j=1}^{N(i)} \int_{f_{ij}} \langle v(x, t), n^{ij} \rangle dS(x), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\},$$

hergeleitet, d. h. die numerische Integration des Wärmestroms v über die inneren Begrenzungsflächen f_{ij} muß vorgenommen werden. Als erstes wird dazu eine Gradienten-Approximation pro Kontrollvolumen vorgestellt. Mit deren Hilfe werden in einem zweiten Schritt durch eine Interpolation die lokal beteiligten Zellmittelwerte geeignet neupositioniert (d. h. auf einer Normalen zu f_{ij}). Diese werden dann in einem letzten Schritt zur numerischen Integration über f_{ij} verwendet.

Gradienten-Approximation

Bevor das eben skizzierte Konzept (vgl. [19]) im Detail formuliert werden kann, wird eine Approximation des Gradienten von u im Zellschwerpunkt x^i wie folgt angegeben:

$$\tilde{\nabla}u(x^i, t) := \begin{cases} \frac{1}{|\sigma_i|} \sum_{j=1}^{N(i)} |f_{ij}| \frac{u_i(t) + u_{c(i,j)}(t)}{2} n^{ij}, & i \notin I_R \\ 0, & i \in I_R \end{cases} \approx \nabla u(x^i, t), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}. \quad (3.3.5)$$

Dabei wird für ein inneres Kontrollvolumen, d. h. $i \notin I_R$, die Gradienten-Rekonstruktion nach Gauss-Green verwendet. Deren Idee liegt darin, den Gradienten von u durch seinen „Mittelwert“ auf dem Kontrollvolumen σ_i zu approximieren und diesen wiederum mit Hilfe des Gauss'schen Satzes durch gewisse „Temperaturströme“ über die Grenzflächen von σ_i zu berechnen:

$$\nabla u(x^i, t) \approx \frac{1}{|\sigma_i|} \int_{\sigma_i} \nabla u(x, t) dx = \frac{1}{|\sigma_i|} \int_{\partial\sigma_i} u(x, t) n^i(x) dS(x),$$

wobei die Integrationen komponentenweise gemeint sind. Kurze Darstellungen dieser Idee findet man in [19] und [12], eine schöne, ausführliche Herleitung in [72].

Für ein Randkontrollvolumen, d. h. $i \in I_R$, wird die Gauss-Green-Rekonstruktion aus praktischen Gründen nicht verwendet. Denn hierfür wären Temperaturvorgaben am Rand, also Dirichlet-Randbedingungen nötig, während die Modellierung nur Wärmestromvorgaben am Rand, also Neumann-Randbedingungen vorsieht.

Interpolation

Zunächst wird zu einer gegebenen, inneren Begrenzungsfläche $f_{ij}, i \in \{1, \dots, N\}, j \in \{1, \dots, N(i)\}$, eine Gerade g konstruiert, die durch den Punkt $z^{ij} \in f_{ij}$ verläuft und n^{ij} als Richtungsvektor hat (s. S. 69, Abb. 20):

$$g := \{z^{ij} + \mu n^{ij} : \mu \in \mathbb{R}\} \subset \mathbb{R}^3.$$

Außerdem werden zwei zueinander parallele Ebenen definiert, die die beiden benachbarten Zellschwerpunkte als Aufpunkte und n^{ij} als Richtungsvektor haben:

$$\begin{aligned} E_{ij} &:= \{x \in \mathbb{R}^3 : \langle n^{ij}, x - x^i \rangle = 0\} \subset \mathbb{R}^3, \\ \tilde{E}_{ij} &:= \{x \in \mathbb{R}^3 : \langle n^{ij}, x - x^{c(i,j)} \rangle = 0\} \subset \mathbb{R}^3. \end{aligned}$$

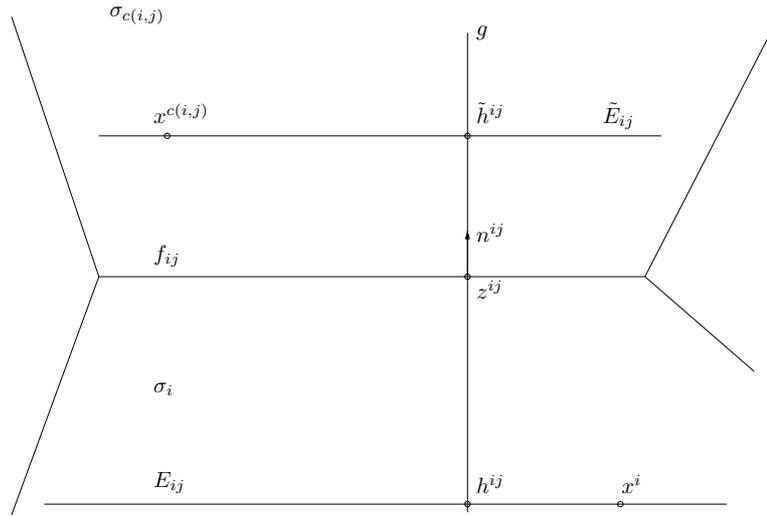


Abbildung 20: Interpolation in die Schnittpunkte für zentrale Differenz (2D)

Die Schnittpunkte von g mit diesen beiden Ebenen werden mit h^{ij} und \tilde{h}^{ij} bezeichnet:

$$\begin{aligned} \exists_1 h^{ij} \in \mathbb{R}^3 : h^{ij} \in g \cap E_{ij}, \\ \exists_1 \tilde{h}^{ij} \in \mathbb{R}^3 : \tilde{h}^{ij} \in g \cap \tilde{E}_{ij}. \end{aligned}$$

Nach diesen geometrischen Vorbereitungen wird jetzt die oben angegebene Gradienten-Approximation dem Zweck dienen, die in den Zellschwerpunkten lokalisierten Zellmittelwerte in die Schnittpunkte h^{ij} und \tilde{h}^{ij} zu interpolieren. Eine Taylor-Entwicklung von u um x^i liefert

$$\begin{aligned} u(h^{ij}, t) &\approx u(x^i, t) + \nabla u(x^i, t)^T (h^{ij} - x^i) \\ &\approx u_i(t) + \nabla u(x^i, t)^T (h^{ij} - x^i) \\ &\approx u_i(t) + \tilde{\nabla} u(x^i, t)^T (h^{ij} - x^i), \quad t \in \mathbb{R}_+^*. \end{aligned}$$

Der auf diese Art und Weise in den Schnittpunkt h^{ij} „verschobene“ Zellmittelwert wird als Approximation für den dortigen Funktionswert verwendet:

$$u_{h^{ij}}(t) := u_i(t) + \tilde{\nabla} u(x^i, t)^T (h^{ij} - x^i) \approx u(h^{ij}, t), \quad t \in \mathbb{R}_+^*. \quad (3.3.6)$$

Analog für die Nachbarzelle $\sigma_{c(i,j)}$:

$$u_{\tilde{h}^{ij}}(t) := u_{c(i,j)}(t) + \tilde{\nabla} u(x^{c(i,j)}, t)^T (\tilde{h}^{ij} - x^{c(i,j)}) \approx u(\tilde{h}^{ij}, t), \quad t \in \mathbb{R}_+^*. \quad (3.3.7)$$

Handelt es sich bei σ_i speziell um ein Randkontrollvolumen ($i \in I_R$), so folgt wegen $\tilde{\nabla} u(x^i, t) = 0$ aus (3.3.6) $u_{h^{ij}}(t) = u_i(t)$, $t \in \mathbb{R}_+^*$. In diesem Fall wird also der Zellmittelwert $u_i(t)$ selber als Approximation für $u_{h^{ij}}(t)$ verwendet.

Integration

Mit Hilfe der Mittelpunktsregel erhält man zunächst

$$\mathcal{L}_i^{IFL}(t) = \sum_{j=1}^{N(i)} \int_{f_{ij}} \langle v(x, t), n^{ij} \rangle dS(x) \approx \sum_{j=1}^{N(i)} \langle v(z^{ij}, t), n^{ij} \rangle |f_{ij}|, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}.$$

Mit der Definition (3.2.2) des Feldes v läßt sich ein einzelner Fluß schreiben als

$$\begin{aligned} \langle v(z^{ij}, t), n^{ij} \rangle &= \left\langle \frac{\lambda(z^{ij})}{\kappa(z^{ij})} \nabla u(z^{ij}, t) - \frac{\lambda(z^{ij})u(z^{ij}, t)}{\kappa^2(z^{ij})} \nabla \kappa(z^{ij}), n^{ij} \right\rangle \\ &= \left\langle \frac{\lambda(z^{ij})}{\kappa(z^{ij})} \nabla u(z^{ij}, t), n^{ij} \right\rangle - \left\langle \frac{\lambda(z^{ij})u(z^{ij}, t)}{\kappa^2(z^{ij})} \nabla \kappa(z^{ij}), n^{ij} \right\rangle \\ &= \frac{\lambda(z^{ij})}{\kappa(z^{ij})} \frac{\partial u}{\partial n^{ij}}(z^{ij}, t) - \frac{\lambda(z^{ij})u(z^{ij}, t)}{\kappa^2(z^{ij})} \frac{\partial \kappa}{\partial n^{ij}}(z^{ij}). \end{aligned}$$

Der Temperaturwert bei z^{ij} wird mit dem Mittelwert aus den Daten, die den anliegenden Zellen entsprechen, approximiert:

$$u(z^{ij}, t) \approx \frac{1}{2} \left(u(x^i, t) + u(x^{c(i,j)}, t) \right) \approx \frac{1}{2} \left(u_i(t) + u_{c(i,j)}(t) \right).$$

Um die Richtungsableitung $\frac{\partial u}{\partial n^{ij}}(z^{ij}, t)$ zu approximieren, werden (sprachlich ungenau) eine zentrale Differenz sowie die „verschobenen“ Zellmittelwerte verwendet:

$$\frac{\partial u}{\partial n^{ij}}(z^{ij}, t) \approx \frac{u(\tilde{h}^{ij}, t) - u(h^{ij}, t)}{\|\tilde{h}^{ij} - h^{ij}\|_2} \approx \frac{u_{\tilde{h}^{ij}}(t) - u_{h^{ij}}(t)}{\|\tilde{h}^{ij} - h^{ij}\|_2}.$$

Für die Materialeigenschaften kommt ebenfalls eine zentrale Differenz zur Anwendung:

$$\frac{\partial \kappa}{\partial n^{ij}}(z^{ij}) \approx \frac{\kappa(\tilde{h}^{ij}) - \kappa(h^{ij})}{\|\tilde{h}^{ij} - h^{ij}\|_2}.$$

Für den Fluß erhält man somit

$$\begin{aligned} \langle v(z^{ij}, t), n^{ij} \rangle &= \frac{\lambda(z^{ij})}{\kappa(z^{ij})} \frac{\partial u}{\partial n^{ij}}(z^{ij}, t) - \frac{\lambda(z^{ij})u(z^{ij}, t)}{\kappa^2(z^{ij})} \frac{\partial \kappa}{\partial n^{ij}}(z^{ij}) \\ &\approx \frac{\lambda(z^{ij})}{\kappa(z^{ij})} \frac{u_{\tilde{h}^{ij}}(t) - u_{h^{ij}}(t)}{\|\tilde{h}^{ij} - h^{ij}\|_2} - \frac{\lambda(z^{ij})}{\kappa^2(z^{ij})} \frac{1}{2} \left(u_i(t) + u_{c(i,j)}(t) \right) \frac{\kappa(\tilde{h}^{ij}) - \kappa(h^{ij})}{\|\tilde{h}^{ij} - h^{ij}\|_2}. \end{aligned}$$

Mit der numerischen Flußfunktion

$$H_{ij}(t) := \left(\frac{\lambda(z^{ij})}{\kappa(z^{ij})} \frac{u_{\tilde{h}^{ij}}(t) - u_{h^{ij}}(t)}{\|\tilde{h}^{ij} - h^{ij}\|_2} - \frac{1}{2} \frac{\lambda(z^{ij})}{\kappa^2(z^{ij})} \left(u_i(t) + u_{c(i,j)}(t) \right) \frac{\kappa(\tilde{h}^{ij}) - \kappa(h^{ij})}{\|\tilde{h}^{ij} - h^{ij}\|_2} \right) |f_{ij}|, \quad (3.3.8)$$

$$t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}, j \in \{1, \dots, N(i)\},$$

kann schließlich die Approximation für die Funktion \mathcal{L}_i^{IFL} bereitgestellt werden:

$$L_i^{IFL}(t) := \sum_{j=1}^{N(i)} H_{ij}(t), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}. \quad (3.3.9)$$

3.3.3 Diskretisierung der Randflüsse

In diesem Abschnitt wird eine Approximation für die Funktion \mathcal{L}_i^{RFL} (vgl. (3.3.3)),

$$\mathcal{L}_i^{RFL}(t) = \mathcal{L}_i^{TW}(t) + \mathcal{L}_i^r(t) + \mathcal{L}_i^{cv}(t) + \mathcal{L}_i^{cd}(t), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\},$$

bzw. für deren einzelne Summanden hergeleitet.

Transepidermale Wasserverluste

Zur Approximation von

$$\mathcal{L}_i^{TW}(t) = - \sum_{j=1}^{\overline{N}(i)} \int_{\overline{f}_{ij}} M^{TW}(x, t) dS(x), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\},$$

müssen zunächst der Sättigungsdampfdruck (1.2.10), die Diffusivität (1.2.11), die transepidermalen Wasserverluste (1.2.12) und der entsprechende Leistungsfluß (1.2.13) in $\overline{z}^{ij} \in \overline{f}_{ij}$ approximiert werden. Dies geschieht einfach dadurch, daß dort jeweils die Temperatur ersetzt wird durch den mit $\kappa^{-1}(x^i)$ gemäß Abschnitt 3.2 rücktransformierten Zellmittelwert:

$$p_i^*(t) := 0.6107 \cdot 10^{\frac{7.5 \cdot \left(\frac{u_i(t)}{\kappa(x^i)} - 273.15 \right)}{\frac{u_i(t)}{\kappa(x^i)} - 36.15}}, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in I_R,$$

$$k_i(t) := k_0 \cdot e^{9.119 - \frac{2809 \kappa(x^i)}{u_i(t)}}, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in I_R,$$

$$TW_{ij}(t) := \begin{cases} k_i(t) \cdot (p_i^*(t) - \frac{rH}{100} \cdot p_a^*), & \overline{z}^{ij} \in \partial_r D_l \\ 0, & \overline{z}^{ij} \in \partial_r D_m \end{cases}, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in I_R, j \in \{1, \dots, \overline{N}(i)\},$$

$$M_{ij}^{TW}(t) := \begin{cases} e_{Wasser} \cdot TW_{ij}(t), & \overline{z}^{ij} \in \partial_r D_l \\ 0, & \overline{z}^{ij} \in \partial_r D_m \end{cases}, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in I_R, j \in \{1, \dots, \overline{N}(i)\}.$$

Die Approximation von \mathcal{L}_i^{TW} geschieht durch die Mittelpunktsregel, da der für diese Arbeit verwendete Volumennetzgenerator (vgl. Kapitel 4) für die Oberflächendreiecke des Rechengebietes D nur den Schwerpunkt dieser Dreiecke zur Verfügung stellt (vgl. Abbildung 21 auf S. 72). Somit lautet die Approximation für \mathcal{L}_i^{TW}

$$L_i^{TW}(t) := - \sum_{j=1}^{\overline{N}(i)} M_{ij}^{TW}(t) |\overline{f}_{ij}| = - \sum_{\substack{j=1 \\ \overline{z}^{ij} \in \partial_r D_l}}^{\overline{N}(i)} M_{ij}^{TW}(t) |\overline{f}_{ij}|, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}. \quad (3.3.10)$$

Radiation

Zur Approximation von

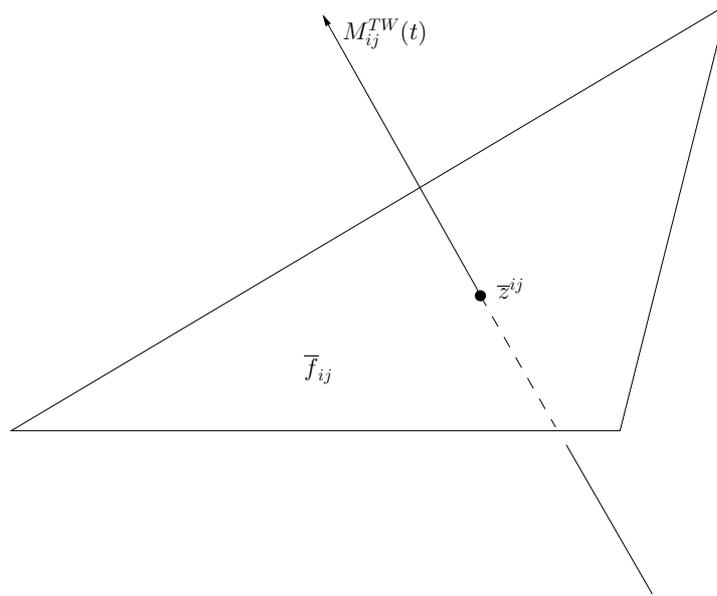
$$\mathcal{L}_i^r(t) = - \sum_{j=1}^{\overline{N}(i)} \int_{\overline{f}_{ij}} M^r(x, t) dS(x), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}$$

über Mittelpunktsregeln muß nur der Leistungsfluß (1.2.14) in $\overline{z}^{ij} \in \overline{f}_{ij}$ approximiert werden. Mit

$$M_{ij}^r(t) := \begin{cases} h^r(\overline{z}^{ij}) \left[\frac{u_i(t)}{\kappa(x^i)} - T_{MRT} \right] - S_{MRT}, & \overline{z}^{ij} \in \partial_r D_l \\ 0, & \overline{z}^{ij} \in \partial_r D_m \end{cases}, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in I_R, j \in \{1, \dots, \overline{N}(i)\}$$

erhält man als Approximation für \mathcal{L}_i^r

$$L_i^r(t) := - \sum_{j=1}^{\overline{N}(i)} M_{ij}^r(t) |\overline{f}_{ij}| = - \sum_{\substack{j=1 \\ \overline{z}^{ij} \in \partial_r D_l}}^{\overline{N}(i)} M_{ij}^r(t) |\overline{f}_{ij}|, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}. \quad (3.3.11)$$

Abbildung 21: Leistungfluß durch Oberflächendreieck \bar{f}_{ij}

Konvektion

Zur Approximation von

$$\mathcal{L}_i^{cv}(t) = - \sum_{j=1}^{\bar{N}(i)} \int_{\bar{f}_{ij}} M^{cv}(x, t) dS(x), \quad t \in \mathbb{R}_+, i \in \{1, \dots, N\}$$

wird völlig analog vorgegangen. Mit

$$M_{ij}^{cv}(t) := \left\{ \begin{array}{l} c_{FL} \left[\frac{u_i(t)}{\kappa(x^i)} - T_{Luft} \right], \quad \bar{z}^{ij} \in \partial_r D_l \\ 0, \quad \bar{z}^{ij} \in \partial_r D_m \end{array} \right\}, \quad t \in \mathbb{R}_+, i \in I_R, j \in \{1, \dots, \bar{N}(i)\}$$

(vgl. (1.2.15)) erhält man als Approximation für \mathcal{L}_i^{cv}

$$L_i^{cv}(t) := - \sum_{j=1}^{\bar{N}(i)} M_{ij}^{cv}(t) |\bar{f}_{ij}| = - \sum_{\substack{j=1 \\ \bar{z}^{ij} \in \partial_r D_l}}^{\bar{N}(i)} M_{ij}^{cv}(t) |\bar{f}_{ij}|, \quad t \in \mathbb{R}_+, i \in \{1, \dots, N\}. \quad (3.3.12)$$

Konduktion

Zur Approximation von

$$\mathcal{L}_i^{cd}(t) = - \sum_{j=1}^{\bar{N}(i)} \int_{\bar{f}_{ij}} M^{cd}(x, t) dS(x), \quad t \in \mathbb{R}_+, i \in \{1, \dots, N\}$$

wird genau wie eben vorgegangen. Mit

$$M_{ij}^{cd}(t) := \left\{ \begin{array}{l} 0, \quad \bar{z}^{ij} \in \partial_r D_l \\ k_{mat} \left[\frac{u_i(t)}{\kappa(x^i)} - T_{mat} \right], \quad \bar{z}^{ij} \in \partial_r D_m \end{array} \right\}, \quad t \in \mathbb{R}_+, i \in I_R, j \in \{1, \dots, \bar{N}(i)\}$$

(vgl. (1.2.16)) erhält man als Approximation für \mathcal{L}_i^{cd}

$$L_i^{cd}(t) := - \sum_{j=1}^{\overline{N}(i)} M_{ij}^{cd}(t) |\bar{f}_{ij}| = - \sum_{\substack{j=1 \\ z^j \in \partial_r D_m}}^{\overline{N}(i)} M_{ij}^{cd}(t) |\bar{f}_{ij}|, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}. \quad (3.3.13)$$

Zum Schluß dieses Abschnittes kann nun die gesamte Approximation für \mathcal{L}_i^{RFL} angegeben werden:

$$L_i^{RFL}(t) := L_i^{TW}(t) + L_i^r(t) + L_i^{cv}(t) + L_i^{cd}(t), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}. \quad (3.3.14)$$

3.3.4 Diskretisierung der Quellterme

In diesem Abschnitt wird eine Approximation für die Funktion \mathcal{L}_i^Q (vgl. 3.3.4),

$$\mathcal{L}_i^Q(t) = \mathcal{L}_i^{Met}(t) + \mathcal{L}_i^{Blut}(t) + \mathcal{L}_i^{RW}, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\},$$

bzw. für ihre einzelnen Bestandteile angeben.

Wärmeproduktion

Die Approximation der afferenten Temperatur (1.2.2),

$$\mathcal{T}_{aff}(t) = \frac{\int_D w(x) T(x, t) dx}{\int_D w(x) dx} = \frac{\int_D \frac{w(x)}{\kappa(x)} u(x, t) dx}{\int_D w(x) dx}, \quad t \in \mathbb{R}_+^*,$$

mit Hilfe der Rechteckregel geschieht durch

$$\bar{\mathcal{T}}_{aff}(t) := \frac{\sum_{j=1}^N \frac{w(x^j)}{\kappa(x^j)} u_j(t) |\sigma_j|}{\sum_{j=1}^N w(x^j) |\sigma_j|} \approx \frac{\sum_{j=1}^N \frac{w(x^j)}{\kappa(x^j)} u(x^j, t) |\sigma_j|}{\sum_{j=1}^N w(x^j) |\sigma_j|}, \quad t \in \mathbb{R}_+^*.$$

Das numerische Pendant der Abweichung (1.2.3) vom Sollwert ist die Steuergröße

$$\Delta \bar{\mathcal{T}}_{aff}(t) := \bar{\mathcal{T}}_{aff}(t) - T_{Soll}, \quad t \in \mathbb{R}_+^*.$$

Der Wert $\Delta \mathcal{M}(x^i, t)$ der cold-response (1.2.4) wird für $t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}$ ersetzt durch

$$\Delta \mathcal{M}_i(t) := \left\{ \begin{array}{ll} 0, & x^i \notin D_{\text{Rumpf, Kern}} \\ \max_{met}, & x^i \in D_{\text{Rumpf, Kern}}, \Delta \bar{\mathcal{T}}_{aff}(t) \leq \Delta T_{\max_{met}}, \\ \frac{\max_{met} \cdot \Delta \bar{\mathcal{T}}_{aff}(t)}{\Delta T_{\max_{met}}}, & x^i \in D_{\text{Rumpf, Kern}}, \Delta T_{\max_{met}} < \Delta \bar{\mathcal{T}}_{aff}(t) < 0, \\ 0, & x^i \in D_{\text{Rumpf, Kern}}, \Delta \bar{\mathcal{T}}_{aff}(t) \geq 0. \end{array} \right\}.$$

Der Wert $\mathcal{Q}^{Met}(x^i, t)$ des Quellterms (1.2.5) wird approximiert durch

$$\mathcal{Q}_i^{Met}(t) := 2^{0.1 \cdot \Delta \bar{\mathcal{T}}_{aff}(t)} \cdot [1 + \Delta \mathcal{M}_i(t)] \cdot \tilde{\mathcal{Q}}^{Met}(x^i), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}.$$

Damit kann nun für

$$\mathcal{L}_i^{Met}(t) = \int_{\sigma_i} \mathcal{Q}^{Met}(x, t) dx \approx \mathcal{Q}^{Met}(x^i, t) |\sigma_i|, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}$$

als Approximationsfunktion

$$L_i^{Met}(t) := Q_i^{Met}(t)|\sigma_i|, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\} \quad (3.3.15)$$

angegeben werden.

Blutfluß

Der Wert $\Delta \mathcal{BF}(x^i, t)$ der cold-response (1.2.6) wird für $t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}$ ersetzt durch

$$\Delta \mathcal{BF}_i(t) := \begin{cases} 0, & x^i \notin D_{Haut}, \\ \min BF, & x^i \in D_{Haut}, \Delta \bar{T}_{aff}(t) \leq \Delta T_{\min BF}, \\ \min BF \frac{\Delta \bar{T}_{aff}(t)}{\Delta T_{\min BF}}, & x^i \in D_{Haut}, \Delta T_{\min BF} < \Delta \bar{T}_{aff}(t) < 0, \\ \max BF \frac{\Delta \bar{T}_{aff}(t)}{\Delta T_{\max BF}}, & x^i \in D_{Haut}, 0 \leq \Delta \bar{T}_{aff}(t) < \Delta T_{\max BF}, \\ \max BF, & x^i \in D_{Haut}, \Delta T_{\max BF} \leq \Delta \bar{T}_{aff}(t), \end{cases}$$

wobei wieder die oben definierte, numerische Steuergröße verwendet wurde. Die diskrete Version der geregelten Blutflußfunktion (1.2.7) in den Zellschwerpunkten x^i lautet

$$\mathcal{BF}_i(t) := [1 + \Delta \mathcal{BF}_i(t)] \cdot \widetilde{\mathcal{BF}}(x^i), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}.$$

Die Approximation der mittleren Bluttemperatur (1.2.8),

$$\mathcal{T}_{Blut}(t) = \frac{\int_D K(x) \mathcal{BF}(x, t) T(x, t) dx}{\int_D K(x) \mathcal{BF}(x, t) dx} = \frac{\int_D \frac{K(x)}{\kappa(x)} \mathcal{BF}(x, t) u(x, t) dx}{\int_D K(x) \mathcal{BF}(x, t) dx}, \quad t \in \mathbb{R}_+^*,$$

mit Hilfe der Rechteckregel geschieht durch

$$\bar{\mathcal{T}}_{Blut}(t) := \frac{\sum_{j=1}^N \frac{K(x^j)}{\kappa(x^j)} \mathcal{BF}_j(t) u_j(t) |\sigma_j|}{\sum_{j=1}^N K(x^j) \mathcal{BF}_j(t) |\sigma_j|} \approx \frac{\sum_{j=1}^N \frac{K(x^j)}{\kappa(x^j)} \mathcal{BF}(x^j, t) u(x^j, t) |\sigma_j|}{\sum_{j=1}^N K(x^j) \mathcal{BF}(x^j, t) |\sigma_j|}, \quad t \in \mathbb{R}_+^*.$$

Der Wert $Q^{Blut}(x^i, t)$ des Quellterms (1.2.9) wird approximiert durch

$$Q_i^{Blut}(t) := \rho_{Blut} c_{Blut} K(x^i) \mathcal{BF}_i(t) \left(\bar{\mathcal{T}}_{Blut}(t) - \frac{u_i(t)}{\kappa(x^i)} \right), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}.$$

Damit kann nun wieder unter Verwendung der Rechteckregel für

$$\mathcal{L}_i^{Blut}(t) = \int_{\sigma_i} Q^{Blut}(x, t) dx \approx Q^{Blut}(x^i, t) |\sigma_i|, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}$$

als Approximationsfunktion

$$L_i^{Blut}(t) := Q_i^{Blut}(t) |\sigma_i|, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\} \quad (3.3.16)$$

angegeben werden.

Respiratorische Wasserverluste

Zur Approximation von

$$\mathcal{L}_i^{RW} = \int_{\sigma_i} \mathcal{Q}^{RW}(x) dx, \quad i \in \{1, \dots, N\}$$

wird unter Verwendung der Rechteckregel

$$L_i^{RW} := \mathcal{Q}^{RW}(x^i) |\sigma_i|, \quad i \in \{1, \dots, N\} \quad (3.3.17)$$

gesetzt.

Zum Schluß dieses Abschnittes kann nun die gesamte Approximation für \mathcal{L}_i^Q angegeben werden:

$$L_i^Q(t) := L_i^{Met}(t) + L_i^{Blut}(t) + L_i^{RW}, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}. \quad (3.3.18)$$

Mit (3.3.9), (3.3.14) und (3.3.18) erhält man nun als Gesamtergebnis der räumlichen Diskretisierung die Evolutionsgleichung (3.3.2) der Zellmittelwerte in folgender Form zurück:

$$\frac{du_i}{dt}(t) \approx \frac{1}{|\sigma_i|} \left(L_i^{IFL}(t) + L_i^{RFL}(t) + L_i^Q(t) \right), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}. \quad (3.3.19)$$

3.3.5 Vorbereitungen für die zeitliche Diskretisierung

In diesem rein technischen Abschnitt werden die Funktionen L_i^{IFL} (3.3.9), L_i^r (3.3.11), L_i^{cv} (3.3.12) und L_i^{cd} (3.3.13) in Kompaktformulierungen direkt durch die Zellmittelwerte ausgedrückt, um sie bei der später folgenden Zeitintegration komfortabel handhaben zu können und die dortige Umsetzung in ein lineares Gleichungssystem zu ermöglichen. Für die Funktionen L_i^{TW} (3.3.10) und L_i^Q (3.3.18) wird keine solche Vorbereitung vorgenommen, da sie direkt in die Zeitintegration eingehen.

3.3.5.1 Vorbereitung der inneren Flüsse

Kompaktformulierung der Gradienten-Approximation

Mit der Matrix

$$G_i = (G_i^1, \dots, G_i^{N(i)}) := \begin{cases} (n^{i1}, \dots, n^{iN(i)}), & i \notin I_R \\ 0, & i \in I_R \end{cases} \in M(3 \times N(i), \mathbb{R}), \quad i \in \{1, \dots, N\},$$

und den Vektoren

$$a^i := \begin{pmatrix} |f_{i1}| \\ \vdots \\ |f_{iN(i)}| \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N(i)}, \quad i \in \{1, \dots, N\},$$

$$b^i(t) := \begin{pmatrix} |f_{i1}| u_{c(i,1)}(t) \\ \vdots \\ |f_{iN(i)}| u_{c(i,N(i))}(t) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N(i)}, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\},$$

$$w^i := \frac{1}{2} G_i a^i \in \mathbb{R}^3, \quad i \in \{1, \dots, N\},$$

$$q^i(t) := \frac{1}{2} G_i b^i(t) \in \mathbb{R}^3, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\},$$

erhält die Gradientenapproximation (3.3.5) folgende Darstellung:

$$\tilde{\nabla}u(x^i, t) = \frac{1}{|\sigma_i|} (u_i(t)w^i + q^i(t)), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}.$$

Analog lautet die Darstellung für eine Nachbarzelle:

$$\tilde{\nabla}u(x^{c(i,j)}, t) = \frac{1}{|\sigma_{c(i,j)}|} (u_{c(i,j)}(t)w^{c(i,j)} + q^{c(i,j)}(t)), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}, j \in \{1, \dots, N(i)\}.$$

Neuformulierung der interpolierten Zellmittelwerte

Mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned} y^{ij} &:= h^{ij} - x^i \in \mathbb{R}^3, \quad i \in \{1, \dots, N\}, j \in \{1, \dots, N(i)\}, \\ \alpha_{ij} &:= 1 + \frac{\langle w^i, y^{ij} \rangle}{|\sigma_i|} \in \mathbb{R}, \quad i \in \{1, \dots, N\}, j \in \{1, \dots, N(i)\}, \\ \nu_{ijk} &:= \frac{|f_{ik}| \langle G_i^k, y^{ij} \rangle}{2|\sigma_i|} \in \mathbb{R}, \quad i \in \{1, \dots, N\}, j, k \in \{1, \dots, N(i)\} \end{aligned}$$

erhält man aus (3.3.6) zunächst

$$\begin{aligned} u_{h^{ij}}(t) &= u_i(t) + \langle \tilde{\nabla}u(x^i, t), y^{ij} \rangle \\ &= u_i(t) + \langle \frac{1}{|\sigma_i|} (u_i(t)w^i + q^i(t)), y^{ij} \rangle \\ &= \alpha_{ij}u_i(t) + \frac{\langle q^i(t), y^{ij} \rangle}{|\sigma_i|}, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}, j \in \{1, \dots, N(i)\} \end{aligned}$$

und mit der Definition von $q^i(t)$ dann

$$u_{h^{ij}}(t) = \alpha_{ij}u_i(t) + \sum_{k=1}^{N(i)} \nu_{ijk}u_{c(i,k)}(t), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}, j \in \{1, \dots, N(i)\}.$$

In völlig analoger Weise erhält man mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned} \tilde{y}^{ij} &:= \tilde{h}^{ij} - x^{c(i,j)} \in \mathbb{R}^3, \quad i \in \{1, \dots, N\}, j \in \{1, \dots, N(i)\}, \\ \tilde{\alpha}_{ij} &:= 1 + \frac{\langle w^{c(i,j)}, \tilde{y}^{ij} \rangle}{|\sigma_{c(i,j)}|} \in \mathbb{R}, \quad i \in \{1, \dots, N\}, j \in \{1, \dots, N(i)\}, \\ \tilde{\nu}_{ijk} &:= \frac{|f_{c(i,j)k}| \langle G_{c(i,j)}^k, \tilde{y}^{ij} \rangle}{2|\sigma_{c(i,j)}|} \in \mathbb{R}, \quad i \in \{1, \dots, N\}, j \in \{1, \dots, N(i)\}, k \in \{1, \dots, N(c(i,j))\} \end{aligned}$$

aus (3.3.7) die Darstellung

$$u_{\tilde{h}^{ij}}(t) = \tilde{\alpha}_{ij}u_{c(i,j)}(t) + \sum_{k=1}^{N(c(i,j))} \tilde{\nu}_{ijk}u_{c(c(i,j),k)}(t), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}, j \in \{1, \dots, N(i)\}.$$

Neuformulierung der numerischen Flußfunktion

Mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned}\delta_{ij} &:= \frac{\lambda(z^{ij})|f_{ij}|}{\kappa(z^{ij})\|\tilde{h}^{ij} - h^{ij}\|_2} \in \mathbb{R}, \quad i \in \{1, \dots, N\}, j \in \{1, \dots, N(i)\}, \\ \epsilon_{ij} &:= \frac{1}{2} \frac{\lambda(z^{ij})}{\kappa^2(z^{ij})} \frac{\kappa(\tilde{h}^{ij}) - \kappa(h^{ij})}{\|\tilde{h}^{ij} - h^{ij}\|_2} |f_{ij}| \in \mathbb{R}, \quad i \in \{1, \dots, N\}, j \in \{1, \dots, N(i)\}, \\ \chi_{ij} &:= \delta_{ij}\alpha_{ij} + \epsilon_{ij} \in \mathbb{R}, \quad i \in \{1, \dots, N\}, j \in \{1, \dots, N(i)\}, \\ \tilde{\chi}_{ij} &:= \delta_{ij}\tilde{\alpha}_{ij} - \epsilon_{ij} \in \mathbb{R}, \quad i \in \{1, \dots, N\}, j \in \{1, \dots, N(i)\}, \\ \xi_{ijk} &:= \delta_{ij}\nu_{ijk} \in \mathbb{R}, \quad i \in \{1, \dots, N\}, j, k \in \{1, \dots, N(i)\}, \\ \tilde{\xi}_{ijk} &:= \delta_{ij}\tilde{\nu}_{ijk} \in \mathbb{R}, \quad i \in \{1, \dots, N\}, j \in \{1, \dots, N(i)\}, k \in \{1, \dots, N(c(i, j))\}\end{aligned}$$

läßt sich die numerische Flußfunktion (3.3.8) für $t \in \mathbb{R}_+^*$, $i \in \{1, \dots, N\}$, $j \in \{1, \dots, N(i)\}$ wie folgt umformen:

$$\begin{aligned}H_{ij}(t) &= \delta_{ij} (u_{\tilde{h}^{ij}}(t) - u_{h^{ij}}(t)) - \epsilon_{ij} (u_i(t) + u_{c(i,j)}(t)) \\ &= \delta_{ij} \left(\tilde{\alpha}_{ij} u_{c(i,j)}(t) + \sum_{k=1}^{N(c(i,j))} \tilde{\nu}_{ijk} u_{c(c(i,j),k)}(t) - \alpha_{ij} u_i(t) - \sum_{k=1}^{N(i)} \nu_{ijk} u_{c(i,k)}(t) \right) \\ &\quad - \epsilon_{ij} (u_i(t) + u_{c(i,j)}(t)) \\ &= (\delta_{ij}\tilde{\alpha}_{ij} - \epsilon_{ij}) u_{c(i,j)}(t) - (\delta_{ij}\alpha_{ij} + \epsilon_{ij}) u_i(t) + \sum_{k=1}^{N(c(i,j))} \delta_{ij}\tilde{\nu}_{ijk} u_{c(c(i,j),k)}(t) \\ &\quad - \sum_{k=1}^{N(i)} \delta_{ij}\nu_{ijk} u_{c(i,k)}(t).\end{aligned}$$

Man erhält also

$$\begin{aligned}H_{ij}(t) &= \tilde{\chi}_{ij} u_{c(i,j)}(t) - \chi_{ij} u_i(t) + \sum_{k=1}^{N(c(i,j))} \tilde{\xi}_{ijk} u_{c(c(i,j),k)}(t) - \sum_{k=1}^{N(i)} \xi_{ijk} u_{c(i,k)}(t), \\ &\quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}, j \in \{1, \dots, N(i)\}.\end{aligned}$$

Kompaktformulierung der Funktion L_i^{IFL}

Mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned}\eta_i &:= \sum_{j=1}^{N(i)} \chi_{ij} \in \mathbb{R}, \quad i \in \{1, \dots, N\}, \\ \gamma_{ik} &:= \sum_{j=1}^{N(i)} \xi_{ijk} \in \mathbb{R}, \quad i \in \{1, \dots, N\}, k \in \{1, \dots, N(i)\}, \\ \mu_{ij} &:= \tilde{\chi}_{ij} - \gamma_{ij} \in \mathbb{R}, \quad i \in \{1, \dots, N\}, j \in \{1, \dots, N(i)\}\end{aligned}$$

erhält man aus (3.3.9)

$$\begin{aligned}
L_i^{IFL}(t) &= \sum_{j=1}^{N(i)} H_{ij}(t) \\
&= \sum_{j=1}^{N(i)} \tilde{\chi}_{ij} u_{c(i,j)}(t) - \sum_{j=1}^{N(i)} \chi_{ij} u_i(t) + \sum_{j=1}^{N(i)} \sum_{k=1}^{N(c(i,j))} \tilde{\xi}_{ijk} u_{c(c(i,j),k)}(t) - \sum_{j=1}^{N(i)} \sum_{k=1}^{N(i)} \xi_{ijk} u_{c(i,k)}(t) \\
&= \sum_{j=1}^{N(i)} \tilde{\chi}_{ij} u_{c(i,j)}(t) - \left(\sum_{j=1}^{N(i)} \chi_{ij} \right) u_i(t) + \sum_{j=1}^{N(i)} \sum_{k=1}^{N(c(i,j))} \tilde{\xi}_{ijk} u_{c(c(i,j),k)}(t) \\
&\quad - \sum_{k=1}^{N(i)} \sum_{j=1}^{N(i)} \xi_{ijk} u_{c(i,k)}(t) \\
&= \sum_{j=1}^{N(i)} \tilde{\chi}_{ij} u_{c(i,j)}(t) - \eta_i u_i(t) + \sum_{j=1}^{N(i)} \sum_{k=1}^{N(c(i,j))} \tilde{\xi}_{ijk} u_{c(c(i,j),k)}(t) - \sum_{k=1}^{N(i)} \left(\sum_{j=1}^{N(i)} \xi_{ijk} \right) u_{c(i,k)}(t) \\
&= \sum_{j=1}^{N(i)} \tilde{\chi}_{ij} u_{c(i,j)}(t) - \eta_i u_i(t) + \sum_{j=1}^{N(i)} \sum_{k=1}^{N(c(i,j))} \tilde{\xi}_{ijk} u_{c(c(i,j),k)}(t) - \sum_{k=1}^{N(i)} \gamma_{ik} u_{c(i,k)}(t) \\
&= \sum_{j=1}^{N(i)} \tilde{\chi}_{ij} u_{c(i,j)}(t) - \eta_i u_i(t) + \sum_{j=1}^{N(i)} \sum_{k=1}^{N(c(i,j))} \tilde{\xi}_{ijk} u_{c(c(i,j),k)}(t) - \sum_{j=1}^{N(i)} \gamma_{ij} u_{c(i,j)}(t) \\
&= \sum_{j=1}^{N(i)} (\tilde{\chi}_{ij} - \gamma_{ij}) u_{c(i,j)}(t) - \eta_i u_i(t) + \sum_{j=1}^{N(i)} \sum_{k=1}^{N(c(i,j))} \tilde{\xi}_{ijk} u_{c(c(i,j),k)}(t) \\
&= \sum_{j=1}^{N(i)} \mu_{ij} u_{c(i,j)}(t) - \eta_i u_i(t) + \sum_{j=1}^{N(i)} \sum_{k=1}^{N(c(i,j))} \tilde{\xi}_{ijk} u_{c(c(i,j),k)}(t), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}.
\end{aligned}$$

Mit den in einem Spaltenvektor zusammengefassten Zellmittelwerten

$$u(t) := \begin{pmatrix} u_1(t) \\ \vdots \\ u_N(t) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^N, \quad t \in \mathbb{R}_+^*$$

und mit einem geeigneten, dünnbesetzten Spaltenvektor $D^{IFL,i} \in \mathbb{R}^N$ ist L_i^{IFL} also darstellbar durch

$$L_i^{IFL}(t) = D^{IFL,iT} u(t), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}. \quad (3.3.20)$$

L_i^{IFL} ist somit linear in den Zellmittelwerten.

3.3.5.2 Vorbereitung der Randflüsse

Radiation

Aus (3.3.11) ergibt sich für $t \in \mathbb{R}_+^*$, $i \in \{1, \dots, N\}$ zunächst

$$\begin{aligned}
L_i^r(t) &= - \sum_{\substack{j=1 \\ \bar{z}^{ij} \in \partial_r D_l}}^{\bar{N}(i)} M_{ij}^r(t) |\bar{f}_{ij}| = - \sum_{\substack{j=1 \\ \bar{z}^{ij} \in \partial_r D_l}}^{\bar{N}(i)} \left(h^r(\bar{z}^{ij}) \left[\frac{u_i(t)}{\kappa(x^i)} - T_{MRT} \right] - S_{MRT} \right) |\bar{f}_{ij}| \\
&= - \sum_{\substack{j=1 \\ \bar{z}^{ij} \in \partial_r D_l}}^{\bar{N}(i)} \frac{h^r(\bar{z}^{ij})}{\kappa(x^i)} |\bar{f}_{ij}| u_i(t) + \sum_{\substack{j=1 \\ \bar{z}^{ij} \in \partial_r D_l}}^{\bar{N}(i)} (h^r(\bar{z}^{ij}) T_{MRT} + S_{MRT}) |\bar{f}_{ij}| \\
&= \left(- \sum_{\substack{j=1 \\ \bar{z}^{ij} \in \partial_r D_l}}^{\bar{N}(i)} \frac{h^r(\bar{z}^{ij})}{\kappa(x^i)} |\bar{f}_{ij}| \right) u_i(t) + \sum_{\substack{j=1 \\ \bar{z}^{ij} \in \partial_r D_l}}^{\bar{N}(i)} (h^r(\bar{z}^{ij}) T_{MRT} + S_{MRT}) |\bar{f}_{ij}|.
\end{aligned}$$

Mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned}
D^{r,i} &:= \left(0, \dots, 0, - \sum_{\substack{j=1 \\ \bar{z}^{ij} \in \partial_r D_l}}^{\bar{N}(i)} \frac{h^r(\bar{z}^{ij})}{\kappa(x^i)} |\bar{f}_{ij}|, 0, \dots, 0 \right)^T \in \mathbb{R}^N, \quad i \in \{1, \dots, N\}, \\
d_i^r &:= \sum_{\substack{j=1 \\ \bar{z}^{ij} \in \partial_r D_l}}^{\bar{N}(i)} (h^r(\bar{z}^{ij}) T_{MRT} + S_{MRT}) |\bar{f}_{ij}| \in \mathbb{R}, \quad i \in \{1, \dots, N\},
\end{aligned}$$

wobei der Vektor nur an der i -ten Position einen von Null verschiedenen Eintrag hat, gilt also

$$L_i^r(t) = D^{r,iT} u(t) + d_i^r, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}.$$

Konvektion

Mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned}
D^{cv,i} &:= \left(0, \dots, 0, - \sum_{\substack{j=1 \\ \bar{z}^{ij} \in \partial_r D_l}}^{\bar{N}(i)} \frac{c_{FL}}{\kappa(x^i)} |\bar{f}_{ij}|, 0, \dots, 0 \right)^T \in \mathbb{R}^N, \quad i \in \{1, \dots, N\}, \\
d_i^{cv} &:= \sum_{\substack{j=1 \\ \bar{z}^{ij} \in \partial_r D_l}}^{\bar{N}(i)} c_{FL} |\bar{f}_{ij}| T_{Luft} \in \mathbb{R}, \quad i \in \{1, \dots, N\}
\end{aligned}$$

erhält man in völlig analoger Weise für (3.3.12)

$$L_i^{cv}(t) = D^{cv,iT} u(t) + d_i^{cv}, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}.$$

Konduktion

Mit den Abkürzungen

$$D^{cd,i} := \left(0, \dots, 0, - \sum_{\substack{j=1 \\ \bar{z}^{ij} \in \partial_r D_m}}^{\bar{N}(i)} \frac{k_{mat}}{\kappa(x^i)} |\bar{f}_{ij}|, 0, \dots, 0 \right)^T \in \mathbb{R}^N, \quad i \in \{1, \dots, N\},$$

$$d_i^{cd} := \sum_{\substack{j=1 \\ \bar{z}^{ij} \in \partial_r D_m}}^{\bar{N}(i)} k_{mat} |\bar{f}_{ij}| T_{mat} \in \mathbb{R}, \quad i \in \{1, \dots, N\}$$

erhält man wieder genauso für (3.3.13)

$$L_i^{cd}(t) = D^{cd,iT} u(t) + d_i^{cd}, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}.$$

Für $L_i^{TW}(t)$ (3.3.10) kann aufgrund der exponentiellen Abhängigkeiten von der Temperatur keine solche affin-lineare Darstellung angegeben werden. Mit

$$D^{RF,i} := D^{r,i} + D^{cv,i} + D^{cd,i} \in \mathbb{R}^N, \quad i \in \{1, \dots, N\},$$

$$d_i^{RF} := d_i^r + d_i^{cv} + d_i^{cd} \in \mathbb{R}, \quad i \in \{1, \dots, N\}$$

kann (3.3.14) also wie folgt dargestellt werden:

$$L_i^{RFL}(t) = L_i^{TW}(t) + D^{RF,iT} u(t) + d_i^{RF}, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}. \quad (3.3.21)$$

3.4 Die zeitliche Diskretisierung

In diesem Abschnitt wird durch ein spezielles, lineares Mehrschrittverfahren die Zeitintegration der Finite-Volumen-Diskretisierung (3.3.19)

$$\frac{du_i}{dt}(t) \approx \frac{1}{|\sigma_i|} \left(L_i^{IFL}(t) + L_i^{RFL}(t) + L_i^Q(t) \right), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}$$

vorgenommen. Unter Verwendung von (3.3.20) und (3.3.21) erhält man hieraus zunächst

$$\frac{du_i}{dt}(t) \approx \frac{1}{|\sigma_i|} \left(D^{IFL,iT} u(t) + L_i^{TW}(t) + D^{RF,iT} u(t) + d_i^{RF} + L_i^Q(t) \right), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}.$$

Mit den Abkürzungen

$$D^i := D^{IFL,i} + D^{RF,i} \in \mathbb{R}^N, \quad i \in \{1, \dots, N\},$$

$$d_i := d_i^{RF} \in \mathbb{R}, \quad i \in \{1, \dots, N\},$$

kann man dann übersichtlicher schreiben

$$\frac{du_i}{dt}(t) \approx \frac{1}{|\sigma_i|} \left(D^{iT} u(t) + d_i + L_i^{TW}(t) + L_i^Q(t) \right), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, i \in \{1, \dots, N\}. \quad (3.4.1)$$

Für eine stabile Zeitintegration von (3.4.1) ist zu beachten, daß durch den Term $D^{iT} u(t) + d_i$ u. a. Diffusionsprozesse beschrieben werden, sodaß man davon ausgehen muß, mit einem zumindest

anteilig steifen System konfrontiert zu sein (vgl. Kapitel 2). Ein explizites, lineares Mehrschrittverfahren kann also nicht verwendet werden, da es eine starke Beschränkung der Zeitschrittweite nötig machen würde. Jeder einzelne Zeitschritt wäre dann zwar simpel durchführbar, aber die nötige Gesamtzahl an Zeitschritten würde enorm wachsen, sodaß die Rechenzeit gesteigert und die Gesamteffizienz des Verfahrens zunichte gemacht werden würden (vgl. [49]). Stattdessen empfehlen sich die impliziten BDF-Verfahren. Diese lassen die Wahl von größeren Zeitschrittweiten zu, allerdings zu dem Preis, in jedem Zeitschritt ein Gleichungssystem lösen zu müssen. Dies wird aber i. allg. mit drastisch reduzierten Rechenzeiten gebührend belohnt. In dieser Arbeit wird das bereits in Kapitel 2 erwähnte, implizite BDF(3)-Verfahren als Basisverfahren zur Zeitintegration von (3.4.1) dienen. Allerdings soll aus erst später ersichtlichen Gründen nicht die gesamte rechte Seite von (3.4.1) implizit behandelt werden. Stattdessen werden die Funktionen L_i^{TW} und L_i^Q durch Extrapolation explizit behandelt, sodaß also insgesamt das in Abschnitt 2.4 vorgestellte SBDF(3)-Verfahren verwendet wird. Es werden also nur diejenigen Teile der rechten Seite von (3.4.1) implizit behandelt, welche Steifheit produzieren. Vorweg werden hierfür in den nächsten beiden Abschnitten die zeitdiskreten Bezeichner eingeführt und das semi-implizite Einschrittverfahren CNEE (vgl. ebenfalls Abschnitt 2.4) für (3.4.1) zur Berechnung von Startwerten aufgestellt. Anschließend wird in einem weiteren Abschnitt das SBDF(3)-Verfahren auf (3.4.1) angewendet. In einem letzten Abschnitt wird dann eine Zusammenfassung des gesamten Finite-Volumen-Verfahrens gegeben.

3.4.1 Zeitdiskrete Bezeichner

Zellmittelwerte

Das Zeitintervall \mathbb{R}_+^* wird in gleichlange Teilintervalle der Länge $\Delta t > 0$ zerlegt:

$$0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots; \quad t_n := n\Delta t, n \in \mathbb{N}.$$

Die Start- bzw. Näherungswerte für die Zellmittelwerte werden wie folgt definiert bzw. deklariert:

$$u^0 = \begin{pmatrix} u_1^0 \\ \vdots \\ u_N^0 \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} u_0(x^1) \\ \vdots \\ u_0(x^N) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^N, \quad (3.4.2)$$

wobei $u_0 : D \rightarrow \mathbb{R}$ die transformierte Anfangsverteilung beschreibt (vgl. (3.2.4)),

$$u^n = \begin{pmatrix} u_1^n \\ \vdots \\ u_N^n \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} u_1(t_n) \\ \vdots \\ u_N(t_n) \end{pmatrix} = u(t_n), n \in \mathbb{N}^*.$$

Der diskrete update-Vektor sei bezeichnet mit

$$\Delta u^n = \begin{pmatrix} \Delta u_1^n \\ \vdots \\ \Delta u_N^n \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} u_1^{n+1} - u_1^n \\ \vdots \\ u_N^{n+1} - u_N^n \end{pmatrix} = u^{n+1} - u^n, n \in \mathbb{N},$$

sodaß sich also ein neuer Temperaturvektor aus dem alten zu

$$u^{n+1} = u^n + \Delta u^n, n \in \mathbb{N}$$

errechnet. Mit diesen Näherungswerten für die Zellmittelwerte werden nun die zeitdiskreten Approximationen für die beiden Funktionen L_i^{TW} und L_i^Q auf der rechten Seite von (3.4.1) definiert.

Transepidermale Wasserverluste

Für die zeitliche Diskretisierung von (3.3.10) wird festgelegt:

$$\begin{aligned}
 p_i^{*,n} &:= 0.6107 \cdot 10^{\frac{7.5 \cdot \left(\frac{u_i^n}{\kappa(x^i)} - 273.15 \right)}{\frac{u_i^n}{\kappa(x^i)} - 36.15}}, \quad n \in \mathbb{N}, i \in I_R, \\
 k_i^n &:= k_0 \cdot e^{9.119 - \frac{2809\kappa(x^i)}{u_i^n}}, \quad n \in \mathbb{N}, i \in I_R, \\
 TW_{ij}^n &:= \left\{ \begin{array}{l} k_i^n \cdot (p_i^{*,n} - \frac{rH}{100} \cdot p_a^*), \quad \bar{z}^{ij} \in \partial_r D_l \\ 0, \quad \bar{z}^{ij} \in \partial_r D_m \end{array} \right\}, \quad n \in \mathbb{N}, i \in I_R, j \in \{1, \dots, \bar{N}(i)\}, \\
 M_{ij}^{TW,n} &:= \left\{ \begin{array}{l} e_{Wasser} \cdot TW_{ij}^n, \quad \bar{z}^{ij} \in \partial_r D_l \\ 0, \quad \bar{z}^{ij} \in \partial_r D_m \end{array} \right\}, \quad n \in \mathbb{N}, i \in I_R, j \in \{1, \dots, \bar{N}(i)\}.
 \end{aligned}$$

Damit kann nun die Approximation für $L_i^{TW}(t_n)$ bereitgestellt werden:

$$L_i^{TW,n} := - \sum_{\substack{j=1 \\ \bar{z}^{ij} \in \partial_r D_l}}^{\bar{N}(i)} M_{ij}^{TW,n} |\bar{f}_{ij}|, \quad n \in \mathbb{N}, i \in \{1, \dots, N\}. \quad (3.4.3)$$

Quellterme

Für die zeitliche Diskretisierung der Funktion L_i^{Met} (3.3.15) müssen vorweg die raumdiskreten Versionen der afferenten Temperatur, der Abweichung vom Sollwert, der cold-response der Wärmeproduktion sowie des entsprechenden Quellterms zeitdiskret formuliert werden. Dies geschieht dadurch, daß sämtliche Zellmittelwerte durch ihre zeitdiskreten Näherungswerte ersetzt werden:

$$\bar{T}_{aff}^n := \frac{\sum_{j=1}^N \frac{w(x^j)}{\kappa(x^j)} u_j^n |\sigma_j|}{\sum_{j=1}^N w(x^j) |\sigma_j|}, \quad n \in \mathbb{N},$$

$$\Delta \bar{T}_{aff}^n := \bar{T}_{aff}^n - T_{Soll}, \quad n \in \mathbb{N},$$

$$\Delta \mathcal{M}_i^n := \left\{ \begin{array}{l} 0, \quad x^i \notin D_{Rumpf, Kern} \\ maxmet, \quad x^i \in D_{Rumpf, Kern}, \Delta \bar{T}_{aff}^n \leq \Delta T_{maxmet} \\ \frac{maxmet \cdot \Delta \bar{T}_{aff}^n}{\Delta T_{maxmet}}, \quad x^i \in D_{Rumpf, Kern}, \Delta T_{maxmet} < \Delta \bar{T}_{aff}^n < 0 \\ 0, \quad x^i \in D_{Rumpf, Kern}, \Delta \bar{T}_{aff}^n \geq 0 \end{array} \right\}, \quad n \in \mathbb{N}, i \in \{1, \dots, N\}$$

$$\mathcal{Q}_i^{Met,n} := 2^{0.1 \cdot \Delta \bar{T}_{aff}^n} \cdot [1 + \Delta \mathcal{M}_i^n] \cdot \tilde{\mathcal{Q}}^{Met}(x^i), \quad n \in \mathbb{N}, i \in \{1, \dots, N\}.$$

Damit kann nun die Approximation für $L_i^{Met}(t_n)$ bereitgestellt werden:

$$L_i^{Met,n} := \mathcal{Q}_i^{Met,n} |\sigma_i|, \quad n \in \mathbb{N}, i \in \{1, \dots, N\}. \quad (3.4.4)$$

Für die zeitliche Diskretisierung der Funktion L_i^{Blut} (3.3.16) werden die raumdiskreten Versionen der cold-response der Vasomotorik, der geregelten Blutflußfunktion, der mittleren Bluttemperatur und des entsprechenden Quellterms zeitdiskret formuliert:

$$\Delta \mathcal{BF}_i^n := \left\{ \begin{array}{ll} 0, & x^i \notin D_{Haut} \\ \min BF, & x^i \in D_{Haut}, \Delta \bar{T}_{aff}^n \leq \Delta T_{\min BF} \\ \min BF \frac{\Delta \bar{T}_{aff}^n}{\Delta T_{\min BF}}, & x^i \in D_{Haut}, \Delta T_{\min BF} < \Delta \bar{T}_{aff}^n < 0 \\ \max BF \frac{\Delta \bar{T}_{aff}^n}{\Delta T_{\max BF}}, & x^i \in D_{Haut}, 0 \leq \Delta \bar{T}_{aff}^n < \Delta T_{\max BF} \\ \max BF, & x^i \in D_{Haut}, \Delta T_{\max BF} \leq \Delta \bar{T}_{aff}^n \end{array} \right\}, n \in \mathbb{N}, i \in \{1, \dots, N\},$$

$$\mathcal{BF}_i^n := [1 + \Delta \mathcal{BF}_i^n] \cdot \widetilde{\mathcal{BF}}(x^i), n \in \mathbb{N}, i \in \{1, \dots, N\},$$

$$\bar{T}_{Blut}^n := \frac{\sum_{j=1}^N \frac{K(x^j)}{\kappa(x^j)} \mathcal{BF}_j^n u_j^n |\sigma_j|}{\sum_{j=1}^N K(x^j) \mathcal{BF}_j^n |\sigma_j|}, n \in \mathbb{N},$$

$$\mathcal{Q}_i^{Blut,n} := \rho_{Blut} c_{Blut} K(x^i) \mathcal{BF}_i^n \left(\bar{T}_{Blut}^n - \frac{u_i^n}{\kappa(x^i)} \right), n \in \mathbb{N}, i \in \{1, \dots, N\}.$$

Damit kann nun die Approximation für $L_i^{Blut}(t_n)$ bereitgestellt werden:

$$L_i^{Blut,n} := \mathcal{Q}_i^{Blut,n} |\sigma_i|, n \in \mathbb{N}, i \in \{1, \dots, N\}. \quad (3.4.5)$$

Für die respiratorischen Wasserverluste (vgl. 3.3.17) braucht aufgrund der Zeitunabhängigkeit keine weitere Diskretisierung vorgenommen werden. Mit (3.4.4) und (3.4.5) kann nun die zeitdiskrete Version von L_i^Q (3.3.18) angegeben werden:

$$L_i^{Q,n} := L_i^{Met,n} + L_i^{Blut,n} + L_i^{RW}, n \in \mathbb{N}, i \in \{1, \dots, N\}. \quad (3.4.6)$$

3.4.2 Zeitintegration mit dem Einschrittverfahren CNEE

Angewandt auf (3.4.1) lautet das in Abschnitt 2.4 dargestellte Crank-Nicolson-Explicit-Euler-Verfahren unter Verwendung von (3.4.3) und (3.4.6) für $n \geq 0$, $i \in \{1, \dots, N\}$ zunächst

$$u_i^{n+1} - u_i^n = \Delta t \left[\frac{1}{2} \left(\frac{1}{|\sigma_i|} \left(D^{iT} u^n + d_i \right) + \frac{1}{|\sigma_i|} \left(D^{iT} u^{n+1} + d_i \right) \right) + \frac{1}{|\sigma_i|} \left(L_i^{TW,n} + L_i^{Q,n} \right) \right].$$

Hieraus erhält man

$$\begin{aligned} e^{iT} \Delta u^n &= \frac{\Delta t}{|\sigma_i|} \left[\frac{1}{2} \left(D^{iT} u^n + D^{iT} u^{n+1} + 2d_i \right) + L_i^{TW,n} + L_i^{Q,n} \right] \\ &= \frac{\Delta t}{|\sigma_i|} \left[\frac{1}{2} \left(D^{iT} u^n + D^{iT} u^{n+1} + 2d_i + D^{iT} u^n - D^{iT} u^n \right) + L_i^{TW,n} + L_i^{Q,n} \right] \\ &= \frac{\Delta t}{|\sigma_i|} \left[\frac{1}{2} \left(2 \left(D^{iT} u^n + d_i \right) + D^{iT} \left(u^{n+1} - u^n \right) \right) + L_i^{TW,n} + L_i^{Q,n} \right] \\ &= \frac{\Delta t}{|\sigma_i|} \left[D^{iT} u^n + d_i + \frac{1}{2} D^{iT} \Delta u^n + L_i^{TW,n} + L_i^{Q,n} \right], \quad n \geq 0, i \in \{1, \dots, N\}, \end{aligned}$$

also

$$\left(e^i - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{|\sigma_i|} D^i \right)^T \Delta u^n = \frac{\Delta t}{|\sigma_i|} \left(D^{iT} u^n + d_i + L_i^{TW,n} + L_i^{Q,n} \right), \quad n \geq 0, i \in \{1, \dots, N\}. \quad (3.4.7)$$

Durch (3.4.7) ist ein schwachbesetztes, lineares Gleichungssystem der Größe $N \times N$ gegeben, dessen Lösung im $(n+1)$ -ten Zeitschritt des Gesamtverfahrens das update Δu^n liefern würde. Es wird hier nur für die Fälle $n=0$ und $n=1$ angewandt und liefert die updates Δu^0 und Δu^1 , womit dann neben u^0 der zweite und dritte Startvektor $u^1 = u^0 + \Delta u^0$ und $u^2 = u^1 + \Delta u^1$ für das eigentliche Zeitschrittverfahren vorliegen.

Bemerkung:

Als Verfahren zur Berechnung von Startwerten für das SBDF(3)-Verfahren bietet sich zunächst das Crank-Nicolson-Verfahren an (vgl. Abschnitt 2.3). Aufgrund der z. T. nichtlinearen Abhängigkeiten der Funktionen $L_i^{Met,n}$ (3.4.4) und $L_i^{Blut,n}$ (3.4.5) von sämtlichen Zellmittelwertapproximationen würde eine ebenfalls implizite Behandlung der Funktion L_i^Q in (3.4.1) auf ein wohlbestimmtes, nichtlineares Gleichungssystem in $u^{n+1} \in \mathbb{R}^N$ führen. Dessen $N \times N$ -Jacobi-Matrix für Newton-Iterationen wäre vollbesetzt, was einen entsprechenden Speicherbedarf zeitigen würde. Um diese gesamte Problematik von vornherein zu vermeiden, wird eine explizite Zeitdiskretisierung von L_i^Q vorgenommen. Die ebenfalls nichtlineare Funktion L_i^{TW} wird aus Gründen der Einfachheit und Einheitlichkeit auch nur explizit behandelt. Insgesamt wird hier also das CNEE-Verfahren aus Abschnitt 2.4 angewandt.

3.4.3 Zeitintegration mit dem Mehrschrittverfahren SBDF(3)

Angewandt auf (3.4.1) lautet das SBDF(3)-Verfahren unter Verwendung von (3.4.3) und (3.4.6) für $n \geq 0$, $i \in \{1, \dots, N\}$ zunächst

$$\begin{aligned} \frac{11}{6} u_i^{n+3} - 3u_i^{n+2} + \frac{3}{2} u_i^{n+1} - \frac{1}{3} u_i^n &= \Delta t \left[\frac{1}{|\sigma_i|} \left(D^{iT} u^{n+3} + d_i \right) + \frac{3}{|\sigma_i|} \left(L_i^{TW,n+2} + L_i^{Q,n+2} \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{3}{|\sigma_i|} \left(L_i^{TW,n+1} + L_i^{Q,n+1} \right) + \frac{1}{|\sigma_i|} \left(L_i^{TW,n} + L_i^{Q,n} \right) \right]. \end{aligned}$$

Hieraus erhält man für $n \geq 0$, $i \in \{1, \dots, N\}$

$$\begin{aligned} \left(\frac{11}{6} e^i - \frac{\Delta t}{|\sigma_i|} D^i \right)^T u^{n+3} &= 3e^{iT} u^{n+2} - \frac{3}{2} e^{iT} u^{n+1} + \frac{1}{3} e^{iT} u^n \\ &\quad + \frac{\Delta t}{|\sigma_i|} \left[d_i + 3 \left(L_i^{TW,n+2} + L_i^{Q,n+2} \right) - 3 \left(L_i^{TW,n+1} + L_i^{Q,n+1} \right) \right. \\ &\quad \left. + L_i^{TW,n} + L_i^{Q,n} \right]. \end{aligned}$$

Mit der Abkürzung

$$\begin{aligned} r_i^n &:= \frac{\Delta t}{|\sigma_i|} \left[d_i + 3 \left(L_i^{TW,n+2} + L_i^{Q,n+2} \right) - 3 \left(L_i^{TW,n+1} + L_i^{Q,n+1} \right) + L_i^{TW,n} + L_i^{Q,n} \right] \in \mathbb{R}, \\ &\quad n \geq 0, i \in \{1, \dots, N\}, \end{aligned}$$

lautet dies

$$\left(\frac{11}{6} e^i - \frac{\Delta t}{|\sigma_i|} D^i \right)^T u^{n+3} = 3e^{iT} u^{n+2} - \frac{3}{2} e^{iT} u^{n+1} + \frac{1}{3} e^{iT} u^n + r_i^n, \quad n \geq 0, i \in \{1, \dots, N\}.$$

Durch Subtraktion von $\left(\frac{11}{6}e^i - \frac{\Delta t}{|\sigma_i|}D^i\right)^T u^{n+2}$ auf beiden Seiten ergibt sich

$$\left(\frac{11}{6}e^i - \frac{\Delta t}{|\sigma_i|}D^i\right)^T (u^{n+3} - u^{n+2}) = \left(\frac{7}{6}e^i + \frac{\Delta t}{|\sigma_i|}D^i\right)^T u^{n+2} - \frac{3}{2}e^{iT}u^{n+1} + \frac{1}{3}e^{iT}u^n + r_i^n, \\ n \geq 0, i \in \{1, \dots, N\},$$

also

$$\left(\frac{11}{6}e^i - \frac{\Delta t}{|\sigma_i|}D^i\right)^T \Delta u^{n+2} = \left(\frac{7}{6}e^i + \frac{\Delta t}{|\sigma_i|}D^i\right)^T u^{n+2} - \frac{3}{2}e^{iT}u^{n+1} + \frac{1}{3}e^{iT}u^n + r_i^n, \quad (3.4.8) \\ n \geq 0, i \in \{1, \dots, N\}.$$

Durch (3.4.8) ist wieder ein schwachbesetztes, lineares Gleichungssystem der Größe $N \times N$ gegeben, dessen Lösung im $(n+3)$ -ten Zeitschritt des Gesamtverfahrens das update Δu^{n+2} , $n \geq 0$, liefert.

Bemerkung:

Um die schon erwähnten Speicherprobleme zu vermeiden, wird hier statt des BDF(3)-Verfahrens das in Abschnitt 2.4 hergeleitete SBDF(3)-Verfahren verwendet, bei dem für die Funktionen L_i^{TW} und L_i^Q eine quadratische Extrapolation von den Zeitpunkten t_n, t_{n+1} und t_{n+2} nach t_{n+3} vorgenommen wurde.

Bemerkung:

Um bei der räumlichen Diskretisierung eine ausreichende Auflösung des Rechengebietes D zu erreichen, wurde die Anzahl N der Zellen in der Größenordnung $10^4 - 10^5$ gewählt (vgl. Kapitel 4). Die aus der Finite-Volumen-Diskretisierung erhaltenen linearen Gleichungssysteme (3.4.7) und (3.4.8) sind daher zu groß, als daß sie mit direkten Verfahren erfolgreich gelöst werden könnten. Die Klasse der Krylov-Unterraum-Methoden bietet sich zur iterativen Lösung dieser Systeme an. Aufgrund der Empfehlungen aus [50] und der Erfahrungen aus [49] wird hier speziell das BICGSTAB-Verfahren mit einer ILU-Präkonditionierung verwendet. Dabei ist zur praktischen Umsetzung anzumerken, daß die Systemmatrix von (3.4.8) aufgrund der festen Volumennetzstruktur ihre Besetzungsstruktur und aufgrund ihrer Unabhängigkeit von der Zeit bzw. vom Iterationsindex n auch ihre Besetzung mit Werten nicht ändert. Sie muß also nur einmal zu Beginn des Verfahrens alloziert und besetzt werden. Entsprechendes gilt für die ILU-Präkonditionierung. Als Literatur zu iterativen Gleichungslösern, Krylov-Unterraum-Verfahren, speziell BICGSTAB-Verfahren sowie zu Präkonditionierungstechniken können [50], [57], [68], [27] und [8] empfohlen werden.

3.4.4 Das Finite-Volumen-Schema

Das gesamte Finite-Volumen-Verfahren kann nun in dem folgenden Schema übersichtlich zusammengefaßt werden:

1. Initialisierung des ersten Startwertvektors u^0 gemäß (3.4.2):

$$u^0 := \begin{pmatrix} u_0(x^1) \\ \vdots \\ u_0(x^N) \end{pmatrix}$$

2. Berechnung des zweiten Startwertvektors u^1 durch Lösung des LGS (3.4.7) mit anschließendem update:

$$\left(e^i - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{|\sigma_i|} D^i \right)^T \Delta u^0 = \frac{\Delta t}{|\sigma_i|} \left(D^{iT} u^0 + d_i + L_i^{TW,0} + L_i^{Q,0} \right), \quad i \in \{1, \dots, N\},$$

$$u^1 := u^0 + \Delta u^0.$$

3. Berechnung des dritten Startwertvektors u^2 durch Lösung des LGS (3.4.7) mit anschließendem update:

$$\left(e^i - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{|\sigma_i|} D^i \right)^T \Delta u^1 = \frac{\Delta t}{|\sigma_i|} \left(D^{iT} u^1 + d_i + L_i^{TW,1} + L_i^{Q,1} \right), \quad i \in \{1, \dots, N\},$$

$$u^2 := u^1 + \Delta u^1.$$

4. Für ein $n \geq 0$ Durchführung eines Zeitschrittes durch Lösung des LGS (3.4.8) mit anschließendem update:

$$\left(\frac{11}{6} e^i - \frac{\Delta t}{|\sigma_i|} D^i \right)^T \Delta u^{n+2} = \left(\frac{7}{6} e^i + \frac{\Delta t}{|\sigma_i|} D^i \right)^T u^{n+2} - \frac{3}{2} e^{iT} u^{n+1} + \frac{1}{3} e^{iT} u^n + r_i^n,$$

$$i \in \{1, \dots, N\},$$

$$u^{n+3} := u^{n+2} + \Delta u^{n+2}.$$

5. Falls das Abbruchkriterium

$$n \geq n_{max} - 3$$

erfüllt ist, Verfahrensstop, sonst weiter mit 4..

Die konkrete Wahl der Zeitschrittweite $\Delta t > 0$ und des Parameters $n_{max} \in \mathbb{N}$ für das Abbruchkriterium wird später getroffen.

4 Simulationsrechnungen

In diesem Kapitel wird das entwickelte Finite-Volumen-Verfahren anhand ausgewählter Beispiele getestet. Bevor es allerdings auf die Thermoregulation angewandt wird, wird es am Beispiel der reinen Wärmeleitungsgleichung mit der Fundamentallösung als bekannter, exakter Lösung auf der einfachen Geometrie eines Würfels im \mathbb{R}^3 getestet. Dies auch deswegen, um die korrekte Implementierung zu überprüfen. In einem vorbereitenden Abschnitt wird kurz auf die für beide Testfälle relevante Netzgenerierung eingegangen.

4.1 Netzgenerierung

Die rechnergestützte Realisierung eines jeden Finite-Volumen-Verfahrens erfordert eine Zerlegung des zugrundeliegenden Rechengebietes in Teilgebiete einfacher, geometrischer Gestalt, speziell in Kontrollvolumina (vgl. Abschnitt 3.3.1), d. h. die Erzeugung eines Volumennetzes bzw. 3D-Gitters. Volumennetze zerfallen in die Klasse der körperangepaßten Netze und die Klasse der nicht-körperangepaßten Netze. Erstere enthält diejenigen Netze, bei denen die Oberflächen- und Randschichtendiskretisierung ein Teil des Netzes ist. Letztere enthält dagegen diejenigen Netze, bei denen die Oberflächen- und Randschichtendiskretisierung ein eigenständiges, zweites Netz bildet, welches durch Überdeckung des Rechengebietes mit einem ersten Netz und anschließendem „Abschneiden“ von Zellen, die z. T. im Außenraum liegen, entsteht (vgl. [13]). Die Klasse der körperangepaßten Netze besteht wiederum aus den strukturierten, den unstrukturierten sowie den hybriden Netzen. Strukturierte Netze bestehen meist aus Quadern und haben den Vorteil der einfachen Programmierbarkeit, da bei ihnen abgesehen vom Rand regelmäßige Nachbarschaftsbeziehungen zwischen den Gitterpunkten bestehen. Hinzu kommt eine effiziente Lösbarkeit des entstehenden Gleichungssystems. Unstrukturierte Netze bestehen typischerweise aus Tetraedern oder Hexaedern. Bei ihnen bestehen keine regelmäßigen Nachbarschaftsbeziehungen zwischen den Gitterpunkten, dafür besitzen sie aber die Vorteile, daß unterschiedliche Elementtypen miteinander kombiniert werden können, daß Rechengebiete mit komplizierter Geometrie relativ leicht diskretisiert werden können und daß lokale Gitterverfeinerungen vorgenommen werden können, falls die numerische Lösung dies erfordert. Die hybriden Netze bestehen meist aus zwei verschiedenen Teilnetzen, einem quasi-prismatischen Netz für die randnahen Schichten und einem unstrukturierten oder kartesischen Netz für das Innere des Rechengebietes. Schließlich besteht die Klasse der nicht-körperangepaßten Netze nur aus kartesischen Netzen mit den bereits erwähnten Schnitzzellen in den Randschichten.

In dieser Arbeit wird für die räumliche Diskretisierung ein hybrid-kartesisches Netz verwendet. Die Erzeugung eines solchen läuft grob gesprochen in drei Schritten ab:

1. Zunächst wird die Oberfläche des Rechengebietes mit einer Oberflächentriangulierung versehen, vgl. Abb. 22 auf S. 89 und Abb. 23 auf S. 89. Im Anhang A ist die technische Bereitstellung einer solchen beschrieben.
2. Die Oberflächentriangulierung dient als Eingabe für das Programmpaket CARTFLOW, welches in der Arbeit [13] zur Lösung von strömungsmechanischen Problemen entwickelt wurde. Dieses enthält u.a. einen Volumennetzgenerator, der zunächst ein quasi-prismatisches Netz erzeugt, indem er die Oberflächentriangulierung in Normalenrichtung ins Innere des Rechengebietes verschiebt, vgl. Abb. 24 auf S. 90 und Abb. 25 auf S. 90.
3. Als letztes wird für den inneren Kern des Rechengebietes ein sich an das quasi-prismatische Netz anschließendes, kartesisches Netz erzeugt, vgl. wieder Abb. 24 auf S. 90 und Abb. 25 auf S. 90.

Alle drei Netze zusammen bilden dann das gesamte Volumennetz, dessen Dimensionen in Tabelle 2 aufgelistet sind. Seine Erzeugung fällt von der Vorgehensweise her in die Klasse der sogenannten „advancing front methods“, bei denen das Rechengebiet ausgehend von einer Startfront, hier der Oberflächentriangulierung, sukzessive reduziert wird (vgl. [37], [51]).

	Würfel	Säugling
Anzahl der Oberflächendreiecke	4800	5262
Anzahl der Zellen	87847	101930

Tabelle 2: Netzparameter

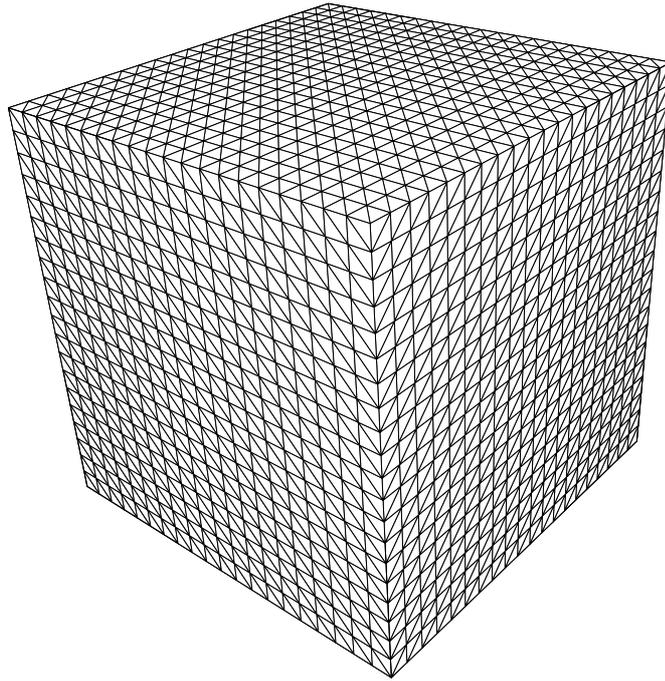


Abbildung 22: Oberflächentriangulierung für das Rechengebiet Würfel

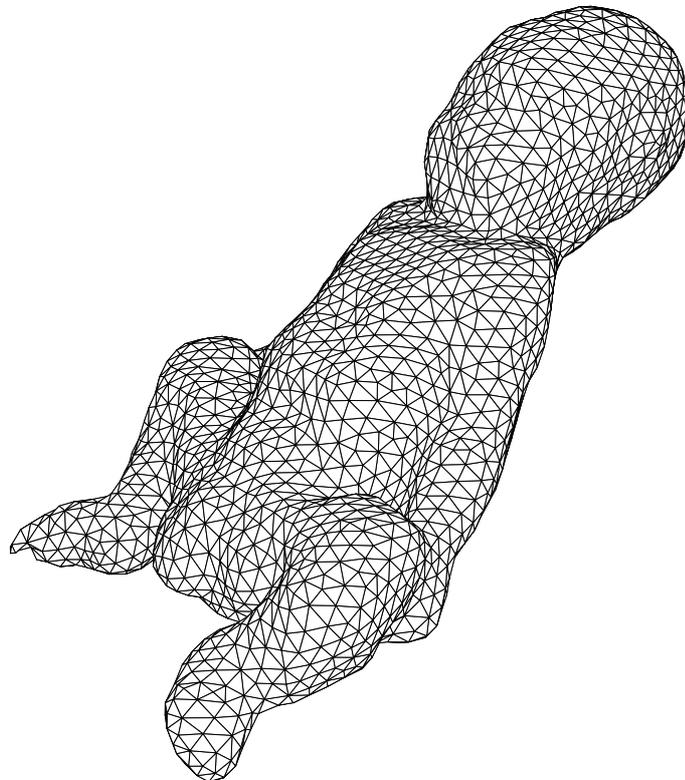


Abbildung 23: Oberflächentriangulierung für das Rechengebiet Säugling

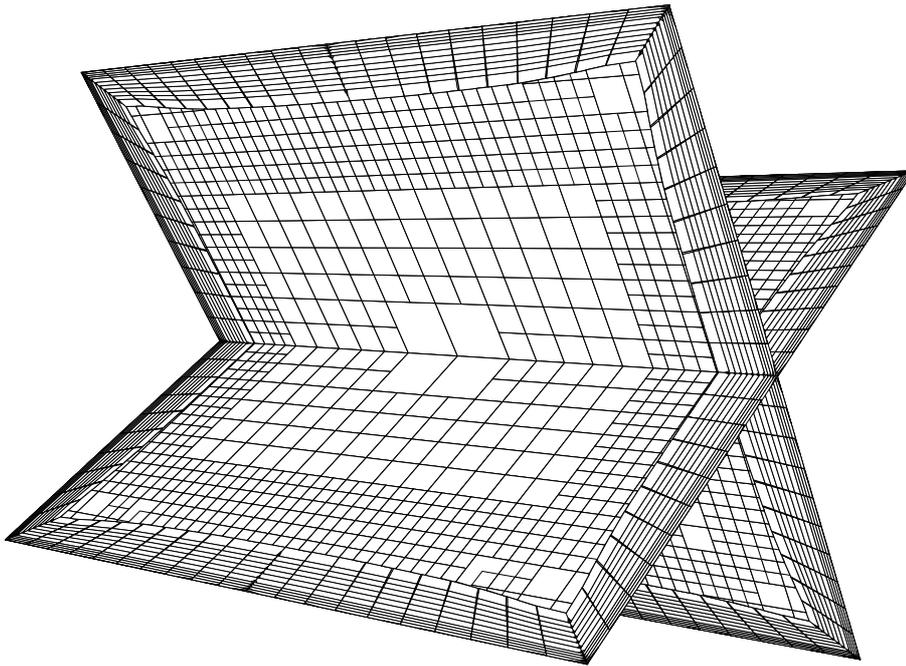


Abbildung 24: Schnitte durch das Volumennetz des Würfels

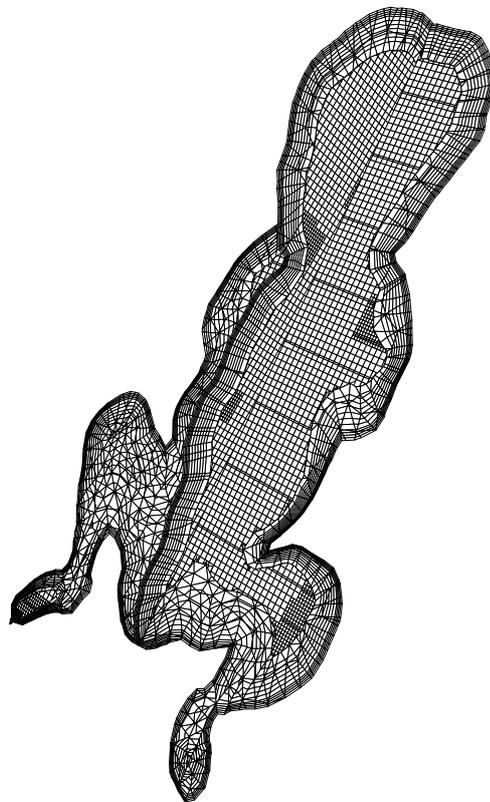


Abbildung 25: Sagittal- und Coronal-Schnitt durch das Volumennetz des Säuglings

4.2 Die Fundamentallösung der Wärmeleitungsgleichung als numerisches Testbeispiel

Als erster Testfall für das entwickelte Finite-Volumen-Verfahren soll die Fundamentallösung der Wärmeleitungsgleichung auf einem Würfel im \mathbb{R}^3 dienen. In dem folgenden Abschnitt wird das entsprechende Anfangsrandwertproblem formuliert und das Finite-Volumen-Verfahren in einer kurzen Zusammenfassung an dieses angepaßt. Im darauf folgenden Abschnitt werden dann numerische Tests durchgeführt.

4.2.1 Anfangsrandwertproblem und Finite-Volumen-Verfahren

Zur Aufstellung des Anfangsrandwertproblems seien ein Startzeitpunkt $t_0 \in \mathbb{R}_+^*$ und konstante Funktionen $\lambda(x) = \hat{\lambda}$, $c(x) = \hat{c}$, $\rho(x) = \hat{\rho}$, $x \in \mathbb{R}^3$, gegeben, wobei $\hat{\lambda}, \hat{c}, \hat{\rho} \in \mathbb{R}$ mit $\hat{\lambda} = \hat{c}\hat{\rho}$ seien. Außerdem sei wieder $\kappa(x) := c(x)\rho(x)$ für $x \in \mathbb{R}^3$. Mit $a \in \mathbb{R}_+^*$ werde die halbe Kantenlänge des Würfels $D =]-a, a[^3 \subset \mathbb{R}^3$ und mit $n : \partial_r D \rightarrow \mathbb{R}^3$ das äußere Einheitsnormalenfeld auf seinem regulären Rand bezeichnet. Durch

$$T_0 : D \rightarrow \mathbb{R}$$

$$T_0(x) := \frac{1}{\sqrt{t_0^3}} e^{-\frac{\|x\|_2^2}{4t_0}}$$

werde die exakte Startverteilung und durch

$$\varphi : \partial_r D \times]t_0, \infty[\rightarrow \mathbb{R}$$

$$\varphi(x, t) := \frac{1}{2} \frac{\lambda(x)}{\sqrt{t^3}} e^{-\frac{\|x\|_2^2}{4t}} x^T n(x)$$

die Neumann-Randwerte beschrieben. Mit der Definition

$$J : \overline{D} \times]t_0, \infty[\rightarrow \mathbb{R}^3$$

$$J(x, t) := -\lambda(x) \cdot \nabla T(x, t)$$

lautet das numerisch zu lösende Anfangsrandwertproblem

$$\kappa(x) \frac{\partial T}{\partial t}(x, t) = \operatorname{div}(-J)(x, t), \quad (x, t) \in D \times]t_0, \infty[,$$

$$T(x, t_0) = T_0(x), \quad x \in D,$$

$$\langle J(x, t), n(x) \rangle = \varphi(x, t), \quad (x, t) \in \partial_r D \times]t_0, \infty[.$$

mit der exakten Lösung

$$T : \mathbb{R}^3 \times [t_0, \infty[\rightarrow \mathbb{R}$$

$$T(x, t) := \frac{1}{\sqrt{t^3}} e^{-\frac{\|x\|_2^2}{4t}}$$

(vgl. Abb. 26 auf S. 92). Für festes $t \geq t_0$ besitzt T ein globales Maximum bei $x = 0$ und fällt monoton und rotationssymmetrisch zum Rand von D hin ab. Für jedes feste $x \in \mathbb{R}^3$ gilt offensichtlich

$$\lim_{t \rightarrow \infty} T(x, t) = 0,$$

T besitzt also das Nullniveau als stationären Endzustand.

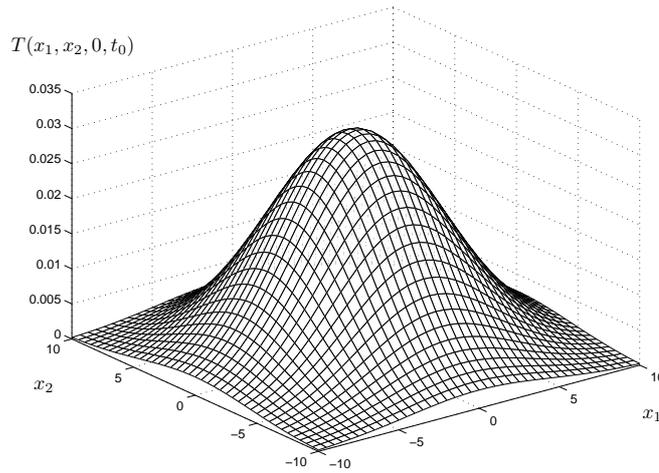


Abbildung 26: 2D-Schnitt der Fundamentallösung T für $t_0 = 10.0s$

Völlig analog zu Abschnitt 3.2 lautet mit den Transformationen

$$u : \mathbb{R}^3 \times [t_0, \infty[\rightarrow \mathbb{R}$$

$$u(x, t) := \kappa(x)T(x, t),$$

$$v : \mathbb{R}^3 \times]t_0, \infty[\rightarrow \mathbb{R}^3$$

$$v(x, t) := \frac{\lambda(x)}{\kappa(x)} \nabla u(x, t) - \frac{\lambda(x)u(x, t)}{\kappa^2(x)} \nabla \kappa(x),$$

und

$$u_0 : D \rightarrow \mathbb{R}$$

$$u_0(x) := \kappa(x)T_0(x)$$

das transformierte Anfangsrandwertproblem

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = \operatorname{div} v(x, t), \quad (x, t) \in D \times]t_0, \infty[,$$

$$u(x, t_0) = u_0(x), \quad x \in D,$$

$$\langle v(x, t), n(x) \rangle = -\varphi(x, t), \quad (x, t) \in \partial_r D \times]t_0, \infty[.$$

Die Entwicklung des Finite-Volumen-Verfahrens verläuft ebenfalls völlig analog zu Kapitel 3. Die einzigen Unterschiede bestehen darin, daß der Startzeitpunkt jetzt t_0 statt 0 ist, daß keine Quellterme vorhanden sind und daß die Anfangs- und Randbedingungsfunktionen T_0 und φ anders definiert sind. Daher werden im folgenden nur die wichtigsten Entwicklungsschritte aufgelistet. Die Evolutionsgleichung (3.2.6) der Zellmittelwerte hat nun folgende, verkürzte Gestalt:

$$\frac{du_\sigma}{dt}(t) = \frac{1}{|\sigma|} \int_{\partial\sigma} \langle v(x, t), n^\sigma(x) \rangle dS(x), \quad t \in]t_0, \infty[.$$

Bei Durchführung der räumlichen Diskretisierung lautet sie mit entsprechend definierten Funktionen

$$\mathcal{L}_i^{IFL}(t) := \sum_{j=1}^{N(i)} \int_{f_{ij}} \langle v(x, t), n^i(x) \rangle dS(x) = \sum_{j=1}^{N(i)} \int_{f_{ij}} \langle v(x, t), n^{ij} \rangle dS(x),$$

$$t \in]t_0, \infty[, i \in \{1, \dots, N\}$$

und

$$\mathcal{L}_i^{RFL}(t) := \sum_{j=1}^{\overline{N}(i)} \int_{\overline{F}_{ij}} \langle v(x, t), n^i(x) \rangle dS(x), \quad t \in]t_0, \infty[, i \in \{1, \dots, N\}$$

zunächst

$$\frac{du_i}{dt}(t) = \frac{1}{|\sigma_i|} (\mathcal{L}_i^{IFL}(t) + \mathcal{L}_i^{RFL}(t)), \quad t \in]t_0, \infty[, i \in \{1, \dots, N\},$$

(vgl. (3.3.1) und (3.3.2)). Dabei ergibt sich für die Funktion \mathcal{L}_i^{RFL} unter Verwendung der transformierten Neumann-Randbedingung wieder

$$\mathcal{L}_i^{RFL}(t) = - \sum_{j=1}^{\overline{N}(i)} \int_{\overline{F}_{ij}} \varphi(x, t) dS(x), \quad t \in]t_0, \infty[, i \in \{1, \dots, N\}.$$

Durch die Diskretisierung der inneren Flüsse gemäß Abschnitt 3.3.2 gelangt man wieder zu

$$L_i^{IFL}(t) := \sum_{j=1}^{N(i)} H_{ij}(t), \quad t \in]t_0, \infty[, i \in \{1, \dots, N\}, \quad (4.2.1)$$

mit entsprechenden Flußfunktionen H_{ij} (vgl. (3.3.9)). Mit der jetzt exakt auswertbaren Funktion

$$L_i^{RFL}(t) := - \sum_{j=1}^{\overline{N}(i)} \varphi(\overline{z}^{ij}, t) |\overline{f}_{ij}|, \quad t \in]t_0, \infty[, i \in \{1, \dots, N\},$$

(vgl. (3.3.14)), erhält man als Gesamtergebnis der räumlichen Diskretisierung

$$\frac{du_i}{dt}(t) \approx \frac{1}{|\sigma_i|} (L_i^{IFL}(t) + L_i^{RFL}(t)), \quad t \in]t_0, \infty[, i \in \{1, \dots, N\},$$

(vgl. (3.3.19)). Die Vorbereitung der inneren Flüsse für die Zeitintegration gemäß Abschnitt 3.3.5.1 führt wieder auf die lineare Darstellung

$$L_i^{IFL}(t) = D^{IFL, i^T} u(t), \quad t \in]t_0, \infty[, i \in \{1, \dots, N\},$$

wobei der Spaltenvektor $u(t)$ die Zellmittelwerte enthält (vgl. (3.3.20)). Mit der Abkürzung

$$D^i := D^{IFL, i} \in \mathbb{R}^N, \quad i \in \{1, \dots, N\},$$

erhält man als Ausgangspunkt für die Zeitintegration wieder

$$\frac{du_i}{dt}(t) \approx \frac{1}{|\sigma_i|} \left(D^{iT} u(t) + L_i^{RFL}(t) \right), \quad t \in]t_0, \infty[, i \in \{1, \dots, N\}, \quad (4.2.2)$$

(vgl. (3.4.1)). Die anschließende Einführung der zeitdiskreten Bezeichner gemäß Abschnitt 3.4.1 bleibt ungeändert mit der einzigen Ausnahme

$$t_n := t_0 + n\Delta t, n \in \mathbb{N}.$$

Angewandt auf (4.2.2) lautet das BDF(3)-Verfahren zunächst

$$\frac{11}{6} u_i^{n+3} - 3u_i^{n+2} + \frac{3}{2} u_i^{n+1} - \frac{1}{3} u_i^n = \Delta t \frac{1}{|\sigma_i|} \left(D^{iT} u^{n+3} + L_i^{RFL}(t_{n+3}) \right), \quad n \geq 0, i \in \{1, \dots, N\},$$

(s. [29]). Durch analoge Umformungen wie in Abschnitt 3.4.3 erhält man für $n \geq 0, i \in \{1, \dots, N\}$

$$\left(\frac{11}{6}e^i - \frac{\Delta t}{|\sigma_i|}D^i\right)^T \Delta u^{n+2} = \left(\frac{7}{6}e^i + \frac{\Delta t}{|\sigma_i|}D^i\right)^T u^{n+2} - \frac{3}{2}e^{iT} u^{n+1} + \frac{1}{3}e^{iT} u^n + \frac{\Delta t}{|\sigma_i|}L_i^{RFL}(t_{n+3}), \quad (4.2.3)$$

also wieder für jeden Zeitschritt ein schwachbesetztes, lineares Gleichungssystem der Größe $N \times N$. Die wesentlichen Schritte des konkreten Rechenablaufs sind wieder dem folgenden FVV-Schema zu entnehmen:

1. Initialisierung der ersten drei Startwertvektoren mit den exakten Startwerten:

$$u^n := \begin{pmatrix} \kappa(x^1)T(x^1, t_n) \\ \vdots \\ \kappa(x^N)T(x^N, t_n) \end{pmatrix}, n = 0, 1, 2$$

2. Für ein $n \geq 0$ Durchführung eines Zeitschrittes durch Lösung des LGS (4.2.3) mit anschließendem update:

$$\begin{aligned} \left(\frac{11}{6}e^i - \frac{\Delta t}{|\sigma_i|}D^i\right)^T \Delta u^{n+2} &= \left(\frac{7}{6}e^i + \frac{\Delta t}{|\sigma_i|}D^i\right)^T u^{n+2} - \frac{3}{2}e^{iT} u^{n+1} + \frac{1}{3}e^{iT} u^n \\ &+ \frac{\Delta t}{|\sigma_i|}L_i^{RFL}(t_{n+3}), \quad i \in \{1, \dots, N\}, \end{aligned}$$

$$u^{n+3} := u^{n+2} + \Delta u^{n+2}.$$

3. Falls das Abbruchkriterium

$$n \geq n_{max} - 3$$

erfüllt ist, Verfahrensstop, sonst weiter mit 2..

4.2.2 Numerische Resultate

Um numerische Tests durchführen zu können, wurde das entwickelte Finite-Volumen-Verfahren bzw. seine modifizierte Version aus Abschnitt 4.2.1 in C++ implementiert. Zur Lösung der linearen Gleichungssysteme wurde das BICGSTAB-Verfahren mit ILU-Präkonditionierung aus den Programm-Bibliotheken [45] und [60] verwendet, wobei für das Residuum in jedem Zeitschritt die einheitliche Schranke $\varepsilon = 10^{-10}$ vorgegeben wurde. Ein Volumennetz für den Würfel $D =]-a, a[^3$ wurde mit dem Programmpaket CARTFLOW erzeugt (vgl. Abschnitt 4.1). Zusätzlich zur Startzeit t_0 wurde eine Stopzeit $t_E > t_0$ gewählt und dann die Anzahl der Zeitschritte $n_{max} = \frac{t_E - t_0}{\Delta t}$ zu gegebener Zeitschrittweite $\Delta t > 0$ festgelegt. Die Eingabeparameter sind in Tabelle 3 zusammengefaßt.

t_0	t_E	$\hat{\lambda}$	\hat{c}	$\hat{\rho}$	Δt	n_{max}
10.0 s	15.0 s	$5.0 \frac{W}{mK}$	$2.5 \frac{J}{kgK}$	$2.0 \frac{kg}{m^3}$	0.0001 s	50000

Tabelle 3: Eingabeparameter für den Testfall der Fundamentallösung

Zu jedem Zeitpunkt $t_n = t_0 + n\Delta t$ gehört zu dem vom Verfahren gelieferten Vektor $u^n \in \mathbb{R}^N$ der rücktransformierte Temperaturvektor

$$T^n := \left(\frac{u_1^n}{\kappa(x^1)}, \dots, \frac{u_N^n}{\kappa(x^N)} \right)^T \in \mathbb{R}^N, \quad n \in \{0, \dots, n_{max}\}.$$

Zur qualitativen Bewertung des Verfahrens bzw. seiner Implementierung wurden die Zellen des Volumennetzes nach ihrer Temperatur T_i^n gemäß einer Farb-Temperatur-Skala eingefärbt. Die Abbildungen 27 bis 32 auf S. 96 zeigen horizontale Schnitte durch die Mitte des Würfels D an aufeinanderfolgenden Zeitpunkten von t_0 bis t_E . Wie sowohl aus physikalischer als auch aus analytischer Hinsicht zu erwarten, wird das Temperaturmaximum in der Mitte des Würfels abgebaut, die Wärme fließt in alle Richtungen gleichmäßig aus dem Würfel heraus und die ganze Temperaturverteilung beginnt, sich dem stationären Endzustand $T \equiv 0$ zu nähern. Das entwickelte Finite-Volumen-Verfahren arbeitet daher für die Fundamentallösung zumindest qualitativ korrekt.

Zur quantitativen Bewertung des Verfahrens bzw. seiner Implementierung wurde der numerisch errechnete Temperaturverlauf an einem festen Punkt x^{i_0} mit dem zugehörigen exakten Temperaturverlauf verglichen. Dazu wurde eine Zelle σ_{i_0} gewählt, die dem Ursprung des \mathbb{R}^3 , d. h. dem Mittelpunkt des Würfels am nächsten liegt, also $\|x^{i_0}\|_2 \leq \|x^i\|_2 \forall i \in \{1, \dots, N\}$, um die Entwicklung des Temperaturmaximums zu beobachten. Der zeitliche Verlauf der exakten Lösung am Punkt x^{i_0} ist gegeben durch

$$T_{i_0}(t) := T(x^{i_0}, t), \quad t \geq t_0.$$

Die Abbildung 34 auf S. 97 zeigt den Verlauf von T_{i_0} an den diskreten Zeitpunkten t_n im Vergleich zu den Näherungswerten $T_{i_0}^n, n \in \{0, \dots, n_{max}\}$, und die Abbildung 35 auf S. 97 die zugehörige Kurve des absoluten Fehlers, d. h. den Graphen von

$$d_{i_0}(n) := |T_{i_0}^n - T_{i_0}(t_n)|, \quad n \in \{0, \dots, n_{max}\}.$$

Das Verfahren liefert also Näherungswerte $T_{i_0}^n$ für $T_{i_0}(t_n)$ mit einem absoluten Fehler, der geringer als $1.4 \cdot 10^{-5}$ ist.

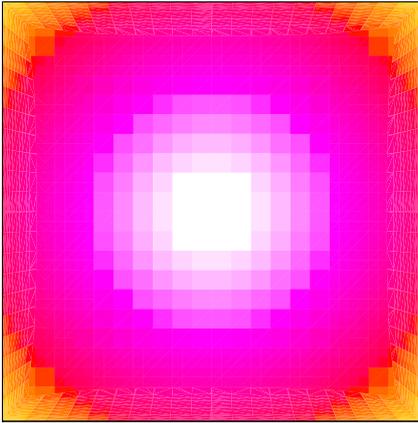
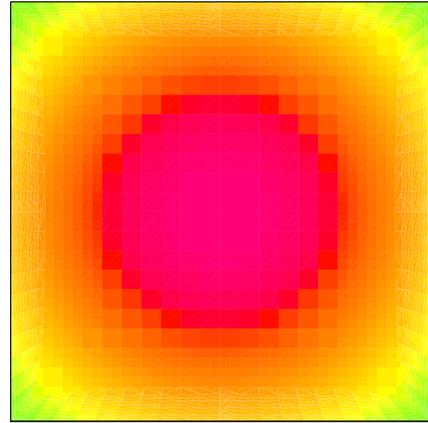
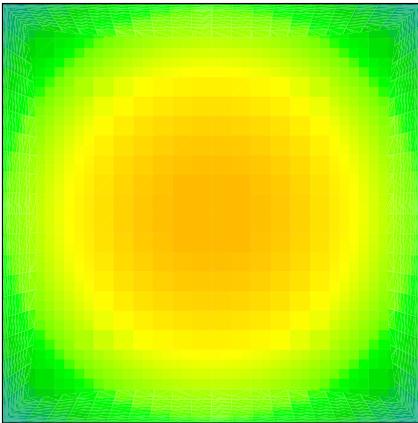
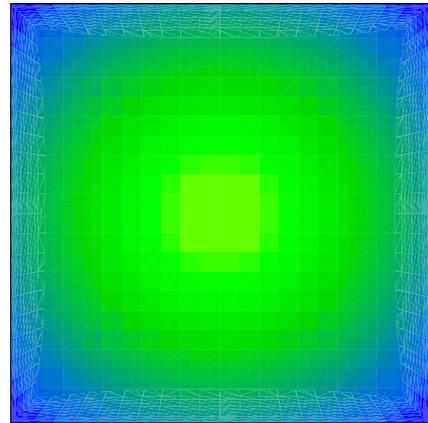
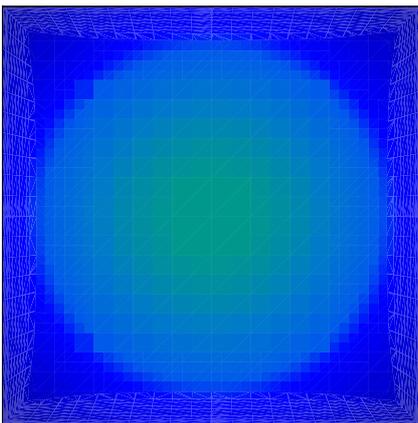
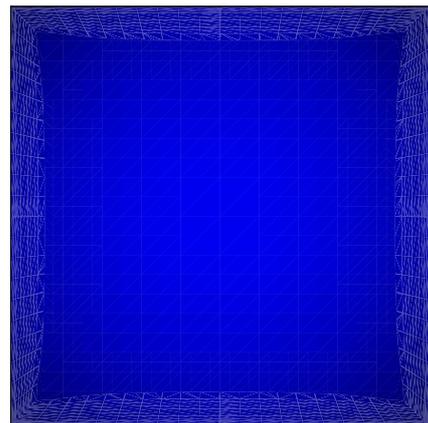
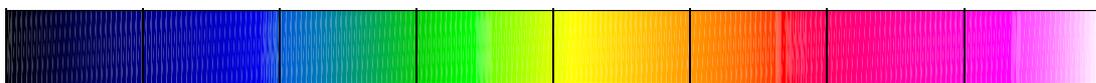
Zur quantitativen Bewertung des Verfahrens bzw. seiner Implementierung wurden außerdem der absolute Gesamtfehler

$$d := \max \{ |T_{i_0}^n - T(x^i, t_n)|, i \in \{1, \dots, N\}, n \in \{0, \dots, n_{max}\} \}$$

über Ort und Zeit sowie der maximale relative Fehler

$$r := \max \left\{ \frac{|T_{i_0}^n - T(x^i, t_n)|}{T(x^i, t_n)}, i \in \{1, \dots, N\}, n \in \{0, \dots, n_{max}\} \right\}$$

über Ort und Zeit ermittelt. Ihre Werte sind $d = 0.000863279$ und $r = 0.0446352 \approx 4.5\%$. Auch sie belegen die hohe Genauigkeit des Verfahrens für den gewählten Simulationszeitbereich. Insgesamt kann dieses also als validiert angesehen und auf das Problem der Thermoregulation angewandt werden.

Abbildung 27: $t = 10.0$ sAbbildung 28: $t = 11.0$ sAbbildung 29: $t = 12.0$ sAbbildung 30: $t = 13.0$ sAbbildung 31: $t = 14.0$ sAbbildung 32: $t = 15.0$ s

0.0131788

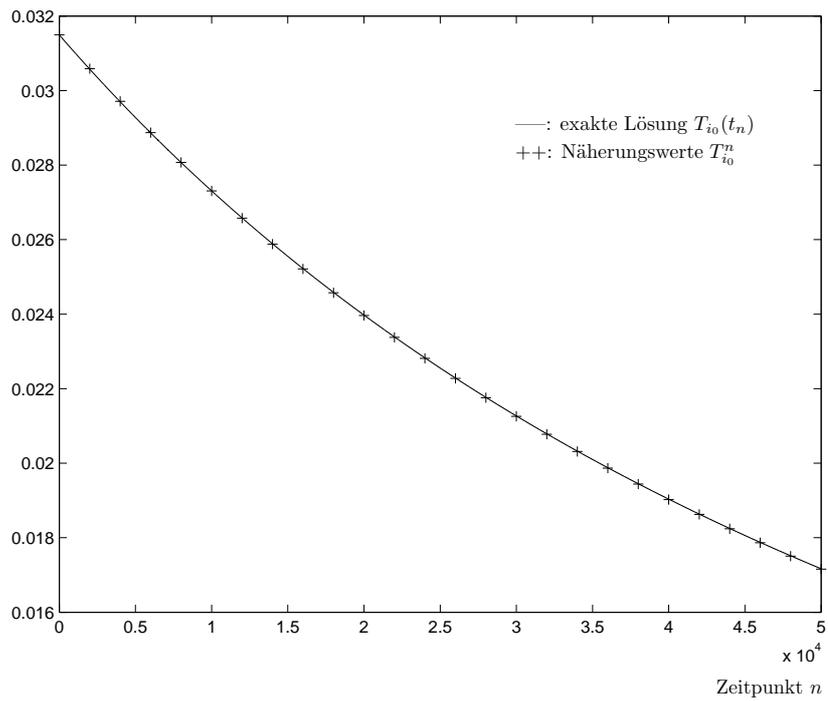
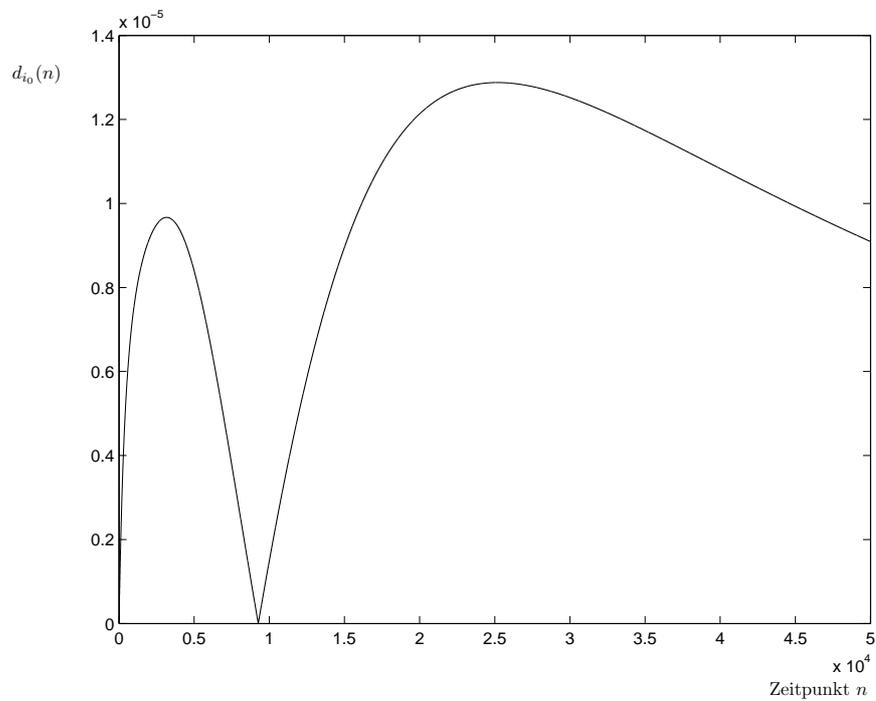
0.0177578

0.0223367

0.0269157

0.0314946

Abbildung 33: Temperaturskala in [K]

Abbildung 34: Exakte und approximierende Werte in der Zelle σ_{i_0} Abbildung 35: Verlauf des absoluten Fehlers in der Zelle σ_{i_0}

4.3 Die Thermoregulation des Frühgeborenen als numerisches Testbeispiel

In diesem Abschnitt wird nun das entwickelte Finite-Volumen-Verfahren auf die eigentliche Problemstellung dieser Arbeit angewandt. Dazu werden zunächst die Eingangsdaten aufgelistet und dann die Ergebnisse von numerischen Testrechnungen präsentiert.

4.3.1 Physikalische und physiologische Eingangsdaten

1. Die Geometrie und der Aufbau des 3-D-Modells eines Frühgeborenen wurden schon in Abschnitt 1.2 beschrieben. Die numerischen Testläufe wurden gemäß dem FVV-Schema aus Abschnitt 3.4.4 für einen Säugling mit den in Tabelle 4 gegebenen, grundlegenden Modellparametern durchgeführt. Für diesen so spezifizierten Säugling wurde ein Volumennetz mit dem Programmpaket CARTFLOW erzeugt (vgl. Abschnitt 4.1).

Gewicht g	1.240
Gestationsalter ga	32
Lebensalter tag	3

Tabelle 4: Grundlegende Modellparameter in kg, Wochen bzw. Tagen

2. Die Schichtdicken der verschiedenen Gewebe sind in der Tabelle 5 angegeben und wurden mit statistischen Formeln ermittelt (vgl. [9]). Da diese extrem kleine Werte für die Fettschicht lieferten, wurde deren Dicke aufgrund der gegebenen Feinheit des Volumennetzes auf 0.001 m festgelegt.

	Kopf	Rumpf	Peripherie
Haut	0.001	0.001	0.001
Fett	0.001	0.001	0.001
Knochen	0.005	-	-

Tabelle 5: Schichtdicken in [m]

3. Die Wärmeleitfähigkeiten, spezifischen Wärmekapazitäten und Dichten der beteiligten Gewebe sind der Tabelle 6 zu entnehmen (vgl. [16], [61]).

	λ	c	ρ
Haut	0.35	3770.0	1030.0
Fett	0.21	2500.0	1030.0
Knochen	0.40	2170.0	1030.0
Kern	0.51	3770.0	1030.0

Tabelle 6: Materialeigenschaften in $[\frac{W}{mK}]$, $[\frac{J}{kgK}]$, $[\frac{kg}{m^3}]$

An den Übergängen zwischen verschiedenen Gewebetypen wurden stets Mittelwerte gebildet.

4. Die Gewichtungsfaktoren $w(x)$ zur Berechnung der afferenten Temperatur (1.2.2) sind durch Tabelle 7 auf S. 99 segment- und gewebeabhängig festgelegt (vgl. [71]).
5. Die Modellparameter zur Festlegung der „cold-response“ (1.2.4) der Wärmeproduktion haben die in Tabelle 8 auf S. 99 angegebenen Werte (vgl. [9]).

	Kopf	Rumpf	Peripherie
Haut	0.02	0.04	0.04
Fett	0.0	0.0	0.0
Knochen	0.0	0.0	0.0
Kern	0.54	0.36	0.0

Tabelle 7: Gewichtungsfaktoren für afferente Temperatur

$maxmet$	1.0
ΔT_{maxmet}	-1.0 K

Tabelle 8: „cold-response“ der Wärmeproduktion

6. Die für die Blutflußfunktion (1.2.7) benötigte, unregelte Durchblutung der Gewebeschichten in den einzelnen Segmenten ist durch Tabelle 9 gegeben (vgl. [9]).

	Kopf	Rumpf	Peripherie
Haut	$1.25 \cdot 10^{-3}$	$1.25 \cdot 10^{-3}$	$1.25 \cdot 10^{-3}$
Fett	0.0	0.0	0.0
Knochen	0.0	0.0	0.0
Kern	$3.30 \cdot 10^{-3}$	$7.00 \cdot 10^{-3}$	$1.25 \cdot 10^{-3}$

Tabelle 9: Ungeregelter Blutfluß in $[\frac{m^3}{m^3s}]$

7. Die Modellparameter zur Festlegung der „cold-response“ (1.2.6) der Vasomotorik haben die Werte aus Tabelle 10 (vgl. [9]).

ΔT_{minBF}	-0.3 K
ΔT_{maxBF}	0.3 K
$minBF$	-1.0
$maxBF$	10.0

Tabelle 10: „cold-response“ der Vasomotorik

8. Die Werte für die Dichte und die spezifische Wärmekapazität des Blutes sind

$$\rho_{BL} = 1060 \frac{kg}{m^3}, \quad c_{BL} = 3840 \frac{J}{kgK},$$

(s. [16]).

9. Die Wärmeübergangskoeffizienten für die Radiation (1.2.14) sind segmentabhängig durch Tabelle 11 gegeben (vgl. [9]).

	Kopf	Rumpf	Peripherie
$h^r(x)$	5.0	4.0	4.0

Tabelle 11: Koeffizienten des radiativen Wärmeübergangs in $[\frac{W}{m^2K}]$

	T_{Luft}	rH	T_{Umg}	T_{MRT}	S_{MRT}	FL	k_{mat}	T_{mat}
RBD1	309.25 K	77.0	293.15 K	297.6 K	$0.0 \frac{W}{m^2}$	$5.0 \frac{cm}{s}$	$0.05 \frac{W}{m^2 K}$	309.25 K
RBD2a	293.15 K	50.0	293.15 K	293.15 K	$160.0 \frac{W}{m^2}$	$30.0 \frac{cm}{s}$	$0.05 \frac{W}{m^2 K}$	310.15 K
RBD2b	293.15 K	50.0	293.15 K	293.15 K	$140.0 \frac{W}{m^2}$	$30.0 \frac{cm}{s}$	$14.0 \frac{W}{m^2 K}$	312.15 K

Tabelle 12: Randbedingungs-Sätze

10. Die numerischen Testläufe wurden mit den in Tabelle 12 aufgeführten Randbedingungssätzen durchgeführt (vgl. Modellgleichungen (1.2.10) bis (1.2.16) in Abschnitt 1.2).

Der Randbedingungssatz RBD1 stellt den Standardfall dar, d. h. der Inkubator steht in einem Raum einer gewissen Temperatur T_{Umg} und die Geschwindigkeit FL der in ihn einströmenden Luft (und damit der konvektive Wärmeübergangskoeffizient c_{FL}) sind vorgegeben. Der Säugling liegt im Inkubator auf einer Isoliermatratze mit gegebenem Wärmeübergangskoeffizienten k_{mat} . Die Lufttemperatur T_{Luft} und die relative Luftfeuchte rH des Inkubators wurden dann mit dem Optimierungsprogramm [47] berechnet und dann $T_{mat} = T_{Luft}$ gewählt. Die Strahlungstemperatur T_{MRT} des Inkubators wurde durch seine Innenwandtemperatur T_{ic} festgelegt und die Strahlungsleistungsdichte S_{MRT} auf 0.0 gesetzt, da der Randbedingungssatz RBD1 nur für den Inkubatorfall verwendet wird.

Der Randbedingungssatz RBD2a beschreibt nicht den Inkubatorfall, sondern den Fall der offenen Pflege, d. h. die Pflegeeinheit steht in einem Raum einer gewissen Temperatur $T_{Umg} = T_{Luft}$ und die Geschwindigkeit FL der durch diesen Raum strömenden Luft (und damit der konvektive Wärmeübergangskoeffizient c_{FL}) sind vorgegeben. Es wurde von einem klimatisierten Raum mit einer Luftfeuchtigkeit von 50 % ausgegangen. Die Strahlungstemperatur T_{MRT} ist mit den Wandtemperaturen gegeben, welche identisch sind mit der Lufttemperatur, also $T_{MRT} = T_{Luft} = T_{Umg}$. Die Strahlungsleistungsdichte S_{MRT} wurde mit dem Simulationsprogramm [48] vorab geschätzt und dann im numerischen Experiment angepaßt. Der Säugling liegt auf einer Isoliermatratze mit gegebenem Wärmeübergangskoeffizienten k_{mat} und gegebener Matratzentemperatur T_{mat} .

Der Randbedingungssatz RBD2b unterscheidet sich von RBD2a nur durch die Verwendung einer Heizmatratze statt einer Isoliermatratze. Dementsprechend ist eine geringere Strahlungsleistungsdichte S_{MRT} notwendig.

4.3.2 Numerische Resultate

Insgesamt wurden 6 Testläufe durchgeführt. Ihre wesentlichen Merkmale sind zur besseren Übersicht in Tabelle 13 auf S. 101 zusammengefasst. Die Fälle TEST1a bis TEST1d beziehen sich auf den Säugling im Inkubator, während die Fälle TEST2a und TEST2b die offene Pflege beschreiben. Dabei bedeutet 0 bzw. 1 bei den Quelltermen, daß der jeweilige Testfall ohne bzw. mit Quellterm gerechnet wurde. Die Fälle TEST1a bis TEST1d unterscheiden sich also nur in der Beteiligung der drei Quellterme mit dem Ziel, deren Effekte nacheinander besser herausstellen zu können. Der Fall TEST1a beschreibt quasi einen „nicht-lebenden“ Block aus verschiedenen Materialien, an dem die Simulation der reinen Wärmeleitung getestet wurde. Beim Fall TEST1b wurde der Quellterm der Wärmeproduktion, beim Fall TEST1c dann der Quellterm des Blutflusses und schließlich beim Fall TEST1d der Quellterm der respiratorischen Wasserverluste hinzugeschaltet.

Testfall	RBD-Satz	t_0	t_E	Δt	n_{max}	Wärme- produktion	Blut- fluß	Respiratorische Wasserverluste
TEST1a	RBD1	0.0 s	3600 s	1.0 s	3600	0	0	0
TEST1b	RBD1	0.0 s	3600 s	0.1 s	36000	1	0	0
TEST1c	RBD1	0.0 s	3600 s	0.1 s	36000	1	1	0
TEST1d	RBD1	0.0 s	5400 s	0.1 s	54000	1	1	1
TEST2a	RBD2a	0.0 s	2700 s	0.1 s	27000	1	1	1
TEST2b	RBD2b	0.0 s	2700 s	0.1 s	27000	1	1	1

Tabelle 13: Testfälle für Thermoregulation

Bemerkungen über den Ablauf der Testrechnungen:

1. Als Startverteilung für die Fälle TEST1a und TEST1b wurde die konstante Temperaturverteilung $T_0(x) = 310.15K = 37^\circ C$ gewählt (vgl. (1.2.18)). Die Fälle TEST1c und TEST1d erhielten jeweils die Temperaturverteilung ihres Vorgängers nach $t = 60$ min.. Die Fälle TEST2a und TEST2b wurden jeweils mit der Temperaturverteilung vom Fall TEST1d nach $t = 90$ min. gestartet.
2. Die für jeden Testfall maximal mögliche Zeitschrittweite $\Delta t > 0$ wurde in numerischen Experimenten vorab ermittelt. Insbesondere für die mit aktiven Quelltermen, nur semi-implizit gerechneten Fälle TEST1b bis TEST2b mußte eine Beschränkung von Δt vorgenommen werden. Zu den rücktransformierten Temperaturvektoren

$$T^n := \left(\frac{u_1^n}{\kappa(x^1)}, \dots, \frac{u_N^n}{\kappa(x^N)} \right)^T \in \mathbb{R}^N, \quad n \geq 0,$$

wurden die „update-vektoren“

$$\Delta T^n := T^{n+1} - T^n = \left(\frac{\Delta u_1^n}{\kappa(x^1)}, \dots, \frac{\Delta u_N^n}{\kappa(x^N)} \right)^T \in \mathbb{R}^N, \quad n \geq 0,$$

in Kelvin berechnet. Ihre zeitlichen Entwicklungen sind für jeden Testfall in den Konvergenzverläufen der Abbildungen 43, 51, 63, 68, 76 und 84 dargestellt. Für den Fall TEST1a wurde als Ende der Simulationszeit willkürlich $t_E = 60$ min. gewählt. Für die anderen Testfälle wurde t_E so gewählt, daß Konvergenz in einen numerisch als stationär anzusehenden Zustand vorlag, d. h. $\|\Delta T^n\|_\infty < 5 \cdot 10^{-5} K$ für die Fälle TEST1b, TEST1c, TEST2a und TEST2b sowie $\|\Delta T^n\|_\infty < 5 \cdot 10^{-6} K$ für TEST1d. Mit $n_{max} = \frac{t_E - t_0}{\Delta t} = \frac{t_E}{\Delta t}$ wurde wieder die Anzahl der Zeitschritte bezeichnet.

3. Für das Residuum des iterativen Gleichungslösers BICGSTAB / ILU wurde in jedem Zeitschritt die einheitliche Schranke $\varepsilon = 10^{-10}$ vorgegeben.
4. Alle Simulationen wurden auf einem Rechner mit einem AMD Athlon XP2700+ mit 1 GB Hauptspeicher durchgeführt. In der Tabelle 14 auf S. 102 sind die Rechenzeiten der einzelnen Testfälle bis zum Erreichen der jeweiligen Stopzeit t_E aufgelistet.

Instationäre Temperaturverteilungen:

Auf den Seiten 105 bis 119 sind die zeitlichen Entwicklungen der Temperaturverteilungen farbige dargestellt. Die Serie auf jeder einzelnen Seite zeigt für einen Testfall zu verschiedenen Zeitpunkten seine Temperaturverteilungen in einem Sagittalschnitt sowie seinen Konvergenzverlauf. Zu den Fällen TEST1b und TEST2b sind zusätzlich noch auf der jeweils nachfolgenden Seite Oberflächentemperaturverteilungen sowie zwei Simultanschnitte durch das Volumennetz abgebildet.

Testfall	Rechenzeit in Std. und Min.
TEST1a	23 min
TEST1b	2 h 28 min
TEST1c	2 h 31 min
TEST1d	3 h 46 min
TEST2a	1 h 56 min
TEST2b	1h 54 min

Tabelle 14: Rechenzeiten für Testfälle der Thermoregulation

1. Der Fall TEST1a (S. 105) diente dafür, zu testen, ob das entwickelte Finite-Volumen-Verfahren in der Lage ist, das reine Wärmeleitungsproblem mit unterschiedlichen Materialschichten zu simulieren. Ausgehend von einer konstanten Starttemperaturverteilung strömt die Wärme aus dem Körper über diejenigen Randteile ab, die an Luft anliegen, da der Randbedingungssatz RBD1 für eine Kühlung sorgt (vgl. Tabelle 12 auf S. 100). Klar zu erkennen ist auch die isolierende Wirkung der Matratze: Das Maximum der Temperatur ist stets im unteren Teil des Randes zu finden. Vergleicht man an der Oberseite Kopf- und Rumpfbereich miteinander, so fällt auf, daß die Geschwindigkeit der Wärmeverluste im Kopfbereich größer ist. Dies liegt zum einen daran, daß beim vorliegenden Säugling das Oberfläche-Volumen-Verhältnis im Kopfbereich mehr als doppelt so groß ist wie im Rumpfbereich, konkret $\frac{O_{Kopf.Luft}}{|D_{Kopf}|} = 2.1 \cdot \frac{O_{Rumpf.Luft}}{|D_{Rumpf}|}$. Zum anderen überwiegt hier der Effekt der geringeren Knochenwärmekapazität im Vergleich zur Kernwärmekapazität ($c_{Knochen} \approx 58\% c_{Kern}$) den entgegengesetzt gerichteten Effekt der geringeren Knochenwärmeleitfähigkeit im Vergleich zur Kernwärmeleitfähigkeit ($\lambda_{Knochen} \approx 78\% \lambda_{Kern}$; vgl. auch Testergebnisse in [72]). Numerische Tests haben außerdem ergeben, daß die lange Dauer zum Auskühlen des gesamten Körpers - auch nach $t_E = 60$ min. ist dieser Zustand noch nicht erreicht, vgl. Abbildung 41 - auf die geringen Wärmeleitfähigkeiten der Größenordnung 10^{-1} im Vergleich zu den hohen Wärmekapazitäten und hohen Dichten jeweils der Größenordnung 10^3 , im Produkt κ also 10^6 , zurückzuführen sind.
2. Der Fall TEST1b (S. 107) diente zum Testen der Auswirkungen der Wärmeproduktion. Wieder ausgehend von einer konstanten Starttemperaturverteilung wurde deren zeitliche Weiterentwicklung bei eingeschaltetem Quellterm Q^{Met} beobachtet. Entsprechend der vorgegebenen Verteilung der Wärmeproduktion (vgl. Abschnitt 1.2) bildet sich das größte Temperaturmaximum im Kopfkern aus. Ein weiteres, lokales, aber geringeres Temperaturmaximum entsteht im Rumpfkern. Diese beiden Ansammlungen von Wärmeenergie werden allerdings wie zu erwarten wieder von dem kühlenden Effekt des Luftkontaktes bzw. der isolierenden Wirkung des Matratzenkontaktes überlagert. Diese beiden Effekte sind auch klar an den Oberflächentemperaturverteilungen nach $t = 60$ min. der Abbildungen 52 und 53 auf S. 109 zu erkennen: Die niedrigsten Temperaturen sind auf der Oberseite des Säuglings zu finden, insbesondere auf der Bein-Peripherie, was außer auf den Luftkontakt auch auf den geringen Anteil der Wärmeproduktion in der Peripherie zurückzuführen ist. Die Rückenpartie weist dagegen die höchsten Temperaturen auf. Die Abbildung 54 auf S. 109 zeigt einen Sagittal-Schnitt (Schnitt in der Nasenebene durch Körper) sowie einen Coronal-Schnitt (vertikaler Schnitt von Ohr zu Ohr durch den Körper) mit den zugehörigen Temperaturverteilungen. Auch hier sticht das starke Maximum der Wärmeproduktion im Kopfkern hervor.
3. Mit dem Fall TEST1c (S. 111) wurde die Wirkung des Blutfluß-Quellterms getestet. Ausgehend von der Temperaturverteilung von TEST1b nach $t = 60$ min. zeigen die Abbildungen 56 bis 61 klar die verteilende Wirkung des Blutflusses: Die lokalen Temperatur-Maxima im

Kopf und Rumpf werden nach und nach „abgebaut“ und die dort gespeicherte Wärmenergie wird gleichmäßig über den ganzen Körper verteilt. Hierbei werden auch die luftnahen Randschichten zunächst miterwärmt ($t \leq 12$ min.). Allerdings reichen die Wärmeproduktion mit ihrem zugehörigen Regelmechanismus und die anschließende Verteilung nicht aus, um diesen Zustand vollständig zu erhalten: Die Wärmeverluste zur umgebenden Luft sind zu stark und sorgen für ein Abkühlen der luftnahen Randschichten, sodaß sich im numerisch stationären Endzustand bei $t = 60$ min. dort steile Temperaturgradienten eingestellt haben (vgl. auch den zugehörigen Konvergenzverlauf in Abbildung 63).

4. Der Fall TEST1d (S.113) diente zum Testen des Quellterms der respiratorischen Wasserverluste. Die Abbildungen 64 bis 66 zeigen, daß seine Auswirkungen über die Zeit kaum bemerkbar sind. Dies ist auf die hohe Lufttemperatur von 309.25 K und die hohe Luftfeuchte von 77% zurückzuführen, welche bewirken, daß die Verluste über die Atemluft sehr gering sind, sodaß im Rumpfkern fast kein Absinken der Temperatur zu beobachten ist. Hierbei sind natürlich die Effekte der Wärmeproduktion und der Wärmeverteilung durch den Blutfluß überlagert.
5. Der Fall TEST2a (S. 115) beschreibt den Säugling auf einer Isoliermatratze in einer offenen Pflegeeinheit unter dem Einfluß einer Strahlungs Lampe. Startend mit der Temperaturverteilung von TEST1d nach $t = 90$ min. findet in den ersten 5 Minuten erwartungsgemäß zunächst eine Erwärmung der luftnahen Randschichten durch die Wärmestrahlung statt. Anschließend erfolgt eine Durchwärmung des gesamten Körpers, welche aufgrund des eingeschalteten Blutfluß-Quellterms gleichmäßig verläuft. Aufgrund der Strahlungs Lampe als zusätzlicher Energiequelle kann sich bis zum stationären Endzustand wieder ein deutliches Temperaturmaximum durch die Wärmeproduktion im Kopfkern ausbilden.
6. Der Fall TEST2b (S. 117) unterscheidet sich von TEST2a nur durch die Verwendung einer Heizmatratze statt einer Isoliermatratze und durch die entsprechend geringere Leistung der Strahlungs Lampe. Wieder startend mit der Temperaturverteilung von TEST1d nach $t = 90$ min. findet in den ersten 10 Minuten wie zu erwarten eine Erwärmung sowohl der luftnahen als auch der matrattennahen Randschichten statt. Anschließend erfolgt wieder eine gleichmäßige Durchwärmung des gesamten Körpers und es bildet sich wieder ein Temperaturmaximum im Kopfkern aus, welches sich allerdings durch den Hinterkopf zur Heizmatratze hinstreckt. Die Abbildungen 85 und 86 auf S. 119 zeigen die Oberflächentemperaturverteilungen im stationären Endzustand nach $t = 45$ min. Auf ihnen sind nochmal deutlich die simultanen Wirkungen der Strahlungs Lampe und der Heizmatratze zu erkennen. Die Abbildung 87 auf S. 119 zeigt wieder die entsprechenden Sagittal- und Coronal-Schnitte, welche neben dem Temperaturmaximum im Kopf die Erwärmung des gesamten Körpers, auch der Peripherie, verdeutlichen.

Zusammenfassend kann man sagen, daß die Abbildungen 36 bis 87 stets zu erwartende und physikalisch / physiologisch plausible Ergebnisse zeigen. Insbesondere das reine Wärmeleitungsproblem sowie die Effekte der Quellterme und der Randbedingungen werden durch das numerische Verfahren korrekt abgebildet. Es ist daher zur Lösung des gegebenen, instationären Wärmeleitungsproblems in Form der bio-heat-transfer-equation geeignet und kann genutzt werden, um die durch sie modellierten, realen Phänomene der Thermoregulation von Frühgeborenen zu analysieren, wobei die benötigten Rechenzeiten als moderat bezeichnet werden können.

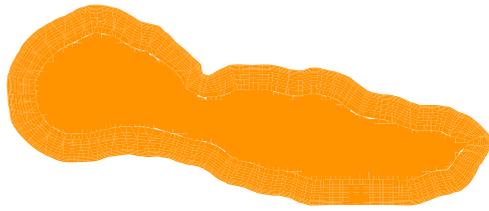


Abbildung 36: TEST1a, t = 0 min.

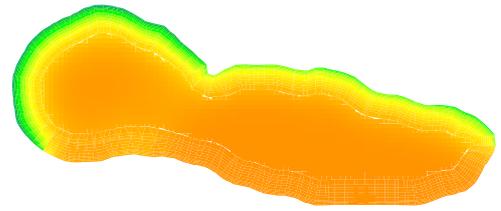


Abbildung 37: TEST1a, t = 12 min.

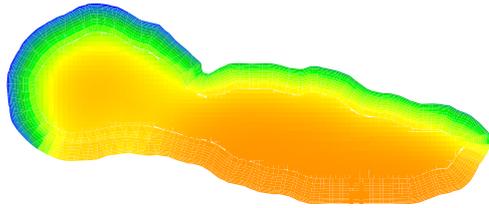


Abbildung 38: TEST1a, t = 24 min.

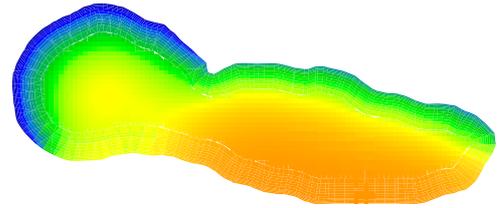


Abbildung 39: TEST1a, t = 36 min.

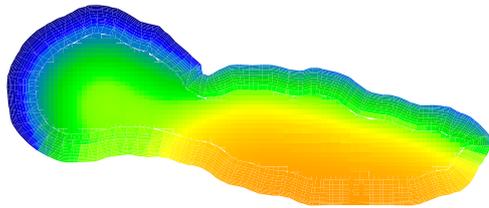


Abbildung 40: TEST1a, t = 48 min.

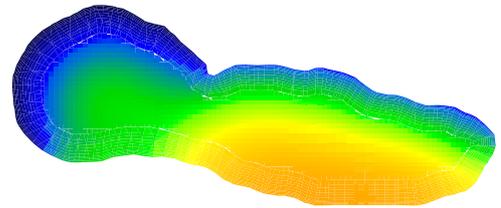


Abbildung 41: TEST1a, t = 60 min.

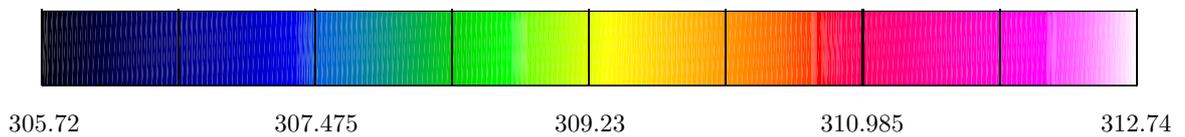


Abbildung 42: Temperaturskala in [K]

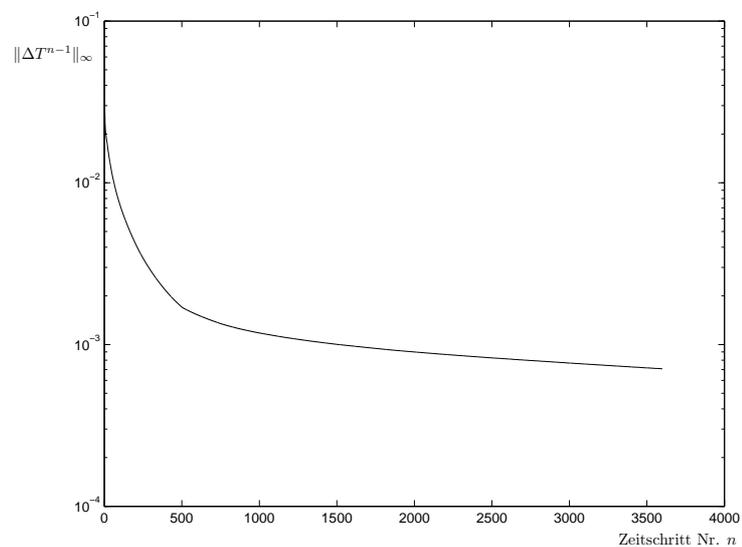


Abbildung 43: Konvergenzverlauf TEST1a

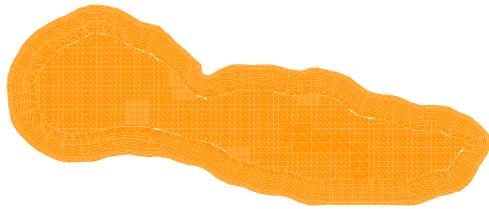


Abbildung 44: TEST1b, t = 0 min.

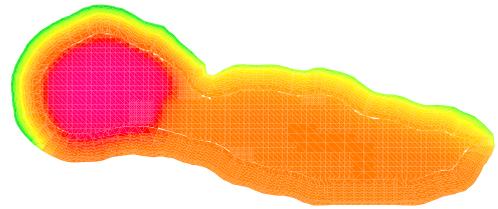


Abbildung 45: TEST1b, t = 12 min.

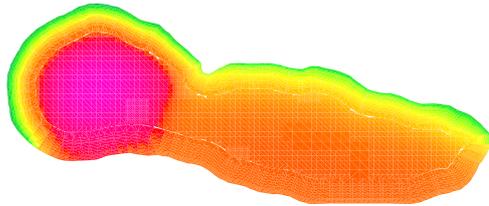


Abbildung 46: TEST1b, t = 24 min.

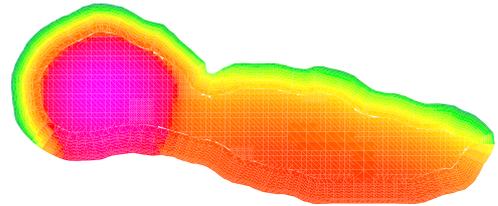


Abbildung 47: TEST1b, t = 36 min.

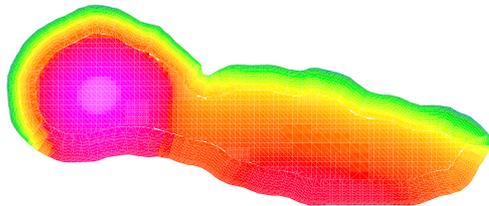


Abbildung 48: TEST1b, t = 48 min.

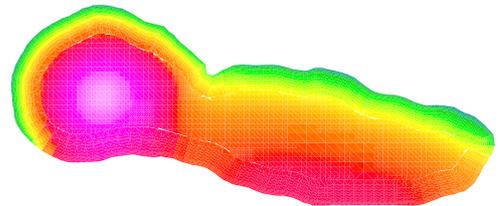


Abbildung 49: TEST1b, t = 60 min.

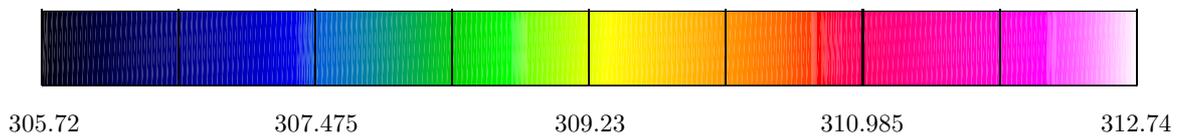


Abbildung 50: Temperaturskala in [K]

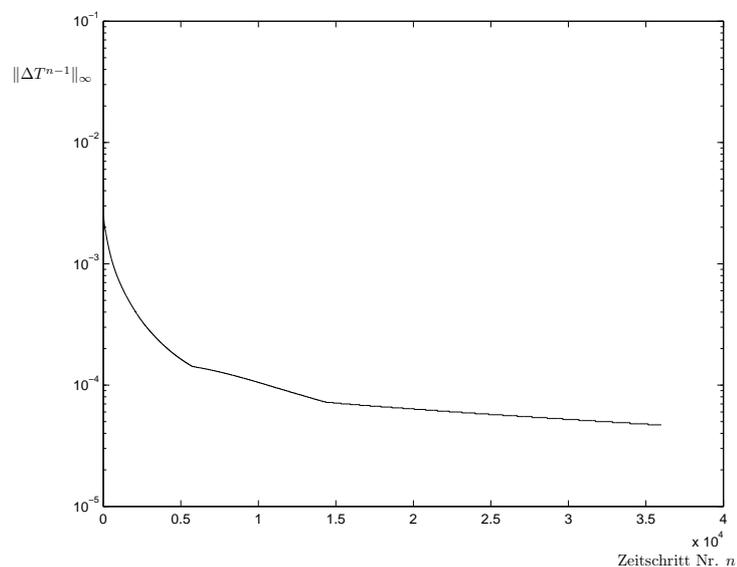


Abbildung 51: Konvergenzverlauf TEST1b

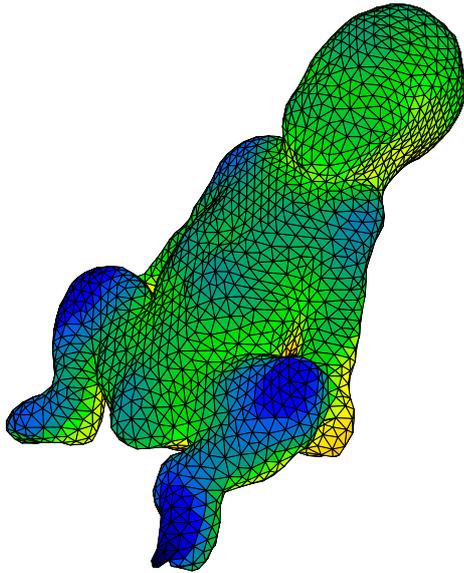


Abbildung 52: TEST1b, $t = 60$ min.

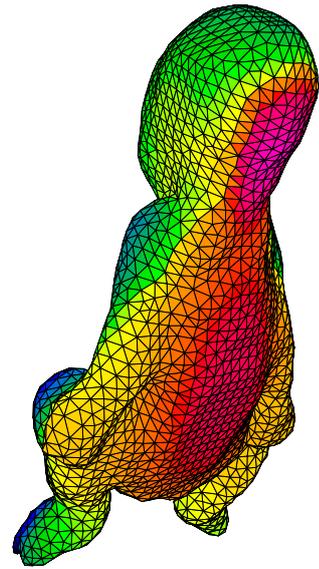


Abbildung 53: TEST1b, $t = 60$ min.

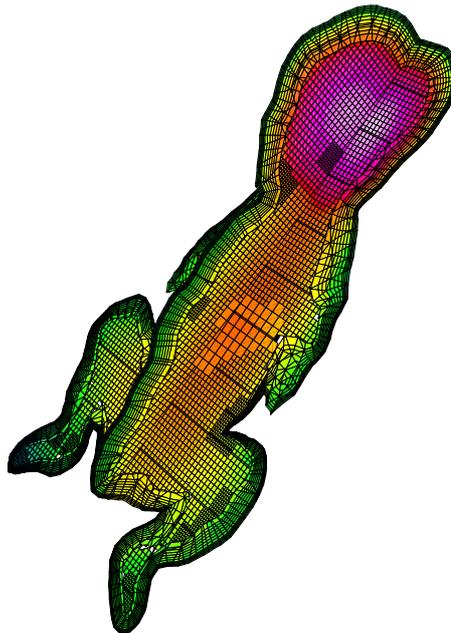


Abbildung 54: TEST1b, $t = 60$ min., Sagittal- und Coronal-Schnitt

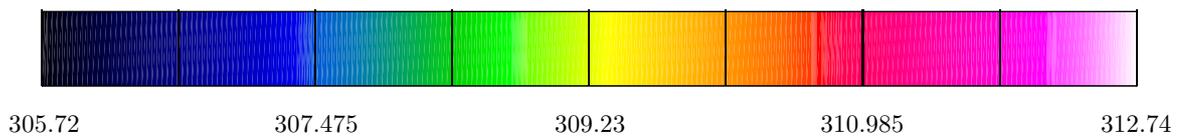


Abbildung 55: Temperaturskala in [K]

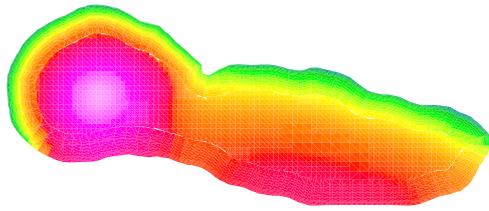


Abbildung 56: TEST1c, t = 0 min.

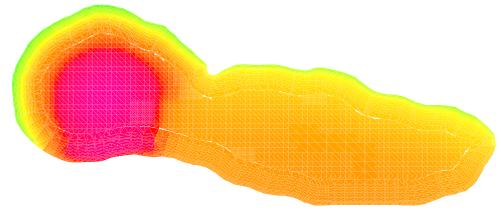


Abbildung 57: TEST1c, t = 3 min.

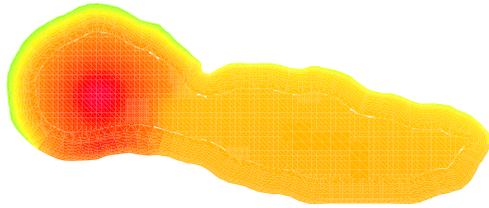


Abbildung 58: TEST1b, t = 6 min.

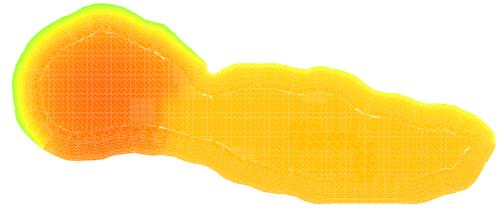


Abbildung 59: TEST1b, t = 9 min.

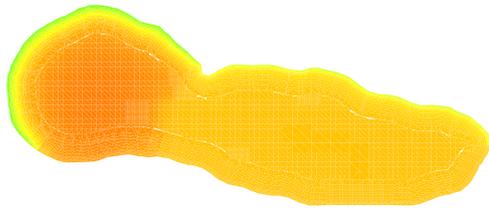


Abbildung 60: TEST1c, t = 12 min.

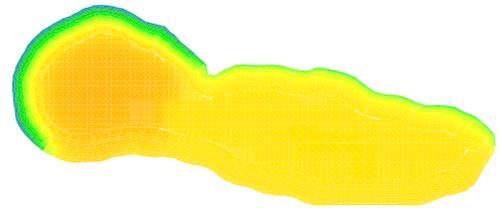


Abbildung 61: TEST1c, t = 60 min.

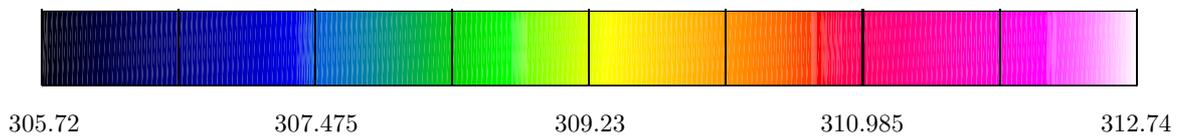


Abbildung 62: Temperaturskala in [K]

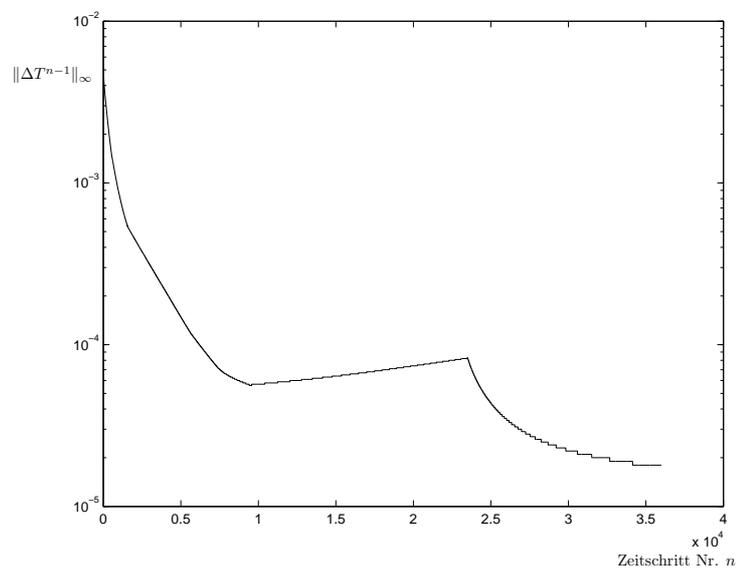


Abbildung 63: Konvergenzverlauf TEST1c

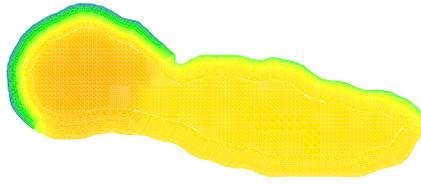
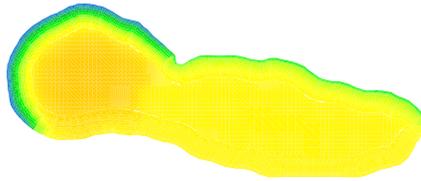
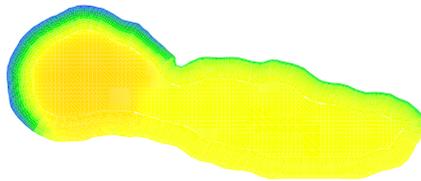
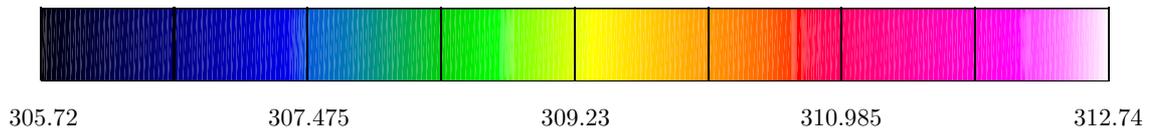
Abbildung 64: TEST1d, $t = 0$ min.Abbildung 65: TEST1d, $t = 45$ min.Abbildung 66: TEST1d, $t = 90$ min.

Abbildung 67: Temperaturskala in [K]

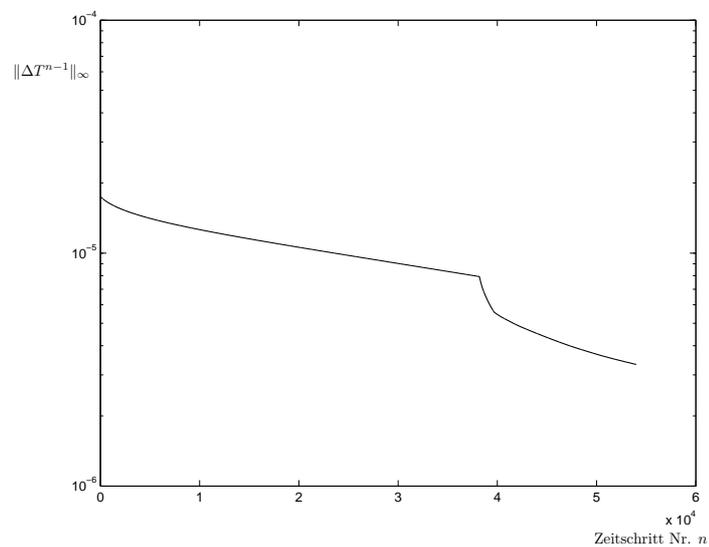


Abbildung 68: Konvergenzverlauf TEST1d

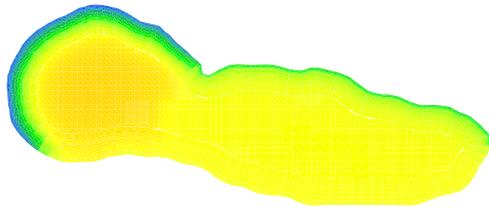


Abbildung 69: TEST2a, t = 0 min.

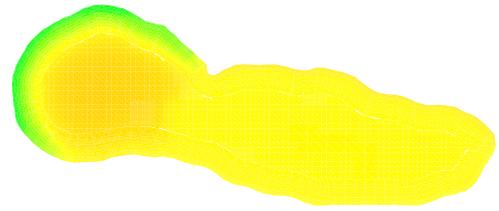


Abbildung 70: TEST2a, t = 5 min.

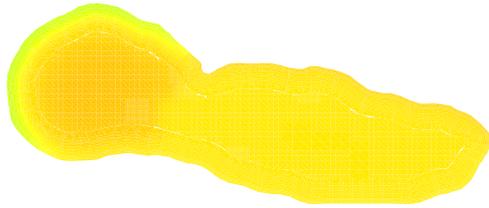


Abbildung 71: TEST2a, t = 10 min.

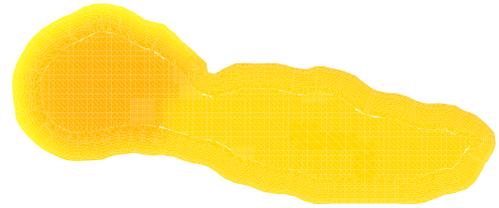


Abbildung 72: TEST2a, t = 15 min.

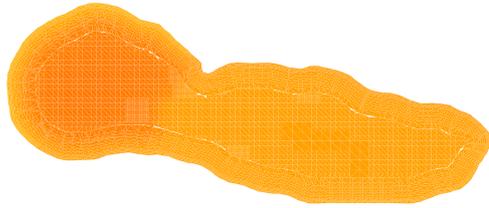


Abbildung 73: TEST2a, t = 30 min.

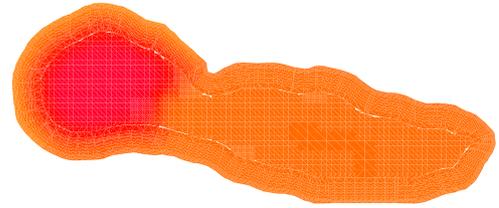


Abbildung 74: TEST2a, t = 45 min.

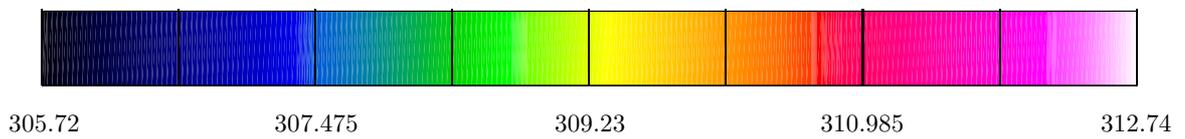


Abbildung 75: Temperaturskala in [K]

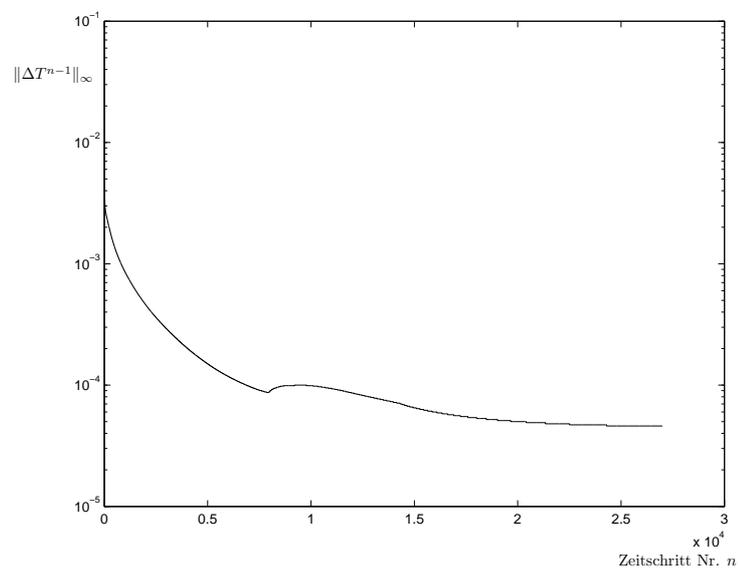


Abbildung 76: Konvergenzverlauf TEST2a

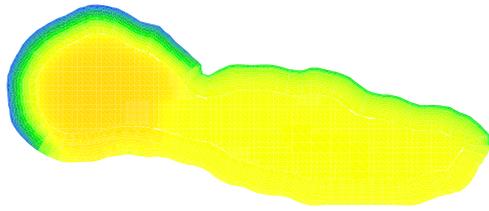


Abbildung 77: TEST2b, t = 0 min.

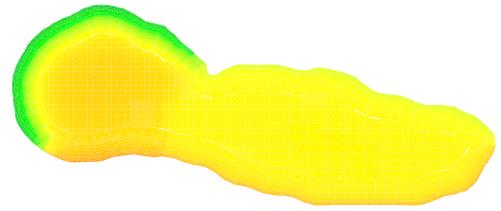


Abbildung 78: TEST2b, t = 5 min.

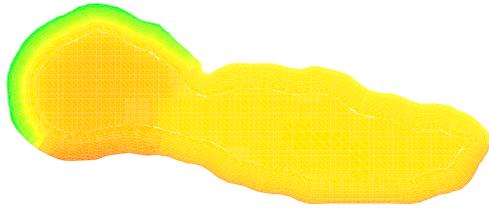


Abbildung 79: TEST2b, t = 10 min.

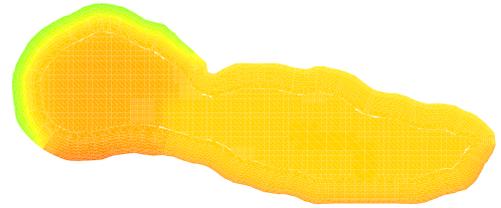


Abbildung 80: TEST2b, t = 15 min.

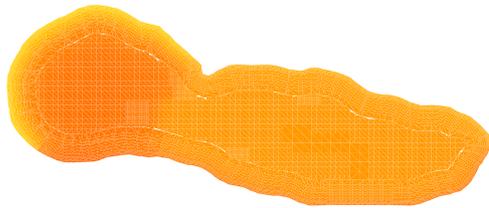


Abbildung 81: TEST2b, t = 30 min.

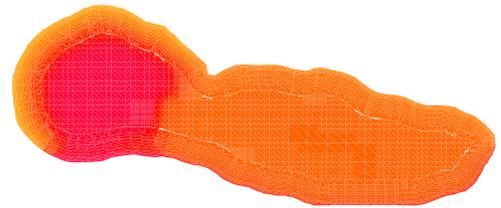


Abbildung 82: TEST2b, t = 45 min.

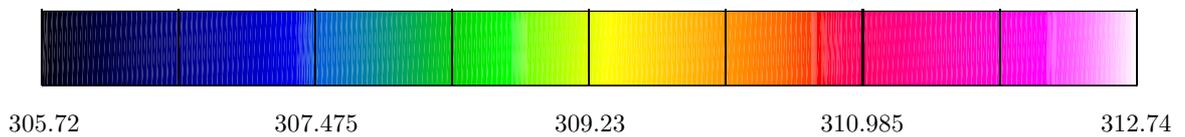


Abbildung 83: Temperaturskala in [K]

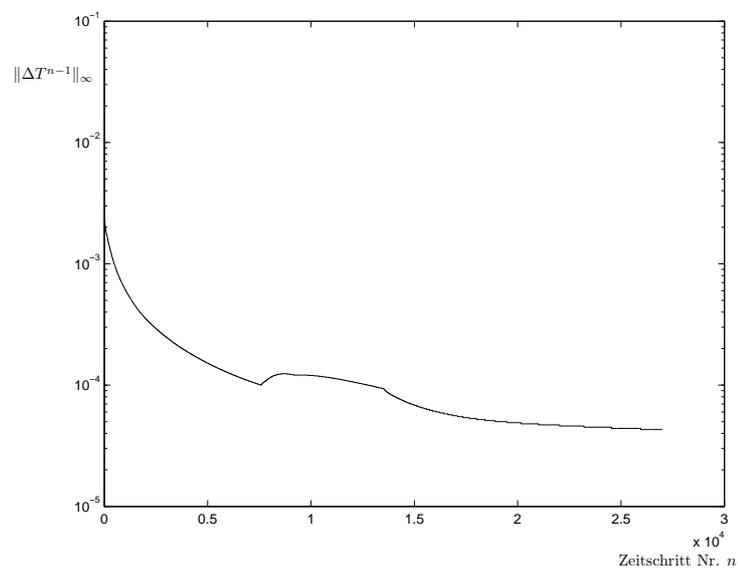


Abbildung 84: Konvergenzverlauf TEST2b

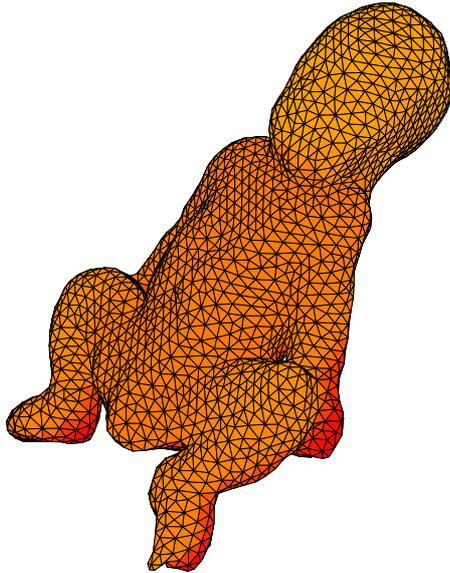


Abbildung 85: TEST2b, $t = 45$ min.

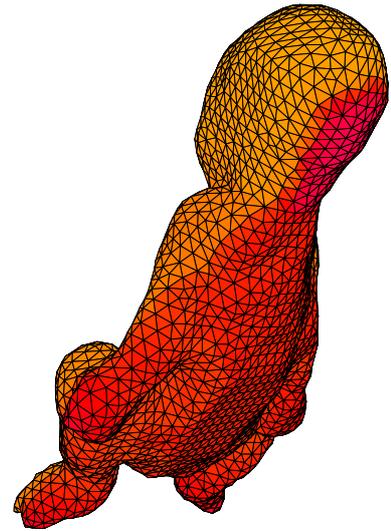


Abbildung 86: TEST2b, $t = 45$ min.

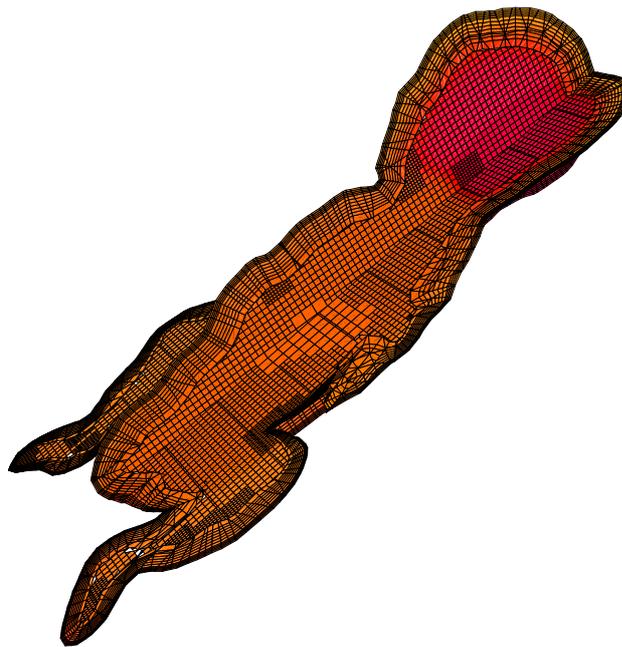


Abbildung 87: TEST2b, $t = 45$ min., Sagittal- und Coronal-Schnitt

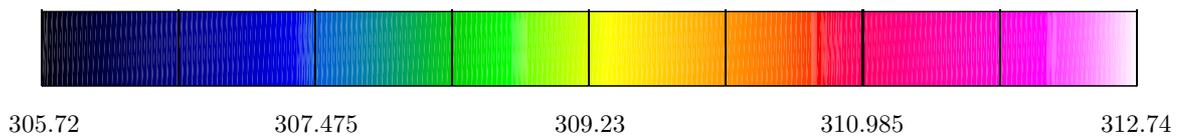


Abbildung 88: Temperaturskala in [K]

Zusammenfassung und abschließende Bemerkungen

Die hier vorliegende Arbeit enthält die Entwicklung eines numerischen Verfahrens zur dreidimensionalen und zeitgenauen Berechnung instationärer Temperaturverteilungen in Frühgeborenen.

Zunächst wurde ausführlich ein Modell der Thermoregulation des Frühgeborenen unter den Umgebungsbedingungen eines Inkubators oder einer offenen Pflegeeinheit beschrieben. Dieses berücksichtigt die molekulare Wärmeleitung, die Wärmeproduktion durch Stoffwechselftigkeit und die Wärmeverteilung durch den Blutfluß. Außerdem werden die Wärmeverluste durch die respiratorischen Wasserverluste, die extra-glandulären, transepidermalen Wasserverluste, die Radiation, die Konvektion und die Konduktion modelliert. Ebenfalls im Modell integriert sind die beiden Regelungsmechanismen Vasomotorik der Haut und Steigerung der Wärmeproduktion. Die mathematische Formulierung des Modells mündete in ein Anfangsrandwertproblem, bestehend aus der bio-heat-transfer-equation und zugehörigen Anfangs- und Neumann-Randbedingungen. Zur numerischen Lösung desselben wurde ein Finite-Volumen-Verfahren entwickelt. Vorbereitend für die darin notwendige Zeitintegration wurde in Kapitel 2 erarbeitet, welche Verfahren aus der Numerik von gewöhnlichen Differentialgleichungen dafür geeignet sind, nämlich die BDF-Verfahren wegen ihrer guten Stabilitätseigenschaften. Kapitel 3 enthält die ausführliche Herleitung des Finite-Volumen-Verfahrens. Dieses ist so konstruiert, daß es auf beliebig komplexen Diskretisierungen der Real-Geometrien von Frühchen arbeiten kann. Dies scheint ein Novum zu sein, da bisherige mathematische Modelle nur stark vereinfachte Körpergeometrien zuließen. Der Einsatz eines semi-impliziten BDF-Verfahrens zur zeitlichen Diskretisierung innerhalb des Finite-Volumen-Verfahrens sichert eine stabile und genaue Zeitintegration. Die daraus resultierenden, großen, schwachbesetzten, linearen Gleichungssysteme wurden effizient mit dem BICGSTAB-Verfahren mit ILU-Präkonditionierung gelöst. In Kapitel 4 wurde zur Absicherung der korrekten Herleitung und Implementierung des entwickelten Finite-Volumen-Verfahrens selbiges an einem Spezialfall mit bekannter, exakter Lösung erfolgreich getestet. Anschließend wurden numerische Tests für das gestellte Problem der Thermoregulation gemacht. Diese lieferten stets der Realität entsprechende Ergebnisse und gaben die Mechanismen des Modells wieder bei - angesichts der Feinheit der räumlichen Diskretisierung - vertretbaren Rechenzeiten. Das entwickelte Verfahren ist somit ein geeignetes Werkzeug zur systematischen Untersuchung des Wärmehaushalts von Frühgeborenen. Es ist leicht möglich, durch Vorgabe weniger Parameter Kinder zu simulieren, die sich anatomisch (Gewicht, Gestationsalter, Lebensalter) oder in ihrer thermoregulatorischen Reife unterscheiden. Eine erste Anwendung und Validierungsmöglichkeit könnte ein Vergleich der nun berechenbaren Oberflächentemperaturprofile mit Meßdaten von Wärmebildkameras sein. Letztere liefern nur Aussagen über Temperaturverteilungen auf der Hautoberfläche und es ist unklar, inwieweit man von diesen auf die Verteilung der Kerntemperaturen schließen kann. Die hier entwickelte Simulationssoftware kann hierfür sehr detaillierte Angaben machen, da sie eben dreidimensionale Temperaturverteilungen errechnet. Gleichzeitig kann das entwickelte Verfahren auch als Basisverfahren für Weiterentwicklungen angesehen werden. Zunächst könnte eine Verbesserung der geometrischen Eingangsdaten vorgenommen werden. Beim hier verwendeten Frühgeborenen liegen die Handinnenflächen an den Rückseiten der Oberschenkel an, sodaß hier zwar zu vernachlässigende, aber nicht verschwindende Wärmeströme von Peripherie zu Peripherie auftreten. Hier wären also MRT-Bilder eines Frühgeborenen mit ausgestreckten Armen und Beinen von Vorteil. Dies konnte in dieser Arbeit leider nicht mehr erledigt werden, da solche Bilder in der Praxis verständlicherweise schwer zu bekommen sind. Als nächstes könnte versucht werden, die Modellierung der Thermoregulation zu verfeinern, z. B. durch „Einbau“ innerer Organe oder durch lokal detailliertere Auflösung der Wärmeproduktion oder des Blutflusses. Auch eine Modifikation des Modells / Verfahrens zur Beschreibung von Feuerwehrleuten im Einsatz oder OP-Patienten ist denkbar. Weiter könnte versucht werden, daß Finite-Volumen-Verfahren durch einen Mehrgitteransatz zu beschleunigen. Der hier verwendete Netzgenerator stellt dafür von vornherein die Grundla-

ge bereit, da er verschiedene Diskretisierungsstufen der Frühchengeometrie mit entsprechenden Verknüpfungsinformationen liefert. Erste Schritte in Richtung „Ergonomie“ des entwickelten Softwarepaketes sind bereits unternommen worden durch Implementierung einer Benutzeroberfläche. Deren Kombination mit einem Visualisierungstool zu einem Gesamtpaket ist offensichtlich ein nächster Schritt.

Anhang A: Oberflächentriangulierung

Für die in Abschnitt 4.1 beschriebene Volumennetzgenerierung ist in einem Vorverarbeitungsschritt die Bereitstellung einer Triangulierung der Oberfläche des Rechengebietes notwendig. Dies soll hier für die Geometrie des Frühchens kurz erläutert werden.

Von einem realen Frühchen wurden MRT-Schichtaufnahmen gemacht, und zwar 160 Sagittalschnitte wie in Abbildung 89 auf S. 124 beispielhaft dargestellt. Mit Hilfe einer kommerziellen Bildverarbeitungssoftware, die u.a. Segmentierungsverfahren zur Verfügung stellt, insbesondere das sog. Region Growing, wurde aus diesen Schichtaufnahmen ein Volumendatensatz erzeugt (vgl. Abbildung 90 auf S. 124). Das Region Growing besteht aus einem Initialisierungsschritt und einer Folge von gleichartigen Ausführungsschritten. Im Initialisierungsschritt wurden in der sog. Region of Interest (ROI) seedpoints markiert und so die Startregion - hier der schwarze Hintergrund - gekennzeichnet (vgl. Abbildung 89 auf S. 124). Dann wurden im Ausführungsschritt, ausgehend von den seedpoints, alle benachbarten Pixel mit einem Distanzmaß betrachtet. Ein Pixel wurde dabei zur aktuellen Region hinzugefügt, wenn die Berechnung des Distanzmaßes einen Wert unterhalb eines gegebenen Schwellenwertes ergab. Dieser Schritt wurde solange ausgeführt, bis keine Pixel mehr im Raum übrig blieben, die der jeweils aktuellen Region hinzugefügt werden konnten. Das Region Growing filtert somit den Hintergrund und alle eventuell darin enthaltenen Artefakte heraus und übrig bleibt ein reiner Volumendatensatz der eigentlichen Geometrie. Auf diesen wurde anschließend der sog. Marching-Cube-Algorithmus angewandt (s. [32]). Dies ist ein Verfahren zur Generierung von Oberflächenmodellen aus medizinischen 3D-Bilddaten. Wesentlicher Verfahrensschritt ist dabei die Definition einer Isofläche, welche diejenigen Bildpunkte enthält, die einen einheitlichen Grauwert besitzen. Diese Fläche trennt das Äußere vom Inneren der Frühchen-Geometrie und stellt somit die aus dem Volumendatensatz extrahierte Frühchen-Oberfläche dar. Für sie erzeugt das Verfahren außerdem eine Triangulierung. Eine solche besteht aus einer durchnumerierten Liste von Punkten des \mathbb{R}^3 (d. h. Koordinatentripeln) und einer weiteren Liste, in welcher je drei Punkte, identifiziert über ihre Nummer aus der ersten Liste, zu einem Oberflächendreieck zusammengefaßt sind. Insbesondere wurde hierbei sichergestellt, daß die Triangulierung „wasserdicht“ ist und daß jede Kante eines Dreiecks nur genau zwei adjazente Dreiecke besitzt. Die Datei mit den beiden Listen wurde dann als Eingabe zur Volumennetzgenerierung verwandt (vgl. Abschnitt 4.1).

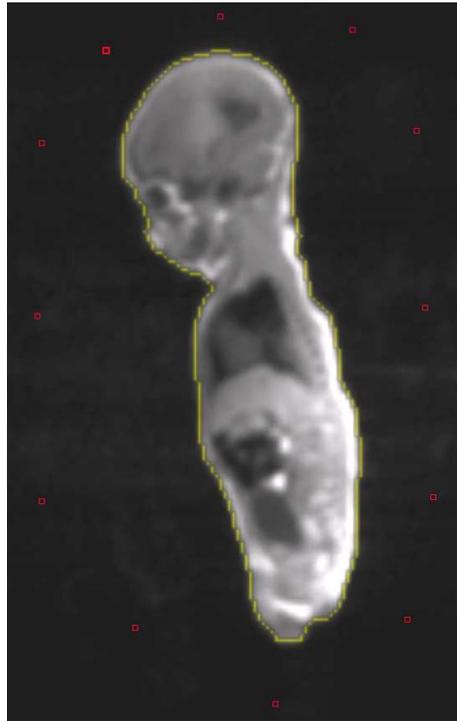


Abbildung 89: MRT-Schichtaufnahme mit seedpoints



Abbildung 90: Volumendatensatz

Anhang B: Die Fundamentallösung der Wärmeleitungsgleichung

In Abschnitt 4.2 wurde die Fundamentallösung der Wärmeleitungsgleichung für numerische Tests des Finite-Volumen-Verfahrens verwendet. Dabei blieben ihre Herkunft, Namensgebung und Bedeutung für die Wärmeleitungsgleichung im Dunkeln. Deshalb wird in diesem Anhang eine knappe Einführung in die Analysis der instationären Wärmeleitungsgleichung gegeben. Dazu wird das Anfangswertproblem

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) &= \Delta u(x, t), \quad (x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*, \\ u(x, 0) &= v(x), \quad x \in \mathbb{R}^n,\end{aligned}$$

betrachtet. Mit Hilfe der Fourier-Transformation kann hierfür eine allgemeine Darstellung der Lösungen gewonnen werden, welche die Fundamentallösung als Wärmeleitungskern enthält.

Definition B1

Die Funktion

$$\begin{aligned}U &: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^* \rightarrow \mathbb{R} \\ U(x, t) &:= \frac{1}{\sqrt{t^n}} e^{-\frac{\|x\|_2^2}{4t}}\end{aligned}$$

wird als Fundamentallösung der Wärmeleitungsgleichung oder auch als Gauss-Kern bezeichnet.

Bemerkung:

Die Fundamentallösung besitzt die folgenden Eigenschaften:

1. Es gilt $U \in C^\infty(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*)$ und sie ist selber in der Tat eine Lösung der Wärmeleitungsgleichung, denn aus

$$\frac{\partial U}{\partial t}(x, t) = \left(\frac{\|x\|_2^2}{4t^2} - \frac{n}{2t} \right) U(x, t) \quad \forall (x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*$$

und

$$\nabla U(x, t) = -\frac{1}{2} \frac{U(x, t)}{t} x \quad \forall (x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*$$

folgt

$$\frac{\partial U}{\partial t}(x, t) = \Delta U(x, t) \quad \forall (x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*.$$

2. Für jedes feste $t \in \mathbb{R}_+^*$ ist $U(\cdot, t) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ eine beschränkte Funktion, was direkt aus dem negativen Exponenten der Exponentialfunktion ersichtlich ist.
3. Für jedes feste $t \in \mathbb{R}_+^*$ ist $U(\cdot, t) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ über \mathbb{R}^n integrierbar, $U(\cdot, t) \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R}^n)$. Dies ergibt sich aus der Existenz des Gauss-Integrals

$$\int_{\mathbb{R}^n} e^{-\|x\|_2^2} dx = \sqrt{\pi^n}$$

(s. z. B. [41]) unter Zuhilfenahme des Transformationsatzes. Man erhält als Ergebnis

$$\int_{\mathbb{R}^n} U(\cdot, t) dx = \int_{\mathbb{R}^n} \frac{1}{\sqrt{t^n}} e^{-\frac{\|x\|_2^2}{4t}} dx = \sqrt{(4\pi)^n}, \quad t \in \mathbb{R}_+^*.$$

4. Für jedes feste $t \in \mathbb{R}_+^*$ ist die räumliche Fourier-Transformierte der Fundamentallösung gegeben durch

$$\widehat{U(\cdot, t)}(x) = \sqrt{2^n} e^{-\|x\|_2^2 t}, \quad x \in \mathbb{R}^n.$$

Dies ergibt sich aus der Tatsache, daß die Funktion

$$\mathbb{R}^n \ni x \mapsto e^{-\frac{\|x\|_2^2}{2}} \in \mathbb{R}$$

mit ihrer eigenen Fourier-Transformierten identisch ist unter Verwendung der Skalierungseigenschaft und der \mathbb{C} -Linearität der Fourier-Transformation (s. z. B. [22]).

Der Satz B2 wird zeigen, welche Gestalt eine Lösung des gegebenen Anfangswertproblems unter gewissen Voraussetzungen haben muß. Die Idee der Herleitung selbiger stammt aus [44]. Da dort jedoch die Rechenschritte nur äußerst rudimentär durchgeführt wurden und außerdem jedwede Voraussetzungen für einen formal sauberen Beweis fehlen, wird ein solcher hier ausführlich erarbeitet.

Satz B2

Gegeben seien eine beschränkte Funktion $v : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ als Startverteilung und eine Funktion $u : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ mit den folgenden Eigenschaften:

1. u ist stetig in $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+$,
2. u ist zweimal stetig differenzierbar in $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*$,
3. $u(\cdot, t) \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R}^n) \forall t \in \mathbb{R}_+$,
4. $\frac{\partial u}{\partial t}(\cdot, t) \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R}^n) \forall t \in \mathbb{R}_+^*$,
5. $\partial^\alpha u(\cdot, t) \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R}^n) \forall \alpha \in \mathbb{N}^n : |\alpha| \leq 2 \forall t \in \mathbb{R}_+^*$,
6. $\exists F \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R}^n) : \left| \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) \right| \leq F(x) \forall (x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*$,
7. $\widehat{u(\cdot, t)} \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R}^n) \forall t \in \mathbb{R}_+^*$.

Außerdem sei u eine Lösung des Anfangswertproblems

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) &= \Delta u(x, t), \quad (x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*, \\ u(x, 0) &= v(x), \quad x \in \mathbb{R}^n. \end{aligned}$$

Dann hat u in positiven Zeitschichten die Darstellung

$$u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{(4\pi t)^n}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{\|x-y\|_2^2}{4t}} v(y) dy \quad \forall (x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*.$$

Beweis:

Das Konzept dieses Beweises besteht darin, die gegebene PDE einer Fourier-Transformation zu unterziehen, sie dann im Frequenzbereich zu lösen und anschließend wieder zurückzutransformieren.

1. Die räumliche Fourier-Transformierte von u ist gegeben durch

$$\widehat{u}(x, t) := \widehat{u(\cdot, t)}(x) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n}} \int_{\mathbb{R}^n} u(\xi, t) e^{-i\langle x, \xi \rangle} d\xi, \quad x \in \mathbb{R}^n, t \in \mathbb{R}_+^*.$$

Außerdem erhält man

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}(\cdot, t)\right)^\wedge(x) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n}} \int_{\mathbb{R}^n} \frac{\partial u}{\partial t}(\xi, t) e^{-i\langle x, \xi \rangle} d\xi = \frac{d\widehat{u}}{dt}(x, t), \quad x \in \mathbb{R}^n, t \in \mathbb{R}_+^*.$$

Dabei war das Vertauschen von Integration und Differentiation aufgrund der 6. Voraussetzung über u erlaubt.

2. Wegen der \mathbb{C} -Linearität der Fourier-Transformation gilt

$$(\Delta u(\cdot, t))^\wedge = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_j^2}(\cdot, t)\right)^\wedge \quad \forall t \in \mathbb{R}_+^*.$$

Für jedes $j \in \{1, \dots, n\}$ sei $\alpha(j) := (0, \dots, 2, \dots, 0) \in \mathbb{N}^n$ ein Multi-Index mit genau einem von Null verschiedenen Eintrag an der j -ten Position. Mit der Regel zum Fourier-Transformieren von Ableitungen (s. z. B. [41]) ergibt sich dann

$$\begin{aligned} (\Delta u(\cdot, t))^\wedge(x) &= \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_j^2}(\cdot, t)\right)^\wedge(x) = \sum_{j=1}^n i^{\alpha(j)} x^{\alpha(j)} \widehat{u(\cdot, t)}(x) = \sum_{j=1}^n i^2 x_j^2 \widehat{u}(x, t) \\ &= -\widehat{u}(x, t) \sum_{j=1}^n x_j^2 = -\|x\|_2^2 \widehat{u}(x, t), \quad x \in \mathbb{R}^n, t \in \mathbb{R}_+^*. \end{aligned}$$

3. Das Anfangswertproblem lautet nun

$$\begin{aligned} \frac{d\widehat{u}}{dt}(x, t) &= -\|x\|_2^2 \widehat{u}(x, t), \quad (x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*, \\ \widehat{u}(x, 0) &= \widehat{v}(x), \quad x \in \mathbb{R}^n. \end{aligned}$$

Es hat die eindeutige Lösung

$$\widehat{u}(x, t) = \widehat{v}(x) e^{-\|x\|_2^2 t}, \quad (x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*.$$

Für $t > 0$ kann diese mit der räumlichen Fourier-Transformierten

$$\widehat{U}(x, t) := \widehat{U(\cdot, t)}(x) = \sqrt{2^n} e^{-\|x\|_2^2 t}, \quad (x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*,$$

der Fundamentallösung reformuliert werden zu

$$\widehat{u}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \widehat{U}(x, t) \widehat{v}(x), \quad (x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*.$$

4. Da für jedes $t \in \mathbb{R}_+^*$ die Funktion $U(\cdot, t) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ beschränkt und über \mathbb{R}^n integrierbar ist und da außerdem die Funktion $v : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ aufgrund der Anfangsbedingung und der 3. Voraussetzung über u ebenfalls über \mathbb{R}^n integrierbar ist, ist die Faltung $U(\cdot, t) * v : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ wohldefiniert und es gilt ohne Ausnahme

$$U(\cdot, t) * v(x) = \int_{\mathbb{R}^n} U(\cdot, t)(x - y) v(y) dy \quad \forall x \in \mathbb{R}^n,$$

(s. z. B. [41]). Nach der Faltungsregel der Fourier-Transformation gilt

$$(U(\cdot, t) * v)^\wedge = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n}} \widehat{U(\cdot, t)} \widehat{v} \quad \forall t \in \mathbb{R}_+^*.$$

5. Die reformulierte AWP-Lösung kann nun für $(x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*$ wie folgt weiter umgeformt werden:

$$\begin{aligned}\widehat{u}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \widehat{U}(x, t) \widehat{v}(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \widehat{U(\cdot, t)}(x) \widehat{v}(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left(\widehat{U(\cdot, t) \widehat{v}} \right)(x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left(\frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n}} (U(\cdot, t) * v)^\wedge \right)(x) = \frac{1}{\sqrt{(4\pi)^n}} (U(\cdot, t) * v)^\wedge(x).\end{aligned}$$

Somit folgt

$$\widehat{u(\cdot, t)} = \frac{1}{\sqrt{(4\pi)^n}} (U(\cdot, t) * v)^\wedge \quad \forall t \in \mathbb{R}_+^*.$$

6. Nach der 7. Voraussetzung über u ist eine erneute Fourier-Transformation erlaubt:

$$\widehat{\widehat{u(\cdot, t)}} = \frac{1}{\sqrt{(4\pi)^n}} (U(\cdot, t) * v)^{\wedge\wedge} \quad \forall t \in \mathbb{R}_+^*.$$

Es sei $t \in \mathbb{R}_+^*$ vorübergehend festgehalten. Da $u(\cdot, t)$ eine stetige und integrierbare Funktion mit integrierbarer Fourier-Transformierter ist, erhält man mit Hilfe des Umkehrsatzes der Fourier-Transformation

$$\widehat{\widehat{u(\cdot, t)}}(x) = u(\cdot, t)(-x) \quad \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

Da $U(\cdot, t) \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R}^n)$ gilt und da v beschränkt und stetig ist, gilt nach dem Differentiationsatz der Faltung

$$U(\cdot, t) * v \in C^0(\mathbb{R}^n),$$

(s. z. B. [41]). Da Faltungen per se integrierbar sind, gilt

$$U(\cdot, t) * v \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R}^n).$$

Da $(U(\cdot, t) * v)^\wedge$ sich nur um einen konstanten Faktor von $\widehat{u(\cdot, t)} \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R}^n)$ unterscheidet, gilt also auch

$$(U(\cdot, t) * v)^\wedge \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R}^n).$$

Wieder nach dem Umkehrsatz der Fourier-Transformation ergibt sich also

$$\frac{1}{\sqrt{(4\pi)^n}} (U(\cdot, t) * v)^{\wedge\wedge}(x) = \frac{1}{\sqrt{(4\pi)^n}} U(\cdot, t) * v(-x) \quad \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

Man erhält also erstmal

$$u(\cdot, t)(-x) = \frac{1}{\sqrt{(4\pi)^n}} U(\cdot, t) * v(-x) \quad \forall x \in \mathbb{R}^n,$$

daraus dann aber auch

$$u(\cdot, t)(x) = \frac{1}{\sqrt{(4\pi)^n}} U(\cdot, t) * v(x) \quad \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

Damit ergibt sich jetzt wieder für beliebiges $t \in \mathbb{R}_+^*$

$$u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{(4\pi)^n}} U(\cdot, t) * v(x) \quad \forall (x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*.$$

Durch Einsetzen der Fundamentallösung folgt hieraus die Behauptung des Satzes. q.e.d.

Bemerkung:

Das Vorgehen im Beweis zu Satz B2 weist eine zwar nebensächliche, aber doch nicht völlig uninteressante Analogie zur Entwicklung des Finite-Volumen-Verfahrens in Kapitel 3 auf. In beiden Fällen wird eine partielle Differentialgleichung durch eine geeignete Transformation in eine gewöhnliche Differentialgleichung verwandelt, beim Finite-Volumen-Verfahren durch Aufstellung der Evolutionsgleichung der Zellmittelwerte auf Kontrollvolumen, hier durch Fourier-Transformation. Anschließend wird jeweils die erhaltene gewöhnliche Differentialgleichung in der Zeit gelöst.

Satz B2 zeigt also, wie unter gewissen Voraussetzungen eine Lösung des Wärmeleitungsproblems notwendig auszusehen hat. Der folgende Satz wird zeigen, daß durch die gefundene Darstellung auch tatsächlich eine Lösung gegeben ist. Wegen seiner somit grundlegenden Bedeutung als Existenzsatz wird auch ein Beweis für ihn mitaufgeführt, welcher eine elaborierte Version des in [44] gegebenen Beweises ist.

Satz B3

Es sei $v : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ eine beschränkte, integrierbare und stetige Funktion. Außerdem sei die Funktion $u : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^* \rightarrow \mathbb{R}$ festgelegt durch

$$u(x, t) := \frac{1}{\sqrt{(4\pi t)^n}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{\|x-y\|_2^2}{4t}} v(y) dy.$$

Dann gelten

$$\begin{aligned} u &\in C^\infty(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*), \\ \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) &= \Delta u(x, t) \quad \forall (x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*, \\ \lim_{(x,t) \rightarrow (a,0)} u(x, t) &= v(a) \quad \forall a \in \mathbb{R}^n. \end{aligned}$$

Beweis:

Mit der Fundamentallösung U hat u die Darstellung

$$u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{(4\pi)^n}} \int_{\mathbb{R}^n} U(x-y, t) v(y) dy, \quad (x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*.$$

Da U beliebig oft stetig differenzierbar ist mit gleichmäßig beschränkten Ableitungen auf jeder Menge $\mathbb{R}^n \times [\epsilon, \infty[$, $\epsilon > 0$, folgt durch Differenzieren unter dem Integralzeichen die erste Behauptung des Satzes.

Da die Fundamentallösung selber eine Lösung der Wärmeleitungsgleichung ist, folgt

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{(4\pi)^n}} \int_{\mathbb{R}^n} \frac{\partial U}{\partial t}(x-y, t) v(y) dy = \frac{1}{\sqrt{(4\pi)^n}} \int_{\mathbb{R}^n} \Delta U(x-y, t) v(y) dy = \Delta u(x, t), \\ &\quad (x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*, \end{aligned}$$

also die zweite Behauptung des Satzes.

Es sei jetzt $a \in \mathbb{R}^n$ beliebig, dann aber fest gewählt. Mit Hilfe des C^1 -Diffeomorphismus'

$$\begin{aligned} \phi : \mathbb{R}^n &\rightarrow \mathbb{R}^n \\ \phi(\eta) &:= \sqrt{4t} \eta + x, \end{aligned}$$

für $(x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*$ und dem Gauss-Integral

$$\frac{1}{\sqrt{\pi^n}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\|\eta\|_2^2} d\eta = 1$$

erhält man die Darstellung

$$u(x, t) - v(a) = \frac{1}{\sqrt{\pi^n}} \int_{\mathbb{R}^n} \left[v(\sqrt{4t}\eta + x) - v(a) \right] e^{-\|\eta\|_2^2} d\eta \quad \forall (x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*.$$

Es seien

$$M := \|v\|_\infty = \sup \{ |v(x)| : x \in \mathbb{R}^n \} \in \mathbb{R}_+$$

und

$$s(x, t, \omega) := \sup \left\{ \left| v(\sqrt{4t}\eta + x) - v(a) \right| : \eta \in B(0, \omega) \right\} \in \mathbb{R}_+, \quad (x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*, \quad \omega \in \mathbb{R}_+^*.$$

Für $(x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*$ und $\omega \in \mathbb{R}_+^*$ kann man mit $B^C(0, \omega) = \mathbb{R}^n \setminus B(0, \omega)$ schreiben

$$\begin{aligned} u(x, t) - v(a) &= \frac{1}{\sqrt{\pi^n}} \left(\int_{B^C(0, \omega)} \left[v(\sqrt{4t}\eta + x) - v(a) \right] e^{-\|\eta\|_2^2} d\eta \right. \\ &\quad \left. + \int_{B(0, \omega)} \left[v(\sqrt{4t}\eta + x) - v(a) \right] e^{-\|\eta\|_2^2} d\eta \right). \end{aligned}$$

Hiervon ausgehend erhält man

$$\begin{aligned} |u(x, t) - v(a)| &\leq \frac{1}{\sqrt{\pi^n}} \left(\int_{B^C(0, \omega)} \left| v(\sqrt{4t}\eta + x) - v(a) \right| e^{-\|\eta\|_2^2} d\eta \right. \\ &\quad \left. + \int_{B(0, \omega)} \left| v(\sqrt{4t}\eta + x) - v(a) \right| e^{-\|\eta\|_2^2} d\eta \right) \\ &\leq \frac{2M}{\sqrt{\pi^n}} \int_{B^C(0, \omega)} e^{-\|\eta\|_2^2} d\eta + \frac{1}{\sqrt{\pi^n}} \int_{B(0, \omega)} \left| v(\sqrt{4t}\eta + x) - v(a) \right| e^{-\|\eta\|_2^2} d\eta \\ &\leq \frac{2M}{\sqrt{\pi^n}} \int_{B^C(0, \omega)} e^{-\|\eta\|_2^2} d\eta + \frac{1}{\sqrt{\pi^n}} s(x, t, \omega) \int_{B(0, \omega)} e^{-\|\eta\|_2^2} d\eta \\ &\leq \frac{2M}{\sqrt{\pi^n}} \int_{B^C(0, \omega)} e^{-\|\eta\|_2^2} d\eta + \frac{1}{\sqrt{\pi^n}} s(x, t, \omega) \sqrt{\pi^n} \\ &= \frac{2M}{\sqrt{\pi^n}} \int_{B^C(0, \omega)} e^{-\|\eta\|_2^2} d\eta + s(x, t, \omega), \quad (x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*, \quad \omega \in \mathbb{R}_+^*. \end{aligned}$$

Nach diesen Vorbereitungen sei jetzt zum Beweis der Grenzwertaussage $\epsilon > 0$ gewählt.

1. Es sei $\omega > 0$ so gewählt, daß gilt

$$\frac{2M}{\sqrt{\pi^n}} \int_{B^C(0, \omega)} e^{-\|\eta\|_2^2} d\eta < \frac{\epsilon}{2},$$

(Gauss-Integral).

2. Aufgrund der Stetigkeit von v in a kann $\delta > 0$ so gewählt werden, daß gilt

$$|v(z) - v(a)| < \frac{\epsilon}{2} \quad \forall z \in \mathbb{R}^n : \|z - a\|_2 < \delta.$$

3. Es sei

$$\beta := \min \left\{ \frac{\delta^2}{4}, \frac{\delta^4}{256 \omega^4} \right\} \in \mathbb{R}_+^*.$$

4. Für $(x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*$ mit $\|(x, t) - (a, 0)\|_2 < \beta$ erhält man zunächst

$$\|x - a\|_2 + \sqrt{4t}\omega < \delta.$$

Hieraus dann für jedes $\eta \in B(0, \omega)$

$$\|\sqrt{4t}\eta + x - a\|_2 < \delta,$$

also nach Wahl von δ auch

$$\left| v\left(\sqrt{4t}\eta + x\right) - v(a) \right| < \frac{\epsilon}{2}.$$

Somit gilt

$$s(x, t, \omega) \leq \frac{\epsilon}{2}.$$

Nach obigen Vorbereitungen folgt zusammen mit 1.)

$$|u(x, t) - v(a)| < \epsilon.$$

Der vorgeführte Konstruktionsprozeß zeigt also

$$\forall \epsilon > 0 \exists \beta > 0 : \left(|u(x, t) - v(a)| < \epsilon \quad \forall (x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^* : \|(x, t) - (a, 0)\|_2 < \beta \right).$$

Dies ist aber gerade die behauptete Grenzwertaussage.

q.e.d.

Bemerkung:

1. Mit Satz B3 ist die Existenz einer Lösung des gestellten Anfangswertproblems gesichert, denn man braucht nur die Funktion u stetig in die Null-Zeitschicht fortzusetzen. Unter der zusätzlichen Forderung einer exponentiellen Wachstumsbeschränkung

$$u(x, t) \leq c e^{d \|x\|_2^2} \quad \forall (x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*$$

mit $c, d \in \mathbb{R}_+^*$ kann auch Eindeutigkeit gewährleistet werden (s. [38], [44]).

2. Die Integraldarstellung von u zeigt, daß die Temperatur $u(x, t)$ am Ort $x \in \mathbb{R}^n$ zum Zeitpunkt $t > 0$ global von sämtlichen Starttemperaturwerten $v(y), y \in \mathbb{R}^n$, abhängt, wobei jeder Startwert einen Gewichtungsfaktor hat. Letzterer sorgt allerdings dafür, daß die Abhängigkeit mit zunehmendem Abstand exponentiell fällt.

3. Es sei $v \geq 0$. Gilt $v \equiv 0$, so folgt $u \equiv 0$. Gilt $v \not\equiv 0$, so folgt

$$u(x, t) > 0 \quad \forall (x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^*.$$

Dies bedeutet, daß Störungen der Anfangsbedingung eine unendlich große Ausbreitungsgeschwindigkeit besitzen, denn aus der Existenz eines $y \in \mathbb{R}^n$ mit $v(y) > 0$ folgt, daß zu einem späteren Zeitpunkt $t > 0$ die Temperatur überall positiv ist.

Bezeichnungen

$\partial D, \bar{D}, \overset{\circ}{D}$	Rand, Abschluß und offener Kern von D
$ABB(X, K)$	K -Vektorraum aller Abbildungen $X \rightarrow K$, X eine Menge, K ein Körper
$S_\infty = \mathbb{C}^\mathbb{N} = ABB(\mathbb{N}, \mathbb{C})$	\mathbb{C} -Vektorraum aller Folgen in \mathbb{C}
$C^k(D, \mathbb{R})$	Raum der k -mal stetig differenzierbaren Funktionen auf D
\mathbb{N}	Menge der natürlichen Zahlen
\mathbb{N}^*	Menge der natürlichen Zahlen ohne Null
\mathbb{R}	Menge der reellen Zahlen
\mathbb{R}^*	Menge der reellen Zahlen ohne Null
$\mathbb{R}_+, \mathbb{R}_-$	Menge der nicht-negativen bzw. nicht-positiven reellen Zahlen
$\mathbb{R}_+^*, \mathbb{R}_-^*$	Menge der positiven bzw. negativen reellen Zahlen
\mathbb{C}	Menge der komplexen Zahlen
\mathbb{C}^*	Menge der komplexen Zahlen ohne Null
$\mathbb{C}_- = \{z \in \mathbb{C} : \operatorname{Re}(z) \leq 0\}$	linke, komplexe Halbebene
$\overset{\circ}{\mathbb{C}}_- = \{z \in \mathbb{C} : \operatorname{Re}(z) < 0\}$	offene, linke, komplexe Halbebene
\mathbb{K}	Menge der reellen oder komplexen Zahlen
$\ \cdot\ _2$	euklidische Norm
$\ \cdot\ _\infty$	Maximum-Norm
$\ \cdot\ _F$	Frobenius-Norm
$\langle \cdot, \cdot \rangle$	Standard-Skalarprodukt im \mathbb{R}^n
$\operatorname{grad} f$	Gradient bzw. einzeilige Jacobi-Matrix der Funktion f
$\nabla f = (\operatorname{grad} f)^T$	als Spalte geschriebener Gradient der Funktion f
$\nabla^2 f = Hf$	Hesse-Matrix der Funktion f
$\operatorname{div} v$	Divergenz des Vektorfeldes v
$x = (x_j)_{j=1, \dots, n}$	Vektor x mit den Komponenten x_j
x^T	als Zeile geschriebener Vektor x
\exists	Es existiert ein
\exists_1	Es existiert genau ein
\forall	Für alle
e^i	i -ter Standardbasisvektor des \mathbb{R}^n
$M(m \times n, K) = K^{m \times n}$	$m \times n$ -Matrizen mit Einträgen aus einem Körper K
$GL(n, K)$	Gruppe der invertierbaren Matrizen über dem Körper K (Groupe lineaire)
$\sigma(A)$	Spektrum der Matrix A

$B(a, \epsilon)$	offene Kugel mit Mittelpunkt a und Radius ϵ
$N(p) = \{z \in \mathbb{C} : p(z) = 0\}$	Nullstellenmenge des Polynoms $p : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$
$\mu_p(z) \in \mathbb{N}$	algebraische Vielfachheit der komplexen Zahl z im Polynom $p : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$
$\arg(z) \in [0, 2\pi[$	Polarwinkel der komplexen Zahl z
ϕ_H	charakteristisches Polynom eines Mehrschrittverfahrens bzgl. $H \in \mathbb{C}$
S_α	Stabilitätsbereich mit halbem Öffnungswinkel α
\emptyset	leere Menge
$A \subset B$	A ist Teilmenge von B mit zugelassener Gleichheit
$\mathcal{L}_1(\mathbb{R}^n)$	\mathbb{C} -Vektorraum der Lebesgue-integrierbaren \mathbb{C} -wertigen Funktionen
$ \alpha := \sum_{j=1}^n \alpha_j \in \mathbb{N}$	Betrag eines Multi-Indexes $\alpha \in \mathbb{N}^n$
$c^\alpha := c^{ \alpha } \in \mathbb{C}$	Potenz einer komplexen Zahl $c \in \mathbb{C}$ mit einem Multi-Index $\alpha \in \mathbb{N}^n$
$x^\alpha := \prod_{j=1}^n x_j^{\alpha_j} \in \mathbb{R}$	Potenz eines Vektors $x \in \mathbb{R}^n$ mit einem Multi-Index $\alpha \in \mathbb{N}^n$
$\hat{f} = f^\wedge$	Fourier-Transformierte der Funktion $f \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R}^n)$
$f * g$	Faltung der Funktionen $f, g \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R}^n)$
$\partial^\alpha f := \frac{\partial^{ \alpha } f}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_n^{\alpha_n}}$	partielle Ableitung der Funktion f zum Multi-Index $\alpha \in \mathbb{N}^n$
BHTE	bio-heat-transfer-equation
AWP, IVP	Anfangswertproblem, Initial value problem
ARWP, IBVP	Anfangsrandwertproblem, Initial boundary value problem
ODE, PDE	Ordinary differential equation, Partial differential equation
ESV, MSV	Einschrittverfahren, (lineares) Mehrschrittverfahren
RKV	Runge-Kutta-Verfahren
FVV	Finite-Volumen-Verfahren
IMEX-Verfahren	gemischt implizit-explizites Verfahren
BDF	backward differentiation formula, Gear'sches Verfahren
SBDF	Semi-implizites BDF-Verfahren
CNEE	Crank-Nicolson-Explizit-Euler-Verfahren
MOL	vertikale Linienmethode, method of lines
LGS	Lineares Gleichungssystem
BICGSTAB	bi-conjugate-gradient-stabilized-Verfahren
ILU	unvollständige LR-Zerlegung, incomplete lower-upper decomposition

Literatur

- [1] R. C. AIKEN. *Stiff Computation*. Oxford University Press, New York - Oxford, 1985.
- [2] P. ALBRECHT. *Die numerische Behandlung gewöhnlicher Differentialgleichungen*. Hanser Verlag, München, 1985.
- [3] U. M. ASCHER, S. J. RUUTH, B. T. R. WETTON. *Implicit-Explicit Methods for Time-Dependant Partial Differential Equations*. SIAM Journal on Numerical Analysis, Volume 32, Number 3, 1995.
- [4] R. BECKER. *Theorie der Wärme*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1966.
- [5] J. BEY. *Finite-Volumen- und Mehrgitter-Verfahren für elliptische Randwertprobleme*. B. G. Teubner, Stuttgart, Leipzig, 1998.
- [6] M. BREUSS, B. FISCHER, A. MEISTER. *The unsteady thermoregulation of premature infants - a model and its application*. Proceedings of the GAMM-Workshop: Discrete Modelling and Discrete Algorithms in Continuum Mechanics, T. Sonar and I. Thomas (eds.), Logos, Berlin, 47-56, 2001.
- [7] M. BREUSS, A. MEISTER, B. FISCHER. *The Numerical Simulation of Unsteady Heat Conduction in a Premature Infant*. Numerical Methods for Fluid Dynamics VIII, M.J. Baines and K.W. Morton (eds.), Clarendon Press, Oxford, 239-246, 2001.
- [8] W. BUNSE, A. BUNSE-GERSTNER. *Numerische lineare Algebra*. B. G. Teubner, Stuttgart, 1985.
- [9] O. BUSSMANN. *Modell der Thermoregulation des Früh- und Neugeborenen unter Einbeziehung der thermischen Reife*. Medizinische Universität zu Lübeck, Institut für Medizintechnik, Lübeck, 2000.
- [10] H. S. CARSLAW, J. C. JAEGER. *Conduction of heat in solids*. Oxford at the Clarendon Press, 1959.
- [11] L. CESARI. *Asymptotic Behavior and Stability Problems in Ordinary Differential Equations*. Springer-Verlag, Berlin - Heidelberg - New York, 3. edition, 1971.
- [12] W. J. COIRIER. *An Adaptively-Refined, Cartesian, Cell-Based Scheme for the Euler and Navier-Stokes Equations*. The University of Michigan, Dissertation, 1994.
- [13] F. J. DEISTER. *Selbstorganisierendes hybrid-kartesisches Netzverfahren zur Berechnung von Strömungen um komplexe Konfigurationen*. VDI-Verlag, Fortschritt-Berichte, Reihe 7, Nr. 430, 2002.
- [14] K. DEKKER, J. G. VERWER. *Stability of Runge-Kutta methods for stiff nonlinear differential equations*. North-Holland, Amsterdam - New York - Oxford, 1984.
- [15] P. DEUFLHARD, F. BORNEMANN. *Scientific Computing with Ordinary Differential Equations*. Springer-Verlag, 2002.
- [16] F. A. DUCK. *Physical Properties of Tissue - 1. Mammals*. Academic Press, London, 1990.
- [17] A. FANAROFF, R. MARTIN. *General Principles of Thermoregulation in the Newborn*. Neonatal-Perinatal Medicine, Diseases of the Fetus and Infant, 397-416, 1988.

- [18] D. FENNER. *Dreidimensionale Simulation der Thermoregulation von Früh- und Neugeborenen: Numerik und Visualisierung*. Universität Hamburg, Fachbereich Mathematik, Diplomarbeit, Hamburg, 2003.
- [19] J. H. FERZIGER, M. PERIC. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag, 1999.
- [20] D. FIALA, K. LOMAS, M. STOHRER. *A computer model of human thermoregulation for a wide range of environmental conditions: the passive system*. J. Appl. Physiol. 87(5): 1957-1972, 1999.
- [21] B. FISCHER, M. LUDWIG, A. MEISTER. *The Thermoregulation of Infants: Modeling and Numerical Simulation*. BIT, Vol. 41, Number 5, 950-966, 2001.
- [22] O. FORSTER. *Analysis 3*. Vieweg-Verlag, Braunschweig / Wiesbaden, 1996.
- [23] J. FRANK, W. H. HUNSDORFER, J. G. VERWER. *Stability of implicit-explicit linear multistep methods*. Centrum voor Wiskunde en Informatica, Department of Numerical Mathematics, NM-R9623, Amsterdam, 1996.
- [24] H. FRANKENBERGER, A. GÜTHE. *Inkubatoren*. Verlag TÜV Rheinland, 1991.
- [25] R. T. FRANKENBERGER. *Modell zur Simulation der Thermodynamik von Frühgeborenen*. Medizinische Universität zu Lübeck - Institut für Medizintechnik, Lübeck, 1996.
- [26] C. GERTHSEN, H. O. KNESER, H. VOGEL. *Physik*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1989.
- [27] W. HACKBUSCH. *Iterative Lösung großer schwachbesetzter Gleichungssysteme*. B. G. Teubner, Stuttgart, 1993.
- [28] W. HAHN. *Theory and Application of Liapunov's Direct Method*. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N. J., 3. edition , 1963.
- [29] E. HAIRER, S. P. NORSETT, G. WANNER. *Solving Ordinary Differential Equations 1 - Nonstiff Problems*. Springer-Verlag, 1993.
- [30] E. HAIRER, G. WANNER. *Solving Ordinary Differential Equations 2 - Stiff and Differential-Algebraic Problems*. Springer-Verlag, 1996.
- [31] K. HAMMARLUND, G. SEDIN, B. STRÖMBERG. *Transepidermal water loss in newborn infants (VIII)*. Acta Paediatr Scand, 72:721-728, 1983.
- [32] H. HANDELS. *Medizinische Bildverarbeitung*. B. G. Teubner, Stuttgart - Leipzig, 2000.
- [33] P. HENRICI. *Error Propagation for Difference Methods*. John Wiley and Sons, Inc., New York - London, 1963.
- [34] E. HERING, R. MARTIN, M. STOHRER. *Physik für Ingenieure*. Springer-Verlag, 2002.
- [35] W. HUNSDORFER. *Partially Implicit BDF2 Blends for Convection Dominated Flows*. SIAM Journal on Numerical Analysis, Volume 38, Number 6, 2001.
- [36] W. HUNSDORFER, J. G. VERWER. *Numerical Solution of Time-Dependant Advection-Diffusion-Reaction Equations*. Springer-Verlag, 2003.

- [37] H. JIN, R. I. TANNER. *Generation of unstructured tetrahedral meshes by advancing front technique*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 36:1805-1823, 1993.
- [38] J. JOST. *Partielle Differentialgleichungen*. Springer-Verlag, 1998.
- [39] P. KNABNER, L. ANGERMANN. *Numerik partieller Differentialgleichungen*. Springer-Verlag, 2000.
- [40] K. KÖNIGSBERGER. *Analysis 1*. Springer-Verlag, 1993.
- [41] K. KÖNIGSBERGER. *Analysis 2*. Springer-Verlag, 1997.
- [42] H. KUCHLING. *Taschenbuch der Physik*. Verlag Harri Deutsch, Thun und Frankfurt am Main, 1978.
- [43] V. LAKSHMIKANTHAM, D. TRIGIANTE. *Theory of Difference Equations: Numerical Methods and Applications*. Academic Press, Inc., San Diego, CA, 1988.
- [44] S. LARSSON, V. THOMEE. *Partial Differential Equations with Numerical Methods*. Springer-Verlag, 2003.
- [45] L. LEE, A. LUMSDAINE, J. SIEK. *The Iterative Template Library*. University of Notre Dame, Laboratory for Scientific Computing, 1998.
- [46] DRÄGERWERK AG LÜBECK, ABT. GRUNDLAGENENTWICKLUNG. Moislinger Allee 53-55, 23542 Lübeck.
- [47] DRÄGERWERK AG LÜBECK, ABT. GRUNDLAGENENTWICKLUNG. *Kalkulationsprogramm „Heat Balance“, Version 2.0a*. Moislinger Allee 53-55, 23542 Lübeck, 1994.
- [48] DRÄGERWERK AG LÜBECK, ABT. GRUNDLAGENENTWICKLUNG. *Simulationsprogramm „Baby Thermoregulation Simulation“*. Moislinger Allee 53-55, 23542 Lübeck, 2000.
- [49] M. LUDWIG. *Die numerische Simulation der Temperaturverteilungen in Früh- und Neugeborenen*. Universität Hamburg, Fachbereich Mathematik, Diplomarbeit, Hamburg, 1999.
- [50] A. MEISTER. *Numerik linearer Gleichungssysteme - Eine Einführung in moderne Verfahren*. Vieweg-Verlag, Wiesbaden, 1999.
- [51] P. MÖLLER, P. HANSBO. *On advancing front mesh generation in three dimensions*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 38:3551-3569, 1995.
- [52] H. H. PENNES. *Analysis of Tissue and Arterial Blood Temperatures in the Resting Human Forearm*. Journal of Applied Physiology, Volume 1, Number 2, 1948.
- [53] L. S. PONTRJAGIN. *Gewöhnliche Differentialgleichungen*. VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1965.
- [54] M. H. PROTTER, H. F. WEINBERGER. *Maximum Principles in Differential Equations*. Springer-Verlag, New York, 1999.
- [55] R. D. RICHTMYER, K. W. MORTON. *Difference methods for initial value problems*. John Wiley and Sons, New York, London, Sydney, 2. edition, 1967.
- [56] N. RUTTER, D. HULL. *Water loss from the skin of term and preterm babies*. Arch. Dis. Child., 54(11):858-68, 1979.

- [57] Y. SAAD. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. PWS Publishing Company, Boston, 1996.
- [58] R. SCHMIDT, G. THEWS, F. LANG. *Physiologie des Menschen*. Springer-Verlag, 2000.
- [59] H. R. SCHWARZ. *Numerische Mathematik*. B.G. Teubner Stuttgart, 1993.
- [60] J. SIEK, A. LUMSDAINE. *The Matrix Template Library: A Unifying Framework for Numerical Linear Algebra*. University of Notre Dame, Department of Computer Science and Engineering, Laboratory for Scientific Computing, Notre Dame, IN 46556, 1998.
- [61] G. SIMBRUNER. *Thermodynamic Models for Diagnostic Purposes in the Newborn and Fetus*. Facultas Verlag, Wien, 1983.
- [62] T. SONAR. *Mehrdimensionale ENO-Verfahren*. B. G. Teubner, Stuttgart, 1997.
- [63] J. A. J. STOLWIJK, J. D. HARDY. *Temperature Regulation in Man - A Theoretical Study*. Pflügers Archiv 291, 129-162, 1966.
- [64] K. STREHMEL, R. WEINER. *Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen*. B. G. Teubner, Stuttgart, 1995.
- [65] J. W. THOMAS. *Numerical Partial Differential Equations: Finite Difference methods*. Springer-Verlag, New York, 1995.
- [66] A. TVEITO, R. WINTHER. *Einführung in partielle Differentialgleichungen*. Springer-Verlag, 2002.
- [67] J. ULTMANN. *Computational model for insensible water loss from the newborn*. Pediatrics, Vol. 79, No. 5, 760-765, 1987.
- [68] H. A. VAN DER VORST. *BI-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of BI-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems*. SIAM J. Sci. Stat. Comput., Vol. 13, No. 2, 1992.
- [69] W. WALTER. *Gewöhnliche Differentialgleichungen*. Springer-Verlag, Berlin - Heidelberg - New York, 1976.
- [70] H. WERNER, H. ARNDT. *Gewöhnliche Differentialgleichungen - Eine Einführung in Theorie und Praxis*. Springer-Verlag, Berlin - Heidelberg, 1986.
- [71] J. WERNER, P. WEBB. *A Six-cylinder Model of Human Thermoregulation for General Use on Personal Computers*. Ann. Physiol. Anthropol., 12(3):123-134, 1993.
- [72] M. WRONNA. *Ein Finite-Volumen-Verfahren zur dreidimensionalen und zeitgenauen Integration der Wärmeleitungsgleichung in Festkörpern aus unterschiedlichen Materialien*. Diplomarbeit, Universität zu Lübeck, Institut für Mathematik, 2004.

Erklärung

Hiermit erkläre ich, daß ich die vorliegende Arbeit mit Ausnahme des Anhanges A selbständig und nur mit den angegebenen Hilfsmitteln angefertigt habe. Die im Anhang A beschriebene Erzeugung einer Oberflächentriangulierung wurde von meinem ehemaligen Diplomanden Herrn Dipl.-Inf. Michael Wronna vorgenommen.

Lübeck, 15. November 2005

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name	Martin Ludwig
Geburtstag	22. März 1972 in Bad Oldesloe (Schleswig-Holstein).
Familienstand	ledig, keine Kinder
Staatsbürgerschaft	deutsch

Schulbildung

1978 - 1982	Besuch der Matthias-Claudius-Schule in Reinfeld (Schleswig-Holstein).
1982 - 1991	Besuch der Theodor-Mommsen-Schule in Bad Oldesloe (Schleswig-Holstein).
4. Juni 1991	Abitur

Grundwehrdienst

Juli 1991 - Juni 1992	Grundwehrdienst in Wentorf (Hamburg).
Juli 1992 - Sep. 1992	Tätigkeit als Lagerarbeiter bei der Mercedes-Benz AG in Lübeck.

Hochschulstudium

Okt. 1992	Beginn des Physikstudiums an der Universität Hamburg.
Okt. 1993	Wechsel des Studienfaches von Physik auf Mathematik.
10. Aug. 1995	Vordiplom in Mathematik
Okt. 1995 - Dez. 1999	Hauptstudium mit der Studienrichtung Angewandte Mathematik und Nebenfach Informatik. Diplom-Arbeit in Zusammenarbeit mit dem Institut für Medizintechnik der Medizinischen Universität zu Lübeck und mit der Drägerwerk AG, Lübeck (Diplomandenvertrag); Titel: „Die numerische Simulation der Temperaturverteilungen in Früh- und Neugeborenen“.
8. Feb. 1999	Teilnahme am Workshop Thermoregulation der Drägerwerk AG, Lübeck: Vortrag über den Inhalt der Diplom-Arbeit.
21. Dez. 1999	Diplom in Mathematik
Jan. - April 2000	Gemeinsame Veröffentlichung mit Prof. B. Fischer, Medizinische Universität zu Lübeck, und Dr. A. Meister, Universität Hamburg: Titel: „An application of the finite volume method to the thermoregulation of infants“, Hamburger Beiträge zur Angewandten Mathematik, Reihe F: Computational Fluid Dynamics and Data Analysis, Nr. 12, 2000.

Weiterer Werdegang

1. Mai 2000	Anstellung als Mathematiker bei der Condor-Lebensversicherungs-AG in Hamburg.
2000	Veröffentlichung in den Proceedings der GAMM-Jahrestagung, Göttingen, 2000: B. Fischer, M. Ludwig, A. Meister: A finite volume method to compute the steady state temperature distribution in premature or newborn infants.

- 2001 Veröffentlichung in der Zeitschrift BIT, 2001, Vol.41, Number 5, 950-966: B. Fischer, M. Ludwig, A. Meister - The Thermoregulation of Infants: Modeling and Numerical Simulation.
- April - Juli 2002 Teilnahme an den Grundwissen-Kursen Lebens- und Pensionsversicherungsmathematik der Deutschen Aktuars-Akademie in Hamburg.
30. Sep. 2002 Ausscheiden aus der Condor-Lebensversicherungs-AG.
1. Okt. 2002 Anstellung als wissenschaftlicher Angestellter am Institut für Mathematik der Universität zu Lübeck. 3-jähriges Stipendium im Rahmen des Förderprojektes „Entwicklung eines Verfahrens zur virtuellen Simulation von Wärmetherapien bei Früh- und Neugeborenen“ der Technologiestiftung Schleswig-Holstein in Zusammenarbeit mit der Drägerwerk AG, Lübeck.
- Okt. 2003 - Mai 2004 Betreuung der Diplomarbeit von Herrn cand. inf. Michael Wronna im Rahmen des Diplomstudienganges Informatik an der Universität zu Lübeck. Titel: Ein Finite-Volumen-Verfahren zur dreidimensionalen und zeitgenauen Integration der Wärmeleitungsgleichung in Festkörpern aus unterschiedlichen Materialien.
14. / 15. Mai 2004 Teilnahme am 25. Norddeutschen Kolloquium über Angewandte Analysis und Numerische Mathematik in Hamburg: Vortrag über den gegenwärtigen Stand des oben genannten Förderprojektes.
29. Juli 2004 Vortrag über den gegenwärtigen Stand des oben genannten Förderprojektes in der Abt. Grundlagenentwicklung der Drägerwerk AG, Lübeck.

Lübeck, 15. November 2005