

INAUGURAL – DISSERTATION
zur
Erlangung der Doktorwürde
der
Naturwissenschaftlich–Mathematischen
Gesamtfakultät
der Ruprecht–Karls–Universität
Heidelberg

vorgelegt von
Diplom–Physiker Erik Meinköhn
aus Berlin

Tag der mündlichen Prüfung: 27.11.2002

**Modellierung dreidimensionaler
Strahlungsfelder
im
frühen Universum**

Gutachter: Prof. Dr. Rainer Wehrse
Prof. Dr. Rolf Rannacher

Modellierung dreidimensionaler Strahlungsfelder im frühen Universum

Die vorliegende Arbeit befaßt sich mit der Modellierung von dreidimensionalen Strahlungsfeldern in Gaswolken aus dem frühen Universum, wobei insbesondere der Einfluß unterschiedlicher Verteilungen der Dichte und der Geschwindigkeit im Zentrum der Untersuchung stehen. Solche Gaswolken stellen hoch-rotverschobene Objekte dar, für die in den meisten Fällen nur der Ly α Übergang des Wasserstoffatoms vom ersten angeregten Niveau zum Grundzustand als einzige prominente Emissionslinie im Spektrum beobachtet wird. Da man annimmt, daß diese Wasserstoffwolken Vorläufer heutiger Galaxien sind, ist die Behandlung des Ly α Linientransports für das Verständnis von Entstehung und Entwicklung der Galaxien im frühen Universum von großer Bedeutung. Das beobachtete Profil dieser Linie erlaubt Rückschlüsse sowohl auf die Komplexität der räumlichen Verteilung und die Kinematik des interstellaren Gases als auch auf die Natur der Photonenquelle. Zur Untersuchung dieser Konfigurationen wurde ein Code entwickelt, der die dreidimensionale, frequenzabhängige Strahlungstransportgleichung für beliebige nicht-relativistisch bewegte Medien löst. Die numerische Behandlung einer solchen partiellen Integro-Differentialgleichung stellt eine außerordentlich anspruchsvolle Aufgabe dar, da die Strahlungsintensität von 6 Variablen abhängt, nämlich von den 3 Orts- und 2 Richtungsvariablen sowie von der Frequenz. Zu ihrer Lösung wurden hochgradig effiziente Verfahren implementiert, die die Simulation der oben beschriebenen komplexen Strahlungstransportprobleme mit hinreichender Genauigkeit erlauben, so daß ein quantitativer Vergleich mit Beobachtungsdaten möglich wird. Wegen der Größe der resultierenden Gleichungssysteme wurden Parallelisierungs- und Gitterverfeinerungsstrategien angewandt.

Modelling three dimensional radiation fields in the early universe

The present work aims at the modelling of three-dimensional radiation fields in gas clouds from the early universe, in particular as to the influence of varying distributions of density and velocity. In observations of high-redshift gas clouds, the Ly α transition from the first excited energy level to the ground state of the hydrogen atom is usually found to be the only prominent emission line in the entire spectrum. It is a well-known assumption that high-redshifted hydrogen clouds are the precursors of present-day galaxies. Thus, the investigation of the Ly α line is of paramount importance for the theory of galaxy formation and evolution. The observed Ly α line – or rather, to be precise, its profile – reveals both the complexity of the spatial distribution and of the kinematics of the interstellar gas, and also the nature of the photon source. In this thesis we have developed a code which is capable of solving the three-dimensional frequency-dependent radiative transfer equation for arbitrarily non-relativistically moving media. The numerical treatment of the associated partial integro-differential equation is an extremely challenging task, since radiation intensity depends on 6 variables, namely 3 space variables, 2 variables describing the direction of photon propagation, and the frequency. With the goal of a quantitative comparison with observational data in mind, the implementation of very efficient methods for a sufficiently accurate solution of the complex radiative transfer problems turned out to be a necessity. The size of the resulting linear system of equations makes the use of parallelization techniques and grid refinement strategies indispensable.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Bedeutung des mehrdimensionalen Strahlungstransports für die Astrophysik	1
1.2	Methoden zur Lösung der mehrdimensionalen Strahlungstransportgleichung	3
1.3	Ziel dieser Arbeit	5
2	Beschreibung der Finite-Elemente-Methode	9
2.1	Allgemeine Projektionsverfahren	10
2.2	Die FEM als Beispiel von Galerkin-Ansatzräumen	15
3	Monochromatischer Strahlungstransport	21
3.1	Die klassische Formulierung	21
3.2	Die schwache Formulierung	23
3.3	Galerkin-Diskretisierung	26
3.4	Fehlerschätzung und Adaptivität	28
3.4.1	Allgemein	28
3.4.2	Der monochromatische Strahlungstransport als Anwendungsbeispiel	32
3.5	Resultierende Matrixstruktur	37
3.6	Iterative Lösungsmethode des linearen Gleichungssystems	38
3.7	Parallelisierung	39
4	Strahlungstransport bei vollständiger Wiederverteilung	41
4.1	Motivation und physikalische Eigenschaften	41
4.2	Mathematische Formulierung	44
4.3	Schwache Formulierung	46
4.4	Diskretisierung	47
4.5	Fehlerschätzer	49
4.6	Resultierende Matrixstruktur und Lösung des Gleichungssystems	52
5	Strahlungstransport in bewegten Medien	57
5.1	Motivation und physikalische Eigenschaften	57
5.2	Mathematische Formulierung	59
5.3	Schwache Formulierung	62
5.4	Diskretisierung	63
5.5	Fehlerschätzer	65
5.6	Resultierende Matrixstruktur und Lösung des Gleichungssystems	66

6	Vergleiche zwischen 3D Codes	69
6.1	Verifizierung des monochromatischen Codes	69
6.1.1	Test I: Searchlight Beam Test	70
6.1.2	Test II: Strahlungsfeld einer plan-parallelen Schicht	73
6.1.3	Test III: Strahlungstransport in einem streuenden Halo	80
6.2	Validierung des frequenzabhängigen Codes	84
6.2.1	Modellbeschreibung	86
6.2.2	Makroskopische Geschwindigkeitsfelder	87
6.2.3	Einfaches Testbeispiel	88
7	Lyα Linienprofile von hoch-rotverschobenen Galaxien	93
7.1	Elliptische Halos	94
7.2	Mehrfachquellen	103
8	Zusammenfassung und Ausblick	111
8.1	Zusammenfassung	111
8.2	Ausblick	114
A	„Separable Representation Method“	125
B	Finite-Differenzen-Methode	126
B.1	Monochromatischer Strahlungstransport	126
B.2	Frequenzabhängiger Strahlungstransport	127

Abbildungsverzeichnis

1	Vergleich zwischen Aufnahmen des Hubble-Space-Telescope und simulierten Bildern angestrahlter „Young Stellar Objects“	6
2	Knotenbasisfunktionen für lineare und bilineare Ansätze	17
3	Triangulierung der Einheitssphäre S^2 (80 bzw. 320 Elemente)	27
4	Problemskizze für die Beobachtung einer Punktquelle	35
5	Farbkodierte Geschwindigkeitsverteilungen für zwei rotierende Modellkonfigurationen	58
6	Test I: Intensitätsverteilung und Gitterstruktur für verschiedene adaptive Verfeinerungsstufen	71
7	Test I: Intensitätsverteilung auf einem Schnitt durch das Rechengebiet für verschieden adaptive Verfeinerungsstufen	72
8	Test II: Winkelverteilung der spezifischen Intensität für verschiedene optische Tiefen τ und Albedo γ	74
9	Test II: Winkelverteilung der spezifischen Intensität für große optische Tiefen $\tau = 10^5, 10^6$ und Albedo $\gamma = 0.98$	76
10	Test III: Abhängigkeit der mittleren Intensität J vom Abstand r vom Zentrum für unterschiedliche optische Tiefen τ und Ordinatenzahl M	83
11	$\text{Ly}\alpha$ Linienprofile eines statischen Halos mit kohärenter Streuung für unterschiedliche optische Tiefen	88
12	$\text{Ly}\alpha$ Linienprofile eines kollabierenden Halos mit kohärenter Streuung für den optisch dünnen und dicken Fall	90
13	$\text{Ly}\alpha$ Linienprofile eines statischen und eines kollabierenden Halos mit vollständiger Wiederverteilung	91
14	Ergebnisse für eine statische, oblate Modellkonfiguration	95
15	Räumliche Intensitätsverteilung für eine statische, oblate Modellkonfiguration für unterschiedliche Beobachtungsrichtungen	96
16	Falschfarbendarstellung der Intensitätsverteilung für ausgewählte Frequenzpunkte unter verschiedenen Beobachtungswinkeln	98
17	Ergebnisse für eine oblate Modellkonfiguration mit einer freien Einfallbewegung	99
18	Falschfarbendarstellung der Intensitätsverteilung für ausgewählte Frequenzpunkte unter verschiedenen Beobachtungswinkeln für eine kollabierende, oblate Halokonfiguration	100
19	Ergebnisse für eine oblate Modellkonfiguration mit einer Keplerschen Rotationsbewegung um die z -Achse	101

20	Falschfarbendarstellung der Intensitätsverteilung für ausgewählte Frequenzpunkte unter verschiedenen Beobachtungswinkeln für eine rotierende, oblate Halokonfiguration	102
21	Räumliche Intensitätsverteilung für eine statische, sphärisch symmetrische Modellkonfiguration mit 3 ausgedehnten Quellregionen unter verschiedenen Beobachtungsrichtungen	104
22	Ergebnisse für eine sphärisch symmetrische Modellkonfiguration mit drei Quellgebieten im Innern für den statischen Fall und zwei unterschiedlichen Halogeswindigkeitsfelder (Kollaps und Rotation)	105
23	Falschfarbendarstellung der Intensitätsverteilung eines statischen Halos mit drei Quellregionen für ausgewählte Frequenzpunkte unter verschiedenen Beobachtungswinkeln	107
24	Falschfarbendarstellung der Intensitätsverteilung für ausgewählte Frequenzpunkte unter verschiedenen Beobachtungswinkeln für eine kollabierende Halokonfiguration mit drei Quellgebieten	108
25	Falschfarbendarstellung der Intensitätsverteilung für ausgewählte Frequenzpunkte unter verschiedenen Beobachtungswinkeln für eine rotierende Halokonfiguration mit drei Quellgebieten	109
26	Zeitlicher Verlauf der Intensität eines Lichtpulses für verschiedene optische Tiefen	116

Tabellenverzeichnis

1	Eine Modellhierarchie des Strahlungstransports	8
2	Test I: Untersuchung der Abweichung der Lösung von einem analytischen Wert für verschiedene adaptive Verfeinerungsstufen . . .	70
3	Test II: Untersuchung der an einem Punkt und in die Richtung $\mu = 0.705$ austretenden spezifischen Intensität für unterschiedlich erzeugte Gitter	77
4	Test II: Vergleich der Speicher- und CPU-Anforderungen zweier dreidimensionalen Codes für eine optisch dünne ($\tau = 0.4$) und eine optische dicke ($\tau = 20$) plan-parallele Schicht	78
5	Test III: Strahlungsfluß eines streudominierten Halos für unterschiedliche optische Tiefen τ und Ordinatenzahl M sowie für verschiedene Verfeinerungsstufen	82
6	Parameter, die für alle frequenzabhängigen Testbeispiele gelten . .	86

1 Einleitung

1.1 Bedeutung des mehrdimensionalen Strahlungstransports für die Astrophysik

Im Jahre 1905 gelang Schuster (Schuster 1905) erstmals die Herleitung einer allgemeinen Gleichung, die den Transport von Strahlung durch ein Medium beschreibt und dabei Absorptions- und Emissionseffekte berücksichtigt. Als „Strahlungstransportgleichung“ hat diese Gleichung seitdem eine zentrale Bedeutung für die quantitative Interpretation kosmischer Objekte. Bis in die sechziger Jahre hinein wurde diese Gleichung im wesentlichen mit Hilfe von analytischen Lösungen erforscht (Chandrasekhar 1960; Kourganoff 1963). Erst durch den außerordentlichen Fortschritt in der Leistungsfähigkeit elektronischer Rechenanlagen in den letzten Jahren gewann die numerische Behandlung des Problems an Bedeutung. Bis zum heutigen Tag wurden eine ganze Reihe von numerischen Verfahren entwickelt, die die eindimensionale Strahlungstransportgleichung lösen (Mihalas 1978; Kalkofen 1987), so daß bereits eine Vielzahl detaillierter numerischer Untersuchungen statischer Systeme in sphärisch-symmetrischen oder plan-parallelen Konfigurationen vorliegen. Viele dieser Codes verwenden einfache Techniken wie die sogenannte „Accelerated Lambda Iteration“ (ALI; für eine Übersicht siehe Hubney 1989) und die „Complete Linearization“ (CL; Auer & Mihalas 1969). Die Beschränkung auf eindimensionale Konfigurationen engt jedoch die Wahl der möglichen astrophysikalischen Anwendungen beträchtlich ein.

Die Beobachtungstechnik in der Astronomie ist – nach Verbesserung der Sensitivität in den 80er Jahren – gegenwärtig vor allem durch eine außerordentliche Erhöhung der räumlichen Auflösung gekennzeichnet: neben der Plazierung von Teleskopen im Weltraum führt vor allem die neue Generation optischer Großteleskope mit rechnergesteuerten, aktiven optischen Komponenten zu einer extremen Verbesserung. Insbesondere durch den Einsatz von Interferometern (SUSI, GI2T, demnächst VLTI und in absehbarer Zukunft ALMA) können in zunehmendem Maße Himmelsobjekte räumlich aufgelöst werden (siehe dazu auch in Robertson & Tango 1994). Dabei stellt sich heraus, daß deren Geometrie oft viel komplexer ist, als man bisher glaubte, und es wurde deutlich, daß Modellierungen nicht mehr ausreichen, welche die mehrdimensionale Struktur und die internen Bewegungen dieser Gebiete vernachlässigen. Dies belegen z.B. Himmelsaufnahmen von Akkretionsscheiben, kollidierenden Galaxien, alten Novae, jungen Galaxien oder Sternentstehungsgebieten, die mit dem Hubble-Space-Telescope, dem ISO Satelliten oder dem „New Technology Telescope“ der ESO gemacht wurden. Insbesondere Beobachtungen von Sternentstehungsgebieten, den so genannten „Young Stellar Objects“ (YSO), wie etwa bipolare Reflexionsnebel (z.B. Lenzen 1987), bipolaren

Materiausströmungen (siehe Bachiller 1996) und Materiescheiben (z.B. McCaughrean & O'Dell 1996) zeigen zunächst eine Axialsymmetrie. Selbst die Vorgänger dieser YSOs, sternlose dichte Wolkenkerne, erscheinen als lang gestreckte Strukturen im Millimeter-Wellenlängenbereich (siehe z.B. Myers et al. 1991). Viele Planetarische Nebel sind ebenfalls von bipolarer Struktur, mit dem Egg-Nebel als einen der spektakulärsten Vertreter. Genauere Beobachtungen mit höherer räumlicher Auflösung zeigen, daß z.B. zirkumstellare Materie oder auch Molekül- und diffuse, neutrale Wasserstoffwolken, sog. HI-Wolken, eine sehr inhomogene Dichteverteilung und somit eine äußerst komplexe Struktur aufweisen (Colomb et al. 1980; Rosen & Bregman 1995; Macchetto et al. 1994; Capetti et al. 1995a,b,c). Weiterhin geht aus vielen Beobachtungen klar hervor, daß Streuprozesse berücksichtigt werden müssen.

Das Profil einer Emissionslinie wird unter anderem durch die komplexen Winkel- und Frequenzkopplungen der vollständigen Wiederverteilung, aber auch durch makroskopische Geschwindigkeitsfelder bestimmt. Die dreidimensionale Strahlungstransportgleichung ist bei Berücksichtigung von Streuung und Dopplereffekt eine partielle Integro-Differentialgleichung für die invariante Strahlungsintensität $\mathcal{I} = \mathcal{I}(x, \vartheta, \nu, t)$ (siehe Mihalas & Weibel-Mihalas 1984), die von Ort x , Richtung ϑ , Frequenz ν und Zeit t abhängt:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{I} + \vartheta \cdot \nabla_x \mathcal{I} - \frac{\mathbf{v}}{1 + \vartheta \cdot \boldsymbol{\beta}} \vartheta \cdot \nabla_x (\vartheta \cdot \boldsymbol{\beta}) \frac{\partial \mathcal{I}}{\partial \nu} = -(\kappa + \sigma) \mathcal{I} + \sigma \int_{\mathbb{R}^+} \int_{S^2} R \mathcal{I} d\vartheta' d\nu' + \kappa B. \quad (1)$$

In diese Gleichung gehen die folgenden Größen ein:

- S^2 : Einheitssphäre im \mathbb{R}^3
- ϑ : Einheitswinkel in S^2 , der die Ausbreitungsrichtung der Strahlung charakterisiert
- c : Lichtgeschwindigkeit
- $\boldsymbol{\beta} = \frac{\mathbf{v}}{c}$: Geschwindigkeitsfeld in Einheiten von c
- $\kappa = \kappa(x, \nu)$: Absorptionskoeffizient
- $\sigma = \sigma(x, \nu)$: Streukoeffizient
- $R = R(\nu', \vartheta'; \nu, \vartheta)$: Wiederverteilungsfunktion
- $B = B(T(x), \nu)$: Planckfunktion
- $T(x)$: Temperaturfeld

Gl. 1 wird üblicherweise unter der Bedingung gelöst, daß die von außen auf den Rand fallende Intensität vorgegeben ist.

1.2 Methoden zur Lösung der mehrdimensionalen Strahlungstransportgleichung

Die Modellierung komplexer astronomischer Konfigurationen ohne vereinfachende Annahmen wie sphärische Symmetrie oder plan-parallele Näherung, erfordert die Lösung der zweidimensionalen, häufig auch der dreidimensionalen Strahlungstransportgleichung. Für die numerische Behandlung des mehrdimensionalen Strahlungstransports liegen seit dem Ende der 80-er Jahre eine große Zahl von Veröffentlichungen vor, wobei die verwendeten Methoden grob in 3 Kategorien eingeteilt werden können: Monte-Carlo-Methoden, Diskrete-Ordinaten-Methoden und Winkel-Momenten-Methoden. *Monte-Carlo-Codes* sind äußerst flexibel, da sich das Konzept der Verfolgung von Photonenpaketen im Prinzip auf beliebig komplexe mehrdimensionale Konfigurationen anwenden läßt, wie z.B. beim UV Kontinuumtransport (Spaans 1996), beim optischen und infraroten Kontinuumtransport (Wolf et al. 1999), beim Moleküllinientransport (Hogerheijde 1998; Juvela 1998; Park & Hong 1998) und bei der Comptonstreuung (Pozdniakov et al. 1979; Haardt & Maraschi 1991). Für Probleme mit geringer bis mittlerer optischer Dicke konvergiert das Monte-Carlo Verfahren sehr schnell. Im Fall großer optischer Tiefen wird die Methode jedoch extrem zeitaufwändig, da der Fehler der Lösung nur sehr langsam abnimmt. Ist N die Zahl der simulierten Photonen, so ist der Fehler im schlechtesten Fall proportional zu $N^{-1/2}$. Allerdings gibt es Möglichkeiten, das Verfahren so zu verbessern, daß Fehler proportional N^{-1} erzielt werden können (siehe Haber 1970). Für optisch dicke Medien läßt sich die Diffusionsnäherung machen, für die die *Winkel-Momenten-Methoden* sehr gut geeignet sind (siehe Yorke et al. 1993; Sonnhalter et al. 1995; Murray et al. 1994). In optisch dünnen Medien versagen diese Methoden, da hier die Diffusionsnäherung nicht mehr gültig ist. Bei der *Diskrete-Ordinaten-Methode* wird neben dem Ortsraum auch die Ausbreitungsrichtung der Photonen diskretisiert, wobei der Ordinatenraum möglichst äquidistant aufgeteilt werden sollte. Für die räumliche Diskretisierung, d.h. die Diskretisierung des Transportoperators, werden Finite-Differenzen-Methoden oder geeigneten Charakteristikenverfahren, wie die Methode der kurzen oder langen Charakteristiken, auf strukturierten Gittern verwendet (siehe auch Stenholm et al. 1991; Dullemond & Turolla 2000). Die Struktur des resultierenden numerischen Schemas ist sehr einfach und für homogene Medien und glatte Daten ohne großen Speicheraufwand zu realisieren. Jedoch eignen sich diese Methoden nicht für den Fall komplexer Geometrien, in denen kleine Strukturen mit steilen Gradienten der Koeffizienten oder der spezifischen

Intensität aufgelöst werden müssen. Die Erzeugung adaptiver, d.h. lösungsangepaßter Gitter ist sehr schwierig, wenn nicht sogar unmöglich. Als Alternative eignen sich Finite-Elemente-Methoden (FEM) sehr gut. Sie verwenden unstrukturierte Gitter, um die oben beschriebenen komplexen Geometrien zu approximieren. Turek (1993) konzipierte eine FEM-Upwind Diskretisierung auf vorverfeinerten Gittern. Kanschat (1996) stabilisiert die FE-Diskretisierung mittels Stromliniendiffusion, wobei adaptiv verfeinerte und somit problemangepaßte Gitter auf der Basis eines a posteriori Fehlerindikators erzeugt werden. Trotz ihrer offensichtlichen Vorteile finden FEM aufgrund des deutlich größeren Aufwands bei der Programmentwicklung bei Astronomen bisher kaum Anwendungen. Die Diskretisierung der mehrdimensionalen Strahlungstransportgleichung führt zu einem sehr großen linearen Gleichungssystem, das nicht mehr direkt gelöst werden kann. Die Lösung erfolgt daher üblicherweise durch ein iteratives Verfahren (siehe z.B. Hackbusch 1993). Im astronomischen Umfeld wird häufig – in Verbindung mit der Diskrete-Ordinaten-Methode – die sogenannte “ Λ -Iteration” zur Lösung des resultierenden linearen Gleichungssystems verwendet (siehe z.B. Collison & Fix 1991; Efsthathiou & Rowan-Robinson 1991). Jedoch treten auch bei der Λ -Iteration wie beim Monte-Carlo-Verfahren in optisch dicken, streuenden Medien Konvergenzprobleme auf. Eine der bekanntesten Methoden, verbesserte Konvergenzraten zu erhalten, ist die “Accelerated Lambda Iteration” (ALI, siehe z.B. Scharmer 1981; Rybicki & Hummer 1991; Hubney 1989). In der Numerik wird die ALI als Defektkorrekturverfahren mit beinahe Block-Jacobi-Vorkonditionierung bezeichnet (siehe z.B. Varga 2000). Ein erster Schritt in Richtung bessere Konvergenzraten für den Problemfall eines streuenden, optisch dicken Mediums, ist die Verwendung einer vollständigen Jacobi-Vorkonditionierung (siehe Turek 1993). Da der Transportoperator explizit invertiert wird, konvergiert das vorkonditionierte Defektkorrekturverfahren für transportdominierte Probleme sehr schnell. Bei Ausnutzung der Dreiecksmatrixstruktur der Upwind-Diskretisierung (Turek 1993) ist die Inversion des Transportoperators tatsächlich extrem günstig und läßt sich auf eine Vektor-Matrix-Multiplikation zurückführen. Bei der Verwendung der Stromliniendiffusionsmethode (Kanschat 1996) wird jedoch eine exakte Inversion des Transportoperators nicht durchgeführt, da dadurch der Lösungsprozeß erheblich verlangsamt würde (siehe Ergebnisse von Führer 1993). Kanschat (1996) verwendet eine angenäherte Inversion mittels eines Multi-Grid oder Gauß-Seidel Schrittes. Die Konvergenzrate des Gauß-Seidel Verfahrens reagiert hochgradig empfindlich auf eine Zunahme der Konditionszahl des linearen Gleichungssystems. Diese Zunahme ergibt sich aus der sukzessiven Verfeinerung des Ortsgitters. Leider versagen die vorkonditionierten Defektkorrekturverfahren – wie auch andere Fixpunktiterationen – im interessanten Fall der Streudominanz, da die Konditionszahl der Iterationsmatrix zu groß wird. Als Alternative schlägt Turek (1993) eine andere Klasse von

Lösen für das lineare Gleichungssystem vor: die Krylovraum-Methoden. Hierbei handelt es sich um Varianten des Konjugierte-Gradienten-Verfahrens (siehe Saad 2000). Diese Klasse iterativer Löser ist hinsichtlich der Eigenwertverteilung des Problems wesentlich besser geeignet als die Fixpunkt-Methoden mit Vorkonditionierung (siehe auch Kanschat 1996). Ursprünglich wurde die Methode der konjugierten Gradienten für positiv definite (symmetrische) Probleme entwickelt. Turek (1993) und Kanschat (1996) zeigen, daß sich für nicht symmetrische Strahlungstransportprobleme die bi-CGSTAB Methode von van der Vorst (1992) bewährt. Der Fehler wird bedeutend schneller reduziert, als es bei einer Fixpunktiteration der Fall ist. Allerdings zeigt das bi-CGSTAB Verfahren ein äußerst unregelmäßiges Konvergenzverhalten.

1.3 Ziel dieser Arbeit

Das Ziel dieser Arbeit ist die Untersuchung dreidimensionaler Strahlungsfelder für ein Spektrallinientransportproblem in bewegten Medien, vorzugsweise für den Einsatz bei frühen Galaxien. Dies erfordert die Entwicklung eines Codes, der die frequenzabhängige Strahlungstransportgleichung (1) – zunächst für eine stationäre Konfiguration – löst. Die numerische Behandlung dieses Problems ist eine außerordentlich anspruchsvolle Aufgabe, da die Strahlungsintensität von 6 Variablen abhängt: 3 Orts- und 2 Richtungsvariablen, sowie der Frequenz. Dabei müssen hochgradig effiziente Verfahren implementiert werden, die die Simulation komplexer Strahlungstransportprobleme mit hinreichender Genauigkeit erlauben, so daß ein quantitativer Vergleich mit Beobachtungsdaten möglich wird. Komplexe Strahlungstransportprobleme ergeben sich beispielsweise, wenn steile Gradienten in der Lösung und in den Koeffizienten der Strahlungstransportgleichung (1) auftreten oder wenn die Auflösung kleiner Strukturen im Ortsraum erforderlich ist. Die Größe der resultierenden Gleichungssysteme macht dabei die Anwendung von Parallelisierung und geeigneter Gitterverfeinerungsstrategien unerlässlich.

Ein Algorithmus zur Lösung der monochromatischen Strahlungstransportgleichung für mehrdimensionale Konfigurationen wurde bereits von G. Kanschat (siehe Kanschat 1996) am Institut für Angewandte Mathematik der Universität Heidelberg entwickelt. Der monochromatische Code seiner Arbeit wurde übernommen. Neben der Weiterentwicklung des Codes ist es ein erklärtes Ziel der vorliegenden Arbeit, das Programm auf astronomische Konfigurationen anzuwenden. Dies geschieht zunächst für ein astronomisches Objekt, das aus Aufnahmen des Hubble-Space-Telescope eines interstellaren Nebels entnommen wurde. Durch die Simulation der aufgenommenen Bilder sollen die optischen Eigenschaften und möglichst die dreidimensionale Geometrie der optisch dünnen und dicken Gebiete des Nebels ermittelt werden. Neben der hochauflösenden Simulation, besonders an

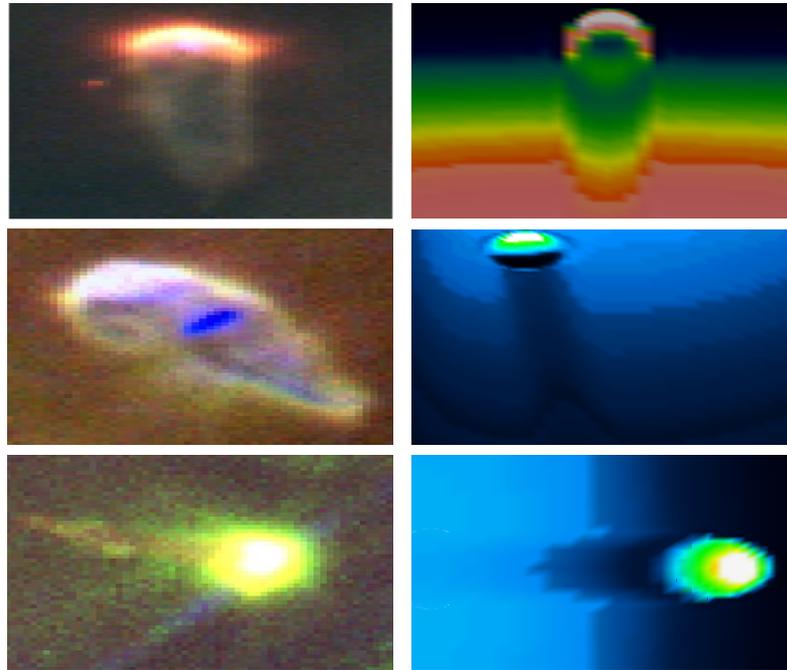


Abbildung 1: Die Bilder der linken Spalte zeigen drei farbkodierte Aufnahmen des Hubble-Space-Telescope von verschiedenen YSOs, die von einem der Zentralsterne des Orionnebels beleuchtet werden. Die rechte Seite stellt zum Vergleich die 3D Simulation des Strahlungsfelds eines angestrahlten YSO dar, jedoch aus unterschiedlichen Blickrichtungen.

den Rändern der Inhomogenitäten, war es dazu wichtig, die Ergebnisse geeignet zu veranschaulichen, so daß ein unmittelbarer Vergleich mit den astronomischen Beobachtungen ermöglicht wird. So zeigt beispielsweise ein Überblick über die Trapez-Region im Zentrum des Orionnebels vier helle Sterne und eine Fülle sogenannter „Young Stellar Objects“ (siehe Bally et al. 1998). „Young Stellar Objects“ (YSOs) sind Sterne in einem sehr frühen Entwicklungsstadium. Sie sind häufig eingehüllt mit Resten des Materials, aus dem sie sich gebildet haben. Die drei hochaufgelösten Falschfarbenbilder (linke Spalte der Abb. 1), durch eine Kombination von Aufnahmen des Hubble-Space-Telescope erzeugt, stellen solche YSOs dar, die durch einen der hellen Zentralsterne des Orionnebels beleuchtet werden. Die dreidimensionale Simulation eines angestrahlten YSO in einem streuenden Medium (rechte Spalte der Abb. 1) liefert vergleichbare Bilder. Die berechneten Bilder zeigen ein Objekt (eine optisch dicke, sphärisch symmetrische Inhomogenität in

einem ansonsten homogenen, optisch dünnen Medium), jedoch aus verschiedenen Blickrichtungen. Es ist deutlich zu erkennen, daß der komplexe Intensitätsverlauf am Rand der simulierten YSO selbst bei dreidimensionalen Rechnungen scharf aufgelöst wird. Damit ist es möglich, die kometenähnliche Struktur zu erzeugen, die aus einem hellen Kopf und einem dunklen Schattenschweif besteht, wobei der Schweif vom energiereichen Zentralstern des Orionnebels weggerichtet ist. Auch der scheibenförmige Schatten auf einem der Photos ergibt sich in der Simulation. Es sei betont, daß hier „nur“ ein sehr einfaches Modell des monochromatischen Strahlungstransports in einem streuenden, inhomogenen Medium verwendet wurde. Ionisationsfronten und Sternwindmodelle sind in diesen Rechnungen nicht berücksichtigt. Dieses Anwendungsbeispiel verdeutlicht jedoch, daß der monochromatische Code tatsächlich in der Lage ist, kleine Strukturen und steile Gradienten der Koeffizienten der monochromatischen Strahlungstransportgleichung auch in drei Raumdimensionen sehr gut aufzulösen.

Die vorliegende Arbeit hat sich zum Ziel gesetzt, den Kanschat-Code zu erweitern, so daß frequenzabhängige Strahlungstransportprobleme mit komplexeren Streumodellen und beliebigen makroskopischen Geschwindigkeitsfeldern berechnet werden können. Die Stärken des monochromatischen Codes, wie z.B. Parallelisierung und adaptive Gitterverfeinerung, sollen dabei auch in seiner erweiterten Form im frequenzabhängigen Algorithmus zum Tragen kommen. Einen Überblick über die einzelnen Erweiterungsschritte des physikalische Modells liefert die Tabelle 1. Die von Kanschat simulierten Anwendungsfälle sind hellgrau unterlegt, während die in dieser Arbeit vorgenommenen Erweiterungen dunkelgrau markiert sind. Die Einträge auf den weißen Feldern verweisen auf zukünftige Modellentwicklungen.

Die behandelten Erweiterungen lassen sich wie folgt charakterisieren: (1) Die Erweiterung auf das kohärente, anisotrope Streumodell wurde zunächst ausschließlich zu Demonstrationszwecken durchgeführt. Es wurden keine astrophysikalischen Anwendungen simuliert. (2) Für die vollständige Wiederverteilung werden die klassischen Fälle von Hummer (siehe Hummer 1962) verwendet. Diese Fälle definieren eine Vereinfachung der Wiederverteilungsfunktion $R(x', \vartheta'; x, \vartheta)$ in Gl. (1) und liefern häufig eine sehr gute Näherung allgemeinerer Streumodelle mit wesentlich komplexeren Wiederverteilungsfunktionen, welche z.B. in Bommier (1997a,b) diskutiert werden. (3) Neben statischen Medien können nun auch Medien mit beliebigen nicht-relativistischen Geschwindigkeitsfeldern bis zu etwa 10 % der Lichtgeschwindigkeit c behandelt werden. Häufig ist der Zustand der Materie bekannt, so daß die Temperatur-, Druck- und Geschwindigkeitsverteilungen sowie die chemische Zusammensetzung des Mediums vorgegeben sind. Unter der Annahme eines lokalen thermodynamischen Gleichgewichts (LTE) können dann die in Gl. (1) eingehenden Absorptions-, Streu- und Emissionskoeffizienten unabhängig von der

Geometrie	Streuung	Bewegung	Thermodyn.	Zeit
1D plan- parallel	keine	keine	LTE	stationär
1D sphärisch- symmetrisch	kohärent, isotrop	langsam ($v/c < 10\%$)	NLTE, 2 Niveaus	instationäre Besetzung
2D euklidisch	kohärent, anisotrop	schnell ($v/c > 10\%$)	NLTE, viele Niveaus	instationäre Strahlung
3D euklidisch	vollständige Wiederver- teilung, isotrop		allgemeine Verteilung	
3D riemannsch	partielle Wiederver- teilung, isotrop			
	partielle Wiederver- teilung, anisotrop			

Tabelle 1: *Eine Modellhierarchie des astrophysikalischen Strahlungstransports. LTE steht für lokales thermodynamisches Gleichgewicht und NLTE für den Fall, daß kein LTE vorliegt. Für eine Erklärung der unterschiedlichen Graustufen der Kästen in der Tabelle siehe Text.*

spezifischen Intensität \mathcal{I} berechnet werden. Diese vereinfachte Kopplung zwischen Materie und Strahlungsfeld gilt auch für die sogenannte Zwei-Niveau-Näherung eines Atoms ohne LTE, den Fall des „Non-Local Thermodynamic Equilibrium“ (NLTE). In anderen Fällen werden die Koeffizienten durch das Strahlungsfeld beeinflusst, so daß NLTE unter Berücksichtigung vieler Niveaus vorliegt. (4) Bei der Behandlung des Linientransports wird die Annahme eines Zwei-Niveau-Atoms im NLTE (vgl. Mihalas 1978) gemacht, was eine instationären Besetzung der Energieniveaus des Atoms impliziert. Die Erweiterung auf instationäre Strahlung wird für ein einfaches Beispiel einer angenäherten plan-parallelen Schicht durchgeführt.

Neben der in dieser Arbeit vorgenommenen Untersuchung mehrdimensionaler Strahlungsfelder für ein Spektrallinientransportproblem bei frühen Galaxien, wurde in den vorhergehenden Abschnitten bereits eine Vielzahl weiterer Anwendungsmöglichkeiten des erweiterten Codes vorgestellt.

2 Beschreibung der Finite-Elemente-Methode

In dieser Arbeit wird die mehrdimensionale Strahlungstransportgleichung (STG) mittels der Finite-Elemente-Methode (FEM) diskretisiert. Da dieses Diskretisierungsverfahren in der Astronomie bislang wenig verwendet wird, ist eine ausführliche Einführung in die FEM angebracht. Dabei verwenden wir als Grundlage das Vorlesungsskriptum „Numerische Methoden für Partielle Differentialgleichungen“ von R. Rannacher (siehe Rannacher 2001). Es werden unter anderem generelle Aspekte, wie Existenz und Eindeutigkeit der Lösung, Konvergenzuntersuchungen, aber auch Vergleiche zum Differenzenverfahren diskutiert.

Die FEM erfordert eine bestimmte Form der Differentialgleichung, die sogenannte *schwache Formulierung*. Zur Erläuterung dieses Begriffs und der drei grundlegenden Aspekte einer FEM wird man sich zunächst aus Gründen der Übersichtlichkeit auf das Modellproblem der Poisson-Gleichung mit (Dirichletschen) Nullrandbedingungen beschränken:

$$-\Delta u = -\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) = f \quad \text{in } \Omega, \quad u = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega. \quad (2)$$

Das Definitionsgebiet $\Omega \in \mathbb{R}^2$ sei ein konvexes Polygonebiet bzw. der Rand $\partial\Omega$ sei glatt. Die Problemdaten f seien ebenfalls glatt. Der Operator Δ wird *Laplace-Operator* genannt. Es sei noch bemerkt, daß das Modellproblem der Poisson-Gleichung im Grenzfall der Diffusionsnäherung zur Beschreibung des Photonentransports verwendet werden kann (vgl. Dautray & Lions 1993).

Bei der numerischen Behandlung einer solchen elliptischen Randwertaufgabe (2) mittels Differenzenverfahren besteht die Grundidee darin, auftretende Ableitungen der gesuchten Funktion durch Informationen an diskreten Stellen zu approximieren, also Ableitungen durch geeignete Differenzenquotienten näherungsweise zu ersetzen.

Eine andere Variante zur numerischen Behandlung von Differentialgleichungen bzw. Randwertaufgaben wird durch geeignete Ansätze für die gesuchte Lösungsfunktion charakterisiert. Die Kollokationsverfahren (siehe z.B. Großmann & Roos 1992) bilden hierfür eine konkrete Realisierung. Anstelle der punktwisen Gültigkeit der Differentialgleichung wird eine unter gewissen Zusatzbedingungen äquivalente Variationsaufgabe bzw. Variationsgleichung zugrunde gelegt. Die dabei auftretenden, durch Integrale definierten Funktionale erfordern jedoch die Verwendung angepaßter Funktionenräume, um die Lösbarkeit der erzeugten Aufgaben zu sichern. Gleichzeitig können auch die Glattheitsvoraussetzungen an die Ansatzfunktionen abgeschwächt werden, und es lassen sich Existenzaussagen auch unter geringerer Regularität der in der Differentialgleichung auftretenden Funktionen gewinnen.

2.1 Allgemeine Projektionsverfahren

Ausgangspunkt für eine Einführung in die FEM und für Projektionsverfahren generell ist die variationelle bzw. schwache Formulierung der Randwertaufgabe (2). Zunächst muss allerdings der Begriff einer „klassischen“ Lösung für die Dirichlet'sche Nullrandbedingung (2) präzisiert werden. Wir verstehen darunter eine Funktion $u \in C^2(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$, welche im Innern von Ω der Differentialgleichung und entlang des Randes der Randbedingung genügt. Ferner soll ihr Gradient quadratintegrabel sein: $|\nabla u| \in L^2(\Omega)$. L^2 ist der Lebesgue-Raum der quadratintegrablen Funktionen und C^k ist der Raum der k -mal stetig differenzierbaren Funktionen (siehe z.B. Ciarlet 1978; Braess 1997). Die Existenz einer schwachen bzw. verallgemeinerten Lösung der Randwertaufgabe des Laplace-Operators ist sehr eng mit der Minimierung des Energiefunktional

$$E(v) := \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla v|^2 dx - \int_{\Omega} f v dx \longrightarrow \min. \quad (3)$$

verknüpft. Dieses Funktional wirkt auf dem Vektorraum \tilde{V} der „zulässigen“ Funktionen:

$$\tilde{V} := \{v : \bar{\Omega} \longrightarrow \mathbb{R} : v \in C^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega}), v|_{\partial\Omega} = 0, |\nabla v| \in L^2(\Omega)\}. \quad (4)$$

Der Vektorraum \tilde{V} wird mit der natürlichen „Energie-Norm“

$$\|v\|_E := \|\nabla v\|_{\Omega}, \quad v \in \tilde{V} \quad (5)$$

versehen. Daß dies wirklich eine Norm ist, folgt aus den entsprechenden Eigenschaften der L^2 -Norm $\|\cdot\|_{\Omega}$ und der Poincaréschen Ungleichung

$$\|v\|_{\Omega} \leq d_{\Omega} \|\nabla v\|_{\Omega}, \quad v \in \tilde{V}, \quad (6)$$

mit $d_{\Omega} := \text{diam}(\Omega)$. In kompakter Schreibweise ist $E(v) = \frac{1}{2} \|\nabla v\|_E^2 - (f, v)$ wobei

$$(v, w) = (v, w)_{\Omega} = \int_{\Omega} v(x) w(x) dx, \quad v, w \in \tilde{V} \quad (7)$$

das Skalarprodukt und

$$\|v\| = \|v\|_{\Omega} = \left(\int_{\Omega} |v(x)|^2 dx \right)^{1/2} \quad (8)$$

die L^2 -Norm ist. Es kann gezeigt werden (vgl. Lemma von Lax-Milgram und den Beweis dazu in Braess 1997; Ciarlet 1978 oder in Brenner & Scott 1996), daß

$E(\cdot)$ nach unten beschränkt ist. Sei nun $(u_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset \tilde{V}$ eine „Minimalfolge“ des Funktionals $E(\cdot)$, d.h. es gilt:

$$E(u_k) \longrightarrow \inf_{v \in \tilde{V}} E(v) =: d > -\infty. \quad (9)$$

In Rannacher (2001) wird gezeigt, daß $(u_n)_{n \in \mathbb{N}}$ eine Cauchy-Folge bzgl. der Energie-Norm ist. Diese Cauchy-Folge besitzt im allgemeinen keinen Grenzwert im normierten (unvollständigen) Raum \tilde{V} . Durch eine Vervollständigung von \tilde{V} erhält man den sog. „Sobolew-Raum“ $H_0^1(\Omega)$. Die Elemente von $H_0^1(\Omega)$ sind zunächst als Äquivalenzklassen von Cauchy-Folgen (analog wie bei der Konstruktion der reellen Zahlen aus den rationalen) definiert, lassen sich aber wieder als Funktionen interpretieren. Sie sind L^2 -Funktionen, deren erste Ableitungen (im Distributionsinne) wieder in L^2 liegen und die in einem abgeschwächten Sinn auf $\partial\Omega$ verschwinden. Die Eigenschaften dieser „Sobolew-Räume“ werden in Adams (1975) ausführlich diskutiert. Der Grenzwert $u \in H_0^1(\Omega)$ der Folge $(u_n)_{n \in \mathbb{N}}$ wird als die „schwache“ oder auch „variationelle“ Lösung der Randwertaufgabe des Laplace-Operators (2) bezeichnet. Über den Variationsansatz

$$\frac{d}{d\varepsilon} E(u + \varepsilon\varphi)|_{\varepsilon=0} = 0 \quad \forall \varphi \in \tilde{V} \quad (10)$$

erhält man die äquivalente Variationsgleichung (Stationaritätsbedingung)

$$(\nabla u, \nabla \varphi) = (f, \varphi) \quad \forall \varphi \in \tilde{V}. \quad (11)$$

Wenn die schwache Lösung u eine höhere Regularität als die H_0^1 -Funktionen, vielleicht sogar die Regularität einer klassischen Lösung besitzt, so kann partiell integriert werden und wir erhalten

$$(-\Delta u - f, \varphi) = 0 \quad \forall \varphi \in \tilde{V}. \quad (12)$$

Aus dieser Gleichung folgt, daß $-\Delta u = f$, d.h. u ist sogar klassische Lösung der Randwertaufgabe. Damit ist der „schwache“ Lösungsbegriff verträglich mit dem ursprünglichen „klassischen“. Der Nachweis höherer Regularität der schwachen Lösung $u \in H_0^1(\Omega)$ ist allerdings schwierig und wir verweisen wiederum auf die empfohlene Literatur zur Theorie der partiellen Differentialgleichungen.

Die folgende Diskussion wird in einem etwas abstrakten Rahmen durchgeführt, der am obigen Beispiel orientiert ist und dieses als Sonderfall beinhaltet. Seien V ein Hilbert-Raum mit Skalarprodukt $(\cdot, \cdot)_V$ und zugehöriger Norm $\|\cdot\|_V := (\cdot, \cdot)_V^{1/2}$ und $a(\cdot, \cdot) : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ eine beschränkte Bilinearform sowie $l(\cdot) : V \rightarrow \mathbb{R}$ eine beschränkte Linearform:

$$|a(v, w)| \leq \alpha \|v\|_V \|w\|_V, \quad |l(v)| \leq \gamma \|v\|_V, \quad v, w \in V.$$

Mit diesen Bezeichnungen kann folgende allgemeine variationelle Gleichung betrachtet werden: Bestimme $u \in V$, so daß

$$a(u, \varphi) = l(\varphi) \quad \forall \varphi \in V. \quad (13)$$

Zum Nachweis, daß diese Aufgabe auch eine Lösung besitzt, wird postuliert, daß die Bilinearform $a(\cdot, \cdot)$ „stark koerzitiv“ (oder „positiv definit“) sei, d.h.:

$$a(v, v) \geq \kappa \|v\|_V^2, \quad v \in V,$$

mit einer Konstante $\kappa > 0$. Allgemeiner wird die Bilinearform $a(\cdot, \cdot)$ „koerzitiv“ (oder „regulär“) genannt, wenn

$$\sup_{\varphi \in V} \frac{a(v, \varphi)}{\|\varphi\|_V} \geq \gamma \|v\|_V, \quad v \in V,$$

mit einer Konstanten $\gamma > 0$. Unter den obigen Voraussetzungen besitzt die variationelle Gleichung (13) eine eindeutige Lösung $u \in V$, für welche die a priori Abschätzung gilt:

$$\|u\|_V \leq \frac{\alpha}{\gamma} \|l\|_{V^*},$$

mit der „Dualnorm“ $\|l\|_{V^*} := \sup_{\{\varphi \in V, \|\varphi\|=1\}} |l(\varphi)|$. Diese Abschätzung stammt aus dem sogenannten Lax-Milgram-Lemma. Ein Beweis dieses Lemmas findet sich z.B. in Ciarlet (1978) oder Brenner & Scott (1996).

Das obige Beispiel zur Randwertaufgabe paßt in diesen Rahmen, wenn $V := H_0^1(\Omega)$, $l(\varphi) := (f, \varphi)$ und

$$a(v, w) := (\nabla v, \nabla w)$$

gesetzt wird. Die Beschränktheit dieser Form ergibt sich direkt mit Hilfe der Hölderschen Ungleichung. Ihre starke Koerzitivität folgt mit Hilfe der Poincaréschen Ungleichung:

$$a(v, v) = \|\nabla v\|^2 = \|v\|_V^2.$$

Eine auf W. Ritz zurückgehende Technik basiert auf der näherungsweise Lösung der Variationsaufgabe (3), indem anstelle des zugrunde liegenden, im Fall der Anwendung auf Differentialgleichungen stets unendlichdimensionalen Raumes V , ein Teilraum

$$V_h \subset V$$

mit $\dim V_h < +\infty$ gewählt wird, dessen Feinheit durch einen Diskretisierungsparameter h (z.B. Gitterweite) charakterisiert ist. Anstelle von (3) sind dann Näherungslösungen $u_h \in V_h$ durch die Vorschrift

$$E(u_h) = \min_{v_h \in V} E(v_h) \quad (14)$$

oder äquivalent durch die diskrete Variationsgleichung

$$a(u_h, \varphi_h) = (f, \varphi_h) \quad \forall \varphi_h \in V_h \quad (15)$$

bestimmt. Die näherungsweise Behandlung von (3) mittels (14) heißt **Ritzches Projektionsverfahren** (siehe Großmann & Roos 1992). Die Existenz und Eindeutigkeit der diskreten Lösung $u_h \in V_h$ folgt mit demselben Argument aus dem Lax-Milgram-Lemma wie beim kontinuierlichen Problem. Diese Analogie der Schlußweisen von kontinuierlicher und diskreter (endlich dimensionaler) Situation ist die charakteristische Stärke der Projektionsmethoden im Gegensatz zu den Differenzenverfahren. Die Bezeichnung Projektionsverfahren ist motiviert durch die Beziehung

$$a(u - u_h, \varphi_h) = 0 \quad \varphi_h \in V_h, \quad (16)$$

welche man durch Subtraktion der Gleichungen (11) und (17) erhält. Sie kann geometrisch dahingehend interpretiert werden, daß der Fehler $e_h := u - u_h$ bezüglich des Skalarprodukts $a(\cdot, \cdot)$ senkrecht auf dem Ansatzraum V_h steht. Dies impliziert auch die sogenannte beste Approximationseigenschaft für den Approximationsfehler e_h bezüglich der natürlichen Energienorm $\|\cdot\|_a := a(\cdot, \cdot)^{1/2}$:

$$\|e_h\|_a = \min_{\varphi_h \in V_h} \|u - \varphi_h\|_a.$$

Da die Normen $\|\cdot\|_a$ und $\|\cdot\|_V$ auf V äquivalent sind, ist die Frage nach der Konvergenz des Projektionsverfahrens,

$$\|e_h\|_V \rightarrow 0 \quad (h \rightarrow 0),$$

damit zurückgeführt auf die Frage der Approximierbarkeit von Funktionen $u \in V$ durch Ansatzfunktionen $\varphi_h \in V_h$:

$$\inf_{\varphi_h \in V_h} \|u - \varphi_h\|_V \rightarrow 0 \quad (h \rightarrow 0).$$

Die endlichdimensionale Variationsgleichung (15) kann jedoch auch als Diskretisierung der Variationsgleichung (13) betrachtet werden. Insbesondere muß

dann die Bilinearform $a(\cdot, \cdot)$ nicht notwendig als symmetrisch vorausgesetzt werden. In diesem Fall wird das auf der diskreten Variationsgleichung

$$a(u_h, \varphi_h) = (f, \varphi_h) \quad \forall \varphi_h \in V_h \quad (17)$$

basierende Projektionsverfahren **Galerkin-Verfahren** genannt. Wegen der Koerzitivitätseigenschaft der Bilinearform $a(\cdot, \cdot)$ auf dem endlich dimensionalen Teilraum V_h folgt unmittelbar die Existenz der (eindeutigen) Lösung $u_h \in V_h$. Die Orthogonalitätsbeziehung (16) bleibt dabei gültig. Damit wird die „Quasi-Beste-Approximationseigenschaft“

$$\|e_h\|_a \leq \frac{\alpha}{\kappa} \min_{\varphi_h \in V_h} \|u - \varphi_h\|_a \quad (18)$$

erschlossen, was die Konvergenz des Galerkin-Verfahrens sichert. Diese Abschätzung des Fehlers $\|e_h\|_a = \|u - u_h\|_a$ zwischen der Lösung u des Ausgangsproblems und der Finite-Elemente-Lösung u_h wird in der Literatur als das Lemma von Cea bezeichnet. Für einen Beweis siehe z.B. Großmann & Roos (1992). Damit konzentriert sich die Konvergenzuntersuchung auf die Ermittlung von Schranken für die rechte Seite der Abschätzung, etwa durch Verwendung von Interpolierenden und entsprechenden Approximationsaussagen.

Eine noch allgemeinere Variante, bei der Ansatzraum V_h^{ansatz} und Testraum V_h^{test} unterschiedlich gewählt werden,

$$u \in V_h^{ansatz} : \quad a(u_h, \varphi_h) = (f, \varphi_h) \quad \forall \varphi_h \in V_h^{test},$$

ist das sogenannte „Petrov-Galerkin-Verfahren“. Durch geeignete Wahl der Ansatz- und Testfunktionen können gezielt zusätzliche Eigenschaften der diskreten Probleme erzeugt werden. Dies wird vor allem für die Behandlung singular gestörter Probleme, z.B. bei Konvektions-Diffusions-Aufgaben, genutzt.

Die Bedingung $V_h \subset V$ sichert die Übertragung der auf dem Ausgangsraum V gültigen Eigenschaften auch auf den endlichdimensionalen Ansatzraum V_h . Bei Verletzung der Forderung $V_h \subset V$ sind weitere Probleme zu erwarten (siehe z.B. Großmann & Roos 1992). Die Verfahren, die auf $V_h \subset V$ und der direkten Übernahme von $a(\cdot, \cdot)$ und f für die diskreten Probleme beruhen, heißen **konforme Methoden**.

Zur praktischen Realisierung des Projektionsverfahrens muß die zunächst abstrakte Variationsgleichung (17) im Funktionenraum algebraisiert werden. D.h., die Variationsgleichung muß in ein äquivalentes algebraisches Gleichungssystem umgewandelt werden. Dazu wird zunächst eine Basis $\{\varphi_h^{(i)}, i = 1, \dots, N\}$, $N := \dim V_h$, von V_h aus gewählt und für die zu bestimmende diskrete Lösung der Ansatz $u_h = \sum_{j=1}^N \xi_j \varphi_h^{(j)}$ gemacht. Wird dies in (17) eingesetzt und läßt man die Testfunktionen

$\varphi_h \in V_h$ alle Basisfunktionen durchlaufen, ergibt sich ein lineares (algebraisches) $N \times N$ -Gleichungssystem

$$\sum_{j=1}^N \xi_j a(\varphi_h^{(j)}, \varphi_h^{(i)}) = (f, \varphi_h^{(i)}), \quad i = 1, \dots, N,$$

für den Vektor $\xi = (\xi_j)_{j=1}^N$ der Entwicklungskoeffizienten. Eine kompakte Schreibweise des linearen Gleichungssystems liefert:

$$A_h \xi = b_h. \quad (19)$$

Dabei sind die Koeffizientenmatrix $A_h = (a_{ij})_{i,j=1}^N$ sowie die rechte Seite $b_h = (b_i)_{i=1}^N$ durch die spezielle Wahl der Basis bestimmt:

$$a_{ij} = a(\varphi_h^{(j)}, \varphi_h^{(i)}), \quad b_i = (f, \varphi_h^{(i)}).$$

Die Entwicklungskoeffizienten ξ_j können sehr unterschiedliche Bedeutung haben: Monom-Koeffizienten einer Polynomdarstellung, Fourier-Koeffizienten einer trigonometrischen Entwicklung, Knotenwerte einer stückweise polynomialen Funktion, usw. Die Eigenschaften der Bilinearform $a(\cdot, \cdot)$ übertragen sich direkt auf die zugehörige Matrix A_h . Ist $a(\cdot, \cdot)$ symmetrisch, so auch A_h , und die Koerzitivität (bzw. Definitheit) von $a(\cdot, \cdot)$ impliziert die von A_h gemäß $(A_h x, x) > 0, x \in \mathbb{R}^N \setminus \{0\}$.

2.2 Die FEM als Beispiel von Galerkin-Ansatzräumen

Mit Hilfe eines *stückweise polynomialen Ansatzes* („finite Elemente“) für Galerkin-Ansatzräume wird im Folgenden eine konkrete Realisierung für den oben beschriebenen Rahmen diskutiert. Bei der Wahl der Ansatzräume $V_h \subset V = H_0^1(\Omega)$ sowie der Basen zur Aufstellung der Gleichungssysteme (19) sind einige Bedingungen zu beachten:

- Die Berechnung der Matrixelemente $a_{ij} = a(\varphi_h^{(j)}, \varphi_h^{(i)})$ sowie die der rechten Seite $(f, \varphi_h^{(i)})$ sollte „billig“ sein.
- Aus Gründen der Genauigkeit wird die Problemdimension in der Regel sehr groß sein ($N \gg 100$). Die Matrix A_h sollte daher möglichst dünn besetzt sein.
- Die Matrix A_h sollte nicht zu schlecht konditioniert sein; akzeptabel sind z.B. beim vorliegenden Poisson-Problem $\text{cond}_2(A_h) \approx O(N) - O(N^2)$, wogegen $\text{cond}_2(A_h) \approx O(N^4) - O(e^N)$ nicht praktikabel wäre.

Um das Problem der Approximation allgemeiner Gebiete zu lösen, werden Ansatzfunktionen (auch „Formfunktionen“ genannt) verwendet, welche bezüglich einer Zerlegung $\bar{\Omega}$ in einfache Teilgebiete K , sogenannte „Zellen“, stückweise polynomial sind. Gängige Beispiele von Zellen sind Dreiecke oder (konvexe) Vierecke in zwei bzw. Tetraeder oder (konvexe) Hexaeder in drei Dimensionen. Der Parameter h ist in diesem Fall etwa der maximale Zelldurchmesser.

Der Finite-Elemente-Ansatz wird anhand eines einfachen Beispiels illustriert. Die Randwertaufgabe (11) sei auf einem (konvexen) polygonalen Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ mit homogenen Randwerten $u|_{\partial\Omega} = 0$ und rechter Seite $f \in L^2(\Omega)$ gestellt. Die zugehörige Lösung $u \in H_0^1(\Omega)$ ist dann auch im Sobolew-Raum $H^2(\Omega)$ und genügt der *a priori* Abschätzung

$$\|\nabla^2 u\| \leq c_s \|f\|, \quad (20)$$

wobei $c_s = 1$ im Falle eines konvexen Gebiets. Weiter sei eine Folge von Zerlegungen $\mathbb{T}_h = \{K\}$ des Gebiets $\bar{\Omega}$ in abgeschlossene Dreiecke K („Triangulierung“) gegeben mit $h := \max_K \text{diam}(K) \rightarrow 0$. Es werden folgende Regularitätsbedingungen an diese Triangulierung gestellt:

i) *Strukturregularität*: Je zwei Dreiecke der Zerlegung $\Omega = \cup \{K \in \mathbb{T}_h\}$ überlappen sich höchstens in gemeinsamen Eckpunkten oder in ganzen Seiten. D.h., sogenannte „hängende“ Knoten sind hier nicht erlaubt.

ii) *Formregularität*: Alle Dreiecke der Triangulierungen $K \in \mathbb{T}_h$ sind von ähnlicher Gestalt. D.h., für den Inkreisradius ρ_K und Umkreisradius h_K eines jeden Dreiecks K gilt gleichmäßig für $h \rightarrow 0$:

$$\max_{K \in \mathbb{T}_h} \frac{h_K}{\rho_K} \leq c_1.$$

iii) *Größenregularität*: Alle Dreiecke einer Triangulierung \mathbb{T}_h sind von gleicher Größenordnung. D.h., es gilt gleichmäßig für $h \rightarrow 0$:

$$\max_{K \in \mathbb{T}_h} h_K \leq c_2 \min_{K \in \mathbb{T}_h} \rho_K.$$

Auf den Triangulierungen \mathbb{T}_h definieren wir Ansatzräume stückweise linearer Funktionen („lineare finite Elemente“: Verallgemeinerung des Konzepts eines Polygonzugs auf höhere Raumdimensionen):

$$V_h^{(1)} := \{v_h \in C(\bar{\Omega}) \mid v_h|_K \in P_1(K), K \in \mathbb{T}_h, v_h|_{\partial\Omega} = 0\}.$$

Dabei bezeichnet allgemein $P_r(K)$ den Vektorraum der Polynome bis zum Grad $r \geq 0$ über K . Dadurch sind tatsächlich Teilräume $V_h^{(1)} \subset H_0^1(\Omega)$ erklärt. Sei N

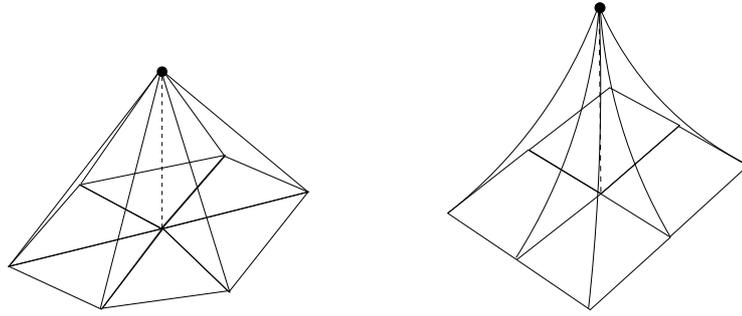


Abbildung 2: Knotenbasisfunktionen für lineare (links) sowie für bilineare (rechts) Ansätze

die Anzahl der „inneren“ Knoten (Dreieckspunkte) der Triangulierung. Jedes $v_h \in V_h^{(1)}$ ist als stückweise lineare Funktion eindeutig durch Vorgabe ihrer Funktionswerte („Knotenwerte“) in den „inneren“ Dreieckspunkten („Knoten“) festgelegt. In den Eckpunkten auf dem Gebietsrand $\partial\Omega$ ist $v_h = 0$ wegen der Dirichlet-Randbedingung. In $V_h^{(1)}$ gibt es daher eine natürliche Basis, die sogenannte „Knotenbasis“ in Analogie zur „Lagrange-Basis“ bei der eindimensionalen Lagrange-Interpolation. Jedem Knoten a_i wird durch die Bedingung

$$\varphi_h^i(a_j) = \delta_{ij}, \quad j = 1, \dots, N, \quad (21)$$

eindeutig eine Funktion $\varphi_h^i \in V_h^{(1)}$ zugeordnet. Damit gilt dann für jedes $v_h \in V_h^{(1)}$ die Darstellung

$$v_h = \sum_{i=1}^N v_h(a_i) \varphi_h^{(i)}.$$

Daraus folgt, daß $\{\varphi_h^{(i)}, i = 1, \dots, N\}$ tatsächlich eine Basis von $V_h^{(1)}$ ist. Umgekehrt läßt sich jeder kontinuierlichen Funktion $v \in C(\bar{\Omega})$ durch die Vorschrift

$$I_h v := \sum_{i=1}^N v(a_i) \varphi_h^{(i)}$$

eindeutig eine (stückweise lineare) „Interpolierende“ $I_h v \in V_h^{(1)}$ zuordnen. Offenbar ist $I_h v \equiv v_h$ für $v_h \in V_h^{(1)}$.

Dieser Diskretisierungsansatz erfüllt offensichtlich die oben formulierten Anforderungen an ein brauchbares Galerkin-Verfahren: Im Unterschied zum allgemeinen Ritz-Verfahren besitzen die Ansatzfunktionen $\varphi_h^{(i)}$ bei der FEM einen relativ kleinen Träger. D.h., die Überlappung der Träger der Basisfunktionen ist gering

(siehe Abb. 2). Das wird bei der Berechnung der Systemmatrix häufig genutzt, indem man diese über den Teilelementen K_j der Zerlegung getrennt ermittelt und anschließend aufaddiert. Dabei treten bei der FEM im allgemeinen in den einzelnen Teilelementen nur wenige Nichtnullelemente auf. Man spricht dann auch davon, daß die resultierende Systemmatrix A_h dünn besetzt sei. Diese Nichtnullelemente können ferner durch Transformationen auf wenige Referenzelemente effektiv bestimmt werden.

Für die Kondition der Matrix A_h kann in zwei Dimensionen gezeigt werden, daß, ähnlich wie bei der 5-Punkte-Differenzdiskretisierung, $\text{cond}_2(A_h) = O(h^{-2}) = O(N)$ gilt. Die asymptotische Abschätzung für den Fehler $e_h := u - u_h$ ergibt sich für das Galerkin-Verfahren mit dem Finite-Elemente-Raum $V_h^{(1)}$ durch:

$$\|\nabla e_h\| = \min_{\varphi_h \in V_h^{(1)}} \|\nabla(u - \varphi_h)\|. \quad (22)$$

Die Frage ist also, ob es $\varphi_h \in V_h^{(1)}$ gibt, so daß $\|\nabla(u - \varphi_h)\| \rightarrow 0$ ($h \rightarrow 0$). Wenn man nur weiß, daß $u \in H_0^1(\Omega)$ ist, dann kann man nur qualitative Konvergenz zeigen. Viel interessanter wäre es, die Konvergenzgeschwindigkeit in Potenzen der Gitterweite h zu kennen. Hierzu ist aber mehr Regularität der Lösung u erforderlich. Für den stückweise linearen Ansatz kann im Rahmen einer allgemeineren Theorie die folgende Interpolationsabschätzung gezeigt werden (siehe z.B. Ciarlet 1978; Braess 1997):

$$\|\nabla(v - I_h v)\| \leq c_i h \|\nabla^2 v\|, \quad v \in H_0^1(\Omega) \cap H^2(\Omega). \quad (23)$$

Unter den bisher formulierten Voraussetzungen läßt sich eine erste quantitative Konvergenzaussage für das Finite-Elemente-Verfahren ableiten.

Satz 1: (Konvergenzsatz) Für die Galerkin-Approximation des Modellproblems (11) mit „linearen“ finiten Elementen gelten unter den obigen Voraussetzungen die Fehlerabschätzungen

$$\|\nabla e_h\| \leq c_i c_s h \|f\|, \quad (24)$$

$$\|e_h\| \leq c_i^2 c_s^2 h^2 \|f\|, \quad (25)$$

mit den Konstanten c_i, c_s aus den Ungleichungen (23) und (20).

Beweis: (i) Die Abschätzung des sogenannten „Energie-Fehlers“ ergibt sich unmittelbar aus der Best-Approximationsbeziehung (22), der Interpolationsabschätzung (23) und der Regularitätsabschätzung (20):

$$\|\nabla e_h\| \leq \|\nabla(u - I_h u)\| \leq c_i h \|\nabla^2 u\| \leq c_i c_s h \|f\|.$$

(ii) Zum Beweis der Fehlerabschätzung in der L^2 -Norm wird ein sogenanntes „Dualitätsargument“ („Aubin-Nitsche-Trick“) verwendet. Sei $z \in H_0^1(\Omega)$ die (schwache) Lösung des Hilfsproblems

$$-\Delta z = \|e_h\|^{-1} e_h \text{ in } \Omega, \quad z|_{\partial\Omega} = 0.$$

Diese ist dann auch in $H^2(\Omega)$, und es gilt die *a priori* Abschätzung

$$\|\nabla^2 z\| \leq c_s \|\Delta z\| = c_s,$$

wobei wieder $c_s = 1$ auf konvexem Gebiet Ω . Nach Konstruktion folgt mit Hilfe der Galerkin-Orthogonalität:

$$\begin{aligned} \|e_h\| &= (\nabla e_h, \nabla z) = (\nabla e_h, \nabla(z - I_h z)) \\ &\leq \|\nabla e_h\| \|\nabla(z - I_h z)\| \leq c_i h \|\nabla e_h\| \|\nabla^2 z\| \leq c_i c_s h \|\nabla e_h\|. \end{aligned}$$

Mit dem Ergebnis (i) ergibt sich damit die gewünschte Abschätzung.

Die im Beweis von Satz 1 verwendete Schlußweise über ein Dualitätsargument ist „das“ zentrale Hilfsmittel bei der Konvergenzanalyse von Finite-Elemente-Verfahren. Dieses abstrakte Argument entspricht der allgemeinen Regel, daß sich die Analyse der Projektionsverfahren eng an die abstrakten Hilbertraum-Methoden zur Behandlung des kontinuierlichen Problems anlehnt. Das zentrale Hilfsmittel bei der Untersuchung von Differenzenverfahren ist dagegen das „(diskrete) Maximumprinzip“, welches sich mehr an den klassischen Techniken für partielle Differentialgleichungen orientiert. Dieser Vergleich „Finite-Elemente-Methode“ (FEM) – Finite-Differenzen-Methode (FDM)“ kann anhand des Resultats von Satz 1 noch etwas weiter geführt werden. Die *a priori* Fehlerabschätzung (25) für das Finite-Elemente-Verfahren ist zu vergleichen mit der Abschätzung für das Differenzenverfahren (5-Punkte-Diskretisierung mit Shortley-Weller-Randapproximation auf polygonalen Gebieten, siehe Rannacher 2001):

$$\max_{\Omega} |e_h| \leq \frac{1}{24} d_{\Omega}^2 M_4(u) h^2 + O(h^3), \quad (26)$$

mit der Schranke $M_4(u)$ für die vierten Ableitungen von u und dem Durchmesser des gesamten Gebiets $d_{\Omega} := \text{diam}(\Omega)$. Beide Abschätzungen zeigen dieselbe asymptotische Konvergenzordnung $O(h^2)$, was aufgrund der verwendeten Diskretisierungsansätze auch zu erwarten ist. Die Unterschiede liegen zum einen in der Art der Norm, in der der Fehler gemessen wird, und zum anderen in der benötigten Regularität der approximierten Lösung. Beim Differenzenverfahren erhält man wegen der Verwendung des Maximumprinzips punktweise Abschätzungen, wie sie auch

der Anwender gern hat. Ein Ingenieur ist z.B. an der maximalen Auslenkung einer belasteten Brückenkonstruktion interessiert. Dagegen liefert die Hilbert-Raum-Theorie für das Finite-Elemente-Verfahren zunächst nur Abschätzungen im quadratischen Mittel, was etwa lokale „Ausreißer“ an kritischen Stellen nicht ausschließt. (Dem Brückenbauer genügt so etwas nicht, wenn Fehlerspitzen etwa in kritischen Lagerungspunkten der Brücke auftreten können.) Es sei jedoch erwähnt, daß unter speziellen Annahmen für das Finite-Elemente-Verfahren Fehlerabschätzungen in der Maximumnorm hergeleitet werden können. Die in der Abschätzung (26) geforderte hohe Regularität der Lösung ist ein sehr viel schwerwiegenderer Nachteil der Analyse des Differenzenverfahrens, da diese Regularitätsstufe im allgemeinen auf Polygonebenen und unter realistischen Annahmen an die Problemdata nicht erwartet werden kann. Es sei noch bemerkt, daß man für das Finite-Elemente-Verfahren mit wesentlich mehr technischem Aufwand „optimale“ Maximumnorm-Fehlerabschätzungen der Form

$$\max_{\bar{\Omega}} |e_h| \leq cM_2(u)h^2 |\ln h|$$

beweisen kann. Allerdings ist auch die abgeschwächte Annahme $M_2(u) < \infty$ im allgemeinen noch zu restriktiv. Für das Finite-Elemente-Verfahren ist auch noch unter der Minimalvoraussetzung $u \in H_0^1(\Omega)$ wenigstens qualitative Konvergenz gesichert. Sein eigentlicher Vorteil, nämlich die große Flexibilität bei der Approximation von komplizierten Geometrien auf unstrukturierten Gittern wird in einem späteren Abschnitt im Zusammenhang mit der Frage nach adaptiver Gittersteuerung und Fehlerkontrolle für die Finite-Elemente-Diskretisierung der Strahlungstransportgleichung deutlich.

3 Monochromatischer Strahlungstransport

Die monochromatische (mehrdimensionale) Strahlungstransportgleichung ist von einem anderen Gleichungstyp als das elliptische Modellproblem, welches wir für die Einführung in die FEM im vorhergehenden Kapitel verwendet haben. Vielmehr handelt es sich bei der STG um eine lineare Boltzmann-Gleichung. Die Erweiterung der FEM auf diesen Gleichungstyp ergibt sich nicht direkt aus der Anwendung der FEM auf die Poisson-Gleichung, da sich die STG nicht mit einem Energieminimierungsansatz behandeln läßt. Die Erweiterung erfolgt jedoch in einem abstrakten mathematischen Sinne.

3.1 Die klassische Formulierung

Unser Ziel ist zunächst die Modellierung eines mehrdimensionalen Strahlungsfelds in einem diffusen, streuenden Medium. Dieses Medium sei von einem ausgedehnten Vakuum umgeben. Aus dieser Konfiguration schneiden wir einen konvexen Bereich um das zu interessierende Gebiet heraus und nehmen an, daß die aus diesem Bereich austretende Strahlung nicht wieder zurück gestreut wird. Innerhalb dieses konvexen Gebiets $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ($d = 2, 3$) gilt für die invariante Intensität $\mathcal{I}(x, \vartheta) \in \Omega \times S^{d-1}$ die monochromatische Strahlungstransportgleichung

$$\vartheta \cdot \nabla_x \mathcal{I}(x, \vartheta) + \kappa(x) \mathcal{I}(x, \vartheta) + \sigma(x) \left(\mathcal{I}(x, \vartheta) - \int_{S^{d-1}} P(\vartheta', \vartheta) \mathcal{I}(x, \vartheta') d\vartheta' \right) = f(x). \quad (27)$$

Die in dieser Gleichung vorkommenden Größen sind:

- d : Raumdimension
- S^{d-1} : Einheitssphäre im \mathbb{R}^d
- ϑ : Einheitsvektor in S^{d-1} , der die Ausbreitungsrichtung der Strahlung charakterisiert
- $\kappa(x) \geq 0$: Absorptionskoeffizient
- $\sigma(x) \geq 0$: Streukoeffizient
- $P(\vartheta', \vartheta) \geq 0$: Phasenfunktion
- $f(x) \geq 0$: Quellterm

Für den (räumlich) zweidimensionalen Fall ist S^1 der Einheitskreis, so daß wir keine, auf zwei Dimensionen reduzierte, dreidimensionalen Probleme berechnen

können. Vielmehr ist der zweidimensionale Fall zur Code-Entwicklung übersichtlicher als der 3D Fall. Der Quellterm $f(x) = \kappa(x)B(T(x))$ entspricht einer thermischen Emission, wobei B die Planckfunktion zu einem gegebenen Temperaturfeld $T(x)$ ist. Die Phasenfunktion $P(\vartheta', \vartheta)$ ist für die anisotrope Streuung definiert durch

$$P(\vartheta', \vartheta) := \frac{1}{\mu(S^{d-1})} p(\vartheta', \vartheta), \quad (28)$$

Für den einfachen Fall der isotropen Streuung ist $P(\vartheta', \vartheta) = \frac{1}{\mu(S^{d-1})}$, wobei $\mu(S^{d-1})$ das Maß der Einheitssphäre S^{d-1} ist. So ist $\mu = 2\pi$ für $d = 2$ und $\mu = 4\pi$ im dreidimensionalen Fall. Für die Phasenfunktion $P(\vartheta', \vartheta)$ nehmen wir folgende Eigenschaften an:

- Normiert:

$$\frac{1}{(2d-2)\pi} \int_{S^{d-1}} P(\vartheta', \vartheta) d\vartheta' = 1. \quad (29)$$

- Die Umkehrbarkeit des Lichtwegs:

$$P(\vartheta', \vartheta) = P(-\vartheta', \vartheta). \quad (30)$$

- Die Phasenfunktion hängt nur vom Betrag des Streuwinkels ab:

$$P(\vartheta', \vartheta) = P(\vartheta, \vartheta') \quad (31)$$

- Energieerhaltung:

$$\left\| \int_{S^{d-1}} P(\vartheta', \vartheta) \mathcal{I}(x, \vartheta') d\vartheta' \right\| = \|\mathcal{I}(x, \vartheta)\|. \quad (32)$$

Nimmt man für die Ausbreitung eine feste Richtung ϑ an und vernachlässigt die Streuung ($\sigma = 0$), dann wird die STG entlang der Charakteristik eine gewöhnliche Differentialgleichung. Betrachtet man nun nacheinander alle Richtungen ϑ , so erhält man ein (unendliches) System gewöhnlicher Differentialgleichungen. Für jede dieser Differentialgleichungen werden Anfangswerte auf allen Randpunkten $x \in \partial\Omega$ benötigt, von denen aus die Charakteristik in Richtung ϑ das Gebiet Ω durchquert. Somit liegt es nahe, den Rand $\partial\Omega$ gemeinsam mit der Einheitssphäre S^{d-1} zu behandeln. Dieses $(2d-2)$ -dimensionale Gebiet wird mit $\Gamma := (\partial\Omega \times S^{d-1})$ bezeichnet und in 3 Bereiche unterteilt, die von der Ausbreitungsrichtung der Photonen abhängen:

$$\begin{aligned} \Gamma^- &:= \{(x, \vartheta) \in \Gamma \mid \vartheta \cdot n_\Gamma(x) < 0\}, \\ \Gamma^0 &:= \{(x, \vartheta) \in \Gamma \mid \vartheta \cdot n_\Gamma(x) = 0\}, \\ \Gamma^+ &:= \{(x, \vartheta) \in \Gamma \mid \vartheta \cdot n_\Gamma(x) > 0\}, \end{aligned}$$

wobei n_Γ die Außennormale am Randpunkt $x \in \partial\Omega$ bezeichnet. Γ^+ ist der sogenannte Ausstrahlungsrand, über den Strahlung in Richtung ϑ das Gebiet Ω verläßt. Dagegen ist Γ^- der sogenannte Einstrahlungsrand, über den Strahlung in Richtung ϑ in das Gebiet Ω eindringt. Damit die STG eindeutig gelöst werden kann, müssen Randbedingungen vorgegeben werden. Die Modellierung von Strahlungsfeldern erfordert die Vorgabe der Randwerte

$$\mathcal{I}(x, \vartheta) = g(x, \vartheta) \quad \text{auf } \Gamma^-. \quad (33)$$

Falls keine Lichtquellen um das zu modellierende Gebiet existieren, ist $g(x, \vartheta) = 0$.

Zur übersichtlichen Darstellung werden folgende Operatoren eingeführt:

$$\begin{aligned} \mathcal{T}\mathcal{I}(x, \vartheta) &:= \vartheta \cdot \nabla_x \mathcal{I}(x, \vartheta), \\ \mathcal{S}\mathcal{I}(x, \vartheta) &:= \mathcal{I}(x, \vartheta) - \int_{S^{d-1}} P(\vartheta', \vartheta) \mathcal{I}(x, \vartheta') d\vartheta', \\ \mathcal{A} &:= \mathcal{T}\mathcal{I}(x, \vartheta) + \kappa(x) \mathcal{I}(x, \vartheta) + \sigma(x) \mathcal{S}\mathcal{I}(x, \vartheta). \end{aligned}$$

Daraus resultiert die abgekürzte Schreibweise der Gl. (27)

$$\mathcal{A}\mathcal{I}(x, \vartheta) = f(x) \quad \text{in } \Omega \times S^{d-1}.$$

3.2 Die schwache Formulierung

Um die FEM anwenden zu können, muß eine schwache Formulierung der Gl. (27) verwendet werden. Vor deren Aufstellung muß jedoch noch der zur STG natürliche Lösungsraum hergeleitet werden. Dazu führt man vereinfachende Schreibweisen ein und betrachtet anschließend den H^1 -Sobolewraum. Das L^2 -Skalarprodukt

$$(s, t)_{L^2(\Omega \times S^{d-1})} := \int_{\Omega} \int_{S^{d-1}} s(x, \vartheta) t(x, \vartheta) d\vartheta dx \quad (34)$$

wird kurz mit (s, t) bezeichnet, ebenso die L^2 -Norm

$$\|s\|_{L^2(\Omega \times S^{d-1})} := (s, s)_{L^2(\Omega \times S^{d-1})}^{1/2} \quad (35)$$

mit $\|s\|$.

Wie bereits im vorherigen Kapitel erläutert, enthält der Raum H^1 alle Funktionen $s \in L^2(\Omega)$, die Distributionsableitungen $\nabla s \in L^2(\Omega, \mathbb{R}^d)$ besitzen, d.h.

$$H^1(\Omega) := \{s \in L^2(\Omega) \mid \nabla s \in L^2(\Omega, \mathbb{R}^d)\}. \quad (36)$$

Die H^1 -Norm ist definiert durch

$$\|s\|_{H^1(\Omega)} := (\|s\|_{\Omega}^2 + \|\nabla s\|_{\Omega}^2) \quad (37)$$

und das Skalarprodukt lautet

$$(s, t)_{H^1(\Omega)} := \int_{\Omega} s(x)t(x)dx + \int_{\Omega} \nabla s(x)\nabla t(x)dx. \quad (38)$$

Der Raum $\{\mathcal{I} \in L^2(\Omega \times S^{d-1}) \mid \mathcal{I}(\cdot, \vartheta) \in H^1(\Omega)\}$ enthält zwar mögliche Lösungen der STG, jedoch nicht alle. Das liegt daran, daß die Lösungsfunktion nur die 1. Ableitung nach x in Richtung ϑ besitzen muß und somit auch Sprünge orthogonal zu ϑ zuläßt. Die Gl. (27) wird in Dautray & Lions (1993) analysiert und deren natürliche Lösungsraum wird dort angegeben mit:

$$V := \{\mathcal{I} \in L^2(\Omega \times S^{d-1}) \mid \mathcal{T}\mathcal{I} \in L^2(\Omega \times S^{d-1})\}. \quad (39)$$

Falls zusätzlich homogene Vakuum-Randbedingungen angenommen werden, wäre der entsprechende Lösungsraum

$$V_0 := \{\mathcal{I} \in V \mid \mathcal{I} = 0 \text{ auf } \Gamma^-\}. \quad (40)$$

Als zugehörige Norm definiert man

$$\|\mathcal{I}\|_V^2 := \|\mathcal{I}\|^2 + \|\mathcal{T}\mathcal{I}\|^2 + \|\mathcal{I}\|_{\Gamma}^2, \quad (41)$$

wobei

$$\|\mathcal{I}\|_{\Gamma}^2 := \int_{\Gamma} \int_{S^{d-1}} \mathcal{I}^2 |\vartheta \cdot n_{\Gamma}(x)| dx d\vartheta. \quad (42)$$

Die schwache Formulierung der STG im Innern des konvexen Gebiets lautet für $f \in L^2(\Omega)$, $\kappa, \sigma \in L^{\infty}(\Omega)$ und $P \in L^2(\Omega \times S^{d-1})$: suche $\mathcal{I} \in V$, so daß gilt

$$\begin{aligned} a(\mathcal{I}, \mathfrak{v}) &:= (\mathcal{A}\mathcal{I}, \mathfrak{v}) = (\mathcal{T}\mathcal{I}, \mathfrak{v}) + (\kappa\mathcal{I}, \mathfrak{v}) + (\sigma S\mathcal{I}, \mathfrak{v}) \\ &= (f, \mathfrak{v}) \quad \forall \mathfrak{v} \in L^2(\Omega \times S^{d-1}), \\ \mathcal{I}(x, \vartheta) &= g(x, \vartheta) \quad \text{auf } \Gamma^-. \end{aligned} \quad (43)$$

Untersuchungen zur Existenz und Eindeutigkeit der Lösung \mathcal{I} für das Problem $a(\mathcal{I}, \mathfrak{v}) = (f, \mathfrak{v})$ werden in Kanschat (1996) und Wild (1999) durchgeführt. Auf ein besonderes Resultat dieser Arbeiten sollte jedoch noch eingegangen werden. Wenn das Medium nicht streuend ist, d.h. $\sigma(x) = 0$, entkoppelt das Problem zu

einen System von Konvektionsgleichungen auf Ω . Dieser Gleichungstyp ist hyperbolisch und es ist allgemein bekannt, daß die Finite-Elemente-Diskretisierung, angewandt auf diese Art von Gleichungen, bei nicht glatten Lösungen (z.B. in der Nähe von steilen Gradienten und Unstetigkeitsstellen) numerische Oszillationen verursachen. Diese Oszillationen werden durch die schlechte Stabilität des Verfahrens verursacht (vgl. Führer 1993) und zwar speziell durch den Transportoperator $\mathcal{T}\mathcal{I} = \vartheta \cdot \nabla_x \mathcal{I}$. Für die STG kann höhere Stabilität durch Addition eines Diffusions-terms erreicht werden. Durch diese Störung entsteht dann das elliptische Problem

$$\begin{aligned} -\varepsilon \Delta \mathcal{I} + \mathcal{T}\mathcal{I} + \kappa \mathcal{I} + \sigma \mathcal{S}\mathcal{I} &= f & \text{in } \Omega \times S^{d-1} \\ \mathcal{I} &= g & \text{auf } \Gamma^-, \end{aligned} \quad (44)$$

wobei ε ein Parameter ist, der in der Größenordnung von der lokalen Gitterweite gewählt wird, um das Problem nicht unnötig stark zu verändern, aber trotzdem eine ausreichende Stabilisierung zu gewährleisten. Der eingeführte Diffusionsterm unterbindet zwar die Oszillationen entlang einer Charakteristik, wirkt jedoch auch orthogonal dazu („crosswind diffusion“). Um diesen Effekt zu unterbinden, wird eine Stabilisierung des Problems mittels der sogenannten Stromlinien-Diffusion für Finite-Elemente-Methoden (SDFEM) durchgeführt. Bei der SDFEM geht $a(\mathcal{I}, \mathfrak{v})$ in die stabilisierte Bilinearform $a_\delta(\mathcal{I}, \mathfrak{v})$ über, indem die Testfunktion $\mathfrak{v} \in L^2(\Omega \times S^{d-1})$ ersetzt wird durch $\mathfrak{v}' := \mathfrak{v} + \delta \mathcal{T}\mathfrak{v}$, mit $\mathfrak{v} \in V$ und $\delta > 0$. In Dautray & Lions (1993) wird gezeigt, daß die Funktionen $\mathfrak{v} \in V$ auf den Rand Γ fortgesetzt werden können. Dies ermöglicht es, die Randbedingung als

$$(\mathcal{I}, \mathfrak{v})_{\Gamma^-} = (g, \mathfrak{v})_{\Gamma^-} \quad \forall \mathfrak{v} \in V \quad (45)$$

schwach zu formulieren.

Die schwache Formulierung der stabilisierten STG mit eingebrachten Randdaten lautet:

$$\begin{aligned} a_\delta(\mathcal{I}, \mathfrak{v}') &:= (\mathcal{T}\mathcal{I} + \kappa \mathcal{I} + \sigma \mathcal{S}\mathcal{I}, \mathfrak{v} + \delta \mathcal{T}\mathfrak{v}) + (\mathcal{I}, \mathfrak{v})_{\Gamma^-} \\ &= (f, \mathfrak{v} + \delta \mathcal{T}\mathfrak{v}) + (g, \mathfrak{v})_{\Gamma^-} \quad \forall \mathfrak{v} \in V. \end{aligned} \quad (46)$$

Die zellweise konstante Parameterfunktion δ hängt von der lokalen Gitterweite und den Koeffizienten κ und σ ab. Es sei bemerkt, daß Gl. (43) und (46) äquivalent sind, d.h. durch die Stabilisierung wird kein zusätzlicher Konsistenzfehler induziert (siehe Kanschat 1998). Als zugehörige Norm wird

$$\|\mathcal{I}\|_{V_\delta}^2 := \left\| \sqrt{\delta} \mathcal{T}\mathcal{I} \right\|^2 + \|\mathcal{I}\|_\Gamma^2 + \left\| \sqrt{\kappa} \mathcal{I} \right\|^2 + \left\| \sqrt{\sigma} \Pi^\perp \mathcal{I} \right\|^2 \quad (47)$$

definiert, wobei Π^\perp die orthogonale Projektion auf das Komplement $N(\sigma \mathcal{S})^\perp$ des Nullraums von $\sigma \mathcal{S}$ bezeichnet (siehe Kanschat 1998; Wild 1999). Die ersten beiden

Terme sind Standard für eine Stabilisierung mittels einer Stromlinien-Diffusions-Methode. Die beiden letzten Terme sind die notwendigen Erweiterungen hinsichtlich Absorption und Streuung. In Kanschat (1998) wurde gezeigt, daß die Finite-Elemente-Diskretisierung (46) in der Norm (47) stabil ist.

3.3 Galerkin-Diskretisierung

Zur numerischen Behandlung der STG wird eine komplette Diskretisierung auf $\Omega \times S^{d-1}$ vorgenommen, wobei von der schwachen Formulierung der STG mit Stromliniendiffusion (siehe Gl. (46)) ausgegangen wird. Um einen endlichdimensionalen Unterraum V_h des natürlichen Lösungsraumes V der STG (siehe Gl. (39)) zu erhalten, wird im folgenden zunächst das Gebiet Ω und dann die Einheitssphäre S^{d-1} diskretisiert. Danach wird durch Komposition der beiden Diskretisierungen die Diskretisierung des Raumes V konstruiert (vgl. auch Kanschat 1996).

Das Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ wird für $d = 2$ in endlich viele Quadrate und für $d = 3$ in endlich viele Hexaeder (Würfel) zerlegt. Diese Zerlegung des euklidischen Raumes wird mit \mathbb{T}^Ω und die einzelnen Teilgebiete (Quadrate und Würfel) werden mit K_i^Ω bezeichnet, wobei alle D Teilgebiete durch $i = \{1, \dots, D < \infty\}$ eindeutig numeriert werden. Als Maß für die Größe des Elements K_i^Ω gilt sein Durchmesser

$$\text{diam } K_i^\Omega := \max_{x_i, y_i \in K_i^\Omega} \text{dist}(x_i, y_i). \quad (48)$$

Die Durchmesser der Elemente K_i^Ω werden als Gitterweitenfunktion h angegeben. Somit ist $h \in L^2(\Omega)$ eine stückweise konstante Funktion, die auf jedem Teilgebiet $K_i^\Omega \in \mathbb{T}^\Omega$ durch $h|_{K_i^\Omega} := \text{diam } K_i^\Omega$ definiert ist. Weiter gilt für alle $K_i^\Omega, K_j^\Omega \in \mathbb{T}^\Omega$:

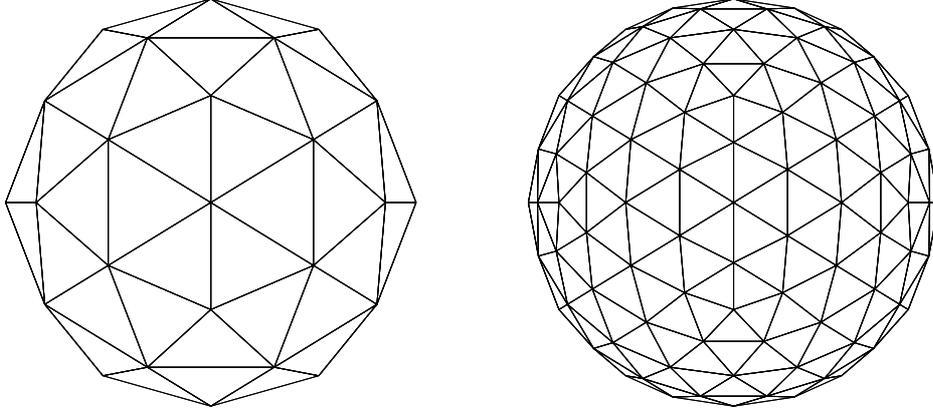
$$\bigcup_i \bar{K}_i^\Omega = \bar{\Omega} \quad \text{und} \quad K_i^\Omega \cap K_j^\Omega = \emptyset \quad \text{für } i \neq j. \quad (49)$$

Wir definieren den Funktionenraum

$$V_h^\Omega := \left\{ v \in C^0(\Omega) \mid v|_{K^\Omega} \in \mathcal{Q}^1(K^\Omega), \quad \forall K^\Omega \in \mathbb{T}^\Omega \right\}. \quad (50)$$

$\mathcal{Q}^1(K^\Omega)$ bezeichnet die Menge aller eindimensionalen Polynome, die sich als Linearkombination aus Produkten von Polynomen jeweils vom Höchstgrad 1 darstellen lassen (siehe z.B. Großmann & Roos 1992). Da die Anzahl der Teilgebiete $D < \infty$ ist, ist auch $\dim V_h^\Omega < \infty$ und es existieren endlich viele lineare Basisfunktionen ψ_i vom Typ (21).

Die Diskretisierung des Winkelraumes erfolgt durch die Projektion eines Polyeders auf die Einheitssphäre (siehe Abb. 3). Diese Zerlegung $\mathbb{T}^{S^{d-1}}$ genügt un-

Abbildung 3: Triangulierung der Einheitssphäre S^2 (80 bzw. 320 Elemente)

abhängig von $h(\vartheta) \in L^2(S^{d-1})$ der „uniform shape“ Bedingung, da die Innenwinkel α dieser Projektion durch $54^\circ \leq \alpha \leq 72^\circ$ beschränkt sind (vgl. Kanschat 1996). Die Elemente von $\mathbb{T}^{S^{d-1}}$ werden mit $K_i^{S^{d-1}}$ bezeichnet, wobei der Index $i = \{1, \dots, L < \infty\}$ ist. Auch hier gilt wie bei der Zerlegung des euklidischen Raumes, daß für alle $K_i^{S^{d-1}}, K_j^{S^{d-1}} \in \mathbb{T}^{S^{d-1}}$ gilt:

$$\bigcup_i \bar{K}_i^{S^{d-1}} = S^{d-1} \quad \text{und} \quad K_i^{S^{d-1}} \cap K_j^{S^{d-1}} = \emptyset \quad \text{für } i \neq j. \quad (51)$$

Als Funktionenraum über S^{d-1} wird

$$V_h^{S^{d-1}} := \left\{ v \in L^2(S^{d-1}) \mid v|_{K^{S^{d-1}}} \in P^r(K^{S^{d-1}}), \quad \forall K^{S^{d-1}} \in \mathbb{T}^{S^{d-1}} \right\} \quad (52)$$

definiert, wobei P^r den Raum aller Polynome vom Grad $\leq r$ bezeichnet. Es werden also auch unstetige Elementübergänge zugelassen. Für den weiteren Verlauf der Arbeit wählen wir $r = 0$, so daß $v|_{K^{S^{d-1}}} = c_{K^{S^{d-1}}}$ konstant ist. Als Basisfunktionen π_i des endlichdimensionalen Funktionenraums $V_h^{S^{d-1}}$ wählen wir stückweise konstante Funktionen. Für $\pi_i|_{K_i^{S^{d-1}}} \in P^0(K_i^{S^{d-1}})$ gilt

$$\pi_i|_{K_i^{S^{d-1}}} := \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{falls } i = j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}. \quad (53)$$

Der Träger der konstanten Basisfunktionen erstreckt sich also jeweils nur über ein Element.

Durch Bildung des Tensorproduktes der beiden oben eingeführten Räume V_h^Ω und $V_h^{S^{d-1}}$ erhält man den endlichdimensionalen Funktionenraum $V_h \subset V$:

$$\begin{aligned} V_h &:= V_h^\Omega \otimes V_h^{S^{d-1}} \\ &= \left\{ \mathbf{v} \in V \mid \mathbf{v}(\cdot, \vartheta)|_{K^\Omega} \in \mathcal{Q}^1(K^\Omega) \forall K^\Omega \in \mathbb{T}^\Omega, \mathbf{v}|_{K^\Omega} \in C^0(\Omega), \right. \\ &\quad \left. \mathbf{v}(x, \cdot)|_{K^{S^{d-1}}} \in P^0(K^{S^{d-1}}) \forall K^{S^{d-1}} \in \mathbb{T}^{S^{d-1}} \right\}. \end{aligned} \quad (54)$$

Aus den Basen $\{\psi_i\}_i$ von V_h^Ω und $\{\pi_j\}_j$ von $V_h^{S^{d-1}}$ setzt sich die Basis $\{\mathbf{v}_{ij}\}_{ij}$ von V_h zusammen als

$$\mathbf{v}_{ij}(x, \vartheta) = \psi_i(x)\pi_j(\vartheta). \quad (55)$$

Somit lautet die vollständig diskretisierte schwache Formulierung der Strahlungstransportgleichung mit Stromliniendiffusion: suche $\mathcal{I}_h \in V_h$, so daß gilt

$$\begin{aligned} a_\delta(\mathcal{I}_h, \mathbf{v}) &:= (\mathcal{T}\mathcal{I}_h + \kappa\mathcal{I}_h + \sigma\mathcal{S}\mathcal{I}_h, \mathbf{v} + \delta\mathcal{T}\mathbf{v}) + (\mathcal{I}_h, \mathbf{v})_{\Gamma^-} \\ &= (f, \mathbf{v} + \delta\mathcal{T}\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in V_h. \end{aligned} \quad (56)$$

In Wild (1999) wird gezeigt, daß die in Gl. (46) definierte Bilinearform $a_\delta(\cdot, \cdot)$ bezüglich der Norm $\|\cdot\|_{V_\delta}$ aus Gl. (47) stetig und koerzitiv ist. Aus diesem Grund hat die Bilinearform dieselben Eigenschaften auf dem Unterraum V_h und es kann die gewöhnliche FE-Konvergenztheorie für elliptische Operatoren angewendet werden, ohne zusätzliche Bedingungen an die Diskretisierung zu stellen.

3.4 Fehlerschätzung und Adaptivität

3.4.1 Allgemein

Um partielle Differentialgleichungen, insbesondere die mehrdimensionale STG, hinreichend genau numerisch zu lösen, werden oft riesige Speicher- und Rechenkapazitäten benötigt. Für Lösungen einer gewünschten Genauigkeit ist es deshalb oft unerlässlich, die Größe des diskreten Problems zu reduzieren. In manchen Fällen ist es möglich, Symmetrien auszunutzen und dadurch die Dimension des Problems zu verringern. Da viele Probleme aber in ihrer vollen Dimension berechnet werden müssen, sucht man nach anderen Methoden, die bei gleicher Genauigkeit weniger Speicher- und Rechenaufwand benötigen. Eine Möglichkeit besteht darin, die Gitterzellen an „problematischen“ Teilgebieten von Ω dichter zu setzen als an „unproblematischen“ Stellen. Dazu muß man festlegen, was „problematisch“ bedeutet und feststellen, wo sich solche Teilgebiete befinden. Allgemein geschieht dies mittels eines optimierenden Gittersteuerungsprozesses, durch den

möglichst wenige markierte Elemente des Gitters verfeinert werden, so daß der Fehler $\|e\| := \|\mathcal{I} - \mathcal{I}_h\|$ (in einer bestimmten Norm) in möglichst wenigen Verfeinerungsschritten unter eine vorgegebene Toleranz TOL gedrückt wird.

Für Diskretisierungen mit äquidistanter Gitterweite erhält man im allgemeinen a priori Fehlerschätzer der Form $\|e\| \leq c(\mathcal{I})h^k$, wobei k die Konsistenzordnung und $c(\mathcal{I})$ eine von h unabhängige Größe ist, die üblicherweise von Schranken höherer Ableitungen der Lösung \mathcal{I} abhängt (siehe dazu das Lemma von Bramble-Hilbert z.B. in Braess 1997). Solange die höheren Ableitungen im gesamten Definitionsbereich von ungefähr gleicher Größe sind, ist die Wahl äquidistanter Gitterweiten angemessen. In vielen Fällen sind die Ableitungen in ihrer Größenordnung jedoch lokal sehr verschieden und können sogar Singularitäten aufweisen (vgl. z.B. Grosche et al. 1996). Dies legt nahe, den Fehler lokal, d.h. auf jedem Element K der Triangulation einzeln zu schätzen. Dann kann man variabel angepaßte Gitterweiten auf entsprechend flexiblen Gittern derart realisieren, daß die lokalen Fehler $\|e\|_K$ an den gewünschten Stellen hinreichend klein oder, falls die Lösung im gesamten Rechengebiet von Interesse ist, überall möglichst gleich groß werden. In Anlehnung an die Vorgehensweise bei Differenzenverfahren könnte man sich auf Schätzungen des „lokalen Diskretisierungsfehlers“ beschränken. Dies läuft auf die Schätzung der lokalen Glattheit der unbekanntenen Lösung aus der berechneten numerischen Approximation hinaus. Z.B. kann man versuchen, auf einem Zellblock aus einer linearen Näherungslösung \mathcal{I}_h durch Anwendung eines Differenzenquotienten ∇_h eine Schätzung der ersten Ableitung von \mathcal{I} zu gewinnen:

$$\|\nabla \mathcal{I}\|_K \approx \eta_K := \|\nabla_h \mathcal{I}_h\|_K, \quad K \in \mathbb{T}_h. \quad (57)$$

Auf der Basis dieses Indikators η_K ließen sich dann Strategien zu lokaler Gitterverfeinerung oder -vergrößerung aufstellen: ist z.B. η_k auf einer Zelle $K \in \mathbb{T}_h$ überdurchschnittlich groß, so wird diese in Teilzellen zerlegt. Diese Strategie der *ad hoc* Gitteranpassung erfordert keinen großen Aufwand und funktioniert in der Praxis in vielen Fällen erstaunlich gut. Grundsätzlich treten jedoch folgende Schwächen auf:

- Die Auswertung von Gl. (57) liefert keine Aussage über die tatsächliche Größe des Fehlers $\|e\| = \|\mathcal{I} - \mathcal{I}_h\|$.
- Die auf den lokalen Indikatoren η_K basierende Gitterverfeinerungsstrategie geht davon aus, daß der „gemessene“ Fehler in K auch dort entstanden ist und durch lokale Verfeinerung von K reduziert werden kann. Dies ist jedoch im allgemeinen nicht richtig, da dabei der Effekt der globalen „Fehlerakkumulation“ (auch „pollution effect“ genannt) vernachlässigt wird.

Eine a priori Gitteradaption ist in der Praxis eher die Ausnahme, weil im allgemeinen nicht bekannt ist, ob und wo Singularitäten auftreten. In Kombination

mit einem a posteriori Fehlerschätzer stellen adaptive Methoden allerdings flexible Möglichkeiten zur Verfügung, Rechenkosten (im Sinne von Speicher- und Rechenzeitaufwand) zu reduzieren und zuverlässige Lösungen zu berechnen. Bei der a posteriori Gitteradaption wird zuerst auf einem groben Gitter eine Näherungslösung berechnet. Daraus wird der Beitrag jedes einzelnen Elements zum Gesamtfehler geschätzt und dadurch auf notwendige Gitterverfeinerung in bestimmten Regionen geschlossen (siehe z.B. Becker & Rannacher 2001).

Die Fehlerkontrolle bei der Galerkin FEM basiert häufig auf a posteriori Fehlerschätzungen in der natürlichen Energienorm oder der globalen L^2 -Norm (für eine Übersicht siehe Ainsworth & Oden 1997 oder Verfürth 1996). Diese werden aus berechenbaren lokalen Residuen $R(\mathcal{I}_h) := (f, \varphi) - a(\mathcal{I}_h, \varphi)$ der approximierten Lösung gewonnen und benötigen insbesondere keine Information über die exakte Lösung. Solche Schätzungen werden über Dualitätsargumente abgeleitet, wobei die Approximationseigenschaften des FE-Raumes über lokale Interpolationskonstanten eingehen, während die Stabilität des dualen Problems gewöhnlich durch eine globale Stabilitätskonstante ausgedrückt wird.

Wir behalten die Bezeichnungen aus Abschnitt 3.3 bei und führen zusätzlich noch einen Fehlerschätzer $\eta(\mathcal{I}_h) := \sum_K \eta_K$ ein.

Wie oben bereits erwähnt wird der Fehlerschätzer über das Residuum definiert, das dann über K geeignet ausgewertet werden muß. Dazu betrachten wir das Problem (vgl. auch Becker & Rannacher 1996; Rannacher 1998; Becker & Rannacher 2001): suche $z \in V$, so daß gilt

$$a(w, z) = \mathcal{M}(w) \quad \forall w \in V, \quad (58)$$

wobei z die Lösung des dualen Problems für ein beliebiges Fehlerfunktional \mathcal{M} ist. Dieses Problem kann auch mit Hilfe der adjungierten Bilinearform $a^*(\cdot, \cdot)$ dargestellt werden: suche $z \in V$, so daß gilt

$$a^*(z, w) = \mathcal{M}(w) \quad \forall w \in V. \quad (59)$$

Wenn man $w = e := \mathcal{I} - \mathcal{I}_h$ setzt, gilt

$$\begin{aligned} \mathcal{M}(e) &= a^*(z, e) \\ &= a(e, z) \\ &= a(\mathcal{I} - \mathcal{I}_h, z) \end{aligned} \quad (60)$$

und man erhält unter Ausnutzung der Galerkin-Orthogonalität (vgl. Gl. (16))

$$\begin{aligned} \mathcal{M}(e) &= a(e, z - z_h) \\ &= a(\mathcal{I}, z - z_h) - a(\mathcal{I}_h, z - z_h) \\ &= (f, z - z_h) - a(\mathcal{I}_h, z - z_h). \end{aligned} \quad (61)$$

Auf der rechten Seite stehen jetzt nur noch gegebene, berechenbare oder zumindest abschätzbare Größen. Wir erhalten somit einen Fehlerschätzer, der das Funktional $\mathcal{M}(e)$ beschränkt:

$$\mathcal{M}(e) = \mathcal{M}(\mathcal{I} - \mathcal{I}_h) \leq \eta(\mathcal{I}_h) \leq TOL. \quad (62)$$

Für einen Fehlerschätzer soll gelten, daß

$$c_1 \eta(\mathcal{I}_h) \leq \mathcal{M}(e) \leq c_2 \eta(\mathcal{I}_h) \quad 0 < c_1 \leq c_2. \quad (63)$$

Ist nur die zweite Ungleichung erfüllt und c_2 bekannt, so kann $\mathcal{M}(e) \leq TOL$ garantiert werden und der Fehlerschätzer heißt zuverlässig. Ist die erste Ungleichung erfüllt, so heißt der Schätzer effizient, falls c_1 nicht zu klein ist. Dies ist wünschenswert, damit keine zu kleinen und dadurch zu aufwendigen Gitter berechnet werden. Im besten Fall ist ein Fehlerschätzer asymptotisch exakt, d.h. $c_1, c_2 \rightarrow 1$ für $h \rightarrow 0$. Während die Zuverlässigkeit bei der Entwicklung eines Schätzers ständig beachtet werden muß, ist Effizienz schwierig zu erreichen und wird deshalb oft mittels numerischer Experimente untersucht.

Je nachdem welche Fehlerabschätzung uns interessiert, wählen wir beispielsweise folgende Fehlerfunktionale:

- L^2 -Norm-Fehler $\|e\|$:

$$\mathcal{M}(\varphi) := \|e\|^{-1} (\varphi, e) \Rightarrow \mathcal{M}(e) = \|e\|; \quad (64)$$

- Energienormfehler $\|\nabla e\|$:

$$\mathcal{M}(\varphi) := \|\nabla e\|^{-1} (\nabla \varphi, \nabla e) \Rightarrow \mathcal{M}(e) = \|\nabla e\|; \quad (65)$$

- Punktfehler:

$$\mathcal{M}(\varphi) := \varphi(x_0) \Rightarrow \mathcal{M}(e) = e(x_0). \quad (66)$$

Mit Hilfe von η_K kann man jetzt die neue Gitterweitenfunktion $h(\eta)$ bestimmen, oder man kann einfach diejenigen Elemente K mit unerwünscht „großem“ Residuumsbeitrag weiter zerlegen.

Der Gitterverfeinerungsprozeß orientiert sich an den lokalen Fehlerindikatoren. Eine a posteriori Gitteradaption durchläuft also folgende Prozedur im allgemeinen mehrfach:

- löse die Aufgabe auf dem gegebenen Gitter;
- bestimme bessere lokale Gitterweiten mit Hilfe der gewonnenen Lösung;

- konstruiere ein neues Gitter aufgrund der neuen Anforderungen;
- beende den Algorithmus, wenn das Abbruchkriterium erfüllt ist.

Bei der Konstruktion eines verbesserten Gitters darf der Aufwand nicht zu groß werden. Deshalb ist es problematisch, durch die Gitterweitenfunktion $h(\eta)$, unabhängig von der vorigen Triangulierung, die neuen Elemente zu bestimmen. Sind die Basis und somit auch alle vorher berechneten Größen, wie z.B. die FE-Matrix, nicht mehr verwendbar. Es liegt also nahe, jedes ausgewählte Element durch Hinzunahme von wenigen Gitterpunkten zu verkleinern. Damit brauchen nur lokale FE-Matrixkoeffizienten berechnet zu werden, denn beginnend mit einer FE-Basis über dem größten Gitter kann die Basis über der nächstfeineren Zerlegung lediglich durch Hinzunahme von lokalen Funktionen über den neuen Gitterpunkten gebildet werden. Auf diese Weise entsteht eine Hierarchie von Gittern, was auch die Verwendung von Mehrgitterverfahren zur Berechnung von \mathcal{I}_h begünstigt (vgl. z.B. Großmann & Roos 1992).

3.4.2 Der monochromatische Strahlungstransport als Anwendungsbeispiel

Die Simulation komplexer Strahlungsfelder in der Astrophysik erfordert in manchen Teilen des Rechengebietes höhere Auflösung als in anderen Bereichen. Das Verwenden von hochgradig adaptiven Gittern ist also im numerischen Strahlungstransport absolut notwendig, da steile Gradienten der Quellfunktion bzw. der Koeffizienten, aber auch die hohe Dimensionalität des Problems die numerische Berechnung unmöglich machen würden (vgl. Führer & Kanschä 1995). Wegen der hohen Dimension des Rechengebiets benötigt man selbst auf Parallelrechnern eine geeignete Methode zur Fehlerschätzung und Gitteradaption, um hinreichend genaue Ergebnisse zu erzielen (siehe Kanschä 1998). Dabei ist zu sicherzustellen, daß die Fehlergrenzen scharf genug sind, um numerische Fehler von Modellfehlern unterscheiden zu können.

Um unter Verwendung der Galerkin-Orthogonalität einen a posteriori Fehlerschätzer zu erhalten, muß die Diskretisierung wie in Abschnitt 3.3 durchgeführt werden. Ferner sollte diese sowohl im Winkel ϑ als auch im Ort vom Galerkin-Typ sein. Wir beziehen uns im folgenden stets auf die in Abschnitt 3.3 durchgeführten Diskretisierungen und verwenden die dort eingeführten Definitionen, insbesondere für den Raum V_h sowie für die Elemente K_i und die Triangulation \mathbb{T}_h . Jetzt wenden wir das oben eingeführte lineare Funktional $\mathcal{M}(\cdot) : V \rightarrow \mathbb{R}$ auf \mathcal{I} bzw. \mathcal{I}_h an und erhalten mit $e := \mathcal{I} - \mathcal{I}_h$

$$\mathcal{M}(\mathcal{I}) - \mathcal{M}(\mathcal{I}_h) = \mathcal{M}(e). \quad (67)$$

Wie wir bereits oben angedeutet haben und im folgenden sehen werden, benötigen wir den dualen Strahlungstransportoperator \mathcal{A}^* und die Lösung z des zur STG dualen Problems, um einen effizienten Fehlerschätzer konstruieren zu können. Als rechte Seite des dualen Problems wählen wir das Fehlerfunktional $\mathcal{M}(e)$, das uns eine Abschätzung in einer bestimmten Norm liefert (vgl. z.B. Gl. (64), (65) oder (66)). Der zum Strahlungstransportoperator \mathcal{A} duale Operator \mathcal{A}^* besitzt die Darstellung

$$\begin{aligned} a(u, \mathbf{v}) &= (\mathcal{A}\mathcal{I}, \mathbf{v}) \\ &= (\mathcal{I}, \mathcal{A}^*\mathbf{v}) \\ &= (\mathcal{I}, (-\mathcal{T} + \kappa + \sigma\mathcal{S})\mathbf{v})_{\Omega \times \mathcal{S}^{d-1}} + (\mathcal{I}, \mathbf{v})_{\Gamma^+}. \end{aligned} \quad (68)$$

Das duale Problem besitzt zum primalen Problem komplementäre Randbedingungen, d.h. $\mathcal{I} = 0$ auf Γ^+ .

Ausgehend von der allgemeinen Fehlerdarstellung in Gl. (59) erhalten wir mit $(\varphi, \mathcal{A}^*z) := \mathcal{M}(\varphi)$ und unter Ausnutzung der Galerkin Orthogonalität $(\mathcal{A}e, \varphi_h) = 0 \forall \varphi_h \in V_h$

$$\begin{aligned} \mathcal{M}(e) &= (e, \mathcal{A}^*z) \\ &= (\mathcal{A}e, z - z_h) \\ &= \sum_{K \in \mathbb{T}_h} (f - \mathcal{A}\mathcal{I}_h, z - z_h)_K \\ &= \sum_{d=1}^D \sum_{l=1}^L (R(\mathcal{I}_h), z - z_h)_{K_d^\Omega \times K_l^{\mathcal{S}^{d-1}}} \quad \forall z_h \in V_h, \end{aligned} \quad (69)$$

$$= \sum_{d=1}^D \sum_{l=1}^L (R(\mathcal{I}_h), z - z_h)_{K_d^\Omega \times K_l^{\mathcal{S}^{d-1}}} \quad \forall z_h \in V_h, \quad (70)$$

wobei $R(\mathcal{I}_h) := f - \mathcal{A}\mathcal{I}_h$ das Residuum bezeichnet. Weiterhin kann man

$$(R(\mathcal{I}_h), z - z_h)_K \leq \|R(\mathcal{I}_h)\|_K \|z - z_h\|_K \quad (71)$$

abschätzen und mit den Approximationsabschätzungen des FE-Raums erhält man

$$\begin{aligned} \|z - z_h\|_K &\leq C_{dl} \left[h_{K_d^\Omega}^2 \|\nabla_x^2 z\|_{K_d^\Omega \times K_l^{\mathcal{S}^{d-1}}} + h_{K_l^{\mathcal{S}^{d-1}}} \|\partial_{\vartheta} z\|_{K_d^\Omega \times K_l^{\mathcal{S}^{d-1}}} \right. \\ &\quad \left. + h_{K_l^{\mathcal{S}^{d-1}}}^2 \|\partial_{\vartheta}^2 z\|_{K_d^\Omega \times K_l^{\mathcal{S}^{d-1}}} \right] \\ &= C_{dl} \hat{\omega}_{dl}. \end{aligned} \quad (72)$$

Aufgrund der Superkonvergenz in den Auswertungspunkten der Ordinatendiskretisierung ist die Lösung der STG stets eine Ordnung in h besser als die Beiträge $h_{K_l^{\mathcal{S}^{d-1}}} \|\partial_{\vartheta} z\|_{K_d^\Omega \times K_l^{\mathcal{S}^{d-1}}} + h_{K_l^{\mathcal{S}^{d-1}}}^2 \|\partial_{\vartheta}^2 z\|_{K_d^\Omega \times K_l^{\mathcal{S}^{d-1}}}$ zum Fehlerschätzer (siehe Kanschat

1996). Der Fehler wird also systematisch überschätzt, so daß wir einen vereinfachten Schätzer verwenden, der nur die Komponente $h_{K_d^\Omega}^2 \|\nabla_x^2 z\|_{K_d^\Omega \times K_l^{sd-1}}$ aus der Ortsdiskretisierung berücksichtigt. Die lokalen Gewichte $\hat{\omega}_{dl}$ werden nun zu

$$\omega_{dl} = h_{K_d^\Omega}^2 \|\nabla_x^2 z\|_{K_d^\Omega \times K_l^{sd-1}}. \quad (73)$$

Somit ergibt sich mit Hilfe des dualen Problems und dessen Lösung z für lineare Ansatzfunktionen im Ort und konstante Ansatzfunktionen im Winkel der folgende Fehlerschätzer: seien $\mathcal{I}, z \in V$ und $\mathcal{I}_h, z_h \in V_h$, wobei z_h die Galerkin-Näherung der dualen Lösung z bezeichnet. Dann kann das Fehlerfunktional $\mathcal{M}(e) = (e, r_{\mathcal{M}})$ mit $r_{\mathcal{M}} = \mathcal{A}^* z$ abgeschätzt werden durch

$$\begin{aligned} |\mathcal{M}(e)| &\leq \eta(\mathcal{I}_h) = \sum_K \eta_K \\ &= \sum_{d=1}^D \sum_{l=1}^L C_{dl} \omega_{dl} \|R(\mathcal{I}_h)\|_{K_d^\Omega \times K_l^{sd-1}}, \end{aligned} \quad (74)$$

wobei die Konstante C_{dl} durch lokale Approximationseigenschaften von V_h bestimmt wird. Da die duale Lösung z nicht analytisch verfügbar ist, wird sie üblicherweise durch die FE-Lösung z_h des dualen Problems ersetzt. Dies hat einen zweiten Lösungsschritt derselben Struktur wie beim primalen Problem zur Folge. Es ist klar, daß wegen dieser Ersetzung der Fehlerschätzer in Gl. (74) im strengen Sinne nicht länger zuverlässig sein kann. Um $\|\nabla_x^2 z\|_K$ abzuschätzen, kann man die Differentialquotienten durch geeignete Differenzenquotienten der Lösung z_h ersetzen. Dies erfordert allerdings die Einführung einer nicht berechenbaren Sicherheitskonstante. Selbst Rechnungen mit dem einfacheren, auf das Ortsgitter beschränkten Fehlerschätzer haben gezeigt, daß dieser trotz empirisch gewählter Sicherheitskonstante gute Ergebnisse liefert (siehe Kanschat 1996).

Für dreidimensionale Strahlungstransportprobleme ist es unvermeidlich, die Größe des zu lösenden diskreten Systems zu reduzieren. Wie bereits diskutiert, sind adaptive Methoden sehr flexibel und liefern – in Verbindung mit a posteriori Fehlerschätzern vom Typ (74) – zuverlässige und genaue Lösungen. Insbesondere der Genauigkeitsaspekt ist für die Interpretation von Beobachtungsdaten mittels Simulationsrechnungen sehr wichtig, da nur bei ausreichender Genauigkeit der numerische Fehler von Modellfehlern getrennt werden kann. Ein erster Schritt war die Entwicklung von Gitterverfeinerungsstrategien basierend auf a posteriori Fehlerschätzern in der globalen Energie- oder L^2 -Norm, die lokale Residuen der berechneten Lösungen enthielten. Wenn wir das L^2 -Fehlerfunktional $\mathcal{M}(e) = \|e\|$ aus Gl. (64) als linke Seite von Gl. (74) verwenden, ergibt eine Abschätzung der

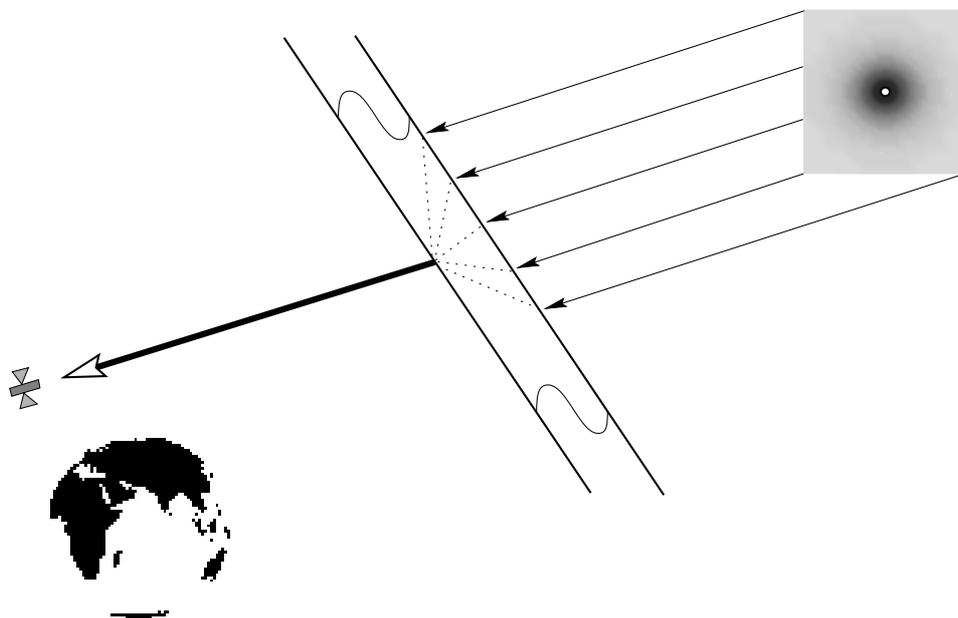


Abbildung 4: Problemskizze für die Beobachtung einer Punktquelle (rechts) von einem Satelliten (links) durch ein dazwischen liegendes Medium (mitte).

rechten Seite

$$\|e\| \leq \tilde{\eta} = \sqrt{\sum_K \eta_{L^2}^2} \quad (75)$$

$$\eta_{L^2} = C_{dl} C_s h_K^2 \|R(\mathcal{I}_h)\|_K,$$

wobei C_s nur von der Form und Größe von Ω abhängt. Diese a posteriori Schranke für den L^2 -Fehler findet man auch in der Literatur (siehe z.B. Eriksson et al. 1995; Verfürth 1996). Solche Abschätzungen sind für den Fall inhomogener Koeffizienten und insbesondere für steile Gradienten der Lösung \mathcal{I} nicht optimal. Jedoch liefern diese sogenannten L^2 -Indikatoren η_{L^2} ein gutes Verfeinerungskriterium, um das qualitative Verhalten der Lösung \mathcal{I} überall in Ω zu untersuchen. In der Astronomie ist man daran interessiert, eine gemessene bzw. beobachtete Größe (z.B. den Strahlungsfluß) mit einem Simulationsergebnis zu vergleichen. Der gewichtete Residuenschätzer aus Gl. (74) wurde genau für diese Aufgabe entwickelt und erlaubt gezielt die a posteriori Fehlerkontrolle in einzelnen, physikalisch relevanten Größen, sowie die adaptive Erzeugung der hierfür „optimalen“ Gitter (siehe Kanschat (1996)). Wie bereits im vorhergehenden Abschnitt erwähnt, werden die lokalen Gewichte ω_{dl} im Residuenfehlerschätzer (74) durch Bildung von Diffe-

renzenquotienten aus der auf dem aktuellen Gitter numerisch berechneten dualen Lösung gewonnen. Dieser Mehraufwand zur Auswertung der lokalen Fehlerindikatoren η_K gegenüber beispielsweise den L^2 -Indikatoren (75) sollte sich durch einen Gewinn an Gitterökonomie, d.h. Verfeinerung an den „problematischen“ Stellen, bezahlt machen (siehe Tabelle 3). Die Definition eines „problematischen“ Teilgebiets findet sich zu Beginn von Abschnitt 3.4.1. Somit erhält man nicht nur wesentlich ökonomischere Gitter als mit einem globalen L^2 -Indikator, sondern auch erstaunlich genaue Schranken für die tatsächliche Fehlergröße (siehe auch Kanschat 1996). Letzteres sollte aber nicht überbewertet werden, da wegen der nur ungenau bekannten Konstante C_{dl} der angegebene Schätzwert etwas willkürlich ist.

Die Abb. 4 skizziert eine typische Beobachtungssituation in der Astronomie: das beobachtete Objekt ist weit entfernt, d.h. beobachtet wird die Strahlungsinintensität in einer Richtung ϑ_{obs} . Da das Objekt von einem Teleskop räumlich nicht aufgelöst wird, wird nur der Strahlungsfluß gemessen. Der Fluß entspricht dem Mittelwert der mit $\cos \vartheta_{obs}$ gewichteten Intensität $\mathcal{I}(x, \vartheta_{obs})$ über den der Erde zugewandten Teil des Randes Γ_{obs} . Wenn man das Simulationsergebnis mit den Beobachtungen vergleichen will, so ist der interessierende Wert aus der Rechnung durch das Auswertungsfunktional

$$\mathcal{M}_{obs}(\mathcal{I}) = \int_{\Gamma_{obs}} \mathcal{I}(x, \vartheta_{obs}) \vartheta_{\Gamma} \cdot \vartheta_{obs} dx \quad (76)$$

definiert, wobei ϑ_{Γ} die Flächennormale des Randelementes ist. Das zu diesem Funktional gehörende duale Problem ist besonders einfach: es entspricht dem primalen Problem ohne Quellen im Innern des Rechengebiets und konstanter Einstrahlung aus Richtung der Erde mit Mittelwert 1.

Häufig ist das beobachtete Objekt keine Punktquelle, sondern eine räumlich ausgedehnte Photonenquellregion. In der Beobachtungstechnik – insbesondere bei der Beobachtung hoch-rotverschobener Galaxien (siehe Kapitel 7) – wird vielfach die sogenannte Langspaltspektroskopie angewandt. Dabei werden Langspaltmasken in den Strahlengang eines Teleskops gebracht, um Spektren aus Teilgebieten des beobachteten Objekts zu erhalten (vgl. dazu Abb. 15 und 21). Das entsprechende Auswertungsfunktional ist durch

$$\mathcal{M}_{slit}(\mathcal{I}) = \int_{\Gamma_{slit}} \mathcal{I}(x, \vartheta_{obs}) \vartheta_{\Gamma} \cdot \vartheta_{obs} dx \quad (77)$$

gegeben, wobei Γ_{slit} die Fläche des Langspalts auf dem Teil des Randes bezeichnet, der dem Beobachter zugewandt ist. Das zu diesem Funktional gehörende duale

Problem ist wie oben definiert, nur daß die Einstrahlung nicht über den gesamten Rand, sondern nur über die Fläche Γ_{slit} erfolgt.

Der Gitterverfeinerungsprozess basierend auf einem a posteriori Fehlerschätzer ist folgendermaßen organisiert: unter der Annahme einer gegebenen Fehlertoleranz TOL ist es das Ziel, ein Gitter \mathbb{T}_h zu erzeugen, auf dem

$$|\mathcal{M}(e)| \leq \eta(\mathcal{I}_h) = \sqrt{\sum_{K \in \mathbb{T}_h} \eta_K^2(\mathcal{I}_h)} \leq TOL \quad (78)$$

gilt. Die *lokalen Verfeinerungsindikatoren* η_K sind in Gl. (74) definiert. Nachdem wir die Lösung der STG auf einem groben Startgitter berechnet haben, wenden wir die sogenannte „fixed fraction“ Gitterverfeinerungsstrategie (siehe z.B. Kanschat 1996; Becker & Rannacher 2001) an: die Zellen werden nach der Größe von η_K sortiert und ein fester Anteil Υ (z.B. 30 %) der Zellen mit den größten η_K wird in jedem adaptiven Schritt verfeinert. Diese Strategie garantiert, daß in jedem Verfeinerungszyklus eine ausreichend große Anzahl von Zellen verfeinert wird. Dann wird auf jedem neuen (und feineren) Gitter die Lösung berechnet und der gesamte Prozeß wird schließlich wiederholt, bis die vorgegebene Toleranz erreicht ist. Diese Strategie ist insbesondere dann zu favorisieren, wenn man eine Rechnung so genau wie möglich machen möchte. Damit ist gemeint, daß die vorgegebene Toleranz zwar nicht erreicht wird, der maximale Hauptspeicher des Computers jedoch bereits erschöpft ist. In diesem Fall muß der Parameter Υ entsprechend den verbleibenden Speicherkapazitäten bestimmt werden.

3.5 Resultierende Matrixstruktur

Bei einer Diskretisierung der monochromatischen STG mit N Freiheitsgraden (entspricht der Anzahl der Knoten des quadratischen Gitters in 2D bzw. hexaedrischen Gitters in 3D) in Ω und M Ordinaten in S^{d-1} erhalten wir ein diskretes lineares Gleichungssystem der Form

$$\mathbf{A}_{mono} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{f}, \quad (79)$$

mit dem Vektor \mathbf{u} , der die spezifischen Intensitäten enthält und \mathbf{f} die Werte des Quellterms. Diese beiden Vektoren haben die Länge $(N \cdot M)$ und \mathbf{A}_{mono} ist eine $(N \cdot M) \times (N \cdot M)$ -Matrix. Wenn wir die im vorigen Abschnitt behandelte Tensorproduktstruktur anwenden, hat die Strahlungstransportmatrix \mathbf{A}_{mono} die Form

$$\mathbf{A}_{mono} = \mathbf{T} + \mathbf{K} + \mathbf{S} \quad (80)$$

mit der Blockstruktur

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \mathfrak{T}_1 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \mathfrak{T}_M \end{pmatrix}, \quad (81)$$

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} \mathfrak{K}_1(\chi) & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \mathfrak{K}_M(\chi) \end{pmatrix}, \quad (82)$$

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \omega_{11}\mathfrak{S}_1(\sigma) & \dots & \omega_{1M}\mathfrak{S}_1(\sigma) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega_{M1}\mathfrak{S}_M(\sigma) & \dots & \omega_{MM}\mathfrak{S}_M(\sigma) \end{pmatrix}, \quad (83)$$

wobei $\omega_{uv} = P(\vartheta_u, \vartheta_v)/M$ ist und $\chi = \kappa + \sigma$ die Opazität bezeichnet. Bei Berücksichtigung der Diskretisierung durch SDFEM sind die Einträge der $N \times N$ -Blöcke definiert durch

$$\mathfrak{T}_i^{jk} = (\mathbf{v}_j + \delta\vartheta_i \cdot \nabla_x \mathbf{v}_j, \vartheta_i \cdot \nabla_x \mathbf{v}_k) \quad (84)$$

$$\mathfrak{K}_i^{jk}(\chi) = (\mathbf{v}_j + \delta\vartheta_i \cdot \nabla_x \mathbf{v}_j, \chi \mathbf{v}_k) \quad (85)$$

$$\mathfrak{S}_i^{jk}(\sigma) = (\mathbf{v}_j + \delta\vartheta_i \cdot \nabla_x \mathbf{v}_j, \sigma \mathbf{v}_k), \quad (86)$$

mit $j = 1, \dots, N$ und $k = 1, \dots, N$.

3.6 Iterative Lösungsmethode des linearen Gleichungssystems

Das aus der oben beschriebenen Diskretisierung resultierende lineare Gleichungssystem (79) ist bereits für eine mäßige Auflösung im Orts- und Winkelraum ($\approx 10^5$ Knoten und 80 Ordinaten) sehr groß, dünn besetzt und, aufgrund des Streuintegraloperators, stark gekoppelt. In der Astrophysik wird häufig die sogenannte Λ -Iteration verwendet, um dieses System zu lösen. Wenn man das gesamte diskrete System betrachtet, ist es ein Defektkorrekturverfahren mit Beinahe-Block-Jacobi-Vorkonditionierung. Durch die Verwendung einer vollständigen Jacobi-Vorkonditionierung gelang Turek (1993) ein erster Schritt in Richtung verbesserte Konvergenzraten. Da der Transportoperator explizit invertiert wird, konvergieren diese Methoden für transportdominierte Probleme sehr schnell. Nutzt man zusätzlich die aus einer Upwind-Diskretisierung resultierende Dreiecksmatrixstruktur aus, ist die Invertierung mit einer Vektor-Matrix-Multiplikation äußerst günstig. Für den interessanten Fall der Streudominanz versagen die Defektkorrekturverfahren (wie andere Fixpunktiterationen auch), da die Konditionszahl der Iterationsmatrix sehr

groß wird und die Konvergenzrate dieser Methoden nur von der Konditionszahl abhängt.

Die Eigenwertverteilung der Streumatrix \mathbf{S} ist stark um bestimmte Werte gehäuft, wobei üblicherweise einer der Eigenwerte Null ist und alle anderen nahe bei Eins oder zumindest deutlich von Null entfernt liegen. Auf diese Strukturen können nun Krylov-Raum-Methoden wie GMRES und bi-CGSTAB (siehe z.B. Sleijpen & Fokkema 1993; van der Vorst 1992) angewendet werden. Da die Eigenwerte eine große Lücke zwischen der unteren und der oberen Anhäufung aufweisen, genügen kleine Polynomgrade, um den Iterationsfehler zu verkleinern. Betrachtet man nur den Streuoperator, konvergiert z.B. der GMRES-Algorithmus in zwei Schritten (siehe Kanschat 1996).

Der bi-CGSTAB Algorithmus von van der Vorst (1992) hat sich bereits in Turek (1993) für nicht-symmetrische Systeme bewährt. Diese Methode reduziert den Iterationsfehler viel schneller als eine Fixpunktiteration, zeigt jedoch auch ein sehr irreguläres Konvergenzverhalten. Kanschat (1996) vergleicht diesen Algorithmus mit GMRES, welches die einzige Methode für nicht-symmetrische Systeme ist, die den Fehler in jedem Schritt tatsächlich reduziert. Dabei stellt sich heraus, daß GMRES für moderate Streuung und für den Fall der Streudominanz im Gleichgewichtsfall $\sigma = \chi = (\kappa + \sigma)$ schneller als das bi-CGSTAB Verfahren konvergiert. Jedoch verwendet das GMRES Verfahren für jeden Iterationsschritt einen Hilfsvektor. Die bi-CGSTAB Methode kommt mit einer festen Anzahl von acht Hilfsvektoren aus. Dies führt zu einer deutlich geringeren Speicheranforderung, so daß sich die bi-CGSTAB Methode zur Lösung des monochromatischen Strahlungstransportproblems empfiehlt.

3.7 Parallelisierung

Die Bilinearform der schwachen Formulierung der monochromatischen STG (43) enthält die Summe von zwei Operatoren \mathcal{T} und \mathcal{S} , wobei der Transportoperator \mathcal{T} auf den Ortsraum und der Streuoperator \mathcal{S} auf den Ordinatenraum wirkt. Somit kann man zwischen zwei Parallelisierungsstrategien, einer Gebietszerlegungsmethode und einer Ordinatenparallelisierung, wählen.

Transportdominierte Probleme unterscheiden sich in einem spezifischen Punkt von elliptischen Problemen. Es existiert eine ausgeprägte Richtung des Informationsflusses. Dieser Aspekt muß bei der Entwicklung von Parallelisierungsstrategien berücksichtigt werden. In Kanschat (2000) wird vorgeschlagen, daß Parallelisierungsstrategien für die STG das Gebiet nicht quer zur Transportrichtung unterteilen sollen. Da die Lösung der STG aus einer Anzahl von Transportinversionen für endlich viele unterschiedliche Richtungen besteht, würde die Konstruktion einer effizienten Gebietszerlegungsmethode eine richtungsabhängige Unterteilung

des Ortsraumes Ω erfordern. Aufgrund der daraus resultierenden immensen Implementierungsprobleme favorisierte Kanschäp (2000) eine Ordinatenparallelisierung. Diese Strategie verteilt den Ordinatenraum S^{d-1} der STG über die Knoten eines Parallelrechners. Wegen der Unstetigkeit der Formfunktionen für die Ordinatenvariable, aber auch wegen der nicht-lokalen Kopplung des Streuintegrals, handelt es sich um eine reine, nicht-überlappende Parallelisierung. Der Nachteil dieser Parallelisierungsstrategie ist, daß das Streuintegral als globaler Operator auch globale Kommunikation erfordert. Somit erhält jeder Prozessor Daten von allen anderen Prozessoren und schickt gleichzeitig Daten an alle.

4 Strahlungstransport bei vollständiger Wiederverteilung

4.1 Motivation und physikalische Eigenschaften

In diesem Abschnitt wird die Wiederverteilung von Photonen im Winkel und in der Frequenz untersucht, die von gebundenen Atomen oder Molekülen gestreut werden. Dies bedeutet, daß man sich bei der Modellierung der Strahlungstransportgleichung nicht mehr auf eine Frequenz beschränken kann. Diese Beschränkung auf eine Frequenz hat uns in Kapitel 3 von der ν -Kopplung befreit, die für den allgemeineren Fall der vollständigen Wiederverteilung in einem Mehrfrequenz-Modell mitberücksichtigt werden muß.

Im folgenden werden wir die Natur der Wiederverteilung im Ruhesystem des Atoms untersuchen. Diese Näherung setzt voraus, daß die allgemeine Wiederverteilungsfunktion $R(\nu', \vartheta'; \nu, \vartheta) = p(\vartheta', \vartheta)\psi(\nu', \nu)$ durch die Produktbildung zweier unabhängiger Funktionen beschrieben werden kann. Dabei beschreibt die Winkelphasenfunktion $p(\vartheta', \vartheta)$ die Änderung der Richtung und $\psi(\nu', \nu)$ die Frequenzänderung eines Photons bei einem Streuprozeß. Ein einlaufendes Photon wird vor dem Streuprozeß durch seine Frequenz ν' bzw. Energie $h\nu'$ (h ist das Plancksche Wirkungsquantum) und seine Richtung ϑ' beschrieben. Die Frequenz und Richtung des auslaufenden Photons werden durch ν und ϑ dargestellt. Unter der Annahme, daß das streuende Material auf atomarer Skala keine ausgezeichnete Richtung aufweist, ist das atomare Absorptionsprofil $\phi(\nu')$ isotrop. ϕ ist normiert, so daß $\int_{-\infty}^{\infty} \phi(\nu') d\nu' = 1$ gilt. Weiter gibt die Frequenzwiederverteilungsfunktion $\psi(\nu', \nu)$ die Wahrscheinlichkeit an, daß ein Photon, welches im Frequenzbereich $(\nu', \nu' + d\nu')$ absorbiert wird, in den Bereich $(\nu, \nu + d\nu)$ emittiert wird. Dagegen beschreibt die Winkelphasenfunktion $p(\vartheta', \vartheta)$ die Wahrscheinlichkeit, daß ein Photon aus dem Raumwinkel $d\vartheta'$ in Richtung ϑ' in den festen Raumwinkel $d\vartheta$ in Richtung ϑ gestreut wird. Diese Funktionen sind normiert, so daß gilt:

$$\int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \psi(\nu', \nu) d\nu' d\nu = 1 \quad \text{und} \quad (87)$$

$$\frac{1}{2\pi(d-1)} \int_{S^{d-1}} p(\vartheta', \vartheta) d\vartheta' = \frac{1}{2\pi(d-1)} \int_{S^{d-1}} p(\vartheta', \vartheta) d\vartheta = 1. \quad (88)$$

Die Phasenfunktion beschreibt üblicherweise dipolartige Streuprozeße (Rayleigh- oder Thomson-Streuung). Unter der Annahme, daß die streuenden Atome oder Moleküle zufällig orientiert sind, ist die Phasenfunktion $p(\vartheta', \vartheta) = 1$ (siehe Michals 1978) und wir sprechen allgemein von isotroper Streuung.

Mit Hilfe der oben definierten Funktionen kann nun die Wahrscheinlichkeit $\phi(\nu') d\nu' d\vartheta' / 4\pi$ angegeben werden, mit der ein Photon (ν', ϑ') absorbiert wird.

Weiter kann die Wahrscheinlichkeit $\psi(v', v)p(\vartheta', \vartheta)dv'd\vartheta/4\pi$ angegeben werden, mit der ein absorbiertes Photon (v', ϑ') nach dem Streuprozeß als Photon (v, ϑ) emittiert wird. Die gemeinsame Wahrscheinlichkeit, daß ein Photon (v', ϑ') absorbiert und ein Photon (v, ϑ) emittiert wird, ist das Produkt der beiden Wahrscheinlichkeiten $\varphi(v')\psi(v', v)dv'dvp(\vartheta', \vartheta)(d\vartheta'/4\pi)(d\vartheta/4\pi)$. Die Funktionen $\varphi(v')$ und $\psi(v', v)$ müssen noch genauer untersucht werden. Im folgenden betrachten wir die einfachen Fälle (vgl. Hummer 1962):

- (a) Fall I: Linienbreite Null
- (b) Fall II: Strahlungsdämpfung im oberen Zustand und Kohärenz im Ruhesystem des Atoms
- (c) Fall III: vollständige Wiederverteilung im Ruhesystem des Atoms
- (d) Fall IV: Wiederverteilung zwischen zwei verbreiterten Zuständen

Die Fälle I-III werden ausführlicher diskutiert, da die entsprechenden Wiederverteilungsfunktionen in den folgenden Anwendungsbeispielen realisiert wurden. Der Fall IV wird nur aus Gründen der Vollständigkeit erwähnt. Die äußerst komplexen Fälle der partiellen Wiederverteilung (siehe Oxenius 1986) werden in dieser Arbeit nicht untersucht.

(a) Fall I: für den einfachsten Fall ist die natürliche Linienbreite Null. Dies ist zwar ein stark idealisiertes Bild und nicht auf ein reales Atom anwendbar, jedoch liefert die Betrachtung dieses Grenzfalls eine tiefere Einsicht in die Natur des Wiederverteilungsprozesses z.B. bei der Berücksichtigung von Dopplereffekten (siehe Mihalas 1978). Es wird angenommen, daß das idealisierte Atom zwei unendlich scharfe Zustände besitzt, zwischen denen die Übergänge stattfinden. Es gilt dann einfach

$$\begin{aligned}\varphi(v')dv' &= \delta(v - v_0)dv' \\ \psi(v', v) &= \delta(v' - v),\end{aligned}\tag{89}$$

wobei δ die Delta-Distribution bezeichnet und v_0 die Frequenz des Linienzentrums ist.

(b) Fall II: als nächstes betrachten wir Strahlungsdämpfung mit Kohärenz im System des Atoms. Kohärenz bedeutet hier, daß die Zeitabhängigkeit der Amplitude zwischen den Wellenpaketen bis auf eine Phasenverschiebung die gleiche ist. Das Atom habe ein (unendlich) scharfes Grundniveau und ein höheres Niveau, dessen Verbreiterung durch die endliche Lebensdauer beim sogenannten Strahlungserfall

in den Grundzustand gegeben ist. Die Absorption um die mittlere Übergangsfrequenz ν_0 wird durch ein Lorentz-Profil

$$\varphi(\nu') = \frac{\Gamma}{[2\pi(\nu' - \nu_0)]^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2} \quad (90)$$

beschrieben, wobei $\Gamma \approx 10^7 \dots 10^9 \text{ s}^{-1}$ die Dämpfungskonstante ist. Wenn es keine zusätzlichen Störungen des Atoms gibt, während sich das Elektron im höheren Niveau befindet, kommt es zu keiner Umgruppierung in den Unterniveaus des oberen Energiezustands. Die Rückkehr des Atoms in den Grundzustand erfolgt durch die Emission eines Photons mit exakt derselben Energie wie für dessen Absorption. Somit erhalten wir für die Frequenzwiederverteilungsfunktion wie im Fall I

$$\psi(\nu', \nu) = \delta(\nu' - \nu). \quad (91)$$

Physikalische Gegebenheiten, in denen dieses Modell gültig ist, sind Resonanzlinien in Medien mit solch geringer Dichte, daß Kollisionsverbreiterungen vernachlässigbar sind. Ein Beispiel wäre die sogenannte Ly α Linie von atomarem Wasserstoff im interstellaren Medium (vgl. Mihalas 1978).

(c) Fall III: das grundlegende physikalische Modell, das hier betrachtet wird, ist ein Atom mit einem scharfen unteren Niveau und einem höheren Niveau, das durch Kollisionen und Strahlungsdämpfung verbreitert ist. Die Kollisionen müssen so häufig auftreten, daß alle angeregten Elektronen vor der Emission eines Photons nach dem Zufallsprinzip über alle Unterniveaus des oberen Zustands umgruppiert werden. Wie bereits im Fall II ist das Absorptionsprofil ein Lorentz-Profil (90), wobei Γ hier die volle Verbreiterung (Strahlungs- und Stoßverbreiterung) des oberen Niveaus darstellt. In diesem Grenzfall ist die Frequenz des emittierten Photons nicht mit der Frequenz des absorbierten Photons korreliert, d.h. das emittierte Photon hat keine „Erinnerung“ an das absorbierte Photon. Die Wahrscheinlichkeit für eine Emission bei einer beliebigen Frequenz ist proportional zur Anzahl der Unterniveaus bei dieser Frequenz und somit proportional zum Absorptionsprofil. Wenn vollständige Wiederverteilung im System des Atoms angenommen wird, erhalten wir

$$\psi(\nu', \nu) d\nu = \varphi(\nu) d\nu = \frac{\Gamma d\nu}{[2\pi(\nu - \nu_0)]^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2}, \quad (92)$$

woraus deutlich wird, daß $\psi(\nu', \nu)$ von ν' unabhängig ist, und daß die gemeinsame Wahrscheinlichkeit für eine Absorption bei ν' und eine nachfolgende Emission bei ν proportional zu $\varphi(\nu')\varphi(\nu)$ ist. Die Annahme von vollständiger Wiederverteilung stellt für kollisionsverbreiterte Linien generell eine gute Näherung dar.

Astrophysikalische Anwendungsbeispiele dieses Modells sind Sternatmosphären und Gasnebel im frühen Universum. In Kapitel 7 untersuchen wir Protogalaxien als Spezialfälle solcher Gasnebel.

4.2 Mathematische Formulierung

Im vorhergehenden Abschnitt haben wir gezeigt, daß unter der Annahme von vollständiger Wiederverteilung die frequenzabhängige Wiederverteilungsfunktion die Gestalt $\psi(\mathbf{v}', \mathbf{v}) = \varphi(\mathbf{v})\varphi(\mathbf{v}')$ hat, wobei $\varphi(\mathbf{v})$ das frequenzabhängige Absorptions- bzw. Emissionsprofil bezeichnet. Für diese Funktionen gilt $\psi \in L^2(\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+)$, $\varphi \in L^1(\mathbb{R}^+)$ und $\psi(\mathbf{v}', \mathbf{v}), \varphi(\mathbf{v}) \geq 0$. Die Wiederverteilungsfunktion $\psi(\mathbf{v}', \mathbf{v})$ ist normiert, so daß $\int_0^\infty \int_0^\infty \psi(\mathbf{v}', \mathbf{v}) d\mathbf{v}' d\mathbf{v} = 1$ und somit auch $\int_0^\infty \varphi(\mathbf{v}) d\mathbf{v} = 1$ gilt. Im Gegensatz zur monochromatischen Strahlungstransportgleichung (27) ist neben der spezifischen Intensität der Streu- und Absorptionskoeffizient sowie der Quellterm vom Ort $x \in \Omega$ und der Frequenz $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^+$ abhängig. Wenn der frequenzabhängige Streukoeffizient $\sigma(x, \mathbf{v}) = \sigma(x)\varphi(\mathbf{v})$ in einen ortsabhängigen und einen frequenzabhängigen Anteil zerlegt wird, lautet die frequenzabhängige STG mit vollständiger Wiederverteilung

$$\vartheta \cdot \nabla_x \mathcal{I}(x, \vartheta, \mathbf{v}) + \chi(x, \mathbf{v}) \mathcal{I}(x, \vartheta, \mathbf{v}) - \sigma(x) \int_{\mathbb{R}^+} \int_{S^{d-1}} R(\vartheta', \mathbf{v}'; \vartheta, \mathbf{v}) \mathcal{I}(x, \vartheta', \mathbf{v}') d\vartheta' d\mathbf{v}' = f(x, \mathbf{v}), \quad (93)$$

wobei $\chi(x, \mathbf{v}) = \kappa(x, \mathbf{v}) + \sigma(x, \mathbf{v})$ die Opazität und $R(\vartheta', \mathbf{v}'; \vartheta, \mathbf{v})$ die allgemeine Wiederverteilungsfunktion bezeichnen. Für den Fall thermischer Emission wird der Quellterm auf der rechten Seite von Gl. (93) zu

$$f(x, \mathbf{v}) = \kappa(x, \mathbf{v}) B(x, \mathbf{v}), \quad (94)$$

mit der Kirchhoff-Planck-Funktion $B(x, \mathbf{v})$.

Die Wiederverteilungsfunktion $R(\vartheta', \mathbf{v}'; \vartheta, \mathbf{v}) = \hat{R}(\mathbf{v}', \mathbf{v}) P(\vartheta', \vartheta)$ beschreibt die Wahrscheinlichkeit, daß ein Photon $(\vartheta', \mathbf{v}')$ absorbiert und ein Photon (ϑ, \mathbf{v}) emittiert wird (vgl. Abschnitt 4.1) und läßt sich in einen frequenzabhängigen Anteil $\hat{R}(\mathbf{v}', \mathbf{v})$ und einen winkelabhängigen Anteil $P(\vartheta', \vartheta)$ zerlegen. Die Phasenfunktion $P(\vartheta', \vartheta)$ aus Gl. (28) ist bereits am Anfang von Abschnitt 3.1 ausführlich diskutiert worden. Unter der Annahme von isotroper Streuung ($P(\vartheta', \vartheta) = 1/(2\pi(d-1))$) wird der Streuterm aus Gl. (93) zu

$$-\frac{\sigma(x)}{2\pi(d-1)} \int_{\mathbb{R}^+} \hat{R}(\mathbf{v}', \mathbf{v}) \int_{S^{d-1}} \mathcal{I}(x, \vartheta', \mathbf{v}') d\vartheta' d\mathbf{v}', \quad (95)$$

wobei $\hat{R}(\mathbf{v}', \mathbf{v})$ als winkelmittelte Wiederverteilungsfunktion

$$\hat{R}(\mathbf{v}', \mathbf{v}) = \frac{1}{(2\pi(d-1))^2} \int_{S^{d-1}} \int_{S^{d-1}} R(\vartheta', \mathbf{v}'; \vartheta, \mathbf{v}) d\vartheta' d\vartheta \quad (96)$$

bezeichnet wird. Diese Funktion ist normiert, so daß

$$\int_0^\infty \int_0^\infty \hat{R}(\mathbf{v}', \mathbf{v}) d\mathbf{v}' d\mathbf{v} = 1 \quad (97)$$

gilt. Für die Test- und Beispielrechnungen aus Kapitel 6 und 7 verwenden wir zwei Grenzfälle: strikte Kohärenz und vollständige Wiederverteilung (siehe auch Fall II und Fall III aus Abschnitt 4.1). Im ersten Fall erhalten wir

$$\hat{R}(\mathbf{v}', \mathbf{v}) = \varphi(\mathbf{v}') \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}') \quad (98)$$

und im letzteren

$$\hat{R}(\mathbf{v}', \mathbf{v}) = \varphi(\mathbf{v}') \varphi(\mathbf{v}). \quad (99)$$

Somit vereinfacht sich der Streuterm aus Gl. (93) für den Fall der kohärenten isotropen Streuung zu

$$-\frac{\sigma(x, \mathbf{v})}{2\pi(d-1)} \int_{S^{d-1}} \mathcal{I}(x, \vartheta', \mathbf{v}) d\vartheta', \quad (100)$$

Gl. (100) hat die gleiche Gestalt wie der Streuterm, den wir im monochromatischen Fall (vgl. Gl. (27)) verwendet haben. Für den Fall der vollständigen Wiederverteilung werden die Photonen isotrop im Winkel gestreut, jedoch zufällig über das Linienprofil wiederverteilt. Somit erhalten wir als Streuterm

$$-\frac{\sigma(x, \mathbf{v})}{2\pi(d-1)} \int_0^\infty \varphi(\mathbf{v}') \int_{S^{d-1}} \mathcal{I}(x, \vartheta', \mathbf{v}) d\vartheta' d\mathbf{v}'. \quad (101)$$

Da wir in unseren Testbeispielen stets isotrope Streuung im Winkel betrachtet haben, werden wir im folgenden die einfachste Form der Phasenfunktion $P(\vartheta', \vartheta) = 1/(2\pi(d-1))$ annehmen. Es sei jedoch unterstrichen, daß der Code auch anisotrope Streuphasenfunktionen verwenden kann.

Als Randbedingung werden die sogenannten Vakuum-Randbedingungen auf dem Einströmrand Γ^- für astrophysikalische Probleme vorgegeben, d.h.

$$\mathcal{I}(x, \vartheta, \mathbf{v}) = 0 \quad \text{auf } \Gamma^- \times I. \quad (102)$$

Um später eine endliche Diskretisierung vornehmen zu können, beschränken wir die Frequenzen auf ein endliches Intervall: $\nu \in I := [a, b]$, wobei $a, b \in \mathbb{R}^+$. Das Intervall muß so groß gewählt werden, daß der Prozeß der vollständigen Wiederverteilung innerhalb des Intervalls korrekt berücksichtigt wird. Ein Maß für diese Intervallanpassung ist die Güte, mit der die Normierung der Wiederverteilungsfunktion und der Absorptionsprofilfunktion innerhalb des Intervalls

$$\int_I \int_I \Psi(\nu', \nu) d\nu' d\nu = 1 \quad \text{und} \quad \int_I \varphi(\nu) d\nu = 1, \quad (103)$$

erfüllt werden. Da wir eine isolierte Spektrallinie betrachten, können wir die Intervallgrenzpunkte a und b jeweils zwischen zwei Linien wählen, so daß die Strahlungsintensität in den Frequenzen a und b gleich der konstanten Intensität der Kontinuumsstrahlung ist und die Ableitungen in unmittelbarer Umgebung der Intervallgrenzen beliebig klein werden. Somit gilt

$$\mathcal{I}(x, \vartheta, \nu) = \text{const} \quad \text{für} \quad \nu \in [a, b] \quad (104)$$

und

$$\partial_\nu \mathcal{I}(x, \vartheta, \nu) \leq \delta \quad \text{für} \quad \nu \in [a \pm \varepsilon, b \pm \varepsilon], \quad (105)$$

wobei $\delta, \varepsilon > 0$ und δ klein ist. Dies ist keine Randbedingung, die wir vorgeben müssen, sondern sie ergibt sich aus der Rechnung, da der Integralkern $\varphi(\nu')$ an den Intervallgrenzen verschwindet.

4.3 Schwache Formulierung

Als Lösungsraum für die STG mit vollständiger Wiederverteilung können wir den Raum V aus Abschnitt 3.2 nicht übernehmen, da dieser die zusätzliche Dimension der Frequenz nicht enthält. Die am Ende von Abschnitt 3.1 eingeführten Operatoren zur übersichtlichen Darstellung der monochromatischen STG ändern sich durch die Berücksichtigung der Frequenzen nicht, da diese alle ν -unabhängig sind. Es ist also

$$\mathcal{T}\mathcal{I}(x, \vartheta, \nu) = \vartheta \cdot \nabla_x \mathcal{I}(x, \vartheta, \nu) \quad (106)$$

und

$$\mathcal{S}\mathcal{I}(x, \vartheta, \nu) = \mathcal{I}(x, \vartheta, \nu) - \int_{S^{d-1}} P(\vartheta', \vartheta) \mathcal{I}(x, \vartheta', \nu') d\vartheta'. \quad (107)$$

Da wir im folgenden die vereinfachende Annahme der isotropen Streuung machen werden, lautet der Streuoperator nun

$$S\mathcal{I}(x, \vartheta, \mathbf{v}) = \mathcal{I}(x, \vartheta, \mathbf{v}) - \frac{1}{2\pi(d-1)} \int_{S^{d-1}} \mathcal{I}(x, \vartheta', \mathbf{v}') d\vartheta'. \quad (108)$$

Für eine kompaktere Darstellung der STG mit vollständiger Wiederverteilung führen wir noch zusätzlich einen Operator \mathcal{F} ein:

$$\mathcal{F}\mathcal{I}(x, \vartheta, \mathbf{v}) := \varphi(\mathbf{v}) \left(\mathcal{I}(x, \vartheta, \mathbf{v}) - \frac{1}{2\pi(d-1)} \int_I \varphi(\mathbf{v}') \int_{S^{d-1}} \mathcal{I}(x, \vartheta', \mathbf{v}') d\vartheta' d\mathbf{v}' \right) \quad (109)$$

Analog zum natürlichen Lösungsraum des monochromatischen Strahlungstransportproblems (vgl. (39)) erhalten wir für den frequenzabhängigen Fall als geeigneten Funktionenraum

$$W := \left\{ \mathcal{I} \in L^2(\Omega \times S^{d-1} \times I) \mid \mathcal{T}\mathcal{I} \in L^2(\Omega \times S^{d-1} \times I) \right\}. \quad (110)$$

Die zugehörige Norm definieren wir durch

$$\begin{aligned} \|\mathcal{I}\|_W^2 &:= \|\sqrt{\delta}\mathcal{T}\mathcal{I}\|_{\Omega \times S^{d-1} \times I}^2 + \|\mathcal{I}\|_{\Gamma \times I}^2 \\ &\quad + \|\sqrt{\kappa}\mathcal{I}\|_{\Omega \times S^{d-1} \times I}^2 + \|\sqrt{\sigma\varphi}\Pi^\perp \mathcal{I}\|_{\Omega \times S^{d-1} \times I}^2. \end{aligned} \quad (111)$$

Die stabilisierte schwache Formulierung lautet schließlich:

Suche $\mathcal{I} \in W$, so daß gilt

$$\begin{aligned} c_\delta(\mathcal{I}, \mathbf{v}) &:= (\mathcal{T}\mathcal{I}, \mathbf{v} + \delta\mathcal{T}\mathbf{v})_{\Omega \times S^{d-1} \times I} + (\kappa\mathcal{I}, \mathbf{v} + \delta\mathcal{T}\mathbf{v})_{\Omega \times S^{d-1} \times I} \\ &\quad + (\sigma\mathcal{F}\mathcal{I}, \mathbf{v} + \delta\mathcal{T}\mathbf{v})_{\Omega \times S^{d-1} \times I} + (\mathcal{I}, \mathbf{v})_{\Gamma \times I} \\ &= (f, \mathbf{v} + \delta\mathcal{T}\mathbf{v})_{\Omega \times S^{d-1} \times I} \quad \forall \mathbf{v} \in W. \end{aligned} \quad (112)$$

Der Index δ zeigt an, daß die SDFEM zur Stabilisierung benutzt wird und dadurch der Term „ $\delta\mathcal{T}\mathbf{v}$ “ in der Testfunktion auftritt. Die Existenz und Eindeutigkeit der Lösung \mathcal{I} in Gl. (112) wird in Wild (1999) gezeigt.

4.4 Diskretisierung

Zunächst präsentieren wir eine Galerkin-Diskretisierung der STG mit vollständiger Wiederverteilung. Dies ist die mathematisch korrekte Vorgehensweise zur Lösung der partiellen Integro-Differentialgleichung, insbesondere auch im Hinblick auf die Herleitung eines a posteriori Fehlerschätzers.

Die Zerlegungen \mathbb{T}^Ω von Ω und $\mathbb{T}^{S^{d-1}}$ von S^{d-1} aus Abschnitt 3.3 können beibehalten werden. Das Frequenzintervall I muß allerdings noch unterteilt werden. Dazu bilden wir die Zerlegung \mathbb{T}^I durch Aufteilung des Intervalls $I = [a, b]$ in endlich viele Elemente K_i^I , ($i = 1, \dots, M < \infty$), für die gilt:

$$\bigcup_i \bar{K}_i^I = I \quad \text{und} \quad K_i^I \cap K_j^I = \emptyset \quad \text{für } i \neq j. \quad (113)$$

Wir definieren als Funktionenraum über I

$$W_h^I := \left\{ \mathfrak{v} \in L^2(I) \mid \mathfrak{v}|_K \in P^s(K) \quad \forall K \in \mathbb{T}^I \right\}. \quad (114)$$

Die Diskretisierung des Intervalls I führen wir analog der Diskretisierung der Einheitssphäre S^{d-1} durch. Diese haben wir anfangs möglichst gleichmäßig unterteilt und haben dann auf den Teilgebieten konstante Basisfunktionen gewählt. Somit beschränken wir uns für das Intervall I auf eine äquidistante Verteilung der Frequenzstützstellen und auf den Polynomgrad $s = 0$, d.h. $\mathfrak{v}|_{K_i^I} = c_K$.

Wegen $M < \infty$ existieren endlich viele Basisfunktionen von W_h^I , die wir mit $\{\rho_i\}_i$, $i \in [1, \dots, M]$ bezeichnen und die die Gestalt wie in Gl. (53) haben. Als diskreten Ansatzraum für die Lösung \mathcal{I}_h der diskretisierten STG mit vollständiger Wiederverteilung wählen wir

$$\begin{aligned} W_h = \left\{ \mathfrak{v} \in W \mid \mathfrak{v}|_{K^\Omega} \in Q^1(K^\Omega) \quad \forall K^\Omega \in \mathbb{T}^\Omega, \mathfrak{v}|_\Omega \in C^0(\Omega) \right. \\ \left. \mathfrak{v}|_{K^{S^{d-1}}} \in P^0(K^{S^{d-1}}) \quad \forall K^{S^{d-1}} \in \mathbb{T}^{S^{d-1}}, \right. \\ \left. \mathfrak{v}|_{K^I} \in P^0(K^I) \quad \forall K^I \in \mathbb{T}^I \right\}. \end{aligned} \quad (115)$$

Als Basisfunktionen $\{\varphi_{ijk}\}_{ijk}$ von W_h erhalten wir

$$\varphi_{ijk}(x, \vartheta, \mathfrak{v}) = \psi_i(x) \pi_j(\vartheta) \rho_k(\mathfrak{v}), \quad (116)$$

wobei $\psi_i(x)$ die Basisfunktionen von V_h^Ω und $\pi_j(\vartheta)$ diejenigen von $V_h^{S^{d-1}}$ sind (vgl. Abschnitt 3.3).

Die diskrete schwache Formulierung der STG mit vollständiger Wiederverteilung lautet: suche $\mathcal{I}_h \in W_h$, so daß gilt

$$\begin{aligned} c_\delta(\mathcal{I}_h, \mathfrak{v}_h) &:= (\mathcal{T}\mathcal{I}_h, \mathfrak{v}_h + \delta\mathcal{T}\mathfrak{v}_h)_{\Omega \times S^{d-1} \times I} + (\kappa\mathcal{I}_h, \mathfrak{v}_h + \delta\mathcal{T}\mathfrak{v}_h)_{\Omega \times S^{d-1} \times I} \\ &\quad + (\sigma\mathcal{F}\mathcal{I}_h, \mathfrak{v}_h + \delta\mathcal{T}\mathfrak{v}_h)_{\Omega \times S^{d-1} \times I} + (\mathcal{I}_h, \mathfrak{v}_h)_{\Gamma^- \times I} \\ &= (f, \mathfrak{v}_h + \delta\mathcal{T}\mathfrak{v}_h)_{\Omega \times S^{d-1} \times I} \quad \forall \mathfrak{v}_h \in W_h. \end{aligned} \quad (117)$$

Wegen $W_h \subset W$ ist nach dem Satz von Lax-Milgram die Bilinearform $c_\delta(\mathcal{I}_h, \mathfrak{v}_h)$ stetig und koerzitiv. Mit dem Lemma von Cea (siehe z.B. Großmann & Roos 1992)

erhalten wir die Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung $\mathcal{I}_h \in W_h$ von Gl. (117). Für Einzelheiten siehe auch Wild (1999).

Eine Diskretisierungsmöglichkeit des Integrals über das Frequenzspektrum ergibt sich direkt aus der Anwendung einer Quadraturformel. Die Zerlegungen \mathbb{T}^Ω von Ω und $\mathbb{T}^{S^{d-1}}$ von S^{d-1} aus Abschnitt 3.3 können beibehalten werden. Das Frequenzintervall $I = [a, b]$ muß allerdings noch unterteilt werden. Ausgehend von L Stützstellen

$$\Xi := [v_1, v_2, \dots, v_L] \subset I \quad (118)$$

und zugehörigen Gewichten

$$w_1, w_2, \dots, w_L \quad (119)$$

definieren wir ein Quadraturverfahren Q :

$$Q(\zeta) := \sum_{l=1}^L w_l \zeta(v_l) \quad (120)$$

für Integrale $\int_I \zeta(v') dv'$ über I . Der Integrand der frequenzabhängigen STG mit vollständiger Wiederverteilung ist $\zeta(v_l) = \varphi(v_l) \int_{S^{d-1}} P(\vartheta', \vartheta) \mathcal{I}(x, \vartheta', v_l) d\vartheta'$. Wenn wir einen Index „ k “ einführen, der die Abhängigkeit des Koeffizienten oder der invarianten Intensität vom k -ten Frequenzpunkt charakterisiert, erhalten wir eine semi-diskrete Formulierung der STG mit vollständiger Wiederverteilung (93):

$$\vartheta \cdot \nabla_x \mathcal{I}_k + \chi_k \mathcal{I}_k - \frac{\sigma_k}{2\pi(d-1)} \sum_{l=1}^L w_l \varphi_l \int_{S^{d-1}} \mathcal{I}(x, \vartheta', v_l) d\vartheta' = f_k, \quad (121)$$

wobei $\chi_k = \kappa(x, v_k) + \sigma(x, v_k)$ die Opazität bezeichnet und $k, l = 1, \dots, L$. Die Struktur der „monochromatischen“ STG für jeden Frequenzpunkt v_k ist dieselbe wie in Abschnitt 3.3, so daß die Diskretisierung wie dort beschrieben erfolgen kann. Der einzige Unterschied liegt in einer veränderten Quellfunktion und einem abgeänderten Vorfaktor zum Streuintegral. Falls $l \neq k$ können die Terme aus der Summe in Gl. (121) auf die rechte Seite gebracht werden und als zusätzliche künstliche Quellterme mit f_k zusammengefaßt werden. Für $l = k$ erhalten wir ein Streuintegral vergleichbar mit dem aus Abschnitt 3.3, wobei wir nur noch die Multiplikation des Quadraturgewichtes w_k und der Profilkfunktion φ_k berücksichtigen müssen.

4.5 Fehlerschätzer

Zunächst leiten wir einen Fehlerschätzer auf der Basis der im vorhergehenden Abschnitt beschriebenen Galerkin-Diskretisierung der STG mit vollständiger Wiederverteilung her. Danach geben wir einen vereinfachten Fehlerschätzer an, wie dieser

aufgrund der tatsächlichen Diskretisierung implementiert ist und erläutern die daraus resultierenden Einschränkungen hinsichtlich der Schärfe der Fehlerkontrolle.

Beim Fehlerschätzer für die Galerkin-diskretisierte STG mit vollständiger Wiederverteilung betrachten wir zusätzlich zum Gebiets- und Winkel-Fehler auch den Fehler in den Frequenzen. Die Funktion $\mathcal{I}(x, \vartheta, \nu)|_I$ approximieren wir mit stückweise konstanten Funktionen. Wie wir bereits im Abschnitt 3.4 für die monochromatische STG beschrieben haben, benötigen wir den zum Strahlungstransportoperator mit vollständiger Wiederverteilung $\mathcal{C} = \mathcal{T} + \kappa + \sigma\mathcal{F}$ dualen Operator \mathcal{C}^* und die duale Lösung z , um einen effizienten Fehlerschätzer konstruieren zu können. Der zum Strahlungstransportoperator \mathcal{C} duale Operator \mathcal{C}^* besitzt die Darstellung

$$\begin{aligned} c(u, \mathbf{v}) &= (\mathcal{C}\mathcal{I}, \mathbf{v}) \\ &= (\mathcal{I}, \mathcal{C}^*\mathbf{v}) \\ &= (\mathcal{I}, (-\mathcal{T} + \kappa + \sigma\mathcal{F}) \mathbf{v})_{\Omega \times S^{d-1} \times I} + (\mathcal{I}, \mathbf{v})_{\Gamma^+}. \end{aligned} \quad (122)$$

Mit $\mathcal{M}(\varphi) := (\mathcal{C}^*z, \varphi)$ und $\mathcal{M}(\mathcal{I}) - \mathcal{M}(\mathcal{I}_h) = \mathcal{M}(e)$ erhalten wir den Fehlerschätzer

$$\begin{aligned} \mathcal{M}(e) &\leq \eta(\mathcal{I}_h) = \sum_K \eta_K \\ &= \sum_{d=1}^D \sum_{l=1}^L \sum_{m=1}^M C \|f - \mathcal{C}\mathcal{I}_h\|_{K_d^\Omega \times K_l^{S^{d-1}} \times K_m^I} \\ &\quad \left[h_{K_d^\Omega}^2 \|\nabla_x^2 z\|_{K_d^\Omega \times K_l^{S^{d-1}} \times K_m^I} + h_{K_l^{S^{d-1}}} \|\partial_{\vartheta} z\|_{K_d^\Omega \times K_l^{S^{d-1}} \times K_m^I} \right. \\ &\quad \left. h_{K_l^{S^{d-1}}}^2 \|\partial_{\vartheta}^2 z\|_{K_d^\Omega \times K_l^{S^{d-1}} \times K_m^I} + h_{K_m^I} \|\partial_{\nu} z\|_{K_d^\Omega \times K_l^{S^{d-1}} \times K_m^I} \right. \\ &\quad \left. h_{K_m^I}^2 \|\partial_{\nu}^2 z\|_{K_d^\Omega \times K_l^{S^{d-1}} \times K_m^I} \right]. \end{aligned} \quad (123)$$

Auch die Differentialquotienten $\|\partial_{\nu} z\|_K$ und $\|\partial_{\nu}^2 z\|_K$ müssen wiederum durch berechenbare Differenzenquotienten der Näherung z_h abgeschätzt werden.

Der in Abschnitt 3.4 hergeleitete gewichtete Residuenschätzer (vgl. Gl. (74)) erlaubt gezielt die a posteriori Fehlerkontrolle in einzelnen, physikalisch relevanten Größen, sowie die adaptive Erzeugung der hierfür „optimalen“ Gitter (siehe auch Kanschat 1998; Wehrse et al. 1999). Diese rigorose Fehlerkontrolle einzelner Meßgrößen, wie z.B. die Beobachtung einer Punktquelle, läßt sich auch auf den frequenzabhängigen Fall übertragen. Nehmen wir wiederum die typische Beobachtungssituation, wie wir sie in Abb. 4 skizziert haben. Da der gewichtete Residuenschätzer den Fehler nur für eine einzelne Meßgröße kontrolliert, müßten wir beispielsweise einen Frequenzmittelungsprozeß über das gesamte Linienprofil durchführen und erhielten den Spektrallinienfluß. Für die typische Beobachtungssituation aus Abb. 4, bei der die Strahlungsintensität in einer Richtung ϑ_{obs} zum

Beobachter gemessen wird und Γ_{obs} der dem Beobachter zugewandte Teil des Randes ist, wäre das entsprechende Auswertungsfunktional

$$\mathcal{M}_{obs}(\mathcal{I}) := \int_{\mathbb{R}^+} \int_{\Gamma_{obs}} \mathcal{I}(x, \vartheta_{obs}, \mathbf{v}) \vartheta_{\Gamma} \cdot \vartheta_{obs} dx d\mathbf{v}. \quad (124)$$

Das zu diesem Funktional gehörende duale Problem entspricht dem primalen Problem ohne Quellen im Innern des Rechengebiets und konstanter Einstrahlung aus Richtung der Erde mit Mittelwert 1 für alle Frequenzen.

Wie wir im nachfolgenden Abschnitt ausführen werden, lösen wir zur Reduzierung des Hauptspeicherbedarfs sukzessive L „monochromatische“ Strahlungstransportgleichungen vom Typ (121) für jeden diskreten Frequenzpunkt. Dies führt dazu, daß wir die rechte Seite des Fehlerschätzers (123) nicht mehr berechnen können. Alternativ wenden wir deshalb in jedem diskreten Frequenzpunkt \mathbf{v}_i ein Auswertungsfunktional

$$\mathcal{M}_{obs}(\mathcal{I}_i) = \int_{\Gamma_{obs}} \mathcal{I}(x, \vartheta_{obs}, \mathbf{v}_i) \vartheta_{\Gamma} \cdot \vartheta_{obs} dx \quad (125)$$

an. Das zu diesem Fehlerfunktional gehörende „duale“ Problem ist recht einfach strukturiert:

$$\mathcal{M}_{obs}(\varphi) = (\varphi, C_i^* z_i) \quad \forall \varphi \in W, \quad (126)$$

wobei der duale Strahlungstransportoperator C^* bereits weiter oben definiert wurde. Der Index „ i “ charakterisiert die Abhängigkeit des dualen Strahlungstransportoperators und der dualen Lösung vom i -ten Frequenzpunkt. Dieses duale Problem entspricht dem Primalen ohne Quellen im Inneren des Gebietes und mit konstanter Einstrahlung aus Richtung des Beobachters mit Mittelwert 1. Als lokale Gitterverfeinerungsindikatoren werden nun die maximalen lokalen Indikatoren

$$\eta_K := \max_i \{\eta_K^{(i)}\} \quad (127)$$

der einzelnen Frequenzpunkte \mathbf{v}_i verwendet. $\eta_K^{(i)}$ entspricht im wesentlichen dem Indikator des monochromatischen Strahlungstransportproblems (vgl. den lokalen Indikator in Gl. (74) und dessen Herleitung) und ergibt sich wie folgt, wenn den Fall der vollständigen Wiederverteilung betrachtet:

$$\eta_K^{(i)} = \|f_i - C_i \mathcal{I}_h^{(i)}\|_{K_d^\Omega \times K_i^{S^{d-1}}} h_{K_d^\Omega}^2 \|\nabla_x^2 z_i\|_{K_d^\Omega \times K_i^{S^{d-1}}}. \quad (128)$$

Somit erhalten wir einen einzigen maximalen Fehler und zwar für die berechneten Strahlungsflüsse an den diskreten Frequenzstützstellen. Es ist jedoch zu beachten,

daß wir einen vereinfachten lokalen Fehlerindikator ohne die Frequenzfehlerbeiträge verwenden, so daß eine Aussage über die genaue Schranke der Fehlergröße in den einzelnen Frequenzpunkten nicht mehr scharf ist. Die praktische Bedeutung der maximalen lokalen Indikatoren aus Gl. (127) liegt nicht in der Fehlerkontrolle, sondern vielmehr bei der Gitterverfeinerungsstrategie des Ortsgitters.

4.6 Resultierende Matrixstruktur und Lösung des Gleichungssystems

In der Praxis scheitert der Versuch, das aus der Diskretisierung resultierende lineare Gleichungssystem als Ganzes zu lösen, bereits bei mäßiger Auflösung im Orts-, Winkel- und Frequenzraum an der Größe diese Systems. Alternativ teilen wir das Frequenzintervall in endlich viele diskrete Stützstellen und lösen sukzessive ein monochromatisches Strahlungstransportproblem für jeden einzelnen diskreten Frequenzpunkt. Somit lösen wir immer noch das gesamte lineare Gleichungssystem, nur daß sich die Größe des im Hauptspeicher zu haltenden Systems erheblich reduziert. Die Diskretisierung bleibt dabei vom Galerkin-Typ.

Bei der Diskretisierung der frequenzabhängigen STG mit vollständiger Wiederverteilung für N Freiheitsgrade in Ω , M Ordinaten in S^{d-1} und L Stützstellen im Frequenzintervall $I = [a, b]$ erhalten wir ein diskretes lineares Gleichungssystem der Form

$$\mathbf{A}_{poly}\mathbf{u} = \mathbf{f} \quad (129)$$

mit dem Vektor \mathbf{u} , der die spezifischen Intensitäten enthält und mit dem Vektor \mathbf{f} , der die Quellterme beinhaltet. Diese beiden Vektoren haben die Länge $(N \cdot M \cdot L)$ und \mathbf{A}_{poly} ist eine $(N \cdot M \cdot L) \times (N \cdot M \cdot L)$ -Matrix. Dieses Gleichungssystem schreibt sich in Blockform

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_1^{mono} & \omega_2 \mathbf{S}_1 & \dots & \omega_L \mathbf{S}_1 \\ \omega_1 \mathbf{S}_2 & \mathbf{A}_2^{mono} & \ddots & \omega_L \mathbf{S}_2 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \omega_1 \mathbf{S}_L & \dots & \dots & \mathbf{A}_L^{mono} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{u}_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f}_1 \\ \mathbf{f}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{f}_L \end{pmatrix}. \quad (130)$$

Wenn wir die in Kapitel 3 behandelte Tensorproduktstruktur verwenden, hat die „monochromatische“ Strahlungstransportmatrix für einen diskreten Frequenzpunkt ν_k die Form

$$\mathbf{A}_k^{mono} = \mathbf{T} + \mathbf{K}_k + \mathbf{S}_k \quad (131)$$

mit der Blockstruktur

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \mathfrak{T}_1 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \mathfrak{T}_M \end{pmatrix}, \quad (132)$$

$$\mathbf{K}_k = \begin{pmatrix} \mathfrak{K}_1(\chi_k) & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \mathfrak{K}_M(\chi_k) \end{pmatrix}, \quad (133)$$

$$\mathbf{S}_k = \begin{pmatrix} \omega_k \mathfrak{S}_1(\sigma_k) & \dots & \omega_k \mathfrak{S}_1(\sigma_k) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega_k \mathfrak{S}_M(\sigma_k) & \dots & \omega_k \mathfrak{S}_M(\sigma_k) \end{pmatrix}, \quad (134)$$

wobei $\omega_k = w_k \varphi_k / (2\pi(d-1)M)$ ist (vgl. dazu auch die semi-diskrete Formulierung der STG mit vollständiger Wiederverteilung aus Gl. (121)). Bei Berücksichtigung der Diskretisierung durch die SDFEM sind die Einträge der $N \times N$ -Blöcke definiert durch

$$\mathfrak{T}_i^{mn} = (\mathbf{v}_m + \delta \vartheta_i \cdot \nabla_x \mathbf{v}_m, \vartheta_i \cdot \nabla_x \mathbf{v}_n) \quad (135)$$

$$\mathfrak{K}_i^{mn}(\chi_k) = (\mathbf{v}_m + \delta \vartheta_i \cdot \nabla_x \mathbf{v}_m, \chi_k \mathbf{v}_n) \quad (136)$$

$$\mathfrak{S}_i^{mn}(\sigma_k) = (\mathbf{v}_m + \delta \vartheta_i \cdot \nabla_x \mathbf{v}_m, \sigma_k \mathbf{v}_n), \quad (137)$$

mit $m = 1, \dots, N$ and $n = 1, \dots, N$.

Wie bereits zu Beginn dieses Abschnitts erwähnt, ist eine vollständige Behandlung des frequenzabhängigen Strahlungstransportproblems (mit der Tensorproduktstruktur $\Omega \times S^{d-1} \times I$) viel zu „kostspielig“, d.h., daß das resultierende Gleichungssystem bereits bei mäßiger Auflösung sowohl im Orts- und Winkelraum, als auch im Frequenzraum eine viel zu große Anzahl von Freiheitsgraden aufweist, um auf den heutigen Rechnern gelöst werden zu können. Eine Parallelisierungsstrategie sowohl im Winkel- als auch im Frequenzraum wäre relativ einfach zu realisieren, jedoch würden bei einer vernünftigen Auflösung von etwa 80 Strahlrichtungen und 80 Frequenzen Maschinen mit 6400 Prozessoren benötigt. Wenn zusätzlich eine hohe Ortsauflösung erforderlich ist – was fast immer der Fall ist –, sollte *jeder* dieser 6400 Prozessoren über einen Hauptspeicher von mindestens 500 Mb verfügen. Eine solche Maschine ist in Deutschland zur Zeit nicht verfügbar, jedoch gibt es am Lawrence Livermore National Laboratory und am Sandia National Laboratory in den USA Parallelrechner mit mehr als 6500 Prozessoren. Da wir keinen Zugang zu derart großen Rechnern haben, müssen wir uns eine Alternative zu der vollständigen Behandlung frequenzabhängiger Strahlungsfelder überlegen.

Wir betrachten die L „monochromatischen“ Strahlungstransportprobleme

$$\mathbf{A}_k^{mono} \mathbf{u}_k = \tilde{\mathbf{f}}_k \quad (k = 1, \dots, L) \quad (138)$$

nacheinander. Die Vektoren \mathbf{u}_k enthalten die spezifischen Intensitäten und $\tilde{\mathbf{f}}_k$ die Werte des Quellterms für die Frequenzen ν_k . Diese beiden Vektoren haben die Länge $(N \cdot M)$ und \mathbf{A}_k^{mono} ist eine $(N \cdot M) \times (N \cdot M)$ -Matrix (siehe oben). Die Struktur der Matrix \mathbf{A}_k^{mono} ist die gleiche wie bereits in Abschnitt 3.5 beschrieben (siehe oben). Der einzige Unterschied besteht darin, daß die Gewichte $\omega_{uv} = P(\vartheta_u, \vartheta_v) / M = 1 / (2\pi(d-1)M)$ (isotrope Streuung) in der kohärenten Streumatrix (83) mit den Quadraturgewichten der Frequenzintegration w_k und der Linienprofilfunktion ϕ_k multipliziert werden müssen. Die modifizierte rechte Seite $\tilde{\mathbf{f}}_k$ enthält nicht nur die Beiträge von thermischen Quellen \mathbf{f}_k , sondern auch die Summe der Beiträge $\sum_{l \neq k} \omega_l \mathbf{M}_k \mathbf{u}_l$ aus der Quadraturformel für das Frequenzintegral, die nicht auf die „aktuelle“ Frequenz k wirken.

Der Lösungsalgorithmus des gesamten, frequenzabhängigen Problems liest sich in Kürze wie:

1. Starte mit $\mathcal{I} = 0$ für alle Frequenzen.
2. Löse Gl. (121) für $k = 1, \dots, L$.
3. Wiederhole Schritt 2, bis die Lösung konvergiert.
4. Verfeinere das Ortsgitter und wiederhole Schritt 2 und 3.

Die Orts- und Winkeldiskretisierung der Strahlungstransportprobleme für die einzelnen Frequenzpunkte ν_k sowie die Lösung der resultierenden Gleichungssysteme erfolgt wie wir es im Fall der monochromatischen STG beschrieben haben (vgl. Kapitel 3). Aufgrund der Frequenzkopplung des globalen Integraloperators der vollständigen Wiederverteilung erhalten wir zusätzlich zu dieser inneren Iterationsschleife des bi-CGSTAB-Lösers eine äußere Iterationsschleife. Zur Lösung des gesamten Problems $\mathbf{A}_{poly} \mathbf{u} = \mathbf{f}$ verwenden wir ein Block-Gauß-Seidel-Verfahren. Dabei starten wir beim Frequenzpunkt $k = 1$ und lösen sukzessive die „monochromatischen“ Strahlungstransportprobleme bis zum letzten Frequenzpunkt $k = L$. Diesen äußeren Iterationsschritt wiederholen wir so oft, bis sich die Lösung im Rahmen einer vorgegebenen Toleranz nicht mehr ändert. Falls wir den stationären Iterationsschritt mit dem Index (i) kennzeichnen, erhalten wir folgende L „monochromatische“ Strahlungstransportprobleme:

$$\mathbf{A}_k^{mono} \mathbf{u}_k^{(i)} = \mathbf{f}_k + \sum_{l < k} \omega_l \mathbf{S}_k \mathbf{u}_l^{(i)} + \sum_{l > k} \omega_l \mathbf{S}_k \mathbf{u}_l^{(i-1)}. \quad (139)$$

Der Vorteil des oben beschriebenen Lösungsverfahrens besteht darin, daß wir L „monochromatische“ und somit „kleinere“ Strahlungstransportprobleme nacheinander lösen können. Somit können wir eine sehr gute Auflösung bei der Orts-, Winkel- und Frequenzdiskretisierung erzielen.

5 Strahlungstransport in bewegten Medien

5.1 Motivation und physikalische Eigenschaften

In diesem Abschnitt werden zwei Fälle betrachtet: im ersten Fall wird Strahlung von einem relativ zum Beobachter bewegten Objekt ausgesendet, im zweiten Fall wird Strahlung von einem differentiell bewegten Medium gestreut. In beiden Fällen ergibt sich eine Doppler-Verschiebung des Spektrums und daher können beide Fälle gemeinsam behandelt werden. Sie treten im allgemeinen kombiniert auf und müssen in vielen astrophysikalischen Problemen mitberücksichtigt werden. Als Beispiele seien rotierende Akkretionsscheiben, kollabierende oder expandierende Galaxien oder Protogalaxien und Supernovae genannt. Insbesondere die Strahlung von einer rotierenden Akkretionsscheibe verdeutlicht den Effekt des Geschwindigkeitsfelds auf das (Linien-) Spektrum. Wenn die Scheibe von der Seite aus betrachtet wird, enthält das Spektrum neben der Information über die chemischen Zusammensetzung, die Temperatur und die Radialgeschwindigkeit bezüglich der Erde auch Informationen über die Rotationsgeschwindigkeit der Scheibe selbst. Für den Fall einer einzelnen Spektrallinie wird der Anteil der Linie aus dem Gebiet der Scheibe, das sich auf den Beobachter zu bewegt, zu größeren Frequenzen (Blauverschiebung) und derjenige Anteil aus dem Gebiet, das sich vom Beobachter weg bewegt, zu kleineren Frequenzen (Rotverschiebung) hin verschoben. Der Doppler-Effekt erzeugt in diesem Fall eine Verbreiterung bzw. eine Aufspaltung der Linie. Qualitativ läßt sich dieser Effekt durch eine Farbkodierung der frequenzintegrierten Intensitätsverteilung beobachten (siehe Abb. 5). Dabei wird der frequenzgemittelten Intensität in eine Beobachtungsrichtung entsprechend ihrer Position im Spektrum (d.h. relativ vom Linienzentrum zu kürzeren oder längeren Frequenzen) ein RGB-Wert zugeordnet. Die Farben rot und blau markieren diejenigen Gebiete, in denen die oben beschriebene Rot- bzw. Blauverschiebung vorkommt, und Grün verweist auf die Regionen im Rechengebiet, in denen der Doppler-Effekt zumindest in Richtung des Beobachters keine Rolle spielt. In Abb. 5 sind solche farbcodierten Bilder für zwei rotierende Konfigurationsbeispiele aus Kapitel 7 dargestellt.

Zusätzlich zum Doppler-Effekt tritt bei der Beobachtung von bewegten Medien der Effekt der Aberration auf (siehe Mihalas 1978; Mihalas & Weibel-Mihalas 1984). Das Phänomen der Aberration spiegelt die Endlichkeit der Lichtgeschwindigkeit und die relative transversale Bewegung zwischen Beobachter und Strahlungsquelle wieder. Für ein Photon, das sich auf gerader Linie mit konstanter Frequenz bewegt, mißt man im ruhenden Beobachtersystem, welches wir ab jetzt als Laborsystem bezeichnen werden, Beiträge von Aberration und Doppler-Verschiebung, die sich von denen in anderen, bewegten Systemen unterscheiden. Diese

Änderungen werden durch eine Lorentz-Transformation beschrieben, einer lineare Transformation, die die Beziehung zwischen den rechtwinkligen Raum- und Zeitkoordinaten x, y, z, t des Laborsystems und den Koordinaten x_0, y_0, z_0, t_0 des mitbewegten Systems angibt (siehe z.B. Mihalas & Weibel-Mihalas 1984). Koeffizienten, die sich auf das mitbewegte System beziehen, erhalten im folgenden den Index „0“.

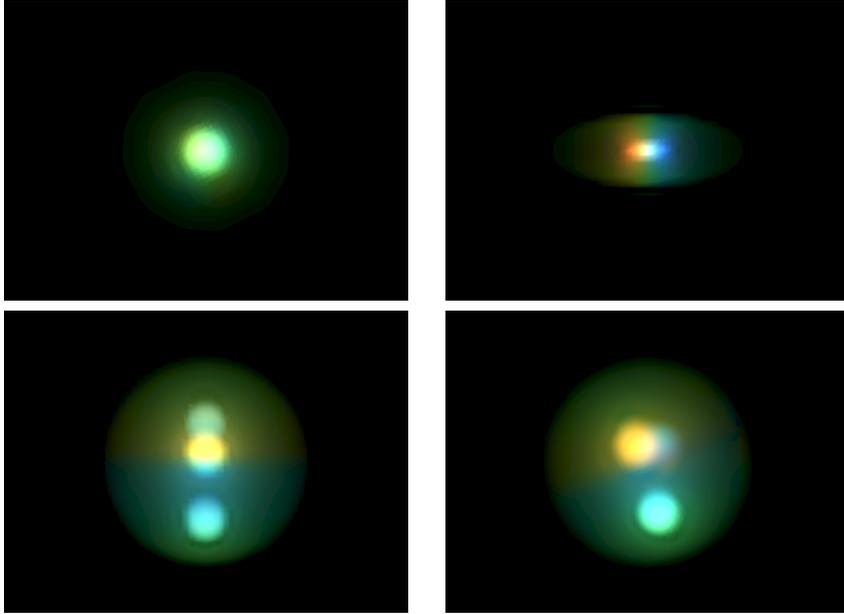


Abbildung 5: *Farbkodierte Geschwindigkeitsverteilungen für eine rotierende oblate Konfiguration und einen rotierenden Halo mit drei räumlich ausgedehnten Photonquellengebieten aus jeweils zwei verschiedenen Blickrichtungen. Die Farben charakterisieren Bereiche im Rechengebiet, die sich vom Beobachter weg (rot) oder sich auf diesen zu bewegen (blau).*

Für ein Photon mit Frequenz ν und Richtung ϑ im Laborsystem gelten folgende Beziehungen zur Frequenz ν_0 und Richtung ϑ_0 im mitbewegten System:

$$\begin{aligned}
 \nu_0 &= \gamma \nu (1 - \vartheta \cdot \beta) \\
 \nu &= \gamma \nu_0 (1 + \vartheta_0 \cdot \beta) \\
 \vartheta_0 &= \frac{(\vartheta - \beta)}{(1 - \vartheta \cdot \beta)} \\
 \vartheta &= \frac{(\vartheta_0 + \beta)}{(1 + \vartheta_0 \cdot \beta)},
 \end{aligned}
 \tag{140}$$

wobei $\gamma = 1/\sqrt{1 - \beta^2}$ der Lorentzfaktor ist, c die Lichtgeschwindigkeit und \mathbf{v} das Geschwindigkeitsfeld darstellt. Zur Abkürzung wird $\beta = \frac{v}{c}$ verwendet.

5.2 Mathematische Formulierung

Ausgehend von der Annahme, daß für nicht-relativistisch bewegte Medien mit Geschwindigkeiten bis zu etwa 10% der Lichtgeschwindigkeit die Advektions- und Aberrationsterme vernachlässigt werden könne, gilt

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} \approx 1 \quad \text{und} \quad \vartheta \approx \vartheta_0. \quad (141)$$

Weiter erfolgt die Transformation der Koordinaten x_0, y_0, z_0 des mitbewegten Systems ins Beobachtersystem in der Gestalt

$$\begin{aligned} x &= x(x_0, v_0) \\ y &= y(y_0, v_0) \\ z &= z(z_0, v_0) \end{aligned} \quad (142)$$

durch eine „vereinfachte“ Lorentztransformation $\mathbf{v} = v_0(1 + \vartheta \cdot \beta)$, wobei es sich im wesentlichen um eine Galilei-Transformation in Kombination mit der linearen Doppler-Formel handelt. Mit Hilfe der Transformationsformel für die Frequenzen im mitbewegten System

$$v_0 \approx \frac{v}{1 + \vartheta \cdot \beta} \quad (143)$$

wird im folgenden die mehrdimensionale STG im mitbewegten System zunächst für ein beliebiges Geschwindigkeitsfeld β hergeleitet (vgl. Wehrse et al. 2000). Dazu müssen wir die Richtungsableitung des Differentialoperators der statischen monochromatischen STG (vgl. Gl. (27))

$$\vartheta \cdot \nabla_x = \vartheta_x \frac{\partial}{\partial x} + \vartheta_y \frac{\partial}{\partial y} + \vartheta_z \frac{\partial}{\partial z} \quad (144)$$

genauer untersuchen. Wegen der funktionalen Abhängigkeit in den Transformationsgleichungen (142), gehen die Differentialoperatoren für das mitbewegte System über in

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &\rightarrow \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial v_0}{\partial x} \frac{\partial}{\partial v_0} \\ \frac{\partial}{\partial y} &\rightarrow \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial v_0}{\partial y} \frac{\partial}{\partial v_0} \\ \frac{\partial}{\partial z} &\rightarrow \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial v_0}{\partial z} \frac{\partial}{\partial v_0}. \end{aligned} \quad (145)$$

Die Lorentz-Transformation für die Frequenz im mitbewegten System (143) impliziert nun, daß

$$\frac{\partial v_0}{\partial x} \approx \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{v}{1 + \vartheta \cdot \beta} \right) \equiv \left(-\frac{v}{(1 + \vartheta \cdot \beta)^2} \right) \frac{\partial}{\partial x} (\vartheta \cdot \beta) \quad (146)$$

und analog

$$\frac{\partial v_0}{\partial y} \approx \left(-\frac{v}{(1 + \vartheta \cdot \beta)^2} \right) \frac{\partial}{\partial y} (\vartheta \cdot \beta) \quad (147)$$

$$\frac{\partial v_0}{\partial z} \approx \left(-\frac{v}{(1 + \vartheta \cdot \beta)^2} \right) \frac{\partial}{\partial z} (\vartheta \cdot \beta) \quad (148)$$

gilt. Dem entsprechend transformiert sich auch der Ausdruck für die Richtungsableitung in Strahlrichtung $\vartheta \cdot \nabla_x$ in Gl. (27):

$$\begin{aligned} \vartheta \cdot \nabla_x &\rightarrow \vartheta_x \left[\frac{\partial}{\partial x} - \frac{v_0}{(1 + \vartheta \cdot \beta)} \frac{\partial}{\partial x} (\vartheta \cdot \beta) \frac{\partial}{\partial v_0} \right] \\ &+ \vartheta_y \left[\frac{\partial}{\partial y} - \frac{v_0}{(1 + \vartheta \cdot \beta)} \frac{\partial}{\partial y} (\vartheta \cdot \beta) \frac{\partial}{\partial v_0} \right] \\ &+ \vartheta_z \left[\frac{\partial}{\partial z} - \frac{v_0}{(1 + \vartheta \cdot \beta)} \frac{\partial}{\partial z} (\vartheta \cdot \beta) \frac{\partial}{\partial v_0} \right] \\ &\equiv \vartheta \cdot \nabla_x - \frac{v_0}{(1 + \vartheta \cdot \beta)} \vartheta \cdot \nabla_x (\vartheta \cdot \beta) \frac{\partial}{\partial v_0}. \end{aligned} \quad (149)$$

Somit lautet die STG für nicht-relativistisch bewegte Medien

$$\begin{aligned} \mathcal{T}\mathcal{I}(x, \vartheta, v_0) - w(x, \vartheta) v_0 \frac{\partial \mathcal{I}(x, \vartheta, v_0)}{\partial v_0} + \\ \kappa_0(x, v_0) \mathcal{I}(x, \vartheta, v_0) + \sigma_0(x, v_0) \mathcal{S}\mathcal{I}(x, \vartheta, v_0) = f(x, v_0), \end{aligned} \quad (150)$$

wobei \mathcal{T} und \mathcal{S} die am Ende von Abschnitt 3.1 definierten Operatoren sind. Der frequenzunabhängige Anteil des Vorfaktors $w(x, \vartheta)$ vor dem sogenannten Doppler-Term ergibt sich aus

$$\frac{1}{(1 + \vartheta \cdot \beta)} \vartheta \cdot \nabla_x (\vartheta \cdot \beta) \approx \vartheta \cdot \nabla_x (\vartheta \cdot \beta) \equiv w(x, \vartheta). \quad (151)$$

Als Frequenzbereich wählen wir ein endliches Intervall $I := [a, b]$ und den Rand dieses Intervalls bezeichnen wir mit ∂I . Die Funktion $w(x, \vartheta)$ gibt an jedem Ort und für jede Strahlrichtung an, ob das Spektrum zu kleineren ($w(x, \vartheta) > 0$) oder

zu größeren ($w(x, \vartheta) < 0$) Frequenzen verschoben wird. Falls das Geschwindigkeitsfeld so gewählt ist, daß die Funktion $w(x, \vartheta)$ das Vorzeichen wechselt, müssen wir für $w(x, \vartheta) > 0$ auf dem oberen Frequenzintervallrand, also für $\mathcal{I}(x, \vartheta, b)$, einen Randwert vorgeben. Für $w(x, \vartheta) < 0$ muß ein Randwert an der unteren Intervallgrenze, also für $\mathcal{I}(x, \vartheta, a)$, vorgegeben werden. Den Rand, auf dem die Vorgabe eines Wertes erforderlich ist, bezeichnen wir mit $\Sigma^- \subset \Omega \times S^{d-1} \times \partial I$. Auch bezüglich des „Frequenz-Einstrahlungsrandes“ Σ^- beschränken wir uns auf homogene Randwerte. Somit lauten die korrekten Randbedingungen für die STG in bewegten Medien (151)

$$\mathcal{I}(x, \vartheta, v_0) = 0 \quad \text{auf } \Gamma^- \times I \quad \text{und} \quad (152)$$

$$\mathcal{I}(x, \vartheta, v_0) = 0 \quad \text{auf } \Sigma^-. \quad (153)$$

Wenn man spezielle Geschwindigkeitsfelder (wie z.B. makroskopischer Kollaps oder eine Expansion) berücksichtigt, wechselt die Funktion $w(x, \vartheta)$ das Vorzeichen nicht. Somit erhalten wir – ähnlich wie bei der Behandlung von instationären Problemen – eine Anfangswertaufgabe. Abhängig davon, ob $w(x, \vartheta)$ positiv oder negativ ist, müssen wir am Frequenzpunkt a oder b einen Anfangswert vorgeben.

Häufig ist es für die numerische Lösung, aber auch für die analytische Untersuchung der STG in bewegte Medien von Vorteil, wenn die Frequenzabhängigkeit des gesamten Vorfaktors $w(x, \vartheta)v_0$ des Doppler-Terms unterdrückt werden kann. Dies geschieht durch die Transformation $\xi_0 = \ln v_0$ und wir erhalten mit

$$\frac{\partial(\ln v_0)}{\partial v_0} = \frac{1}{v_0} \quad (154)$$

den Doppler-Term ohne frequenzabhängigen Vorfaktor:

$$w(x, \vartheta)v_0 \frac{\partial \mathcal{I}(x, \vartheta, v_0)}{\partial v_0} = w(x, \vartheta) \frac{\partial \mathcal{I}(x, \vartheta, v_0)}{\partial(\ln v_0)} = w(x, \vartheta) \frac{\partial \mathcal{I}(x, \vartheta, \xi_0)}{\partial \xi_0}. \quad (155)$$

Somit ergibt sich für die STG in bewegten Medien (151) transformiert auf logarithmische Frequenzen

$$\begin{aligned} \mathcal{I} \mathcal{I}(x, \vartheta, \xi_0) - w(x, \vartheta) \frac{\partial \mathcal{I}(x, \vartheta, \xi_0)}{\partial \xi_0} + \\ \kappa_0(x, \xi_0) \mathcal{I}(x, \vartheta, \xi_0) + \sigma_0(x, \xi_0) S \mathcal{I}(x, \vartheta, \xi_0) = f(x, \xi_0), \end{aligned} \quad (156)$$

mit den Randwerten

$$\mathcal{I}(x, \vartheta, \xi_0) = 0 \quad \text{auf } \Gamma^- \times I \quad \text{und} \quad (157)$$

$$\mathcal{I}(x, \vartheta, \xi_0) = 0 \quad \text{auf } \Sigma^-. \quad (158)$$

Für den nicht-streuenden Fall hat die Gl. (157) dieselbe mathematische Struktur wie die mitbewegte Transportgleichung, die von Baschek et al. (1997b) für plan-parallele und sphärisch-symmetrische Konfigurationen verwendet wird. Deren Gleichung wurde als Grenzfall für kleine Geschwindigkeiten β und für die Strahlrichtungen $\mu = \pm 1$ aus der (sphärisch-symmetrischen) relativistischen STG aus Mihalas & Weibel-Mihalas (1984) hergeleitet. Es sei noch bemerkt, daß in der Gleichung aus Baschek et al. (1997b) ein zusätzlicher Absorptionsterm $5wI$ auftritt. Dieser Term kann vermieden werden, wenn man nicht die spezifische Intensität I , sondern – wie bei der obigen Herleitung – eine relativistisch invariante Intensität verwendet (vgl. auch Wehrse & Baschek 1999). Somit können die analytischen Lösungen aus Baschek et al. (1997a,b) und Varianten davon für streuende Medien unter anderem verwendet werden, um aufwändige numerische Codes, die die mehrdimensionale STG lösen, zu verifizieren (vgl. Richling et al. 2001). In Abschnitt 6 wird genauer auf den Vergleich unterschiedlicher Codes für einfache Geometrien eingegangen.

5.3 Schwache Formulierung

Der Lösungsraum der STG für bewegte Medien muß alle Funktionen enthalten, für die sowohl die Richtungsableitung $\mathcal{T}\mathcal{I}(x, \vartheta, \xi_0)$, als auch die Ableitung nach der Frequenz $v_0 \partial \mathcal{I}(x, \vartheta, v_0) / \partial v_0 = \partial \mathcal{I}(x, \vartheta, \xi_0) / \partial \xi_0$ existiert. Zur einfacheren Handhabung führen wir die Operatoren \mathcal{G} und \mathcal{H} ein als

$$\mathcal{G}\mathcal{I}(x, \vartheta, \xi_0) := w(x, \vartheta) \frac{\partial \mathcal{I}(x, \vartheta, \xi_0)}{\partial \xi_0} \quad (159)$$

und

$$\mathcal{H}\mathcal{I}(x, \vartheta, \xi_0) := \mathcal{T}\mathcal{I}(x, \vartheta, \xi_0) - \mathcal{G}\mathcal{I}(x, \vartheta, \xi_0). \quad (160)$$

Als geeigneten Lösungsraum definieren wir

$$X := \left\{ \mathcal{I} \in L^2(\Omega \times S^{d-1} \times I) \mid \mathcal{H}\mathcal{I} \in L^2(\Omega \times S^{d-1} \times I) \right\} \quad (161)$$

und als zugehörige Norm

$$\begin{aligned} \|\mathcal{I}\|_X^2 &:= \|\sqrt{\delta} \mathcal{H}\mathcal{I}\|_{\Omega \times S^{d-1} \times I}^2 + \|\sqrt{\kappa_0} \mathcal{I}\|_{\Omega \times S^{d-1} \times I}^2 \\ &\quad + \|\sqrt{\sigma_0} \Pi^\perp \mathcal{I}\|_{\Omega \times S^{d-1} \times I}^2 + \|\mathcal{I}\|_{\Gamma \times I}^2 + \|\mathcal{I}\|_{\Sigma}^2. \end{aligned} \quad (162)$$

Zur Stabilisierung kann beispielsweise eine SDFEM im Orts-Frequenz-Raum gewählt werden, so daß die schwache Formulierung mit $f(x, \xi_0) \in L^2(\Omega \times I)$ und mit

den Koeffizienten $\kappa_0(x, \xi_0), \sigma_0(x, \xi_0) \in L^\infty(\Omega \times I)$ für Nullrandbedingungen lautet: Suche $\mathcal{I} \in X$, so daß gilt

$$\begin{aligned} d_\delta(\mathcal{I}, \mathbf{v}) &:= (\mathcal{H}\mathcal{I}, \mathbf{v} + \delta\mathcal{H}\mathbf{v})_{\Omega \times S^{d-1} \times I} \\ &\quad + (\kappa_0\mathcal{I}, \mathbf{v} + \delta\mathcal{H}\mathbf{v})_{\Omega \times S^{d-1} \times I} \\ &\quad + (\sigma_0\mathcal{S}\mathcal{I}, \mathbf{v} + \delta\mathcal{H}\mathbf{v})_{\Omega \times S^{d-1} \times I} \\ &\quad + (\mathcal{I}, \mathbf{v})_{\Gamma^- \times I} + (\mathcal{I}, \mathbf{v})_{\Sigma^-} \\ &= (f, \mathbf{v} + \delta\mathcal{H}\mathbf{v})_{\Omega \times S^{d-1} \times I} \quad \forall \mathbf{v} \in X. \end{aligned} \quad (163)$$

Die Existenz und Eindeutigkeit für Lösungen von $d_\delta(\mathcal{I}, \mathbf{v})$ kann wiederum über den Satz von Lax-Milgram gezeigt werden (siehe Wild 1999).

5.4 Diskretisierung

Die Diskretisierung der STG für bewegte Medien erfolgt ähnlich wie im Fall der vollständigen Wiederverteilung (vgl. Abschnitt 4.4), so daß wir die dort beschriebene Zerlegung \mathbb{T}^I des Frequenzintervalls $I = [a, b]$ und die Zerlegung \mathbb{T}^Ω von Ω und $\mathbb{T}^{S^{d-1}}$ von S^{d-1} aus Abschnitt 3.3 beibehalten können. Als Funktionenraum über I definieren wir

$$X_h^I := \left\{ \mathbf{v} \in L^2(I) \mid \mathbf{v}|_K \in P^s(K) \quad \forall K \in \mathbb{T}^I \right\}. \quad (164)$$

Das Frequenzintervall I unterteilen wir wiederum gleichmäßig und wählen auf den Teilgebieten konstante Basisfunktionen, d.h. wir beschränken uns auf den Polynomgrad $s = 0$ ($\mathbf{v}|_{K^I} = c_K$).

Wegen $M < \infty$ existieren endlich viele Basisfunktionen von X_h^I , die wir mit $\{\tau_i\}_i, i = \{1, \dots, M\}$ bezeichnen und die die Gestalt wie in Gl. (53) haben. Als diskreten Ansatzraum für die Lösung \mathcal{I}_h der diskretisierten STG für bewegte Medien wählen wir

$$\begin{aligned} X_h &= \left\{ \mathbf{v} \in X \mid \mathbf{v}|_{K^\Omega} \in Q^1(K^\Omega) \quad \forall K^\Omega \in \mathbb{T}^\Omega, \mathbf{v}|_\Omega \in C^0(\Omega), \right. \\ &\quad \left. \mathbf{v}|_{K^{S^{d-1}}} \in P^0(K^{S^{d-1}}) \quad \forall K^{S^{d-1}} \in \mathbb{T}^{S^{d-1}}, \right. \\ &\quad \left. \mathbf{v}|_{K^I} \in P^0(K^I) \quad \forall K^I \in \mathbb{T}^I \right\}. \end{aligned} \quad (165)$$

Als Basisfunktionen $\{\zeta_{ijk}\}_{ijk}$ von X_h erhalten wir

$$\zeta_{ijk}(x, \vartheta, \mathbf{v}) = \psi_i(x) \pi_j(\vartheta) \tau_k(\mathbf{v}), \quad (166)$$

wobei $\psi_i(x)$ die Basisfunktionen von V_h^Ω und $\pi_j(\vartheta)$ diejenigen von $V_h^{S^{d-1}}$ sind (vgl. Abschnitt 3.3).

Als diskrete schwache Formulierung der STG für bewegte Medien ergibt sich somit:

$$\begin{aligned}
d_\delta(\mathcal{I}_h, \mathbf{v}_h) &:= (\mathcal{T}\mathcal{I}_h, \mathbf{v}_h + \delta\mathcal{T}\mathbf{v}_h)_{\Omega \times S^{d-1} \times I} - (\mathcal{G}\mathcal{I}_h, \mathbf{v}_h + \delta\mathcal{T}\mathbf{v}_h)_{\Omega \times S^{d-1} \times I} \\
&\quad + (\kappa_0 \mathcal{I}_h, \mathbf{v}_h + \delta\mathcal{T}\mathbf{v}_h)_{\Omega \times S^{d-1} \times I} + (\sigma_0 \mathcal{S}\mathcal{I}_h, \mathbf{v}_h + \delta\mathcal{T}\mathbf{v}_h)_{\Omega \times S^{d-1} \times I} \\
&\quad + (\mathcal{I}_h, \mathbf{v}_h)_{\Gamma^- \times I} + (\mathcal{I}_h, \mathbf{v}_h)_{\Sigma^-} \\
&= (f, \mathbf{v}_h + \delta\mathcal{T}\mathbf{v}_h)_{\Omega \times S^{d-1} \times I} \quad \forall \mathbf{v}_h \in X_h.
\end{aligned} \tag{167}$$

Wie wir bereits zu Beginn des Abschnitts erwähnt haben, erfolgt die Diskretisierung der STG für bewegte Medien ähnlich wie im Fall der vollständigen Wiederverteilung (vgl. Abschnitt 4.4), nur mit dem Unterschied, daß hier kein Integral über das Frequenzspektrum berücksichtigt werden muß, sondern ein zusätzlicher Ableitungsterm bezüglich der Frequenz. Die Diskretisierung dieser Frequenzableitung im Doppler-Term (159) erfolgt durch ein unstetiges Galerkin-Verfahren („discontinuous Galerkin“) vom Grad $r = 0$, kurz DG- bzw. DG(0)-Verfahren. Üblicherweise werden die DG-Verfahren zur Diskretisierung gewöhnlicher Differentialgleichungen (insbesondere von Anfangswertaufgaben) verwendet, finden jedoch auch eine Anwendung bei der Zeitdiskretisierung und Gittersteuerung partieller Differentialgleichungen (siehe dazu Eriksson & Johnson 1987, 1991; Eriksson et al. 1985). Trotz der grundlegenden Unterschiede im Ansatz von DG- und Differenzenverfahren lassen sich zwischen beiden Klassen auch enge Beziehungen feststellen. So kann das DG(0)-Verfahren im wesentlichen mit der impliziten Euler-Formel der Differenzenverfahren identifiziert werden (siehe Böttcher 1996).

Ausgehend von L Frequenzstützstellen

$$\Xi := [\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_L] \subset I \tag{168}$$

ergibt sich für die DG(0) Diskretisierung des Doppler-Terms:

$$-w(x, \vartheta) \mathbf{v} \frac{\partial \mathcal{I}}{\partial \mathbf{v}} \longrightarrow -w \mathbf{v}_k \frac{\mathcal{I}_k - \mathcal{I}_{k-1}}{\Delta \nu_k} \quad \text{für } w(x, \vartheta) < 0 \tag{169}$$

und

$$-w(x, \vartheta) \mathbf{v} \frac{\partial \mathcal{I}}{\partial \mathbf{v}} \longrightarrow -w \mathbf{v}_k \frac{\mathcal{I}_{k+1} - \mathcal{I}_k}{\Delta \nu_k} \quad \text{für } w(x, \vartheta) > 0. \tag{170}$$

Wie oben bereits erwähnt wurde, kann das DG(0)-Verfahren mit der impliziten Euler-Formel identifiziert werden, wobei jedoch zu beachten ist, daß der Doppler-Term – im Gegensatz zur Diskretisierung einer Zeitableitung – das Vorzeichen

wechseln kann. Aus Gründen der Einfachheit wählen wir eine äquidistante Unterteilung des Frequenzintervalls I , so daß die Intervalllänge zwischen zwei aufeinanderfolgenden diskreten Frequenzpunkten $\Delta v_k = \text{konstant}$ ist. Der Index „ k “ charakterisiert die Abhängigkeit der Größen vom k -ten diskreten Frequenzwert. Mit $\gamma_k = \gamma(x, \vartheta, v_k) = w(x, \vartheta) v_k / \Delta v_k$ erhalten wir eine semi-diskrete Formulierung der STG für bewegte Medien

$$\vartheta \cdot \nabla_x \mathcal{I}_k + (\chi_k + |\gamma_k|) \mathcal{I}_k - \frac{\sigma_k}{2\pi(d-1)} \int_{S^{d-1}} \mathcal{I}(x, \vartheta', v_k) d\vartheta' = f_k + |\gamma_k| \begin{cases} \mathcal{I}_{k-1} & (\gamma_k < 0) \\ \mathcal{I}_{k+1} & (\gamma_k > 0) \end{cases}, \quad (171)$$

wobei $\chi_k = \kappa(x, v_k) + \sigma(x, v_k)$ die Opazität bezeichnet. Die Struktur der „monochromatischen“ STG für jeden Frequenzpunkt v_k ist dieselbe wie in Abschnitt 3.3, so daß die Diskretisierung des Orts- und Winkelraums wie dort beschrieben erfolgen kann. Der einzige Unterschied liegt in einer um zusätzliche Terme erweiterten Quellfunktion (ähnlich wie im Fall der vollständigen Wiederverteilung) und einem zusätzlichen „künstlichen“ Opazitätsterm.

5.5 Fehlerschätzer

Die Herleitung eines maximalen Fehlerindikators erfolgt ähnlich wie wir es bereits für den Fall der vollständigen Wiederverteilung (vgl. Abschnitt 4.5) beschrieben haben. Somit benötigen wir zunächst den zum Strahlungstransportoperator für bewegte Medien $\mathcal{D} = \mathcal{T} + \mathcal{G} + \kappa + \sigma\mathcal{S}$ dualen Operator \mathcal{D}^* und die duale Lösung z , um einen solchen vereinfachten Fehlerschätzer konstruieren zu können. Der zum Strahlungstransportoperator für bewegte Medien \mathcal{D} duale Operator \mathcal{D}^* lautet

$$\begin{aligned} d_\delta(\mathcal{I}, \mathbf{v}) &=: (\mathcal{D}\mathcal{I}, \mathbf{v}) \\ &= (\mathcal{I}, \mathcal{D}^*\mathbf{v}) \\ &= (\mathcal{I}, (-\mathcal{T} - \mathcal{G} + \kappa + \sigma\mathcal{S}) \mathbf{v})_{\Omega \times S^{d-1} \times I} \\ &\quad + (\mathcal{I}, \mathbf{v})_{\Gamma^+ \times I} + (\mathcal{I}, \mathbf{v})_{\Sigma^-}. \end{aligned} \quad (172)$$

Wie bereits im vorigen Abschnitt diskutiert wurde, wird für jeden diskreten Frequenzpunkt ein „monochromatisches“ Strahlungstransportproblem betrachtet, wobei die zusätzliche Frequenzableitung durch ein DG(0)-Verfahren berücksichtigt wird. Somit ist eine rigorose Fehlerkontrolle einer gemittelten Größe (wie z.B. des gesamten Spektrallinienflusses) nicht mehr möglich. Wir können jedoch einen vereinfachten Fehlerindikator definieren, der für alle L diskreten Frequenzpunkte einen maximalen (Orts-) Fehler des beobachteten Strahlungsflusses in Richtung des Beobachters liefert (vgl. Abschnitt 4.5). Somit kann das Fehlerfunktional

$\mathcal{M}(e_h) := \mathcal{M}(\mathcal{I} - \mathcal{I}_h)$ wie folgt abgeschätzt werden:

$$|\mathcal{M}(e_h^{(i)})| \leq \eta(\mathcal{I}_h) = \sum_K \eta_K. \quad (173)$$

$\eta_K = \max_i \{\eta_K^{(i)}\}$ bezeichnet den maximale Fehlerindikator aller L lokalen Fehlerindikatoren

$$\eta_K^{(i)} = \|f_i - \mathcal{D}_i \mathcal{I}_h^{(i)}\|_K h_K^2 \|\nabla_{x^i}^2 z_i\|_K. \quad (174)$$

Der Index i bzw. (i) charakterisiert den i -ten Frequenzpunkt.

5.6 Resultierende Matrixstruktur und Lösung des Gleichungssystems

Wie wir bereits für den Fall der vollständigen Wiederverteilung ausführlich diskutiert haben, ist es mit den von uns verwendeten Rechnern nicht möglich das aus der Diskretisierung resultierende lineare Gleichungssystem als Ganzes zu lösen. Die Lösungsversuche scheitern bereits bei mäßiger Auflösung im Orts-, Winkel- und Frequenzraum an der Größe diese Systems. Alternativ teilen wir das Frequenzintervall in endlich viele diskrete Stützstellen und lösen sukzessive ein „monochromatisches“ Strahlungstransportproblem (171) für jeden einzelnen diskreten Frequenzpunkt. Somit lösen wir immer noch das gesamte lineare Gleichungssystem, nur daß sich die Größe des im Hauptspeicher zu haltenden Systems erheblich reduziert. Die Diskretisierung bleibt dabei vom Galerkin-Typ.

Bei der Diskretisierung der frequenzabhängigen STG für bewegte Medien mit N Freiheitsgraden in Ω , M Ordinaten in S^{d-1} und L Stützstellen im Frequenzintervall $I = [a, b]$ erhalten wir ein diskretes lineares Gleichungssystem der Form

$$\mathbf{A}_{bew} \mathbf{u} = \mathbf{f} \quad (175)$$

mit dem Vektor \mathbf{u} , der die spezifischen Intensitäten enthält, und mit dem Vektor \mathbf{f} , der die Quellterme beinhaltet. Diese beiden Vektoren haben die Länge $(N \cdot M \cdot L)$, und \mathbf{A}_{bew} ist eine $(N \cdot M \cdot L) \times (N \cdot M \cdot L)$ -Matrix. Da wir beliebige Geschwindigkeitsfelder betrachten wollen, kann der Vorfaktor des Doppler-Terms (159) das Vorzeichen wechseln, was zu einer block-tridiagonalen Struktur von \mathbf{A}_{bew} führt:

$$\begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{A}}_1 & \mathbf{R}_1 & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{B}_2 & \tilde{\mathbf{A}}_2 & \mathbf{R}_2 & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \ddots & \ddots & \ddots & \mathbf{0} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \mathbf{R}_{L-1} \\ \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{B}_L & \tilde{\mathbf{A}}_L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{u}_{L-1} \\ \mathbf{u}_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f}_1 \\ \mathbf{f}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{f}_{L-1} \\ \mathbf{f}_L \end{pmatrix}. \quad (176)$$

Die Blockmatrix \mathbf{R}_k enthält als Einträge diejenigen $\gamma_k = w(x, \vartheta)v_k/\Delta v_k$, die aufgrund des Vorzeichens ($w(x, \vartheta) > 0$) im Medium eine Rotverschiebung bewirken. Analog enthält \mathbf{B}_k diejenigen Einträge, die aufgrund eines negativen Vorfaktors $w(x, \vartheta)$ im Medium eine Blauverschiebung der Photonen bewirken. Wie bereits zu Beginn des Abschnitts beschrieben, lösen wir aus Gründen der Hauptspeicherreduzierung nacheinander L „monochromatische“ Strahlungstransportprobleme

$$\tilde{\mathbf{A}}_k \mathbf{u}_k = (\mathbf{A}_k^{mono} + \mathbf{R}_k + \mathbf{B}_k) \mathbf{u}_k = \tilde{\mathbf{f}}_k \quad (177)$$

mit der rechten Seite

$$\tilde{\mathbf{f}}_k = \mathbf{f}_k + \mathbf{R}_k \mathbf{u}_{k+1} + \mathbf{B}_k \mathbf{u}_{k-1}. \quad (178)$$

Auf der linken Seite von Gl. (177) ergeben die Beiträge \mathbf{R}_k und \mathbf{B}_k aus der Frequenzdiskretisierung eine zusätzliche „künstliche“ Absorption (siehe dazu auch Gl. (171)). Auf der rechten Seite werden diese Beiträge als eine „künstliche“ Quelle in $\tilde{\mathbf{f}}_k$ mitberücksichtigt.

Der Lösungsalgorithmus des gesamten, frequenzabhängigen Problems schreibt sich in Kürze ähnlich wie für den Fall der vollständigen Wiederverteilung:

1. Starte mit $\mathcal{I} = 0$ für alle Frequenzen.
2. Löse Gl. (171) für $k = 1, \dots, L$.
3. Wiederhole Schritt 2, bis die Lösung konvergiert.
4. Verfeinere das Ortsgitter und wiederhole Schritt 2 und 3.

Die Orts- und Winkeldiskretisierung der Strahlungstransportprobleme für die einzelnen Frequenzpunkte v_k sowie die Lösung der resultierenden Gleichungssysteme $\tilde{\mathbf{A}}_k \mathbf{u}_k = \tilde{\mathbf{f}}_k$ erfolgt wie im Fall der monochromatischen STG (vgl. Kapitel 3). Da in der modifizierten rechten Seite $\tilde{\mathbf{f}}_k$ sowohl Beiträge $\mathbf{B}_k \mathbf{u}_{k-1}$ eingehen, die sich aus der Lösung des vorhergehenden Frequenzschrittes zusammensetzen, als auch Terme $\mathbf{R}_k \mathbf{u}_{k+1}$, welche die Lösungen des nächsten Frequenzschrittes beinhalten, müssen wir eine äußere Schleife um den inneren iterativen Lösungsprozess der einzelnen „monochromatischen“ Strahlungstransportprobleme konstruieren. Zur Lösung des gesamten Problems $\mathbf{A}_{bew} \mathbf{u} = \mathbf{f}$ verwenden wir ein Block-Gauß-Seidel-Verfahren. Dabei starten wir beim Frequenzpunkt $k = 1$ und lösen sukzessive die „monochromatischen“ Strahlungstransportprobleme bis zum letzten Frequenzpunkt $k = L$. Diesen äußeren Iterationsschritt wiederholen wir so oft, bis sich die Lösung im Rahmen einer vorgegebenen Toleranz nicht mehr ändert. Der Vorteil dieses Lösungsverfahrens besteht darin, daß wir L „monochromatische“ und

somit „kleinere“ Strahlungstransportprobleme nacheinander lösen können. Somit können wir eine sehr gute Auflösung bei der Orts-, Winkel- und Frequenzdiskretisierung erzielen.

Für den Fall, daß wir ein Geschwindigkeitsfeld gewählt haben, welches kein Vorzeichenwechsel der Funktion $w(x, \vartheta)$ bewirkt (z.B. Kollaps oder Expansion), reduziert sich der zeitliche Aufwand zur Lösung des Gleichungssystems erheblich. Die Struktur der Strahlungstransportmatrix \mathbf{A}_{bew} ist dann block-bidiagonal, da je nach Vorzeichen von $w(x, \vartheta)$ nur einer der Blockmatrizen \mathbf{B}_k oder \mathbf{R}_k von Null verschiedene Einträge enthält. Zur Lösung des Gleichungssystem $\mathbf{A}_{bew}\mathbf{u} = \mathbf{f}$ genügt ein einziger oben beschriebener äußerer Iterationsschritt durch das Frequenzspektrum.

6 Vergleiche zwischen 3D Codes

In diesem Abschnitt führen wir eine Reihe von Testbeispielen durch, um die Richtigkeit sowohl des monochromatischen als auch des frequenzabhängigen Strahlungstransport-Codes zu überprüfen. Bei der Verifizierung eines komplizierten numerischen Codes ist es üblich, dessen Ergebnisse mit zuverlässigen Lösungen, die mit anderen Methoden berechnet wurden, zu vergleichen. Diese zuverlässigen Lösungen können beispielsweise mittels analytischer oder zumindest semi-analytischer Methoden gewonnen werden. Falls keine analytischen Lösungen existieren, müssen voneinander unabhängige Codes sogenannte Benchmark-Probleme lösen. Liefern diese „unterschiedlichen“ Programme im Rahmen einer gewissen Fehlergrenze dieselben Ergebnisse, können wir annehmen, daß die erzielten Ergebnisse zuverlässig sind.

In Abschnitt 4 und 5 haben wir gezeigt, daß sich die frequenzabhängige Version des Strahlungstransportprogramms im wesentlichen auf das mehrfache Lösen des monochromatischen Problems reduziert. Somit ist die Verifizierung des monochromatischen Codes von entscheidender Bedeutung für die Richtigkeit der erweiterten Version. Dies geschieht in den ersten drei Testbeispielen, wobei zunächst qualitativ die Güte der SDFEM mittels eines sogenannten „searchlight beam test“ (vgl. Kunasz & Auer 1988) durchgeführt wird. Die quantitative Überprüfung erfolgt durch einen Lösungsvergleich von drei unabhängigen Codes für eine plan-parallele Schicht. Als letzten Test für den monochromatischen Code dient ein Vergleich mit einem analytisch ermittelten Strahlungsfluß aus einer stark streuenden, sphärisch symmetrischen Konfiguration. Zusätzlich wird dabei noch der Einfluß der Winkeldiskretisierung der Einheitssphäre S^2 auf die Lösung untersucht. Die Validierung des erweiterten (frequenzabhängigen) Codes wird zunächst für den einfachsten Fall der kohärenten, isotropen Streuung in statischen Medien überprüft. Als Referenzlösung kann hierfür ein analytisches Resultat herangezogen werden. Für die wesentlich komplizierteren Fälle der vollständigen Wiederverteilung und die Berücksichtigung unterschiedlicher Geschwindigkeitsfelder existieren keine analytischen Lösungen, so daß wiederum ein Vergleich mit einem unabhängigen 3D Code präsentiert wird.

6.1 Verifizierung des monochromatischen Codes

Für die folgenden drei Testbeispiele verwenden wir die SDFEM der monochromatischen Strahlungstransportgleichung (56), wie wir sie in Abschnitt 3 beschrieben haben. Der einzige Unterschied besteht in der Definition des Quellterms

$$f(x) = \kappa(x)B(T(x)) + \varepsilon(x), \quad (179)$$

welcher neben einer thermischen Quelle, die von der Temperatur $T(x)$ abhängt, eine zusätzliche Emissivität $\varepsilon(x)$ einer Punktquelle oder eines ausgedehnten Quellgebiets enthält.

6.1.1 Test I: Searchlight Beam Test

Beim „Searchlight Beam Test“ handelt es sich um einen Standardtest zur Überprüfung der Güte der Diskretisierung des Transportproblems (vgl. Kunasz & Auer 1988). Dabei wird ein schmaler Lichtstrahl unter einem bestimmten Winkel zu den Gitterlinien in das Rechengebiet gesandt. Das Medium soll ein Vakuum darstellen, d.h. der Absorptionskoeffizient $\kappa = 0$, der Streukoeffizient $\sigma = 0$ und der Quellterm $f = 0$. Der Lichtstrahl sollte das Vakuum durchlaufen ohne sich künstlich – verursacht durch einen Diskretisierungsfehler oder eine zu geringe Auflösung – zu verbreitern. Diesen Effekt der künstlichen Verbreiterung bezeichnen wir im folgenden als „Auffächerung“ des Lichtstrahls. Um den Test durchzuführen, starten wir auf

Stufe	\mathcal{I}_{\min}	n_{low} in %	\mathcal{I}_{\max}	n_{high} in %	N	N_{uni}
0	-0.0457	35	1.000	0.37	289	289
1	-0.0805	39	1.076	0.32	631	1 089
2	-0.0833	38	1.104	1.7	1 395	4 225
3	-0.0963	34	1.109	7.6	2 995	16 641
4	-0.1018	36	1.171	14	6 312	66 049
5	-0.0833	36	1.106	24	13 084	263 169
6	-0.0833	34	1.080	24	28 005	1 050 625
7	-0.0929	32	1.095	25	57 606	4 198 401
8	-0.0934	29	1.093	23	118 179	16 785 409

Tabelle 2: *Test I: Für jede Verfeinerungsstufe sind die minimale Intensität \mathcal{I}_{\min} , die relative Anzahl der Knoten mit negativem Intensitätswert n_{low} , die maximale Intensität \mathcal{I}_{\max} , die relative Anzahl der Knoten mit Intensitätswerten größer als eins n_{high} , die Gesamtzahl der Knoten N und die Anzahl der benötigten Knoten N_{uni} eines global verfeinerten Gitters, das dieselbe Auflösung lieferte*

einem zweidimensionalen, global vorverfeinerten Gitter mit 16^2 Zellen, welches die Zerlegung eines Einheitsquadrats von $x \in [-1, 1]$ und $y \in [-1, 1]$ darstellt. Somit hat das Gitter zunächst 17^2 Knoten und die Auflösung beträgt $\Delta x = \Delta y = 0.125$. Der Lichtstrahl mit der Intensität $\mathcal{I} = 1$ tritt am Rand des Rechengebietes bei $x = -1$ und zwischen $y \in [-0.875, -0.750]$ unter einem Winkel von ungefähr 45° ein. Wir berechnen das Strahlungsfeld für das Ausgangsgitter und 8 weitere adaptiv verfeinerte Gitter, wobei in jedem Verfeinerungsschritt 25% der Zellen mit den

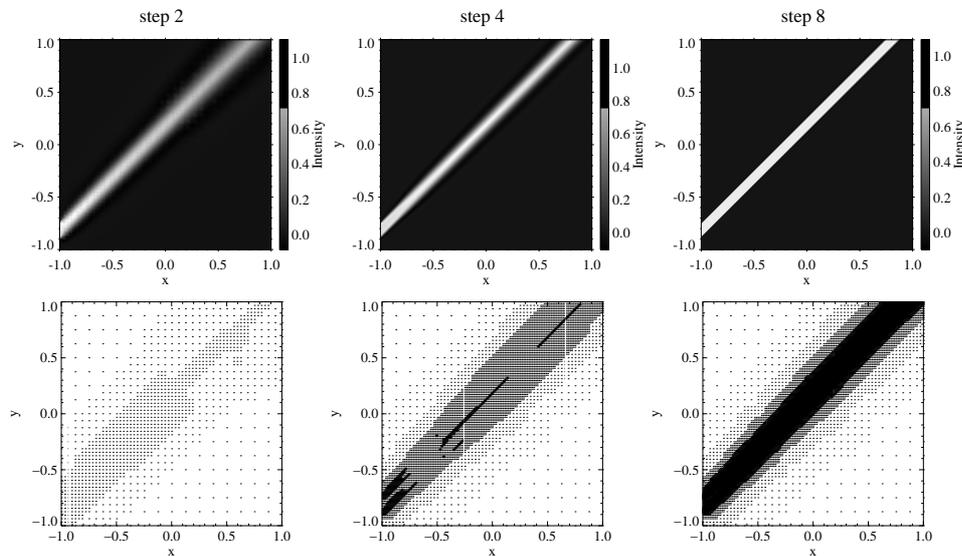


Abbildung 6: *Test I: Intensitätsverteilung (oben) und Gitterstruktur (unten) für die Verfeinerungsstufen 2, 4 und 8 des „searchlight beam test“. Jeder Punkt markiert die Lage eines Knotens. Der Lichtstrahl tritt an der Stelle $x = -1.0$ zwischen $y \in [-0.875, -0.750]$ in das Rechengebiet ein. Man sieht wie der Verfeinerungsindikator für eine gute Auflösung im Bereich des Strahlrandes sorgt, so daß bereits nach wenigen Verfeinerungsschritten der Lichtstrahl beim Durchgang durch das Vakuum fast keine künstliche Verbreiterung mehr aufweist.*

größten L^2 -Indikatoren η_{L^2} (siehe Gl. (75)) in 4 gleich große Quadrate unterteilt werden.

In Abb. 6 ist die Intensitätsverteilung und die Gitterstruktur der Verfeinerungsschritte 2, 4 und 8 dargestellt. Die minimale Zellgröße des Gitters der Verfeinerungsstufe 2 entspricht der Zellgröße eines global verfeinerten Gitters mit 64^2 Zellen. Die „Auffächerung“ des Strahls bei dieser Stufe ist qualitativ vergleichbar mit den Ergebnissen von Kunasz & Auer (1988), die die Methode der kurzen Charakteristiken verwendet haben. Die Stufe 8 zeigt die Intensitätsverteilung eines „scharfen“ Lichtstrahls mit vernachlässigbarer „Auffächerung“. Dieses Ergebnis wird mit etwa 10^5 Knotenpunkten erzielt, was ungefähr einem hundertstel der Knoten für ein global verfeinertes Gitter mit gleicher Auflösung entspricht. Weiter fällt in Abb. 6 auf, daß in den ersten Verfeinerungsschritten zunächst im Bereich des gesamten Strahls, später hauptsächlich an den Rändern verfeinert wird. Der Grund für dieses Verhalten des Fehlerindikator erkennt man sehr leicht anhand der Abb. 7, welche die Intensitätsverteilung auf einem Schnitt bei $y = -0.25$ für verschiedene adapti-

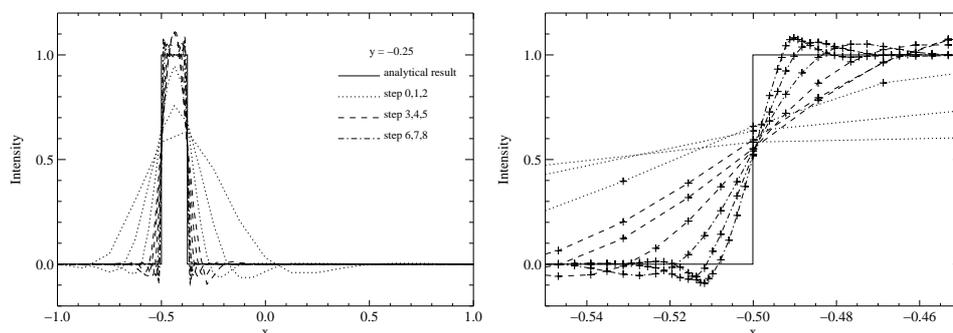


Abbildung 7: Test I: Die Intensitätsverteilung auf einem Schnitt durch das Rechengebiet bei $y = -0.25$ für verschieden adaptive Schritte. Das rechte Bild vergrößert den Bereich $x \in [-0.55, -0.45]$, wobei die Kreuze die Lage der Knoten markieren.

ve Schritte zeigt. Die rechte Seite dieser Abbildung vergrößert die linke Flanke des Lichtstrahls aus dem linken Bild und die darin enthaltenen Kreuze markieren die Knotenpunkte. Bis zur Verfeinerungsstufe 3 muss zunächst der gesamte Strahl aufgelöst werden, d.h. die Intensitätsverteilung nimmt in etwa die rechteckige Gestalt der analytischen Lösung an. Schließlich wird in den folgenden Stufen der äußerst steile Abfall auf $\mathcal{I} = 0$ in den Flanken des Strahls immer besser aufgelöst. Innerhalb des Strahls, weit genug von den steilen Flanken entfernt, müssen nun nur noch wenige Zellen verfeinert werden, da der Wert $\mathcal{I} = 1$ bereits sehr gut approximiert wird. Da die SDFEM eine Diskretisierung zweiter Ordnung ist, kommt es im Bereich steiler Gradienten der Intensität zu sogenannten Über- und Unterschwingern (siehe auch Abb. 7). D.h., wir erhalten für Test I negative Intensitäten und Werte, die größer als 1 sind. Die Tabelle 2 liefert einen quantitativen Überblick über dieses Verhalten. Für alle Verfeinerungsstufen weichen die Über- und Unterschwinger (\mathcal{I}_{\max} und \mathcal{I}_{\min}) um etwa 10% vom analytischen Wert ab. Weiterhin sieht man, daß mit zunehmender Auflösung der Anteil der Knotenpunkte mit negativen Intensitäten n_{low} von 40% auf 30% leicht abnimmt, wohingegen der Anteil der Knoten mit Werten größer als eins n_{high} kontinuierlich bis zu $\sim 25\%$ zunimmt. Die minimalen Intensitäten aus Tabelle 2 weichen nicht so stark von der exakten Lösung ab, wie es bei der parabolischen „Upwind“-Interpolation nach Kunasz & Auer (1988) der Fall ist. Kunasz & Auer (1988) erhalten $\mathcal{I}_{\min} \simeq -0.15$ sowohl für global verfeinerte Gitter als auch für logarithmische Gitter. Die relative Anzahl der Knoten mit negativen Intensitäten $n_{\text{low}} \simeq 20\%$ in Kunasz & Auer (1988) ist kleiner als die entsprechenden Werte aus Tabelle 2. Dies liegt daran, daß der Fehlerindikator und die Verfeinerungsstrategie der SDFEM insbesondere Zellen in Regionen mit steilen Gradienten bzw. Diskontinuitäten verfeinert. Es werden also mit jedem adaptiven

Schritt Zellen in die Gebiete „gepumpt“, in denen die Intensität von eins auf null springt. Aus diesem Grund wäre es sinnvoller, die Gesamtfläche aller Zellen mit negativen Intensitäten zu betrachten. Das rechte Bild der Abb. 7 verdeutlicht zumindest qualitativ, daß diese Fläche mit zunehmender Verfeinerungsstufe kleiner wird. Es sei noch bemerkt, daß negative Intensitäten insbesondere in solchen Fällen zu Problemen führen, in denen auch die mittlere Intensität J negativ wird, was zu einer Verfälschung wichtiger physikalischer Größen wie z.B. Temperatur führt. Es reicht nicht aus, in den Regionen negativer Intensitäten einfach $\mathcal{I} = 0$ als eine untere Grenze zu setzen. Vielmehr müßte eine geeignetere Behandlung dieser Fälle erfolgen, was jedoch eine aufwendige Code-Entwicklung, wie z.B. das Verfolgen von Diskontinuitäten zur Umschaltung von Methoden zweiter auf erste Ordnung, erfordern würde. Wir verweisen auf sogenannte „shock capturing“ Methoden, die in der Literatur ausführlich beschrieben werden (siehe Eriksson & Johnson 1993).

6.1.2 Test II: Strahlungsfeld einer plan-parallelen Schicht

Nachdem in Test I die Güte der Diskretisierung des Transportoperators untersucht wurde, soll in Test II die Streuung mitberücksichtigt werden. Hierfür berechnen wir anhand der SDFEM das Strahlungsfeld einer (näherungsweise) unendlich ausgedehnten plan-parallelen Schicht und vergleichen die Ergebnisse mit denen einer (semi-) analytischen Methode, der sogenannten „separable representation method“ (SR) aus Efimov et al. (2002), und denen eines Finite-Differenzen-Codes (FD) aus Stenholm et al. (1991). Beide Codes werden kurz in Anhang A und Anhang B.1 beschrieben.

Dieser Test modelliert das Strahlungsfeld einer plan-parallelen Schicht der Dicke Δ mit homogener Dichteverteilung. Weiter nehmen wir Nullrandbedingungen auf dem Einströmrand Γ^- und einen konstanten Quellterm $f = \chi(1 - \gamma)$ an. $\chi = \kappa + \sigma$ ist die Opazität und $\gamma = \sigma/\chi$ die Albedo des Mediums. Wir berechnen das Strahlungsfeld für die optischen Tiefen $\tau = \chi\Delta = 0.4, 2, 6, 20$ und die Albedo $\gamma = 0.02, 0.8, 0.98$ und untersuchen die Winkelabhängigkeit der entweichenden spezifischen Intensität $I(x_0, \vartheta)$ an einem Punkt x_0 auf dem Rand der plan-parallelen Schicht.

Für die Berechnungen mit der SDFEM approximieren wir die unendlich ausgedehnte Schicht durch ein dreidimensionales, anisotropes Gitter mit einem Seitenverhältnis von $100 : 100 : 1$. Ausgehend von den 4^3 Zellen des Startgitters führen wir bis zu 7 Verfeinerungsschritte durch und untersuchen die aus der Mitte der Oberfläche austretende Intensität. Dabei verwenden wir den Verfeinerungsindikator η_K aus Gl. (74) für ein Punktfehlerfunktional $\mathcal{M}(e) = e(x_0, \vartheta_0)$ (vgl. Gl. (66)). D.h., das Gitter wird in jeder Verfeinerungsstufe für die an einem Punkt x_0 in eine bestimmte Richtung ϑ_0 austretende spezifische Intensität „optimiert“. Ein Sei-

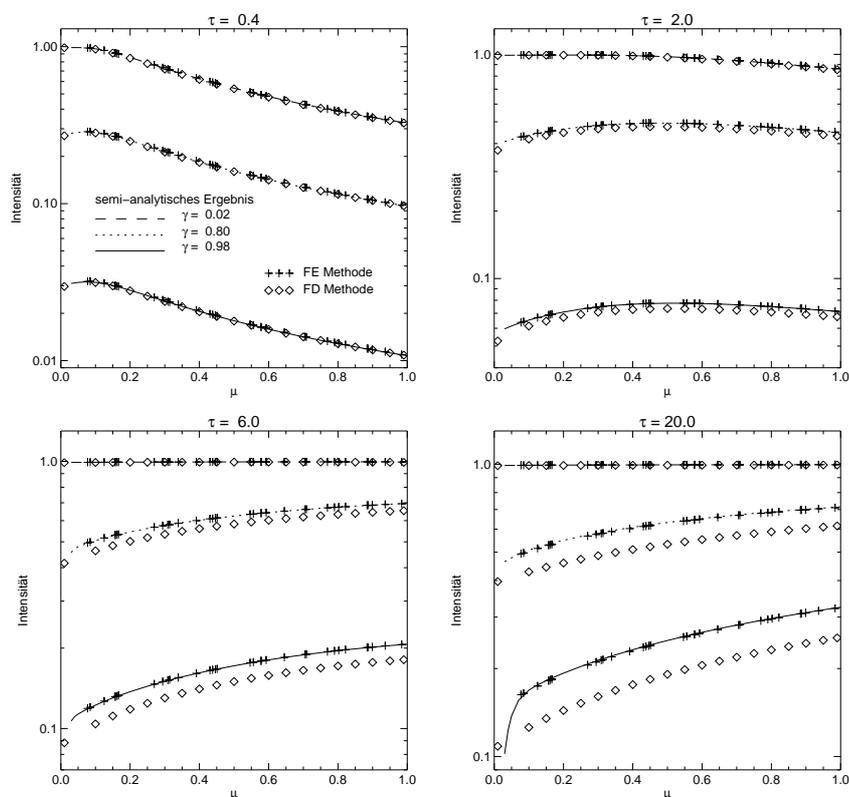


Abbildung 8: *Test II: Winkelverteilung der spezifischen Intensität für verschiedene optische Tiefen τ und Albedo γ .*

tenverhältnis des Ortsgitters von $100 : 100 : 1$ hat zur Folge, daß wir für $\mu \geq 0.2$ verläßliche Lösungen erhalten, wobei μ der Kosinus des Winkels zwischen der Strahlrichtung ϑ_0 und der Oberflächennormalen an der Stelle x_0 ist.

Der FD Code kann ebenfalls dreidimensionale Strahlungsfelder modellieren, wobei wir hier ein globales Gitter mit 32^3 Zellen verwenden. Das Seitenverhältnis des Ortsgitters beträgt wie für die SDFEM $100 : 100 : 1$. Die SOR-Iteration für die mittlere Intensität J wird abgebrochen, wenn die relative Änderung von J kleiner als 10^{-5} ist (vgl. Anhang B.1).

Die SR Methode (siehe Anhang A) liefert die Lösung in Form von Funktionen, die aus unendlichen Summen bestehen. Die Näherung dieser unendlichen Reihen durch eine endliche Summe ist möglich. Eine sehr gute Übereinstimmung zwischen der approximierten und der exakten Summe kann für einen großen Parameterbereich bereits mit $N = 5$ erzielt werden, wobei N die Anzahl der Summanden

der genäherten Funktion bezeichnet. Allerdings führt die geringe Anzahl der Summanden bei kleinen μ zu falschen Ergebnissen, so daß wir für alle Testrechnungen $N = 10$ verwendet haben.

Abb. 8 zeigt die Winkelverteilung der an einem bestimmten Punkt der planparallelen Schicht austretenden spezifischen Intensität für die drei oben vorgestellten Codes. Allgemein läßt sich sagen, daß alle Programme (innerhalb einer Fehler-schranke) das gleiche Ergebnis liefern. Insbesondere die Ergebnisse der SDFEM und der SR Methode stimmen für alle optischen Tiefen und Albedo ausgezeichnet überein. Im optisch dünnen Fall benötigt der FE Code zwei bis drei und für $\tau = 20$ fünf Verfeinerungsschritte, um das korrekte Ergebnis der SR Methode zu reproduzieren. Die Auflösung der Verfeinerungsstufe 5 entspricht derjenigen eines global verfeinerten Gitters mit 128^3 Zellen. Der FD Code ist nicht in der Lage, für große Albedo und mit zunehmender optischer Tiefe die Lösungen der anderen beiden Methoden zu reproduzieren. Unter Verwendung eines feineren Ortsgitters können die Ergebnisse zwar leicht verbessert werden, jedoch liefert selbst ein Gitter mit 128^3 Zellen keine dem FE Code vergleichbare Lösung. Da sichergestellt wurde, daß sowohl die Genauigkeit des Abbruchkriteriums im iterativen Löser des linearen Gleichungssystems (vgl. Anhang B.1) als auch die Auflösung der Ordinatendiskretisierung des FD Verfahrens eine untergeordnete Rolle spielen, müssen die sehr guten Ergebnisse des FE Codes auf die Diskretisierung zweiter Ordnung der Stromliniendiffusionsmethode zurückzuführen sein. Die FD Methode verwendet eine Erste-Ordnung-, „Upwind“-Diskretisierung.

Der allgemeine Verlauf der Intensitätsverteilungen in Abb. 8 wird klar, wenn wir die Änderung der Intensität I entlang der Strecke ds betrachten:

$$\frac{dI}{ds} = -\chi[I - \gamma J - (1 - \gamma)B]. \quad (180)$$

Die Lösung dieser Gleichung für ein vorgegebenes J , eine konstante Planck-Funktion $B = 1$ und Nullrandbedingungen ist

$$I(\mu) = \int_0^{\tau/\mu} (\gamma J + (1 - \gamma)) \exp(-\tau') d\tau', \quad (181)$$

wobei $d\tau' = \chi ds$ und $\mu = \cos \vartheta$. Für $\gamma \sim 0$ wird die Intensitätsverteilung zu

$$I(\mu) = 1 - \exp(-\tau/\mu), \quad (182)$$

was den Abfall der Intensität mit zunehmendem μ im optisch dünnen Fall und die flache Verteilung $I(\mu) = 1$ für größere optische Tiefen erklärt. Für $\gamma \sim 1$ erhalten wir die Intensitätsverteilung

$$I(\mu) = \int_0^{\tau/\mu} J \exp(-\tau') d\tau', \quad (183)$$

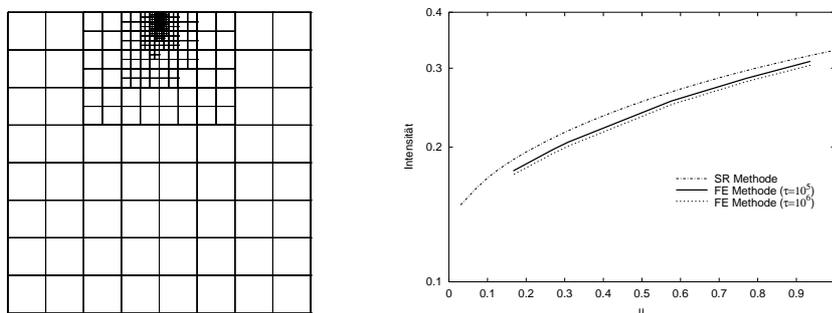


Abbildung 9: Test II: Rechts ist die Winkelverteilung der spezifischen Intensität für große optische Tiefen $\tau = 10^5, 10^6$ und Albedo $\gamma = 0.98$ aufgetragen. Das linke Bild zeigt das entsprechende Gitter auf einem Schnitt durch die Schicht für die 5. Verfeinerungsstufe.

die von der räumlichen Verteilung der mittleren Intensität J innerhalb der Schicht abhängt. Im optisch dünnen Fall liegt eine (beinahe) homogene Verteilung von J vor, so daß $I(\mu)$ für alle Werte der Albedo den gleichen Verlauf aufzeigt. Für hohe optische Tiefen ist J im Zentrum der Schicht größer und fällt zu den Rändern hin ab. Da für diesen Fall nur Photonen bis zu einer optischen Tiefe $\tau' \sim 1$ entlang der Wegstrecke ds zur austretenden Intensität beitragen, hat diese ein Maximum bei $\mu = 1$.

Nachdem sichergestellt wurde, daß der Finite-Elemente-Code korrekte Ergebnisse produziert, bietet sich dieses Testbeispiel an, um zu überprüfen, ob die SDFEM auch für größere optischen Tiefen vernünftige Ergebnisse liefert. Die rechte Seite der Abb. 9 zeigt die Winkelverteilung der an einem bestimmten Punkt austretenden spezifischen Intensität für die SR Methode und die SDFEM, wobei die optische Tiefe $\tau = 10^5, 10^6$ ist. Die Ergebnisse der SDFEM stimmen mit denjenigen der SR Methode, bis auf einen Fehler von 2–3 %, überein. Das Gitter auf der linken Seite von Abb. 9 ist ein Schnitt durch die plan-parallele Schicht und verdeutlicht das Verhalten des Verfeinerungsindikators η_K aus Gl. (74) für ein Punktfunktional $\mathcal{M}(e) = e(x_0, \vartheta_0)$ (vgl. Gl. (66)). Ausgehend von einem Startgitter mit 9^3 Knotenpunkten, ist das Gitter aus Abb. 9 das Produkt der 4. Verfeinerungsstufe, wobei in jedem Schritt 10% der Zellen mit dem größten η_K verfeinert werden. Um die Winkelverteilung der spezifischen Intensität für die optischen Tiefen $\tau = 10^5, 10^6$ (vgl. rechten Seite der Abb. 9) zu berechnen, werden insgesamt 13 bzw. 14 Verfeinerungsschritte durchgeführt. Dies entspricht einer Knotenanzahl von ca. 2.81×10^{14} bzw. 2.25×10^{15} für ein global verfeinertes Gitter. Es sollte erwähnt werden, daß dieses Testbeispiel eines homogenen Mediums mit einer glat-

Tabelle 3: *Test II: Untersuchung der an einem Punkt und in eine bestimmte Richtung $\mu = 0.705$ austretenden spezifischen Intensität für zwei adaptiv verfeinerte Gitter (DUAL,L2) und ein strukturiertes Gitter (GLOBAL). Die optische Tiefe ist $\tau = 20$ und die Albedo beträgt $\gamma = 0.8$.*

FE				FD			
DUAL		L2		GLOBAL		GLOBAL	
N	Wert	N	Wert	N	N	N	Wert
125	0.427	125	0.427	125	0.427	35 937	0.576
501	0.596	579	0.525	729	0.591	274 625	0.616
2 213	0.661	2 474	0.640	4 913	0.642	2 146 689	0.642
8 103	0.672	10 935	0.662	35 937	0.661		
14 953	0.674	86 903	0.669	274 625	0.669		

ten Lösung stark idealisiert ist. Für komplexere Probleme mit beispielsweise stark schwankenden Koeffizienten und inhomogenen Quellgebieten müßten zusätzlich Teilgebiete innerhalb der Schicht sehr fein aufgelöst werden.

In Tabelle 3 werden die spezifischen Intensitäten in einem Randpunkt x_0 und in eine Richtung $\mu = 0.705$ für unterschiedliche Gitter aufgelistet. Die SDFEM verwendet Gitter, die auf der Basis eines lokalen Fehlerindikators η_K sowohl für ein Punktfehlerfunktional $\mathcal{M}(e) = e(x_0, \vartheta_0)$ (DUAL), als auch für einen globalen L^2 -Fehler $\mathcal{M}(e) = \|e(x, \vartheta)\|$ (L2) erzeugt werden. Zum Vergleich mit den Ergebnissen des FD Codes werden auch strukturierte Gitter (GLOBAL) verwendet. Die optische Tiefe der Schicht beträgt $\tau = 20$ und die Albedo ist $\gamma = 0.80$. Wenn wir zunächst nur die Ergebnisse des FE Codes auf den unterschiedlichen Gittern vergleichen, zeigt es sich, daß das L2-Gitter etwa 3.5-mal weniger Knoten benötigt, um die gleichen Ergebnisse zu erzeugen als auf dem strukturierten Gitter. Dieses Verhältnis würde noch viel größer ausfallen, wenn wir realistischere Probleme (steile Gradienten der Koeffizienten oder räumlich kleine Quellgebiete) betrachten würden, die eine feinere Ortsauflösung erfordern würden. Weder auf dem L2-Gitter, noch auf dem GLOBAL-Gitter kann der semi-analytische Wert von 0.675 gut angenähert werden, da der Bedarf den zur Verfügung stehenden Hauptspeicher des verwendeten Parallelrechners übersteigt. Nur auf dem DUAL-Gitter kann die semi-analytische Lösung sehr gut reproduziert werden, obwohl eine viel geringe Anzahl von Knoten verwendet wird. Wie bereits weiter oben erwähnt, ist dieser Effekt auf das dem Problem angepaßten Gitter zurückzuführen. D.h., die lokalen

Tabelle 4: *Test II: Vergleich zwischen dem FE und dem FD Code hinsichtlich ihrer Speicher- und CPU-Anforderungen für eine optisch dünne ($\tau = 0.4$) und eine optische dicke ($\tau = 20$) plan-parallele Schicht (vgl. Abb. 8). Die FE Methode verwendet einen dual gewichteten (DUAL) Fehlerindikator für den Verfeinerungsprozeß. Da der FD Code keine adaptiv verfeinerten Gitter erzeugen kann, wird ein strukturiertes Gitter (GLOBAL) mit 65^3 Knotenpunkten für $\tau = 0.4$ und 129^3 für $\tau = 20$ verwendet.*

$\tau = 0.4$						
	FE					FD
Prozessoren	1	2	4	8	16	1
RAM [MB]	31.9	16.7	9.0	5.2	3.3	13
CPU-Zeit [s]	846.5	371.8	121.4	56.2	48.2	1275.0
$\tau = 20$						
	FE					FD
Prozessoren	1	2	4	8	16	1
RAM [MB]	196	99.6	52.2	28.7	15.1	99
CPU-Zeit [s]	3167.2	1364.2	428.7	207.1	136.1	9878.9

Gewichte $\omega_{dt} = h^2 \|\nabla_x^2 z\|$ aus Gl. (74) erzeugen während des adaptiven Prozesses ein Gitter, das dem Problem einer Punktauswertung angepaßt ist (vgl. linkes Bild in Abb. 9). Beim Vergleich der Ergebnisse der SDFEM mit denen des FE Codes fällt zunächst auf, daß die Lösung auf dem feinsten GLOBAL-Gitter mit 129^3 Knoten etwa vergleichbar ist mit der FE-Lösung auf dem gröberen GLOBAL-Gitter mit 17^3 Knotenpunkten. Dieser Effekt ist auf die höhere Ordnung der FE Stromlinien-diffusionsdiskretisierung zurückzuführen.

Wenn dreidimensionale Strahlungsfelder berechnet werden sollen, ist neben der Genauigkeit (von beispielsweise 1%) ebenso die benötigte CPU-Zeit von entscheidender Bedeutung. Tabelle 3 zeigt, daß neben der Verwendung von Diskretisierungen höherer Ordnung insbesondere moderne numerische Techniken wie Adaptivität und problem-angepaßte Gitter zu erheblichen Laufzeitverkürzungen führen können. Modernere und somit schnellere iterative Löser und eine effiziente Parallelisierung sind zusätzliche Werkzeuge zur Reduzierung von Rechenkapazitäten. In Tabelle 4 vergleichen wir Speicher- und CPU-Bedarf für beide dreidimensionale Codes in den Extremfällen einer optisch dünnen ($\tau = 0.4$) und einer

optisch dicken ($\tau = 20$) Schicht. Die Albedo ist jeweils $\gamma = 0.80$. Der FD Code verwendet ein strukturiertes Gitter (GLOBAL) mit 65^3 Knoten für $\tau = 0.4$ und 129^3 Knoten für den optisch dicken Fall. Die SDFEM startet auf einem strukturierten Gitter mit 5^3 Knoten und erreicht nach mehreren adaptiven Verfeinerungsschritten ein finales Gitter mit 670 Knoten im optisch dünnen und 4263 Knoten im optisch dicken Fall. Das Abbruchkriterium des Verfeinerungsprozesses ist eine gute Approximation der semi-analytischen Lösung. Die Vergleichsrechnungen erfolgten auf dem Pentium III 650 MHz Parallelrechner des Instituts für Wissenschaftliches Rechnen der Universität Heidelberg. Dieser Linux-Cluster besteht aus 16 Einzelknoten mit 1 GB Hauptspeicher pro Prozessor. Wenn nur ein einziger Prozessor verwendet wird, ist der Speicherbedarf des FE Codes ungefähr doppelt so groß wie der des FD Verfahrens. Dies überrascht zunächst, da der FD Code wesentlich mehr Gitterpunkte verwendet. Jedoch speichert der FE Code die Lösungsvektoren für alle Richtungen ab, wohingegen die FD Methode die spezifischen Intensitäten für die einzelnen Richtungen aufaddiert, um diese Summe als mittlere Intensität in der Quellfunktion des folgenden SOR-Schrittes zu verwenden (vgl. Anhang B.1). Die in unserem Algorithmus verwendeten numerischen Techniken führen dazu, daß die Laufzeit des FE Codes für beide Extremfälle der optischen Tiefe schneller ist. Unter Ausnutzung der Ordinatenparallelisierung des FE Algorithmus kann der Speicherbedarf bereits mit zwei Prozessoren dem des FD Codes angepaßt werden. Generell sieht man, daß sich der Speicherbedarf umgekehrt proportional zur Anzahl der Prozessoren verhält. Das gleiche kann man auch beim Vergleich der Laufzeiten beobachten. Dieser Effekt tritt im optisch dicken Fall besonders deutlich hervor, so daß sich die Laufzeit gegenüber der des FD Verfahrens um etwa zwei Größenordnungen reduziert. Der FD Algorithmus benötigt ein feineres Gitter mit mindestens 257^3 Knotenpunkten, um eine ähnlich gute Lösung wie das FE Verfahren zu erzielen (vgl. Tabelle 3), so daß sich ein deutlich größerer Unterschied in den Rechenkapazitäten ergibt. Kurze Rechenzeit für die Lösung eines monochromatischen Strahlungstransportproblems ist ein sehr wichtiges Kriterium, da die Erweiterung auf zeit- bzw. frequenzabhängige Probleme die Lösung der monochromatischen STG für jeden diskreten Zeit- bzw. Frequenzpunkt erfordert. So müssen beispielsweise für die Modellierung eines Linienprofils etwa 40–70 monochromatische Probleme gelöst werden, um eine ausreichende Frequenzauflösung zu gewährleisten. Das gesamte Problem wird sogar noch kritischer, wenn wir vollständige Wiederverteilung oder komplexe Geschwindigkeitsfelder mitberücksichtigen. Für diese Fälle müßte eine Fixpunktiteration im Frequenzintervall durchgeführt werden, was ein mehrfaches Lösen der monochromatischen Strahlungstransportprobleme pro diskrettem Frequenzpunkt zur Folge hat.

6.1.3 Test III: Strahlungstransport in einem streuenden Halo

Der letzte Test des monochromatischen FE-Strahlungstransport-Codes erfolgt für eine komplexere und somit realistischere Konfiguration: Wir untersuchen das Strahlungsfeld in einem streuenden Halo mit stark schwankenden Koeffizienten κ und σ . Ein Halo ist eine räumlich weit ausgedehnte Hülle aus Gas, die eine oder mehrere Quellen umgibt (siehe auch Kapitel 7). Die Konfiguration des Test III besteht aus einem dreidimensionalen Einheitswürfel ($x, y, z \in [-1, 1]$), der eine sphärisch-symmetrische stark streuende Gaswolke (Halo) mit dem Radius $r_c = 0.9$ enthält. Im Zentrum dieses Halos sitzt eine räumlich ausgedehnte, sphärisch-symmetrische Strahlungsquelle mit einem Radius $r_s = 0.125$. Der Quellterm (179) enthält keine thermische Strahlung, sondern nur eine Emissivität, die durch andere physikalische Mechanismen hervorgerufen wird, und die auf das zentrale Quellgebiet beschränkt ist. Wir sind somit nicht an einer Modellierung der Quelle interessiert, sondern an den aus dem streuenden Halo entweichenden Photonen. Der Quellterm reduziert sich auf

$$f(r) = \begin{cases} 1 & \text{for } r \leq r_s \\ 0 & \text{for } r > r_s \end{cases}, \quad (184)$$

wobei $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ ist. Wir verwenden ein Lorentz-Profil für die radiale Verteilung des Extinktionskoeffizienten

$$\chi(r) = \begin{cases} \chi_0 / (1 + 100r^2) & \text{for } r \leq r_c \\ \chi(r_c) / 100 & \text{for } r > r_c \end{cases}, \quad (185)$$

wobei die Konstante χ_0 mittels einer vorgegebenen optischen Tiefe $\tau = \int_0^{r_c} \chi(r) dr$ berechnet wird. Somit erreichen wir, daß $\chi(r)$ innerhalb des Halos von r_s nach r_c um etwa zwei Größenordnungen abnimmt.

Dieses Testbeispiel ist nicht zufällig ausgewählt, sondern stellt ein einfaches Modell für einen sogenannten Ly α Halo dar. Der Begriff des Ly α Halos ist eng verknüpft mit der Beobachtung von hoch-rotverschobenen (Proto-) Galaxien im frühen Universum (siehe auch van Ojik et al. 1996, 1997; Steidel et al. 2000), was uns direkt zur Theorie der Galaxienentstehung führt, die bis heute noch nicht vollständig verstanden ist. Aus diesem Grund ist es sehr wichtig, die wenigen Beobachtungen aus diesem Entwicklungsstadium der Galaxien zu verstehen. Allgemein geht man davon aus, daß sich innerhalb des Halos dieser (Proto-) Galaxien überwiegend neutraler Wasserstoff befindet. Der kalte Wasserstoff wird nun von der zentralen Quelle angestrahlt und die Photonen können mittels Resonanzstreuung aus dem Halo entweichen. Es existieren bereits eine Vielzahl von Beobachtungen von Ly α Halos (siehe van Ojik et al. 1996, 1997; Steidel et al. 2000) und

sie zeigen, daß es sich um diffuse und klumpige Emissionsliniengebiete handelt, deren räumliche Ausdehnung die Größe des Radioemissionsgebiets um mehr als das Zehnfache übertrifft. Die beobachteten Ly α Linienprofile lassen ein komplexes Geschwindigkeitsfeld des Halomaterials vermuten. Die Auswirkungen unterschiedlicher Geschwindigkeitsfelder auf das Linienprofil wollen wir mit Hilfe des frequenzabhängigen FE Codes untersuchen (siehe Abschnitt 6.2 und Kapitel 7).

Im Test III werden die Ergebnisse des FE Codes mit einer analytischen Lösung verglichen, um zu zeigen, daß die SDFEM auch für komplexere Konfigurationen als die im vorherigen Abschnitt beschriebenen geeignet ist. Gleichzeitig sollen die Anforderungen an die Orts- und Winkelauflösung untersucht werden, um möglichst genaue Lösungen zu erzielen. Im gesamten Rechengbiet können wir in guter Näherung $\chi \approx \sigma$ annehmen (der Zwei-Photonen-Zerfall verhindert, daß $\chi = \sigma$ exakt gilt). Für diesen Fall reduziert sich die nullte Momentengleichung der Strahlungstransportgleichung auf

$$\nabla \cdot \mathbf{F} = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 F_r = 4\pi f, \quad (186)$$

wobei F_r die radiale Komponente des Strahlungsflusses

$$\mathbf{F}(x) = \int_{S^2} \vartheta \mathcal{I}(x, \vartheta) d\omega \quad (187)$$

ist. Die Lösung der Gl. (186) lautet

$$F_r(r) = \begin{cases} \frac{4}{3}\pi r & \text{for } r \leq r_s \\ \frac{4}{3}\pi \frac{r_s^3}{r^2} & \text{for } r > r_s \end{cases}, \quad (188)$$

so daß der Fluß aus einer Sphäre $F_r(1.0) = 8.18 \times 10^{-3}$ ist. Der Radius ist $r = 1.0$ gewählt, damit der Einheitswürfel die Sphäre umschließen kann und wir somit die numerischen Resultate mit dem analytischen Ergebnis vergleichen können. Da wir vorausgesetzt haben, daß im Halo alle Photonen gestreut werden ($\chi = \sigma$), ist der entweichende Strahlungsfluß unabhängig von der optischen Tiefe.

Die numerischen Berechnungen starten auf einem strukturierten Gitter mit 16^3 Zellen, so daß das Emissionsgebiet mit $r_s = 0.125$ gerade eben aufgelöst wird. Der Gitterverfeinerungsprozess basiert auf den globalen L^2 -Indikatoren aus Gl. (75). Die numerischen Tests werden für die optischen Tiefen $\tau = 0.1, 1, 10$ und Ordinaten $M = 20, 80, 320$ durchgeführt. Aufgrund der Speicherlimitierung des benutzten Parallelrechners hängt die Anzahl der Verfeinerungsstufen sehr kritisch von der Anzahl der verwendeten Ordinaten M ab. In Tabelle 5 werden die Ergebnisse des über alle Richtungen gemittelten (aus dem Einheitswürfel austretenden) Strahlungsflusses für unterschiedliche Ordinatenzahlen und optische Tiefen angegeben.

Tabelle 5: *Test III: Strahlungsfluß normiert auf 10^{-3} eines streudominierten Halos für unterschiedliche optische Tiefen τ und Ordinatenzahl M sowie für verschiedene Verfeinerungsstufen.*

τ	0.1			1.0			10.0		
M	20	80	320	20	80	320	20	80	320
Stufe 0	9.48	9.48	9.48	9.48	9.48	9.48	9.48	9.48	9.48
Stufe 1	8.04	8.04	8.04	8.04	8.04	8.04	8.04	8.04	8.04
Stufe 2	8.19	8.19	8.04	8.19	8.22	8.04	8.19	8.19	8.19
Stufe 3	8.19	8.19	–	8.19	8.19	–	8.20	8.20	–
Stufe 4	8.20	–	–	8.20	–	–	8.18	8.20	–

Diese Größe ermöglicht einen Vergleich mit dem analytischen Wert $F_r(1.0)$. Auf dem Startgitter wird die Lösung überschätzt, wohingegen der erste Verfeinerungsschritt zu einer zu kleinen Lösung führt. Im Verfeinerungsschritt 2 wird das Emissionsgebiet und der Halo ausreichend aufgelöst, so daß der gemittelte Strahlungsfluß für die Ordinatenzahlen 20 und 80 eine Abweichung $< 1\%$ vom analytischen Wert haben. Dagegen benötigt die Rechnung mit 320 Ordinaten einen weiteren Verfeinerungszyklus, um ähnlich gute Ergebnisse zu erzielen. Diese sehr gute Übereinstimmung mit dem analytischen Wert ist auf die globale Flußerhaltungseigenschaft des FE Verfahrens zurückzuführen. Im Gegensatz dazu ist das FD Verfahren aus dem vorhergehenden Abschnitt nicht flußerhaltend, so daß wir für das gleiche Problem mit einer räumlichen Auflösung vergleichbar mit Stufe 3 einen Strahlungsfluß erhalten, der ungefähr 6% kleiner ist als der analytische Wert.

Weiter kann man aus Tabelle 5 ersehen, daß die Ortsauflösung der Verfeinerungsstufe 2 für die Rechnungen mit optischer Tiefe $\tau \leq 1$ und Ordinatenzahl $M \geq 320$ nicht ausreicht, um eine gute Übereinstimmung mit dem analytischen Wert zu erzielen. Für diese Fälle scheint der Verfeinerungsprozeß überwiegend Zellen aus der äußeren Haloregion zu verfeinern. Da wir jedoch die Größe des Emissionsgebietes kennen, können wir das Startgitter in der Weise vorverfeinern, daß die Quelle ausreichend aufgelöst wird. Somit würden 2 Verfeinerungsstufen auch für diese Fälle genügen.

Der sphärisch symmetrische Test III verdeutlicht, daß nur 20 Ordinaten ausreichen, um ausgezeichnete Resultate für gemittelte Größen wie den Strahlungsfluß, der aus dem gesamten Rechengebiet austritt, zu erzielen (vgl. Tabelle 5). Für die Berechnung örtlich aufgelöster Größen, wie z.B. den Strahlungsfluß aus einem kleinen Teil des Rechengebiets oder die mittlere Intensität im gesamten Einheitswürfel, müßte eine feinere Winkelauflösung verwendet werden. Ersteres

könnte man mit (örtlich) hoch aufgelösten spektroskopischen Beobachtungen vergleichen und letzteres zur Bestimmung einer Temperaturverteilung verwenden. In

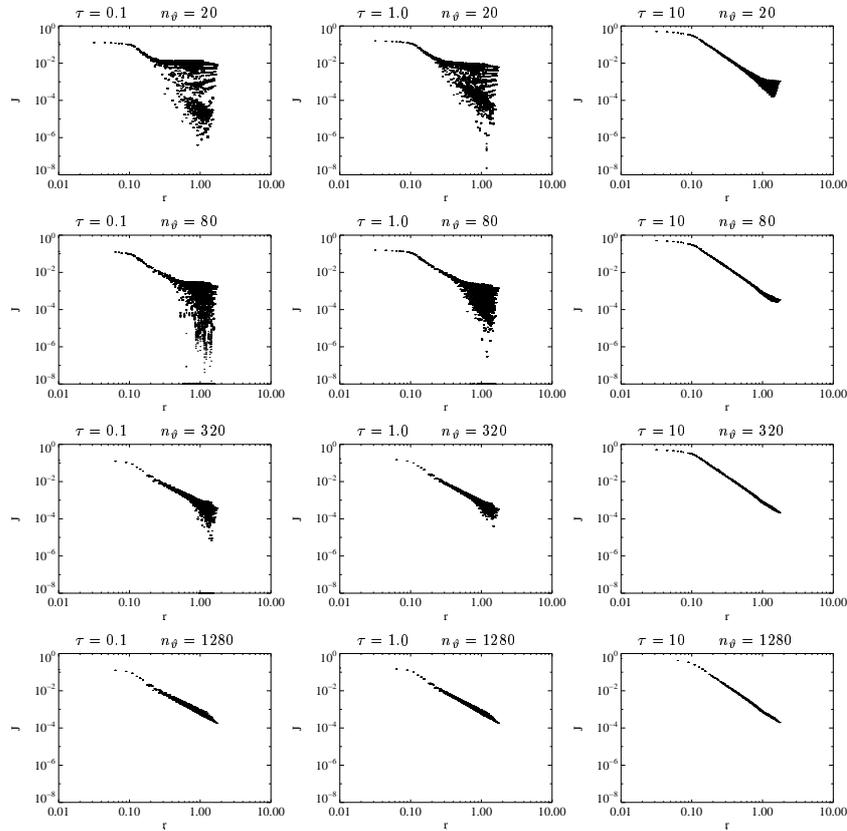


Abbildung 10: Test III: Abhängigkeit der mittleren Intensität J vom Abstand r vom Zentrum für unterschiedliche optische Tiefen τ und Ordinatenzahl M . Für eine Interpretation der Verläufe siehe Text.

Abb. 10 ist der Verlauf der mittleren Intensität $J(r) = 1/(4\pi) \int_{\mathcal{S}^2} I(r, \vartheta) d\omega$ für alle Knotenpunkte der 2. Verfeinerungsstufe aufgetragen. Generell erwarten wir für eine ausreichende Winkelauflösung eine einzige Linie. Tatsächlich beobachten wir jedoch in vielen Fällen eine erhebliche Abweichung von dieser Idealgestalt. Für kleine optische Tiefen τ und eine zu geringe Ordinatenzahl schwankt die mittlere Intensität an verschiedenen Ortspunkten, jedoch mit gleicher Entfernung r zum Zentrum, um mehr als 3 Größenordnungen. Diese Streuung ist charakteristisch für die diskrete Ordinatenmethode mit ungenügender Winkelauflösung und nimmt mit zunehmender Ordinatenzahl ab. Wie bei steigender Winkelauflösung, ist bei zu-

nehmender optischer Tiefe zu beobachten, daß die Abweichungen der mittleren Intensität $J(r)$ von der Linienverteilung kleiner werden. Dies erklärt sich damit, daß mit der wachsenden optischen Tiefe die Streuwahrscheinlichkeit in den einzelnen Ortspunkten ebenfalls zunimmt. Dieser Effekt korrigiert die „Ausreißer“, die auf die schlechte Ordinatendiskretisierung zurückzuführen sind.

6.2 Validierung des frequenzabhängigen Codes

Aufbauend auf dem Test III einer streuenden Halokonfiguration des monochromatischen Strahlungstransportprogramms werden wir nun den erweiterten (frequenzabhängigen) Code testen. Falls keine makroskopischen Geschwindigkeitsfelder existieren – wir sprechen von einem statischen Halo – und falls wir zusätzlich kohärente, isotrope Streuung annehmen, können wir den frequenzabhängigen Code ähnlich wie beim Test III mittels der analytischen Lösung aus Gl. (188) überprüfen. Berücksichtigen wir jedoch vollständige Wiederverteilung oder beliebige Geschwindigkeitsfelder, so müssen wir die erweiterte SDFEM mit den Ergebnisse einer Linienversion des FD Codes (siehe Anhang B.2) vergleichen, um die beiden dreidimensionalen Codes zu testen.

Wir berechnen das frequenzabhängige Strahlungsfeld in bewegten Medien, indem wir die stationäre, nicht-relativistische STG im mitbewegten System

$$(\mathcal{T} + \mathcal{D} + \mathcal{S} + \chi(x, \mathbf{v}))\mathcal{I}(x, \vartheta, \mathbf{v}) = f(x, \mathbf{v}) \quad (189)$$

lösen. Der Transportoperator \mathcal{T} , der Doppler-Operator \mathcal{D} und der Streuoperator \mathcal{S} werden definiert durch

$$\begin{aligned} \mathcal{T}\mathcal{I}(x, \vartheta, \mathbf{v}) &= \vartheta \cdot \nabla_x \mathcal{I}(x, \vartheta, \mathbf{v}), \\ \mathcal{D}\mathcal{I}(x, \vartheta, \mathbf{v}) &= w(x, \vartheta) \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \mathcal{I}(x, \vartheta, \mathbf{v}), \\ \mathcal{S}\mathcal{I}(x, \vartheta, \mathbf{v}) &= -\frac{\sigma(x)}{2\pi(d-1)} \int_0^\infty \int_{S^2} R(\vartheta', \mathbf{v}'; \vartheta, \mathbf{v}) \mathcal{I}(x, \vartheta', \mathbf{v}') d\vartheta' d\mathbf{v}'. \end{aligned}$$

Die Opazität $\chi(x, \mathbf{v}) = \kappa(x, \mathbf{v}) + \sigma(x, \mathbf{v})$ ist die Summe des Absorptionskoeffizienten $\kappa(x, \mathbf{v}) = \kappa(x)\varphi(\mathbf{v})$ und des Streukoeffizienten $\sigma(x, \mathbf{v}) = \sigma(x)\varphi(\mathbf{v})$. Die Frequenzabhängigkeit dieser Koeffizienten ist durch die normierte Profildfunktion φ gegeben. In den folgenden Anwendungen nehmen wir ein Doppler-Profil

$$\varphi(\mathbf{v}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\Delta v_D} \exp \left[-\left(\frac{\mathbf{v} - \mathbf{v}_0}{\Delta v_D} \right)^2 \right] \quad (190)$$

an, wobei ν_0 die Frequenz des Linienzentrums bezeichnet. Die Doppler-Breite $\Delta\nu_D$ und die Doppler-Geschwindigkeit ν_D werden sowohl durch eine thermische Geschwindigkeit ν_{therm} als auch durch eine turbulente Geschwindigkeit ν_{turb} bestimmt. Somit ergibt sich für die Doppler-Breite

$$\Delta\nu_D = \frac{\nu_0}{c}\nu_D = \frac{\nu_0}{c}\sqrt{\nu_{\text{therm}}^2 + \nu_{\text{turb}}^2}, \quad (191)$$

wobei c die Lichtgeschwindigkeit ist. Für alle folgenden Anwendungen in dieser Arbeit nehmen wir $\nu_D = 10^{-3}c \sim 300 \text{ km s}^{-1}$ an (siehe auch Tabelle 6). Der Quellterm ist definiert durch

$$f(x, \nu) = \kappa(x, \nu)B(T(x), \nu) + \varepsilon(x, \nu), \quad (192)$$

wobei eine ausgedehnte thermische und/oder eine nicht-thermische Photonenquelle berücksichtigt werden kann. Im Falle einer thermischen Strahlungsquelle wird f mit Hilfe einer Temperaturverteilung $T(x)$ über die Planck-Funktion $B(T(x), \nu)$ berechnet. Der Doppler-Operator \mathcal{D} beschreibt die makroskopische Doppler-Verschiebung der Photonen und wurde ausführlich in Kapitel 5 diskutiert. Der Streuoperator hängt von der allgemeinen Wiederverteilungsfunktion $R(\vartheta', \nu'; \vartheta, \nu)$ ab, welche die Wahrscheinlichkeit angibt, daß bei einem Streuprozeß ein Photon aus Richtung ϑ' mit Frequenz ν' in Richtung ϑ mit Frequenz ν gestreut wird. Die unterschiedlichen Streumodelle werden ausführlich in Kapitel 4 diskutiert. In den folgenden Anwendungsbeispielen werden wir zwei Grenzfälle der Streutheorie berücksichtigen: strikte Kohärenz und die vollständige Wiederverteilung im mitbewegten System. Im ersten Grenzfall vereinfacht sich der Streuoperator \mathcal{S} zu

$$\mathcal{S}^{\text{koh}}\mathcal{I}(x, \vartheta, \nu) = -\frac{\sigma(x, \nu)}{2\pi(d-1)} \int_{S^{d-1}} \mathcal{I}(x, \vartheta', \nu) d\vartheta'. \quad (193)$$

Für den Fall der vollständigen Wiederverteilung werden Photonen durch Stöße zufällig über das Linienprofil wiederverteilt. Somit vereinfacht sich der Streuoperator \mathcal{S} für diesen zweiten Grenzfall zu

$$\mathcal{S}^{\text{vwv}}\mathcal{I}(x, \vartheta, \nu) = -\frac{\sigma(x, \nu)}{2\pi(d-1)} \int_0^\infty \varphi(\nu') \int_{S^{d-1}} \mathcal{I}(x, \vartheta', \nu') d\vartheta' d\nu'. \quad (194)$$

Es sollte beachtet werden, daß in beiden Grenzfällen die Annahme der isotropen Streuung eingegangen ist, der FE-Code jedoch auch anisotrope Streuphasenfunktionen modellieren kann.

Tabelle 6: Parameter, die für alle frequenzabhängigen Testbeispiele gelten.

r_h	r_c	α	r_s	ν_D	ν_0	r_0	R_0
1.0	0.2	10^3	0.2	$10^{-3}c$	$-10^{-3}c$	0.2	1.0

6.2.1 Modellbeschreibung

Für die Testrechnungen zur Überprüfung der erweiterten SDFEM beschränken wir uns auf sphärisch symmetrische Verteilungen des Ortsanteils der Opazität $\chi(x) = \kappa(x) + \sigma(x)$. Da wir im nächsten Kapitel oblate Konfigurationen untersuchen wollen, führen wir jedoch eine allgemeinere Form der Opazitätsverteilung ein:

$$\chi(x) = \begin{cases} \chi_0/(1 + \alpha r_c^2) & \text{for } r \leq r_c \\ \chi_0/(1 + \alpha r^2) & \text{for } r_c < r \leq r_h \\ \chi_0/(1 + \alpha r_h^2)/10^3 & \text{for } r > r_h \end{cases}, \quad (195)$$

wobei $r^2 = (x/a)^2 + (y/b)^2 + (z/c)^2$ ist. Somit ist für den sphärisch symmetrischen Fall $a = b = c = 1$. Weiterhin sollte beachtet werden, daß der Extinktionskoeffizient innerhalb des Radius der Quelle r_c und außerhalb des Haloradius r_h konstant ist. Falls nicht anders angegeben, wird χ_0 mittels der optischen Tiefe im Linienzentrum

$$\tau = \int_{r_c}^{r_h} \chi(r) \varphi(\nu_0) \vartheta_{\text{gr}} dx \quad (196)$$

entlang der Richtung ϑ_{gr} mit der größten optischen Tiefe zwischen r_c und r_h bestimmt. Insgesamt wird die räumliche Verteilung der Opazität χ durch sechs Parameter beschrieben: die Längen der Halbachsen a , b und c , die Radien r_c und r_h und den Parameter α und die optische Tiefe τ . Für r_c , r_h und α verwenden wir die Werte aus Tabelle 6.

Da wir in erster Linie den Strahlungstransport in Resonanzlinien wie z.B. Ly α untersuchen wollen, nehmen wir $\sigma(x) = \chi(x)$ und $\kappa(x) = 0$ für alle folgenden Linienprofilberechnungen an. Diese Annahme ermöglicht es uns, nicht-thermische Quellfunktionen zu verwenden (vgl. Gl. 192). Allgemein betrachten wir eine oder mehrere räumlich begrenzte Quellregionen mit Radius r_s , die an der Stelle x_i positioniert sind:

$$f(x, \nu) = \begin{cases} \varphi(\nu) & \text{for } |x - x_i| \leq r_s \\ 0 & \text{for } |x - x_i| > r_s \end{cases}. \quad (197)$$

Die Funktion $\varphi(\mathbf{v})$ ist das in Gl. (190) definierte Doppler-Profil. Auch hier gilt wie bei der Definition der räumlichen Opazitätsverteilung, daß die Quellfunktion möglichst allgemein gehalten wird, um komplexere Anwendungsbeispiele im folgenden Kapitel zu beschreiben. Für das sphärisch symmetrische Beispiel betrachten wir eine einzelne Quellregion, die im Zentrum des Rechengebietes bei $x = 0$ positioniert ist.

6.2.2 Makroskopische Geschwindigkeitsfelder

Mit Hilfe des FE Codes sind wir in der Lage beliebige Geschwindigkeitsfelder zu berücksichtigen, beschränken uns jedoch in den folgenden Anwendungsbeispielen auf zwei einfache Geschwindigkeitsfelder und berechnen die Funktion $w(x, \vartheta)$ aus dem Doppler-Term (151) analytisch. Bisher hatten wir den Ortsvektor mit x bezeichnet, ohne diesen Vektor explizit anzugeben. Um Verwechslungen auszuschließen, bezeichnen wir in diesem Abschnitt den Ortsvektor mit $\mathbf{x} = (x, y, z)$.

Das erste Geschwindigkeitsfeld beschreibt den sphärisch symmetrischen Kollaps ($v_0 < 0$) oder die sphärisch symmetrische Expansion ($v_0 > 0$) und hat somit die allgemeine Gestalt

$$v_{io} = v_0 \left(\frac{r_0}{r} \right)^l \frac{\mathbf{x}}{r}, \quad (198)$$

wobei $r = |\mathbf{x}| = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ und v_0 die Geschwindigkeit beim Radius r_0 ist. Die von diesem Geschwindigkeitsfeld abgeleitete w -Funktion lautet

$$w(\mathbf{x}, \vartheta) = \frac{v_0}{c} \left(\frac{r_0}{r} \right)^l \left(\frac{1}{r} - (l+1) \frac{|\vartheta \cdot \mathbf{x}|^2}{r^3} \right). \quad (199)$$

Als zweites Geschwindigkeitsfeld wählen wir eine Rotationsbewegung um die z -Achse

$$v_{rot} = v_0 \left(\frac{R_0}{R} \right)^l R^{-1} \begin{pmatrix} y \\ -x \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (200)$$

wobei $R^2 = x^2 + y^2$ der Abstand von der Rotationsachse ist und v_0 die Geschwindigkeit beim Abstand R_0 bezeichnet. Mit $\vartheta = (\vartheta_x, \vartheta_y, \vartheta_z)$ erhalten wir die w -Funktion für die Rotation

$$w = \frac{v_0}{c} \left(\frac{R_0}{R} \right)^l (l+1) \left(\frac{xy(\vartheta_y^2 - \vartheta_x^2) + \vartheta_x \vartheta_y (x^2 - y^2)}{R^3} \right). \quad (201)$$

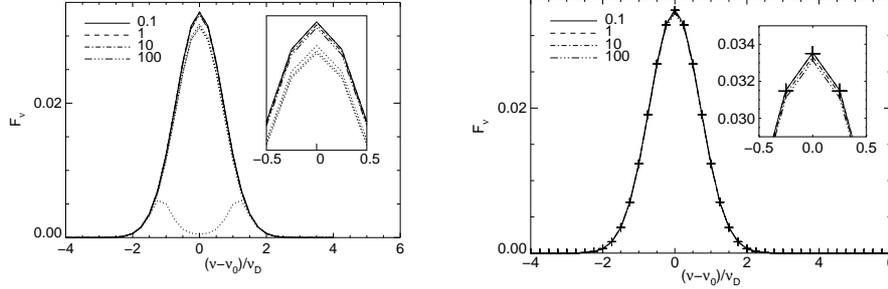


Abbildung 11: FE Lösung eines Ly α Linienprofils eines statischen Halos mit kohärenter Streuung für unterschiedliche optische Tiefen τ (siehe Legende). Die gepunkteten Kurven im linken Bild stellen die Ergebnisse des FD Codes dar. Im rechten Bild markieren die Kreuze die analytischen Lösungen.

Der Parameter l definiert in beiden Fällen die Art des Geschwindigkeitsfelds, so daß v_{i0} z.B. für $l = 0.5$ den freien Fall einer kollabierenden Gaswolke und für $l = -1$ eine typische Supernova-Expansion simuliert. Für die Rotation v_{rot} erhalten wir für $l = 0.5$ den Spezialfall eines Keplerschen Geschwindigkeitsfelds mit der w -Funktion

$$w = \frac{v_0}{c} \frac{3}{2} R_0^{0.5} R^{-3.5} [xy(\vartheta_y^2 - \vartheta_x^2) + \vartheta_x \vartheta_y (x^2 - y^2)] \quad (202)$$

(siehe auch Baschek & Wehrse 1999). Die Werte für v_0 , r_0 und R_0 in allen folgenden Anwendungsbeispielen finden sich in Tabelle 6.

6.2.3 Einfaches Testbeispiel

Wir beginnen die Untersuchung frequenzabhängiger Strahlungsfelder mit dem einfachen Testbeispiel einer sphärisch symmetrischen Opazitätsverteilung (195) ($a = b = c = 1$) und einer einzelnen Quellregion um das Zentrum des Rechengebiets bei $x = 0$. Für die Diskretisierung des Frequenzintervalls in Doppler-Einheiten $(v - v_0)/\Delta v_D \in [-4, 6]$ verwenden wir 41 gleichverteilte Stützstellen und 80 Ordinaten. $v_0 = 2.466 \cdot 10^{15}$ Hz ist die Frequenz des Ly α Übergangs im Wasserstoffatom. Das Startgitter hat 4^3 Zellen und eine vorverfeinerte Quellregion. Je nach optischer Tiefe werden 3–5 adaptive Verfeinerungsschritte auf der Basis eines maximalen L^2 -Fehlerindikators (75) durchgeführt. Ein Ortsgitter der Verfeinerungsstufe 5 enthält ungefähr $1.5 \cdot 10^5$ Knotenpunkte, wobei die Auflösung dem eines strukturierten Gitters mit 257^3 Knotenpunkten entspricht. Das einfachste frequenzabhängige Testbeispiel ist ein statisches Modell mit kohärenter, isotroper Streuung.

Abb. 11 zeigt die Ly α Linienprofile eines solchen Modells für unterschiedliche optische Tiefen $\tau = 0.1, 1, 10, 100$. Die Legende charakterisiert die Lösungen der SDFEM für die unterschiedlichen optischen Tiefen, wohingegen die gepunkteten Kurven im linken Bild die Ergebnisse der FD Methode (siehe Anhang B.2) markieren. Das Doppler-Profil wird in allen Testrechnungen reproduziert, bis auf den Fall $\tau = 100$ für die FD Methode. In den vorhergehenden Abschnitten haben wir gezeigt, daß die monochromatische FD Methode für große optische Tiefen ($\tau > 10$) nur sehr langsam bzw. nicht mehr konvergiert. Da der erweiterte frequenzabhängige FD Code das monochromatische FD Problem für jeden diskreten Frequenzpunkt löst, überrascht es nicht, daß dort die gleichen Schwierigkeiten auftreten. Wenn wir das Linienprofil mit Hilfe der analytische Lösung (188) reproduzieren, erkennt man, daß die Abweichungen der numerischen Ergebnisse der SDFEM nur sehr klein sind. Insbesondere für die optischen Tiefen $\tau = 0.1, 1$ sind die Kurven praktisch identisch. Selbst für $\tau = 100$ bleibt der Fluß im Linienzentrum besser als 99% erhalten. Ganz im Gegensatz zu den Ergebnissen des erweiterten FD Codes, welche im und um das Linienzentrum Abweichungen – auch bei kleiner optischer Tiefe – von ca. 10% aufweisen. Im Fall großer optischer Tiefen ($\tau = 100$) weichen die Ergebnisse deutlich von der analytischen Lösung ab.

Als nächstes betrachten wir einen kollabierenden Halo mit kohärenter Streuung, wobei wir an Hand dieser Konfiguration die Effekte der Frequenzkopplung durch den Doppler-Term verdeutlichen wollen. In Abb. 12 sind berechnete Linienprofile dargestellt, wobei unterschiedliche Exponenten $l = 0, 0.5, 2$ des Geschwindigkeitsfelds v_{i0} aus Gl. (198) berücksichtigt wurden. Für kleine optische Tiefen $\tau = 1$ sind die Linienprofile leicht rotverschoben, d.h. zu kleineren Doppler-Einheiten bzw. zu kleineren Frequenzen hin verschoben. Da τ klein ist, durchlaufen die meisten Photonen den Halo direkt, ohne gestreut zu werden. Die Rotverschiebung der beobachteten Linienprofile ist schließlich auf die Bewegung des Halos weg vom Beobachter (aufgrund des Kollaps) zurückzuführen. Da der Doppler-Term proportional zum Gradienten des Geschwindigkeitsfelds ist (siehe Kapitel 5), ist die Rotverschiebung um so ausgeprägter, je größer der Exponent l ist. Für $\tau = 10$ (siehe Abb. 12) sind die Linienprofile jedoch blauverschoben, d.h. zu größeren Doppler-Einheiten bzw. zu höheren Frequenzen hin verschoben. Da die optische Tiefe bereits relativ groß ist, entweichen die meisten Photonen nicht direkt aus dem Halo, sondern werden gestreut. Somit beobachten wir nur wenige Photonen, die direkt von der Quelle stammen, sondern vielmehr Photonen, die vom einfallenden Halo hinter der Quelle (vom Beobachter aus gesehen) zurück gestreut werden. Diese gestreuten Photonen können nun direkt aus dem Halo entweichen, da durch die Blauverschiebung der Halo plötzlich optisch dünn geworden ist. Für den Fall $l = 2$ ist die Blauverschiebung des beobachteten Linienprofils weniger ausgeprägt, da der große Gradient des Geschwindigkeitsfelds sehr nahe an der Quellregion

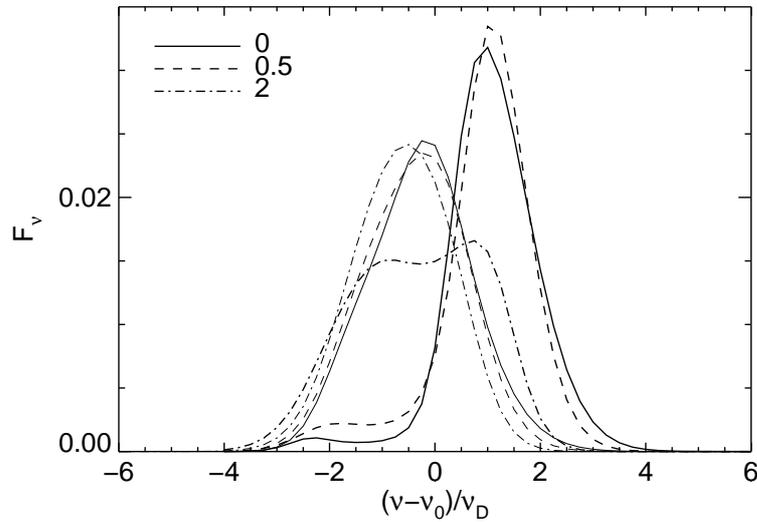


Abbildung 12: FE Lösungen von Ly α Linienprofilen kollabierender Halos mit kohärenter Streuung für eine optisch dünne (dünne Linien) und eine optische dicke (dicke Linien) Konfiguration. Die Legende markiert die unterschiedlichen Exponenten l des verwendeten Geschwindigkeitsfelds (siehe dazu auch Text).

im Innern des Halos bereits eine beträchtlich Rotverschiebung der Photonen verursacht. Diesen Photonen erscheint der Halo nun ebenfalls optisch dünn und sie können direkt zum Beobachter entweichen. Der Bereich, in dem diese Rotverschiebung stattfinden kann, ist sehr klein. Weiter außen, wenn die gesamte optische Tiefe wieder zunimmt, werden die Photonen durch den oben beschriebenen Streuprozess blauverschoben.

Vollständige Wiederverteilung bewirkt eine viel stärkere Frequenzkopplung als die Kopplung aufgrund des Doppler-Terms (siehe Kapitel 4). Das ist auch deutlich an den Linienprofilen in Abb. 13 zu erkennen. Das linke Bild zeigt Ly α Linienprofile eines statischen Halos für unterschiedlich $\tau = 0.1, 1, 10, 100$. Die gepunkteten Linien markieren die FD Lösungen. Mit zunehmender optischer Tiefe entweichen die Photonen immer mehr aus dem Linienflügel. Bereits für $\tau \geq 1$ erhalten wir ein charakteristisches Profil mit einer Zentralsenkung im Linienzentrum. Gleichzeitig nimmt auch der Abstand zwischen den zwei Maxima und die Tiefe der Zentralsenkung zu. Die Flußerhaltung beträgt im optisch dicken Fall ($\tau = 100$) nur 96%, was jedoch auf die zu geringe Auflösung der Frequenzdiskretisierung zurückzuführen ist.

Das rechte Bild der Abb. 13 zeigt die berechneten Ly α Linienprofile eines kollabierenden Halos mit vollständiger Wiederverteilung, wobei unterschiedliche Ex-

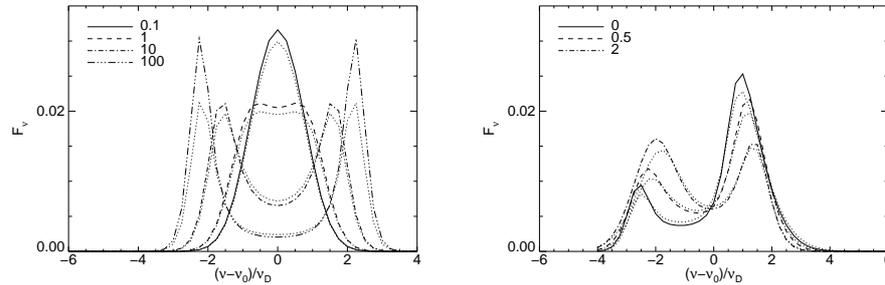


Abbildung 13: FE Lösung von Ly α Linienprofilen eines statischen (linkes Bild) und eines kollabierenden (rechtes Bild) Halos mit vollständiger Wiederverteilung. Im statischen Fall wird der Einfluß unterschiedlicher optische Tiefen (siehe Legende) auf das Linienprofil untersucht. Beim Kollaps markiert die Legende die unterschiedlichen Exponenten des Geschwindigkeitsfelds. Die FD Lösungen werden als gepunktete Linien dargestellt.

ponenten $l = 0, 0.5, 2$ des Geschwindigkeitsfelds v_{i0} aus Gl. (198) berücksichtigt wurden. Die optische Tiefe beträgt $\tau = 10$. Generell ist zu beobachten, daß das Geschwindigkeitsfeld die Symmetrie des Profils um das Linienzentrum zerstört. Für die Exponenten $l = 0$ und 0.5 wird das blaue Maximum gegenüber dem roten verstärkt, was – wie im kohärenten Fall (siehe oben) – auf die durch einen Streuprozeß blauverschobenen Photonen zurückzuführen ist. Im Falle eines expandierenden Halos erhalten wir ein Linienprofil wie in Abb. 13 (rechts), jedoch am Linienzentrum gespiegelt. D.h., daß nun das rote Maximum gegenüber dem blauen verstärkt ist. Für $l = 2$ ist die Symmetrie des Profils beinahe wieder hergestellt. Es scheint sogar, als ob das rote Maximum gegenüber dem blauen leicht verstärkt ist. Dieser Effekt liegt wie im kohärenten Fall am großen Geschwindigkeitsgradienten (siehe oben). Der Vergleich der FE Lösungen mit den FD Ergebnissen ergibt eine zumindest qualitative Übereinstimmung und spricht somit für dreidimensionalen erweiterten Codes. Die unterschiedlichen Ergebnisse, zumindest für die optisch dünnen Halos ($\tau \leq 1$), sind auf eine zu geringe Ortsauflösung des FD Verfahrens zurückzuführen. Mit zunehmender optischer Tiefe entfernen sich die Ergebnisse der FD Methode immer mehr von denen des FE Codes, was an der unterschiedlichen Ordnung der beiden Diskretisierungen liegt (siehe auch monochromatische Testbeispiele im vorhergehenden Abschnitt).

7 Ly α Linienprofile von hoch-rotverschobenen Galaxien

Bei der Beobachtung von hoch-rotverschobenen Galaxien ist der Ly α Übergang vom ersten angeregten Niveau zum Grundzustand des Wasserstoffatoms in den meisten Fällen die einzige prominente Emissionslinie im Spektrum und ist somit für das Verständnis der Entstehung und Entwicklung von Galaxien im frühen Universum von großer Bedeutung. In spektroskopischen Himmelsdurchmusterungen und Schmalbandbildern neueren Datums wurde die Ly α Linie zur Identifikation von Galaxien mit großer Rotverschiebung herangezogen (siehe Hu et al. 1998; Kudritzki et al. 2000; Rhoads et al. 2000; Fynbo 2000, 2001). Abgesehen davon, daß die Ly α Emissionslinie als Rotverschiebungsindikator gut geeignet ist, läßt das Profil dieser Linie sowohl auf die räumliche Verteilung und die Kinematik des interstellaren Gases als auch auf die Natur der Photonenquellen zurückschließen. So enthüllen beispielsweise sehr gut aufgelöste Beobachtungen von hoch-rotverschobenen Radiogalaxien (siehe Hippelein & Meisenheimer 1993; van Ojik et al. 1996, 1997; Villar-Martín et al. 1999) ausgedehnte Ly α Halos mit Durchmesser oberhalb von 100 kpc. Die beobachteten Linien weisen die in Abschnitt 6.2 simulierten charakteristischen Profile mit zwei Maxima und einer mehr oder weniger ausgeprägten Zentraleinsenkung auf. Weiterhin lassen zweidimensionale Spektren von Ly α Halos eine komplexe Kinematik mit Geschwindigkeiten $> 1000 \text{ km s}^{-1}$ vermuten (siehe van Ojik et al. 1996, 1997). Die Interpretation von Ly α Beobachtungen ist sehr schwierig, da hoch-rotverschobene Radiogalaxien häufig innerhalb eines Haufens von Proto-Clustern zu finden sind und der Radiojet mit der durch Verschmelzungsprozesse äußerst inhomogenen Umgebung wechselwirkt (siehe z.B. Bicknell et al. 2000; Kurk et al. 2001). Aufgrund der großen räumlichen Ausdehnung sind diese Halos optisch dick und die Ly α Photonen können nur mittels Streuprozeß oder durch Wechselwirkung mit einem makroskopischen Geschwindigkeitsfeld entweichen. Diese Phänomene erfordern jedoch eine sehr detaillierte Behandlung des dreidimensionalen Strahlungstransportproblems. Analytische (siehe Neufeld 1990) sowie frühe numerische Methoden (siehe Adams 1972; Hummer & Kunasz 1980) beschränkten sich auf die Lösung der eindimensionalen Strahlungstransportgleichung in statischen Medien. Erst in jüngster Zeit wurden auf der Basis der Monte-Carlo-Methode Codes entwickelt, welche mehrdimensionale Ly α Linientransportprobleme, zunächst für statische (siehe Ahn et al. 2001, 2002), aber auch für nicht-relativistisch bewegte Medien (siehe Zheng & Miralda-Escudé 2002) simulieren können.

Nachdem wir in Abschnitt 6.2 den frequenzabhängigen FE Code erfolgreich getestet haben, werden wir in diesem Kapitel zwei komplexere Anwendungen des Ly α Linientransportproblems untersuchen: Eine scheibenartige, oblate Konfiguration und ein Modell mit drei Quellen in einem gemeinsamen Halo. Die Mo-

dellbeschreibung und die Geschwindigkeitsfelder werden aus Abschnitt 6.2 übernommen, wobei wir uns im folgenden auf den schwierigeren Fall der vollständige Wiederverteilung beschränken werden. Wir verwenden 49 gleichverteilte diskrete Frequenzstützstellen für das Intervall $(v - v_0)/\Delta v_D \in [-6, 6]$ und 80 Ordinaten. Das Startgitter besteht aus 4^3 Zellen mit einer vorverfeinerten Quellregion, so daß wir unsere Simulationen auf einem Gitter mit insgesamt mehreren 10^3 Zellen starten. Je nach optischer Tiefe werden 3–7 adaptive Verfeinerungsschritte auf der Basis eines maximalen L^2 -Fehlerindikator (75) durchgeführt. Ein Ortsgitter der Verfeinerungsstufe 7 enthält ungefähr $1.5 \cdot 10^5$ Knotenpunkte und entspricht der Auflösung eines strukturierten Gitters mit 257^3 Knoten.

7.1 Elliptische Halos

In einem zweiten Schritt – nach dem sphärisch symmetrischen Modell aus Abschnitt 6.2 – hin zu einer echten dreidimensionalen Konfiguration untersuchen wir den Resonanzlinien-transport für ein axialsymmetrisches (oblates) Scheibenmodell mit einer Opazitätsverteilung wie in Gl. (195) definiert, jedoch mit Halbachsenverhältnissen von $a : b : c = 3 : 3 : 1$. Der oblate Halo ist um das Zentrum des Rechengebiets bei $x = 0$ positioniert, wobei die Achse senkrecht zur äquatorialen Ebene der Scheibe die z -Achse ist. Im folgenden bezeichnen wir die z -Achse aufgrund der Symmetrie als Rotationsachse. Wir untersuchen das Ly α Linienprofil für unterschiedliche optische Tiefen τ und verschiedene Geschwindigkeitsfelder (statisch, Kollaps und Rotation) aus unterschiedlichen Beobachtungsrichtungen. Die optische Tiefe $\tau = \tau(\vartheta_{gr})$ wird entlang der Richtung ϑ_{gr} bestimmt, die der großen Halbachse zwischen r_c und r_h bestimmt. Für r_c , r_h und α (Parameter aus der Opazitätsverteilung (195)) verwenden wir die Werte aus Tabelle 6. Anhand des statischen Falles zeigen wir exemplarisch, welche Informationen aus den FE Lösungen der Ly α Halosimulationen extrahiert werden können. Die berechneten Linienprofile sind in Abb. 14a für verschiedene optische Tiefen τ und für unterschiedliche Beobachtungswinkel aufgezeigt. Der Beobachtungswinkel ist definiert als der Winkel zwischen der Rotationsachse und der Richtung zum Beobachter hin. Z.B. bedeutet ein Beobachtungswinkel von 90° , daß wir die Scheibe von der Kante aus sehen. Ein Beobachtungswinkel von 0° entspricht somit der Draufsicht auf die Scheibe. Wie beim einfachen Testbeispiel aus Abschnitt 6.2.3 erhalten wir die charakteristische Zentralsenkung für $\tau \geq 1$. Aufgrund der oblaten Opazitätsverteilung mit den Halbachsenverhältnissen $a : b : c = 3 : 3 : 1$ nimmt die optische Dicke mit einer Verringerung des Beobachtungswinkels (d.h. in Richtung der kleinen Halbachse c) ab, so daß wir für einen Beobachtungswinkel von 0° eine effektive optische Tiefe von $\tau(\vartheta_{gr})/3$ erhalten. Folglich beobachten wir für eine Verringerung des Beobachtungswinkels eine Zunahme des Abstands der beiden Maxima voneinander und

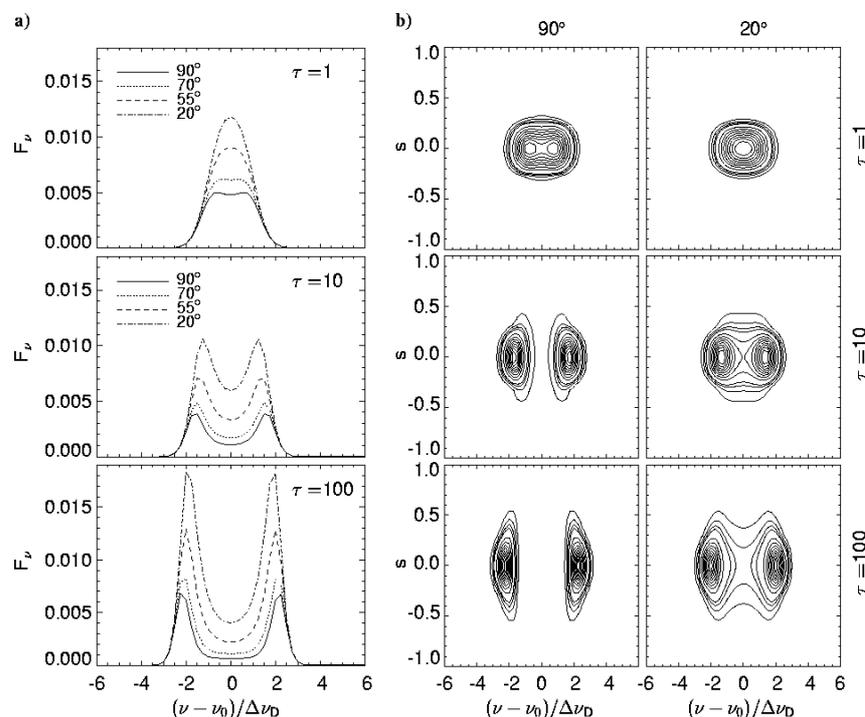


Abbildung 14: Ergebnisse für eine statische, oblate Modellkonfiguration: a) Ly α Linienprofile für verschiedene Beobachtungsrichtungen und unterschiedliche optische Tiefen $\tau = \tau(\vartheta_{\text{gr}})$. b) Zweidimensionales Spektrum einer Kantenansicht (90°) der Scheibe und einer Aufsicht auf die Scheibe (20°) bei unterschiedlichen optischen Tiefen. Die Position und Breite des Langspalts des Spektrographen ist in Abb. 15a angegeben. Die Konturen sind für 2.5%, 5%, 7.5%, 10%, 20%, ..., 90% des Maximalwertes aufgezeichnet.

eine Zunahme der Tiefe der Zentraleinsenkung innerhalb des Linienspektrums. Dabei sollte beachtet werden, daß der entlang der z -Achse entweichende totale relative Fluß $F(\vartheta = 0^\circ)/F(\vartheta = 90^\circ)$ mit zunehmender optischer Tiefe $\tau(\vartheta_{\text{gr}})$ ebenfalls zunimmt. Die Abb. 14b wird weiter unten erklärt.

Viel mehr Informationen sind in den räumlichen Linienintensitätsverteilungen enthalten. Diese Verteilungen werden auf die Beobachtungsebene, d.h. die Ebene senkrecht zur Beobachtungsrichtung, projiziert (siehe Abb. 15). In Abb. 15a ist die frequenzintegrierte Intensitätsverteilung für $\tau(\vartheta_{\text{gr}}) = 10$ unter verschiedenen Beobachtungswinkeln gezeigt. Bei 90° zeigt diese Abbildung das Ly α -Bild einer elliptischen Emissionslinienregion. Der diffuse Halo ist aufgrund der gestreuten

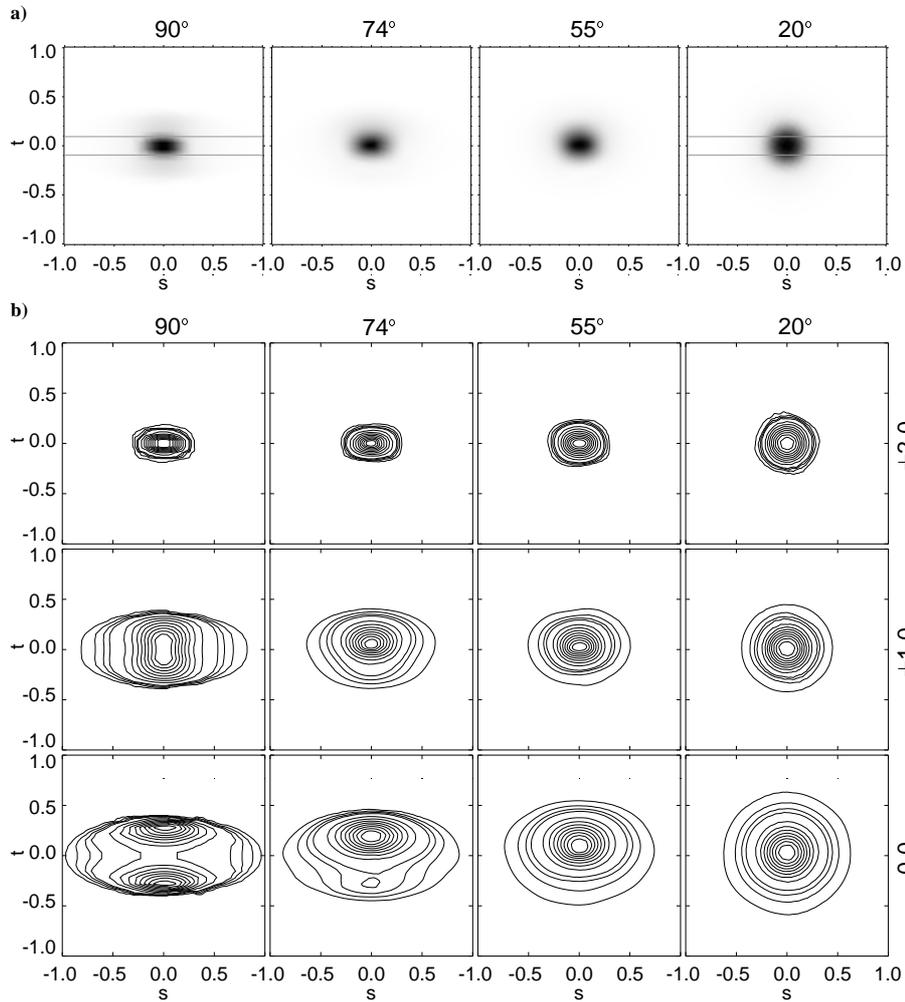


Abbildung 15: Räumliche Intensitätsverteilung für eine statische, oblate Modellkonfiguration mit $\tau(\vartheta_{gr}) = 10$ für unterschiedliche Beobachtungsrichtungen: a) Frequenzintegrierte Intensitätsverteilung, wobei zusätzlich die Position des Langspalts angegeben ist. b) Intensitätsverteilung für ausgewählte Frequenzpunkte. Die Frequenz ist in Doppler-Einheiten $(v - v_0)/\Delta v_D$ relativ zum Linienzentrum am rechten Bildrand angegeben.

Photonen sehr deutlich sichtbar. Mit abnehmendem Beobachtungswinkel wird der Halo optisch dünner und die Intensitätsverteilung erscheint zunehmend sphärisch symmetrisch.

In Abb. 15b ist die räumliche Verteilung der Ly α Intensität für verschiedene Blickwinkel (hintereinander) an ausgewählten Frequenzpunkten (nebeneinander) dargestellt. Die Kantenansicht der Scheibe (90°) zeigt, daß die Intensitätsverteilung sehr stark von der Frequenz abhängt. Im äußeren Linienflügel bei $(\nu - \nu_0)/\Delta\nu_D = \pm 2$ ist der Halo optisch dünn und die Konturlinien haben eine kompakte elliptische Gestalt, wobei sie im wesentlichen die oblate Form der Quellregion reproduzieren. Die beiden Maxima des Linienprofils liegen bei $(\nu - \nu_0)/\Delta\nu_D \sim \pm 1$ und wir beobachten, daß die Hauptachse der elliptischen Intensitätsverteilung, zumindest im Innern des aufgezeigten Konturlinienbereichs, parallel zur Rotationsachse liegt. Im äußeren Bereich liegt diese Hauptachse, wie für die Linienflügel Frequenzen auch, senkrecht zur Rotationsachse und zwar so wie die Hauptachse der ursprünglich Intensitätsverteilung der Quellregion. Im Linienzentrum bei $(\nu - \nu_0)/\Delta\nu_D = 0$ ist die direkte Sicht auf das Quellgebiet durch die optisch dicke Gasmaterie blockiert und es erscheinen zwei Emissionsknoten knapp ober- und unterhalb der Scheibe, jedoch noch innerhalb des weit ausgedehnten elliptischen Halos. Der Ly α Knoten unterhalb der Scheibe verschwindet mit abnehmendem Beobachtungswinkel. Bei 20° ist die Intensitätsverteilung schließlich für alle Frequenzen sphärisch symmetrisch, wobei die beobachtete Photonenquellregion im Linienzentrum die größte Ausdehnung aufweist. In Abb. 16 ist die Intensitätsverteilung für ausgewählte Frequenzpunkte ähnlich wie in Abb. 15 dargestellt, nur daß die Verteilung nun farbkodiert ist und keine Konturlinien mehr aufweist.

Zweidimensionale Spektren von hochaufgelösten spektroskopischen Beobachtungen liefern üblicherweise frequenzabhängige Daten für eine Rückrichtung. Für einen Vergleich mit derartigen Beobachtungen haben wir unsere Ergebnisse in einem Nachbearbeitungsschritt in zweidimensionale Spektren umgewandelt, wobei nur Daten innerhalb des in Abb. 15a angegebenen Langspaltes für eine Kanten- und eine Draufsicht der oblaten Konfiguration verwendet werden. Jedoch ist die Form des zweidimensionalen Spektrums relativ unabhängig von der Breite des gewählten Langspaltes. Die Ergebnisse sind in Abb. 14b für unterschiedliche optische Tiefen dargestellt. Für den optisch dünnen Fall mit $\tau = 1$ ist nur ein einzelnes, zusammenhängendes Emissionsgebiet sichtbar. Bei einer Kantenansicht deuten die innersten Konturlinien bereits die Zentraleinsenkung und die zwei Maxima an, die auch im Linienprofil gut sichtbar sind (Abb. 14a). Mit zunehmender optischer Tiefe wird die Zentraleinsenkung immer deutlicher und der Abstand der beiden Maxima vergrößert sich. Es ist aber zu beachten, daß die räumliche Ausdehnung der äußeren Konturlinien nur von $\tau(\vartheta_{gr})$ abhängt und nicht von der Beobachtungsrichtung.

Als nächstes untersuchen wir, wie sich das Ly α Linienprofil der oblaten Konfiguration verändert, wenn man ein makroskopisches Geschwindigkeitsfeld mitberücksichtigt. Zuerst simulieren wir einen Kollaps mit $l = 0.5$ in Gl. (198). Abb. 17a zeigt die berechneten Linienprofile für verschiedene optische Tiefen unter un-

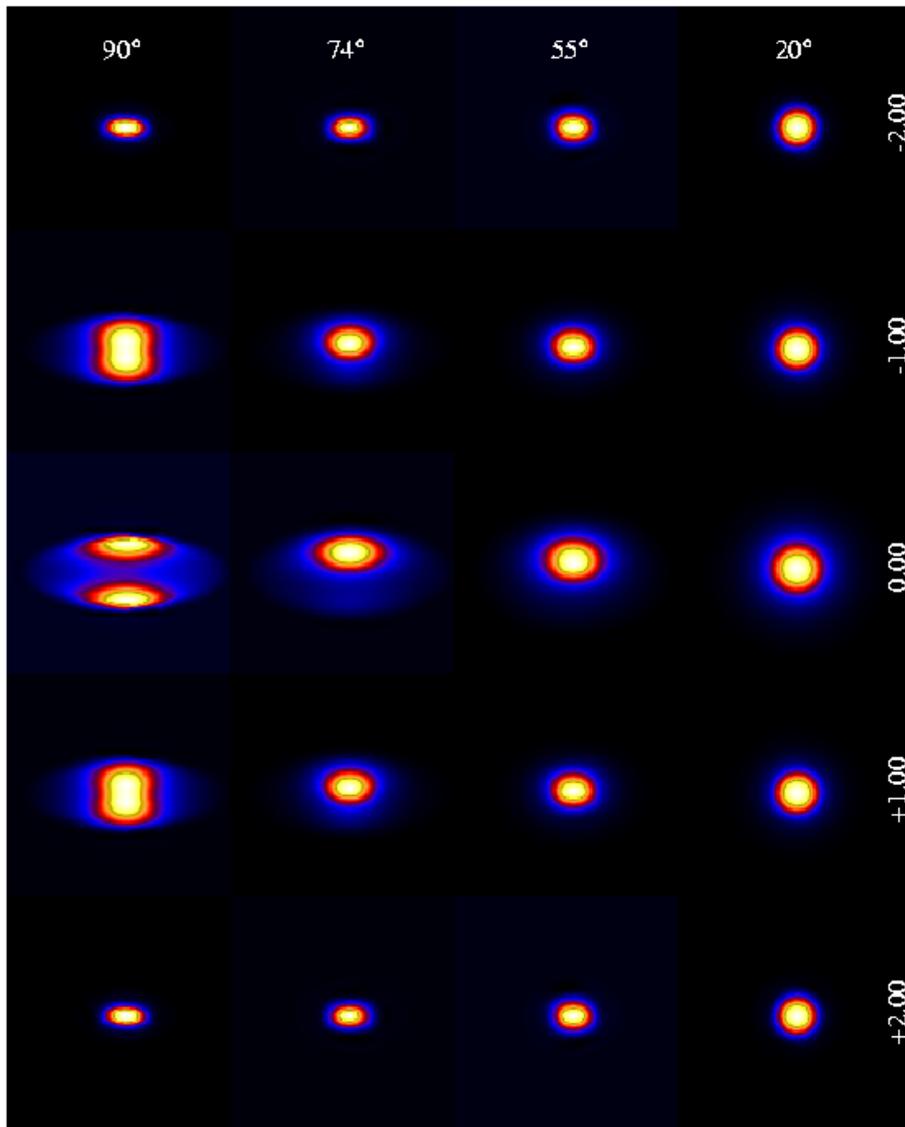


Abbildung 16: Falschfarbendarstellung der Intensitätsverteilung für ausgewählte Frequenzpunkte (untereinander) unter verschiedenen Beobachtungswinkeln (nebeneinander). Die Intensität nimmt von blau nach weiß zu.

terschiedlichen Beobachtungswinkeln. Wie im Fall des kollabierenden sphärisch symmetrischen Halo (siehe Abschnitt 6.2.3) wird das blauverschobene Maximum durch das Geschwindigkeitsfeld verstärkt. Mit zunehmendem τ tritt dieser Effekt

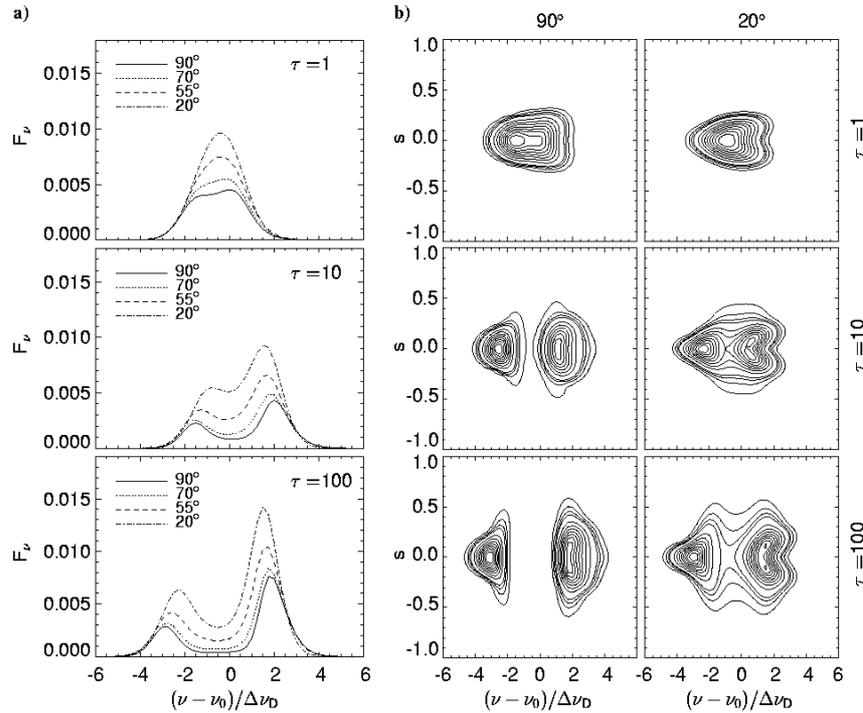


Abbildung 17: Ergebnisse für eine oblate Modellkonfiguration mit einer freien Einfallbewegung ($l = 0.5$): a) Ly α Linienprofile für verschiedene Beobachtungsrichtungen und unterschiedliche optische Tiefen $\tau = \tau(\vartheta_{\text{gr}})$. b) Zweidimensionales Spektrum für eine beinahe Kantensicht (90°) der Scheibe und eine Aufsicht auf die Scheibe (20°) bei unterschiedlichen optischen Tiefen. Die Position und Breite der Spaltmaske ist in Abb. 15a angedeutet. Die Konturen sind für 2.5%, 5%, 7.5%, 10%, 20%, ..., 90% des Maximalwertes aufgezeichnet.

immer deutlicher hervor. In Abb. 17b sind die den Linienprofilen entsprechenden zweidimensionalen Spektren für eine Kantensicht (90°) und eine Beinahe-Draufsicht (20°) bei gleicher Spaltgröße und -position wie im statischen Fall dargestellt. Für eine kleine optische Tiefe haben die Konturlinien eine beinahe dreieckige Gestalt, da Photonen, die in der Frequenz gestreut werden und über den blauen Flügel der Linien entweichen, auch häufiger im Ortsraum gestreut werden. Dies hat eine größere räumliche Ausdehnung der Photonen des blauen Linienflügels zur Folge. Auch wenn der Abstand zwischen den Maxima mit zunehmender optischer Tiefe wächst, so bleibt doch die allgemeine Dreiecksgestalt erhalten. In Abb. 18 ist die Intensitätsverteilung farbkodiert für ausgewählte Frequenzpunkte ähnlich wie

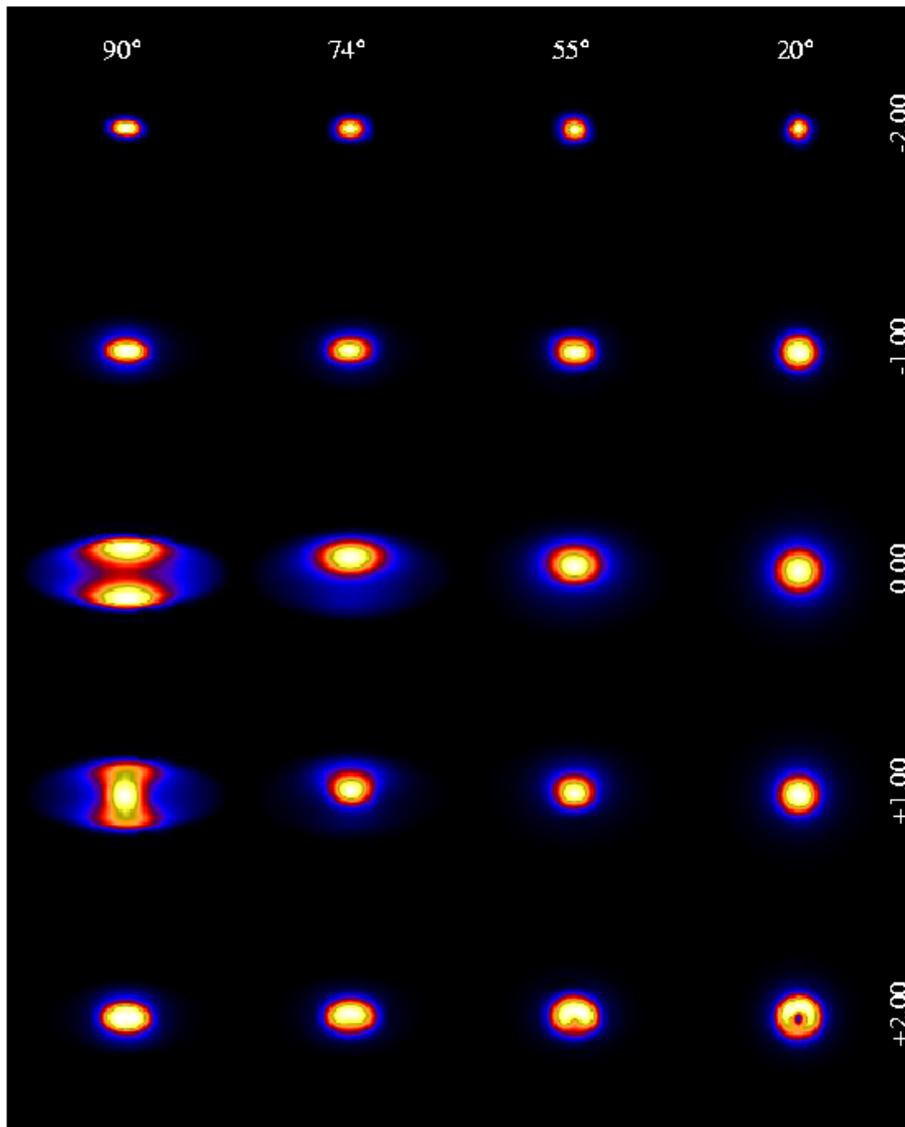


Abbildung 18: Falschfarbendarstellung der Intensitätsverteilung für ausgewählte Frequenzpunkte (untereinander) unter verschiedenen Beobachtungswinkeln (nebeneinander) für eine kollabierende, oblate Halokonfiguration.

in Abb. 16 dargestellt, nur daß hier ein makroskopischer Einfall mitberücksichtigt wird.

Das zweite Geschwindigkeitsfeld, dessen Einfluß auf das Linienspektrum wir

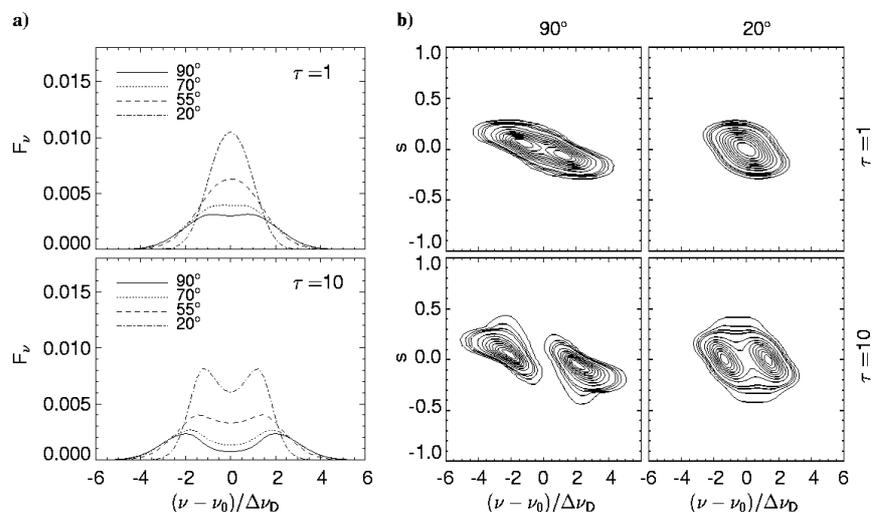


Abbildung 19: Ergebnisse für eine oblate Modellkonfiguration mit einer Keplerschen Rotationsbewegung ($l = 0.5$) um die z -Achse: a) Ly α Linienprofile für verschiedene Beobachtungsrichtungen und unterschiedliche optische Tiefen $\tau = \tau(\vartheta_{\text{gr}})$. b) Zweidimensionales Spektrum für eine beinahe Kantenansicht (90°) der Scheibe und eine Aufsicht auf die Scheibe (20°) bei unterschiedlichen optischen Tiefen. Die Position und Breite der Spaltmaske sind die gleichen wie in Abb. 15a angedeutet. Die Konturen sind für 2.5%, 5%, 7.5%, 10%, 20%, ..., 90% des Maximalwertes aufgezeichnet.

bei der oblaten Halokonfiguration untersuchen wollen, entspricht einer Keplerschen Rotationsbewegung ($l = 0.5$) um die z -Achse. Die Ergebnisse sind in Abb. 19 für $\tau = 1$ und $\tau = 10$ aufgetragen. Die Linienprofile sind symmetrisch bezüglich des Linienzentrums und zeigen für unterschiedliche Blickwinkel und optische Tiefen das gleiche Verhalten wie im statischen Fall. Der einzige sichtbare Unterschied besteht darin, daß die Linienflügel bzw. die Maxima mit zunehmendem Beobachtungswinkel stärker „verschmiert“ werden als bei der statischen Konfiguration. Dies liegt in der Zunahme des Doppler-Effekts begründet, da das Geschwindigkeitsfeld (Rotation) einen immer größeren Einfluß auf das beobachtete Spektrum ausübt, je mehr wir die oblate Halokonfiguration von der Kante her sehen. Ganz anders als beim eindimensionalen Spektrum ist der Effekt der Rotation im zweidimensionalen Spektrum sehr deutlich zu erkennen (siehe Abb. 19b). Die Scherung der Konturlinien ist ein typisches Muster für eine Rotationsbewegung. Wie im statischen Fall und beim Kollaps sind bei $\tau = 10$ und Kantenansicht zwei Emissionsknoten im zweidimensionalen Spektrum zu beobachten, wobei die Scherung, be-

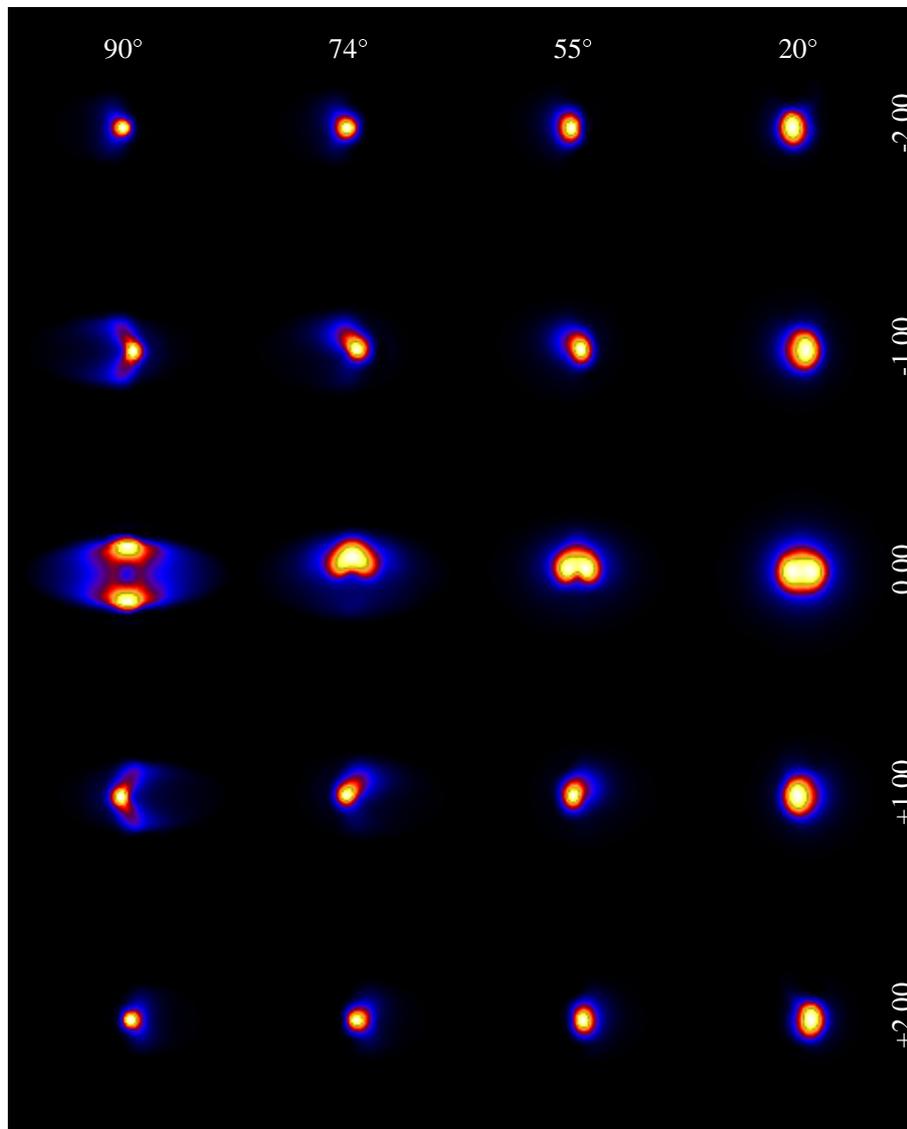


Abbildung 20: Falschfarbendarstellung der Intensitätsverteilung für ausgewählte Frequenzpunkte (untereinander) unter verschiedenen Beobachtungswinkeln (nebeneinander) für eine rotierende, oblate Halokonfiguration. Die Intensität nimmt von blau nach weiß zu.

dingt durch die Rotationsbewegung, zwei bananenförmige Konturplots hervorruft. In Abb. 20 ist die Intensitätsverteilung für ausgewählte Frequenzpunkte ähnlich

wie in Abb. 16 und 18 dargestellt, nur daß hier eine makroskopische Rotationsbewegung mitberücksichtigt wird.

Trotz der relativ geringen optischen Tiefe der Modellkonfigurationen können wir die Form und die typischen Muster zweidimensionaler Spektren vieler hochrotverschobener Galaxien sehr gut reproduzieren. So sind z.B. die zweidimensionalen Spektren der Ly α „blobs“ aus (Steidel et al. 2000, Fig. 8) vergleichbar mit den Ergebnissen für kollabierende (Abb. 17b) und rotierende (Abb. 19b) Halos. Die Beobachtungen von van Ojik et al. (1997) enthalten eine Vielzahl von hochrotverschobenen Radiogalaxien mit Ly α Linienprofilen, die ein oder zwei Maxima mit einer Zentraleinsenkung aufweisen. De Breuck et al. (2000) entdecken bei der statistischen Untersuchung von Emissionslinien hochrotverschobener Radiogalaxien, daß die Dreiecksgestalt der Ly α Emission ein charakteristisches Muster im zweidimensionalen Spektrum dieser Objekte ist. Da die Emission des blauverschobenen Maximums im beobachteten Linienprofil deutlich geringer ausgeprägt ist als diejenige beim rotverschobenen Maximum, sollten sich die meisten dieser Halos im Stadium der Expansion befinden.

7.2 Mehrfachquellen

Wie bereits zu Anfang dieses Kapitels erwähnt, befinden sich hochrotverschobene Radiogalaxien häufig im Zentrum von Haufen von (Proto-) Galaxien. In einer solchen Umgebung könnte es möglich sein, daß die Ly α Emission mehrerer Galaxien in einem gemeinsamen Halo nach außen gestreut wird. Um solche Konfigurationen untersuchen zu können, starten wir mit einer sphärisch symmetrischen Opazitätsverteilung (vgl. Abschnitt 6.2.3) und mit drei räumlich getrennten Quellgebieten positioniert um $x_1 = (0.5, 0.25, 0)$, $x_2 = (-0.5, 0.25, 0)$ und $x_3 = (0, -0.25, 0)$, die ein Dreieck in der (x, y) -Ebene bilden. Im folgenden werden die Ergebnisse für eine optische Tiefe $\tau = 10$ des Halos präsentiert.

Wie im Abschnitt 7.1 beginnen wir mit dem statischen Modell. Abb. 21a zeigt frequenzintegrierte Ly α Bilder aus vier ausgewählten Blickrichtungen. Der über den Bildern angegebene Blickwinkel ist der Winkel zwischen Beobachtungsrichtung und der (x, y) -Ebene. Es ist zu beachten, daß sich die Orientierung der Quellgebiete innerhalb der Beobachtungsebene für unterschiedliche Blickrichtungen ändert. Wenn man die Konfiguration beinahe senkrecht zur (x, y) -Ebene (70°) betrachtet, sind alle drei Quellgebiete sehr gut sichtbar, da diese in der äußeren und somit optisch dünneren Haloregion lokalisiert sind. Es sei daran erinnert, daß sich der Hauptteil der streuenden Halomaterie in der Nähe des Zentrums bei $x = 0$ befindet. Für andere Blickwinkel – insbesondere wenn man beinahe direkt von Punkten in der x - y -Ebene auf die Konfiguration schaut – liegen einige der Quellgebiete vom Beobachter aus gesehen hinter dem Halozentrum und sind somit auf den ent-

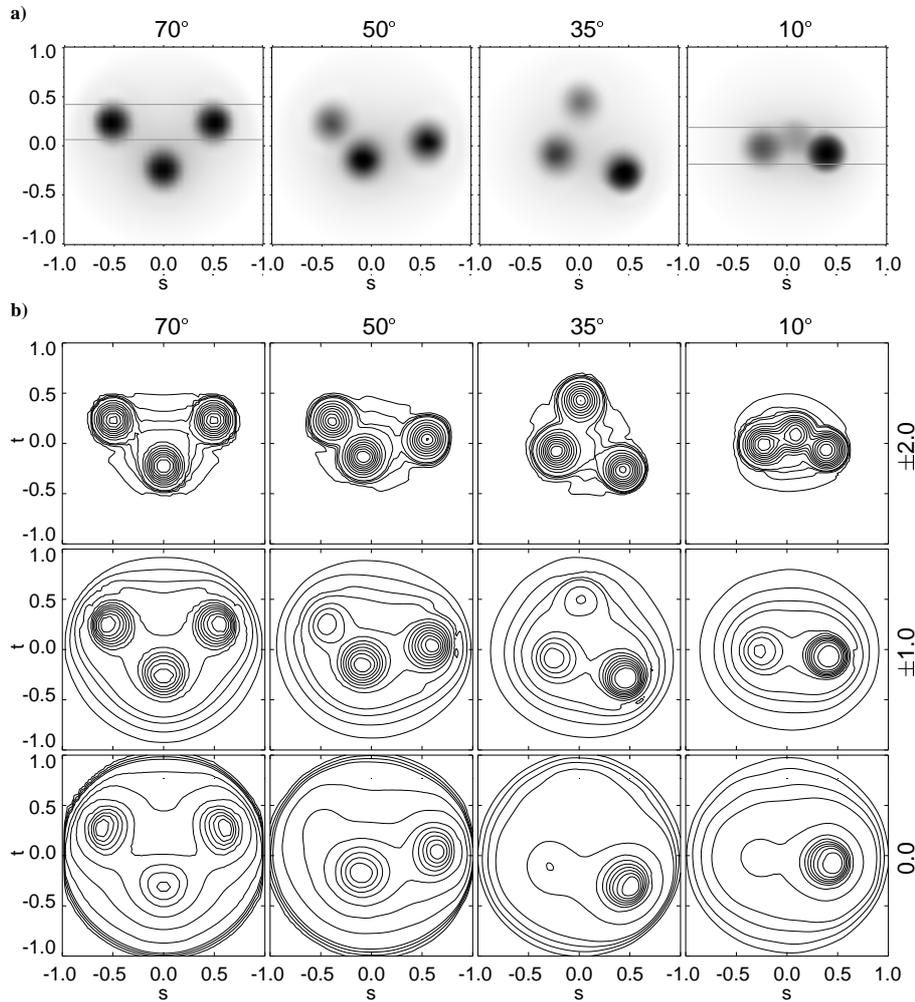


Abbildung 21: Räumliche Intensitätsverteilung für eine statische, sphärisch symmetrische Modellkonfiguration mit $\tau = 10$ und 3 ausgedehnten Quellregionen unter verschiedenen Beobachtungsrichtungen: a) Frequenzintegrierte Intensitätsverteilung. b) Intensitätsverteilung für ausgewählte Frequenzpunkte. Die Frequenz ist in Doppler-Einheiten $(v - v_0)/\Delta v_D$ relativ zum Linienzentrum am rechten Bildrand angegeben.

sprechenden Bildern weniger gut sichtbar. Abb. 21b ist eine Konturliniendarstellung der spezifischen Intensität für ausgewählte Frequenzpunkte und Blickrichtungen. Wenn man in den Linienflügeln bei $(v - v_0)/\Delta v_D = \pm 2$ beobachtet, kann die

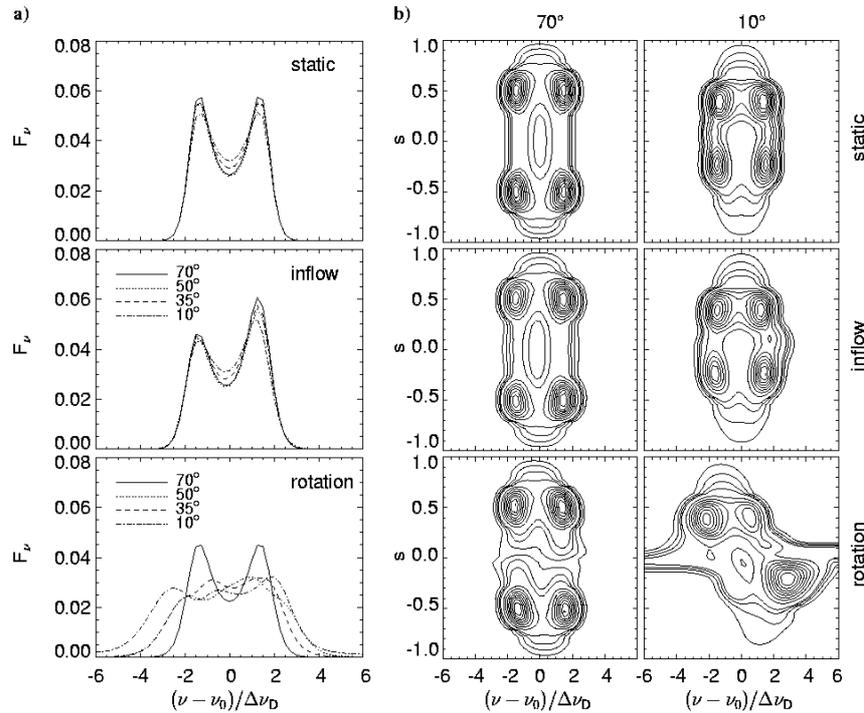


Abbildung 22: Ergebnisse für eine sphärisch symmetrische Modellkonfiguration mit drei Quellgebieten im Innern für den statischen Fall und zwei unterschiedlichen Halogeswindigkeitsfelder (Kollaps und Rotation): a) Ly α Linienprofile für verschiedene Beobachtungsrichtungen. b) Zweidimensionales Spektrum für eine beinahe Kantenansicht (10°) der Scheibe und eine Aufsicht auf die Scheibe (70°). Die Position und Breite der Spaltmaske ist in Abb. 21a angedeutet. Die Konturen sind für 2.5%, 5%, 7.5%, 10%, 20%, ..., 90% des Maximalwertes aufgezeichnet.

Anzahl und die Position aller Quellgebiete aus jeder beliebigen Blickrichtung bestimmt werden. Wenn man den Halo jedoch in Frequenzen um das Linienzentrum bei $(\nu - \nu_0)/\Delta\nu_D = \pm 1$ und 0 betrachtet, hängt die Anzahl der sichtbaren Quellgebiete stark vom Beobachtungswinkel ab. So zeigen einige Bilder nur eine, andere wiederum zwei oder drei Quellregionen.

Die entsprechenden Linienprofile und zweidimensionalen Spektren werden in Abb. 22 sowohl für den statischen Fall als auch für einen Kollaps und eine Keplerische Rotationsbewegung des Halos dargestellt. Die Breite und Position des Langspalts, durch den das zweidimensionale Spektrum aufgenommen wird, sind in Abb. 21a angedeutet. Es werden für beinahe alle Fälle Zentraleinsenkungen mit zwei

Maxima beobachtet. Die einzige Ausnahme sind die berechneten Profile für einen rotierenden Halo, die für Blickwinkel kleiner als 70° sehr breit werden. Zusätzliche Merkmale, wie Senken oder Zwischenmaxima, tauchen im roten oder blauen Linienflügel auf, da die drei Quellgebiete relativ zum Beobachter signifikant unterschiedliche Geschwindigkeitskomponenten aufweisen.

Die Spaltmaske für den Blickwinkel 70° enthält zwei Quellregionen (siehe Abb. 21a), die jedoch im zweidimensionalen Spektrum von Abb. 22b als vier Emissionsgebiete sichtbar werden. Das sichtbare Konturlinienmuster ist selbst für die bewegten Halos sehr symmetrisch. Wie wir in Abb. 21a angedeutet haben, enthält ein Langspalt bei einem Winkel von 10° alle drei Quellgebiete. Trotzdem werden die zweidimensionalen Spektren von den beiden Quellregionen dominiert, die näher zum Beobachter hin und somit vor der optisch dichteren Zentralregion des Halos liegen. Im statischen Fall ist die dritte Quellregion nicht sichtbar. Beim Kollaps ist die dritte Quelle als schwache Emission im blauen Teil des Spektrums zu erahnen. Dies steht ganz im Gegensatz zum Fall einer Rotationsbewegung, bei dem die dritte Quelle relativ deutlich zu erkennen ist. Jedoch ist das Konturlinienmuster sehr undeutlich, so daß eine eindeutige Identifikation der Emission, ohne das Wissen über die Existenz einer dritten Quelle, äußerst schwierig sein dürfte. In Abb. 23, 24 und 25 sind die Intensitätsverteilungen für unterschiedliche Geschwindigkeitsfelder (statisch, Kollaps, Rotation) farbkodiert für ausgewählte Frequenzpunkte sowie aus verschiedenen Blickrichtungen, ähnlich wie für die oblate Modellkonfiguration, dargestellt.

Dieses Anwendungsbeispiel demonstriert die Komplexität dreidimensionaler Strahlungstransportprobleme. In einem klumpigen, inhomogenen Medium wäre es äußerst schwierig, einzig auf der Basis von frequenzintegrierten Bildern, die genaue Anzahl und Position von Ly α Quellgebieten zu bestimmen. Zweidimensionale Spektren können hilfreich sein, werden sich jedoch in vielen Fällen als zu kompliziert erweisen. Vielversprechender wären Bilder aus unterschiedlichen Teilen des Linienprofils oder Informationen von anderen Emissionslinien (wie z.B. H α in Kurk et al. 2001), um die Dichteverteilung des neutralen Wasserstoffs oder andere Merkmale wie z.B. Stoßfronten zu ermitteln, die durch die Wechselwirkung des Radio-Jets mit der Halomaterie verursacht werden.

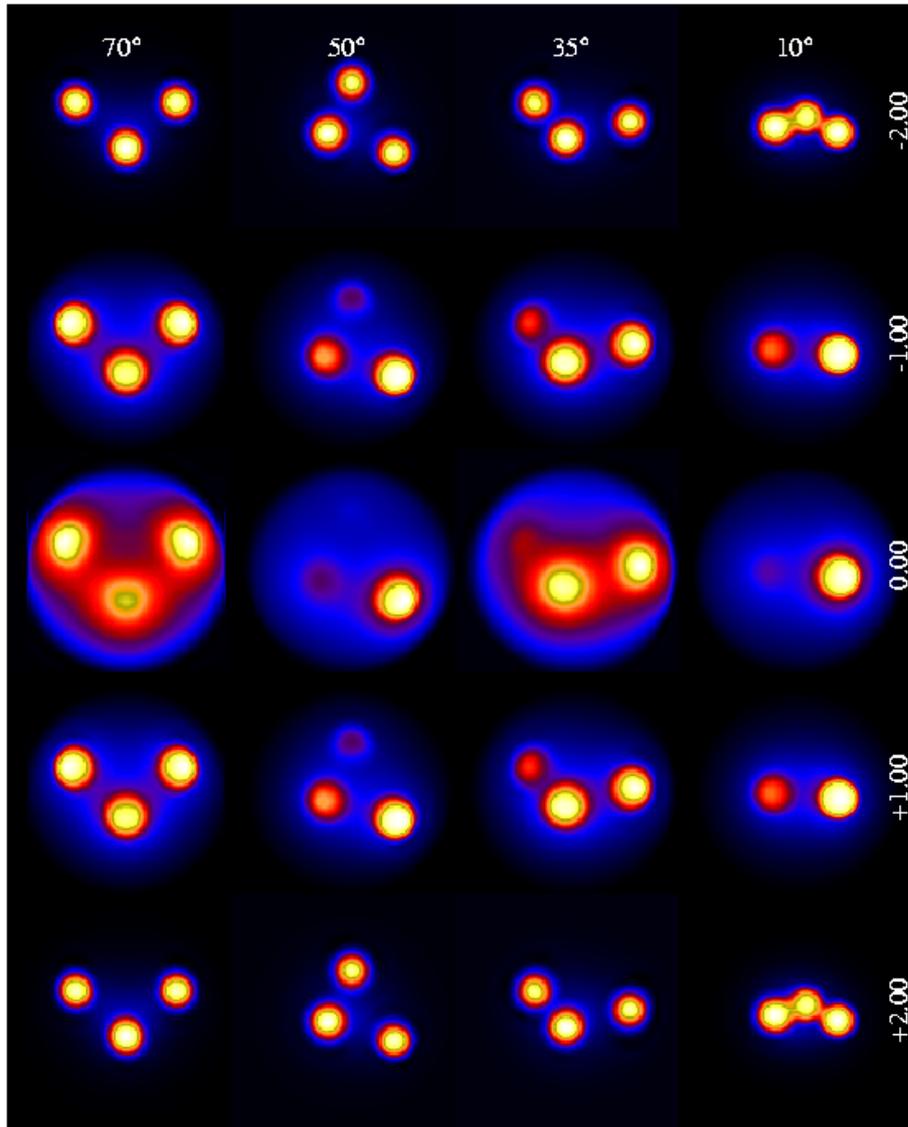


Abbildung 23: Falschfarbendarstellung der Intensitätsverteilung eines statischen Halos mit drei Quellregionen für ausgewählte Frequenzpunkte (untereinander) unter verschiedenen Beobachtungswinkeln (nebeneinander). Die Intensität nimmt von blau nach weiß zu.

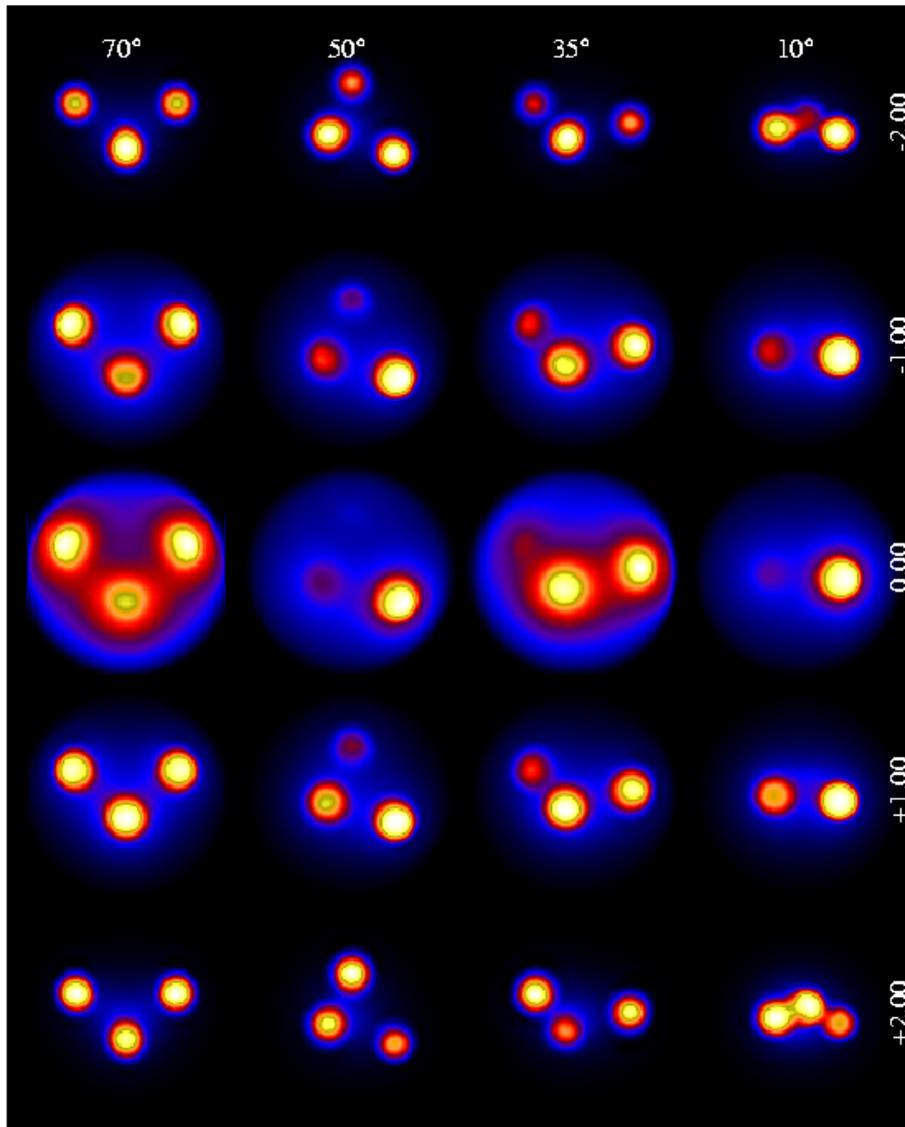


Abbildung 24: Falschfarbendarstellung der Intensitätsverteilung für ausgewählte Frequenzpunkte (untereinander) unter verschiedenen Beobachtungswinkeln (nebeneinander) für eine kollabierende Halokonfiguration mit drei Quellgebieten. Die Intensität nimmt von blau nach weiß zu.

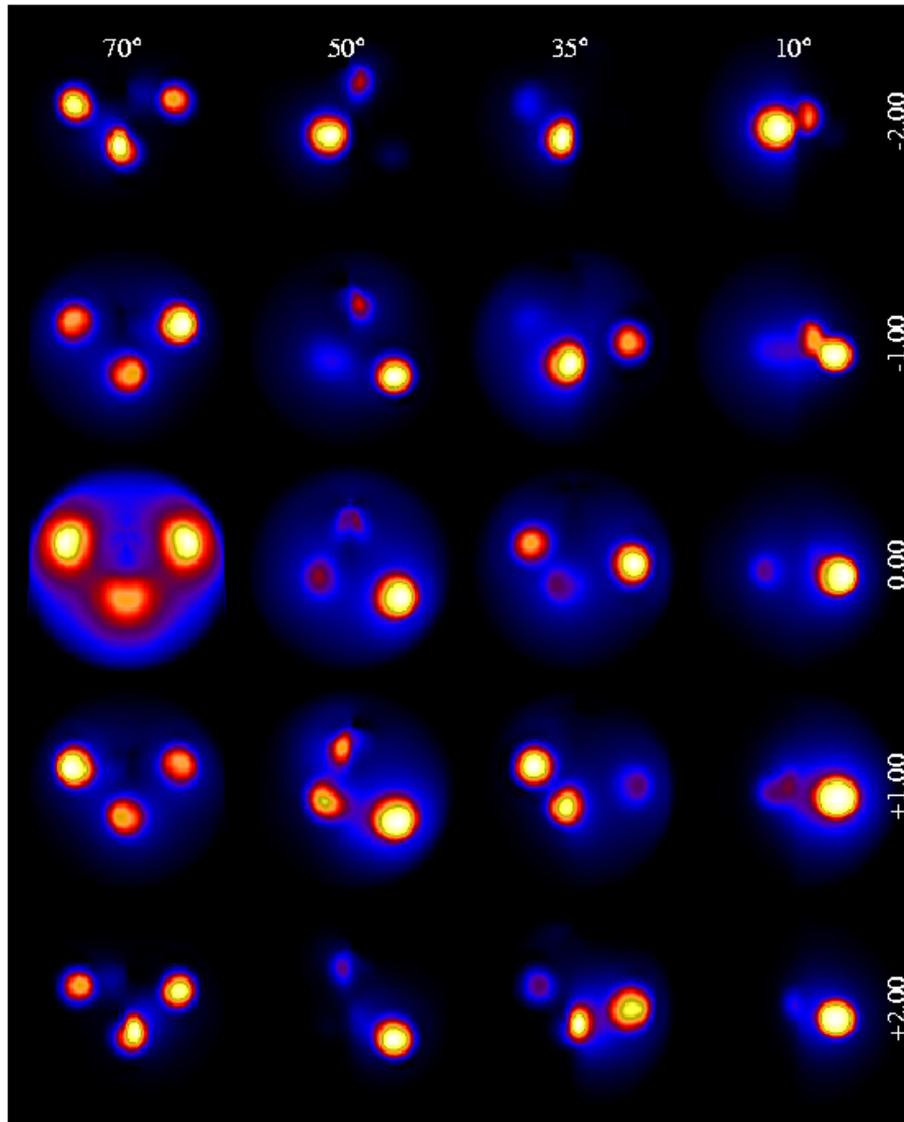


Abbildung 25: Falschfarbendarstellung der Intensitätsverteilung für ausgewählte Frequenzpunkte (untereinander) unter verschiedenen Beobachtungswinkeln (nebeneinander) für eine rotierende Halokonfiguration mit drei Quellgebieten. Die Intensität nimmt von blau nach weiß zu.

8 Zusammenfassung und Ausblick

8.1 Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit werden numerische Lösungen der Strahlungstransportgleichung ermittelt und deren Güte für eine Reihe von astronomisch interessanten Anwendungen demonstriert. Dazu werden diese Lösungen mit numerischen oder analytischen Resultaten verglichen, die von anderen Autoren stammen. Die numerische Behandlung basiert auf einer Diskretisierung der mehrdimensionalen Strahlungstransportgleichung durch Anwendung der Finite-Elemente-Methode. Da dieses Diskretisierungsverfahren in der Astronomie bislang wenig Verwendung findet, wurde zunächst eine detaillierte Einführung in die Finite-Elemente-Methode präsentiert, die aus Gründen der Einfachheit vom Poisson-Problem ausging. Dabei wurden generelle Aspekte, wie Existenz und Eindeutigkeit der Lösung, Konvergenzuntersuchungen, aber auch Begriffe aus der Theorie der partiellen Differentialgleichungen vorgestellt.

Mathematisch gesehen ist die monochromatische, mehrdimensionale Strahlungstransportgleichung vom Typ einer Boltzmann-Gleichung und daher von einem anderen Gleichungstyp als das elliptische Problem der Poisson-Gleichung. Deshalb wurde anschließend die Erweiterung der Finite-Elemente-Methode auf die Strahlungstransportgleichung beschrieben. Diese Erweiterung ergibt sich nicht direkt aus der Anwendung der Finite-Elemente-Methode auf die Poisson-Gleichung, da sich die Strahlungstransportgleichung nicht aus einem Energieminimierungsansatz ableiten läßt. Die Erweiterung erfolgt jedoch in einem abstrakten mathematischen Sinne. Dabei wurde gezeigt, wie sich die Galerkin-Finite-Elemente-Methode eignet, um einen a posteriori Fehlerschätzer herzuleiten. Dieser gewichtete Residenschätzer erlaubt gezielt die Kontrolle des Fehlers in einzelnen Meßgrößen (wie z.B. den Strahlungsstrom). Somit kann der Modellfehler von Diskretisierungsfehlern unterschieden werden, was eine bessere Interpretation von Beobachtungsdaten ermöglicht. Auf der Basis dieses Fehlerschätzers wurde eine adaptive Gitterverfeinerungsstrategie vorgestellt, die es ermöglicht, Ergebnisse mit hoher Genauigkeit auf möglichst wenig Gitterzellen zu erzielen.

Um die Anzahl der Anwendungsmöglichkeiten von mehrdimensionalen Strahlungstransportproblemen zu erhöhen, ist das Modell vom monochromatischen auf den frequenzabhängigen Fall erweitert worden. Die Diskretisierung bleibt dabei vom Galerkin-Typ und die Lösung des resultierenden linearen Gleichungssystems erfolgt schrittweise, indem sukzessive „monochromatische“ Strahlungstransportprobleme für die einzelnen diskreten Frequenzpunkte gelöst werden. Durch die Erweiterung des Streumodells von kohärenter auf vollständige Wiederverteilung können diese „monochromatischen“ Probleme nicht mehr unabhängig von den

Lösungen für die übrigen Frequenzstützstellen betrachtet werden. Vielmehr verursacht die vollständigen Wiederverteilung eine Frequenzkopplung über das gesamte Spektrum, was ein mehrfaches Lösen der „monochromatischen“ Strahlungstransportgleichung an den einzelnen diskreten Frequenzstützstellen zur Folge hat. Das Strahlungstransportproblem wird selbstkonsistent gelöst, d.h. die äußere Iteration wird so oft wiederholt, bis sich die zu interessierende Größe (z.B. ein Linienprofil) im Rahmen einer vorgegebenen Fehlertoleranz nicht mehr ändert. Die Erweiterung des Modells von statischen auf nicht-relativistisch bewegte Medien führt zu einem zusätzlichen Term in der Strahlungstransportgleichung. Dieser Term enthält eine Frequenzableitung, die durch ein unstetiges Galerkin-Verfahren vom Grad Null diskretisiert wird. Trotz der grundlegenden Unterschiede im Ansatz von unstetigem Galerkin- und Differenzenverfahren lassen sich zwischen beiden Klassen enge Beziehungen feststellen. So kann das unstetige Galerkin-Verfahren vom Grad Null im wesentlichen mit der impliziten Euler-Formel der Differenzenverfahren identifiziert werden. Diese Diskretisierung führt uns – wie im Fall der vollständigen Wiederverteilung – auf ein nichtlineares Gleichungssystem, welches mittels Iteration in einer äußeren Schleife um die „monochromatischen“ Strahlungstransportprobleme der einzelnen diskreten Frequenzpunkte gelöst werden muß. Die Strategie der adaptiven Ortsgitterverfeinerung und die Ordinatenparallelisierung konnten durch Anpassung an des erweiterte Modell übernommen werden.

In der Arbeit wird ein Lösungsverfahren der frequenzabhängigen Strahlungstransportprobleme angegeben, das im wesentlichen auf dem mehrfachen Lösen der monochromatischen Strahlungstransportgleichung beruht. Somit ist die Validierung des monochromatischen Codes von entscheidender Bedeutung für die Güte der frequenzerweiterten Version. Dies wurde in drei Testbeispielen demonstriert, in denen zunächst die Güte der Finiten-Elemente-Diskretisierung mittels eines qualitativen „search light beam test“ (vgl. Kunasz & Auer 1988) bestimmt wird. Dieser Test zeigte, daß der Algorithmus in der Lage ist, steile Gradienten und Sprünge der Lösungen in wenigen adaptiven Verfeinerungsschritten aufzulösen. Die quantitative Überprüfung ist mittels eines Lösungsvergleichs von drei unabhängigen Codes für eine in drei Raumdimensionen angenäherte plan-parallele Schicht erfolgreich durchgeführt worden. Dabei wurde die Winkelverteilung der austretenden spezifischen Intensität an einem Randpunkt der Schicht mit den Ergebnissen einer analytischen und einer Finite-Differenzen-Methode für unterschiedliche optische Tiefen und Albedos verglichen. Es ergab sich, daß die Ergebnisse des Finite-Elemente-Codes unabhängig von der Anzahl der Ordinaten sehr gut mit den analytischen Lösungen übereinstimmen. Aufgrund der adaptiven Verfeinerungsstrategie, durch die ein lokal sehr stark verfeinertes Ortsgitter erzeugt wird, weicht der Finite-Elemente-Algorithmus selbst für stark streuende und optisch dicke ($\tau = 10^6$) Medien um weniger als 2 % von der analytischen Lösung ab. Im Gegensatz dazu

weichen die Lösungen des Finite-Differenzen-Codes im Fall großer Streuung bereits bei mäßiger optischer Tiefe ($\tau = 20$) um mehr als 10 % von der analytischen Lösung ab. Dies liegt daran, daß die Finite-Differenzen-Methode ein Verfahren 1. Ordnung ist und man eine sehr hohe Ortsauflösung benötigt, um vergleichbar gute Ergebnisse zu erzielen. Die Speichergröße der von uns verwendeten Rechner beschränkt die Anwendung des Finite-Differenzen-Codes auf strukturierte Gitter mit maximal 128^3 Zellen. Der Finite-Differenzen-Code reproduziert die analytischen Ergebnisse nur für nicht-streuende Medien oder für eine streuende Schicht mit geringer optischer Tiefe. Als letzten Test für den monochromatischen Code wurde ein Vergleich mit einem analytisch ermittelten Strahlungsstrom aus einer stark streuenden, kugelsymmetrischen Konfiguration durchgeführt. Zusätzlich ist dabei noch der Einfluß der Winkeldiskretisierung der Einheitssphäre S^2 auf die Lösung untersucht worden. Gleichzeitig dient diese dreidimensionale Konfiguration als erstes, einfaches Anwendungsbeispiel für die komplexeren Linientransportprobleme. Die Ergebnisse zeigen, daß der analytisch bestimmte Strahlungsstrom unabhängig von der Anzahl der Ordinaten bereits nach wenigen adaptiven Verfeinerungsschritten sehr gut reproduziert werden kann, was unter anderem auf die globale Erhaltungseigenschaft der Stromlinien-Diffusions-Diskretisierung zurückzuführen ist.

Die Güte des erweiterten frequenzabhängigen Codes konnte zunächst für den einfachsten Fall der kohärenten, isotropen Streuung in statischen Medien demonstriert werden, wobei als Referenzlösung ein analytisches Resultat herangezogen wurde (siehe oben). Für die wesentlich komplizierteren Fälle der vollständigen Wiederverteilung und die Berücksichtigung unterschiedlicher Geschwindigkeitsfelder existierten bis zum Abschluß der vorliegenden Arbeit keine analytischen Lösungen, so daß zum Vergleich eine frequenzerweiterte Version des dreidimensionalen Finite-Differenzen-Codes hinzugezogen wurde. Die Ergebnisse der beiden dreidimensionalen Codes stimmten im Rahmen der bereits im monochromatischen Fall diskutierten Diskrepanz für optische dicke, stark streuende Medien überein.

Die erfolgreiche Validierung des Finite-Elemente-Codes durch ausführliche Testrechnungen ließ es gerechtfertigt erscheinen, den Algorithmus auch auf komplexere, astronomisch interessante Konfigurationen anzuwenden. Die zahlreichen Beobachtungen der Ly α Linien von hoch-rotverschobenen Gaswolken, die als Protogalaxien gedeutet werden, hat uns veranlaßt, die Ly α Linie des atomaren Wasserstoff für eine Reihe von Modellkonfigurationen zu berechnen. Dabei sind die Auswirkungen unterschiedlicher makroskopischer Geschwindigkeitsfelder, wie Kollaps, Expansion oder Rotation, und verschiedener optischer Tiefen auf das beobachtete Linienprofil, das Ly α Bild und auf das sogenannte zweidimensionale Spektrum erfaßt worden. Die systematischen Untersuchungen von sehr einfachen bis äußerst komplexen Modellkonfigurationen lieferten folgende Ergebnisse:

- Ab einer moderaten optischen Tiefen von $\tau \geq 1$ beobachtet man eine Zentraleinsenkung des Linienprofils, so wie es analytische Untersuchungen (vgl. Neufeld 1990) erwarten lassen. Dieses charakteristische Linienprofil ist auf den Effekt der vollständigen Wiederverteilung zurückzuführen, die bewirkt, daß die Photonen bevorzugt über die Linienflügel entweichen, da dort die optische Dicke wesentlich geringer ist als im Linienzentrum.
- Makroskopische Geschwindigkeitsfelder, wie z.B. der Kollaps oder die Expansion, zerstören die Symmetrie des Linienprofils. Allgemein wird für einen Kollaps das blaue Maximum und für eine Expansionsbewegung das rote Maximum verstärkt. Dieser Effekt kann jedoch für spezielle Geschwindigkeitsfelder (z.B. solche mit einem sehr steilen Gradienten) abgeschwächt werden.
- Linienprofile mit der charakteristischen Zentraleinsenkung erscheinen im zweidimensionalen Orts-Frequenz-Spektrum als zwei separate Emissionsgebiete. Dabei sind den unterschiedlichen makroskopischen Geschwindigkeitsfeldern jeweils typische Emissionsgestalten zugeordnet. So bewirkt ein Kollaps oder eine Expansion ein charakteristisches dreiecksförmiges Emissionsmerkmal. Eine Rotationsbewegung dagegen verursacht ein typisches Scherungsmuster im zweidimensionalen Spektrum.
- Für nicht-symmetrische Modellkonfigurationen, wie z.B. für drei räumlich ausgedehnte Photonenquellen in einem gemeinsamen Halo, variiert die optische Tiefe mit der Sichtlinie. Somit hängt die Stärke des beobachteten Strahlungsstroms, die relative Tiefe der Zentraleinsenkung bzw. die Anzahl der Einsenkungen innerhalb des Linienprofils und das Emissionsmuster des zweidimensionalen Spektrums sehr stark von der Beobachtungsrichtung ab.

8.2 Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde der dreidimensionale Linientransport in bewegten Medien untersucht. Es sei unterstrichen, daß es sich hierbei um eine von vielen möglichen astrophysikalischen Anwendungen des erweiterten Algorithmus handelt. So wäre es beispielsweise denkbar, neben dem Linientransport die kohärente Streuung an Staubpartikeln einzubeziehen. Weitere Anwendungsbeispiele wären die Untersuchung von Kontinuums-Transportproblemen mit anisotroper Streuphasenfunktion (Rayleigh- und Thomson-Streuung), sowie die Compton-Streuung. Obwohl damit bereits vielfältige Anwendungsmöglichkeiten des erweiterten Algorithmus gegeben sind, so ist aus der Tabelle 1 (siehe Abschnitt 1.3) doch ersichtlich, daß das physikalische Modell erweiterbar ist. Für den in dieser Arbeit

beschriebenen Code wären folgende Erweiterungen des Modells sinnvoll:

- a) Erweiterung des Streumodells auf partielle (isotrope und anisotrope) Wiederverteilung;
- b) Berücksichtigung relativistischer Geschwindigkeitsfelder;
- c) Entwicklung eines Rechenverfahrens für die Modellierung von zeitabhängigen Strahlungsfeldern eines Zwei-Niveau-Atoms unter NLTE-Bedingungen;
- d) Entwicklung von Methoden zur Behandlung des multidimensionalen Strahlungstransports unter NLTE-Bedingungen mit mehreren Energieniveaus.

Jeder dieser vier Punkte stellt bereits für sich alleine ein anspruchsvolles Projekt dar. Wegen der Bedeutung der Kopplung von Strahlungsfeld und Materie seien besonders die letzten beiden Punkte c) und d) hervorgehoben. Üblicherweise sind die Zeitskalen für die Lichtausbreitung und die Einstellung von Niveaubesetzungszahlen kurz gegenüber den relevanten hydrodynamischen Zeitskalen, so daß Strahlungsfelder meist ohne explizite Berücksichtigung der Zeitableitung simuliert werden können. Bei Sternexplosionen oder bei der Ausbreitung von Stoßwellen in sehr dünnen Medien gibt es jedoch Situationen, in denen Einstellzeiten wesentlich sind. Unter solchen Bedingungen muß die Zeitableitung in der Strahlungstransportgleichung (1) berücksichtigt werden, und die Besetzungszahlen der Niveaus, die die Extinktionskoeffizienten und die Quellfunktion bestimmen, müssen durch zeitabhängige Ratengleichungen bestimmt werden. Bezüglich der Zeit und der Wellenlänge liegt dann ein Anfangswertproblem, bezüglich der Ortskoordinate weiterhin ein Randwertproblem vor.

Durch die Nichtlinearität der Ratengleichungen und die zusätzliche Zeitableitung ergibt sich ein wesentlich komplizierteres Modell (vgl. Müller 2001). Daher erscheint es sinnvoll, zunächst ein sehr einfaches Modell des Zwei-Niveau-Atoms zu verwenden. Als Vorstufe wurde bereits ein monochromatisches, instationäres Problem mittels eines impliziten Zeitschrittverfahrens gelöst. Dabei wird eine näherungsweise plan-parallele, streuende Schicht von einer simulierten externen Quelle beleuchtet. Die in die Schicht eindringenden Photonen werden gestreut und ein Teil kann auf der Quelle abgewandten Seite entweichen. Abb. 26 zeigt den zeitlichen Verlauf der Intensität eines Lichtpulses für verschiedene optische Tiefen, wobei der Lichtpuls für $t = t_0$ in die Schicht eindringt. Die Schicht wirkt mit zunehmender optischer Tiefe wie ein Spiegel, so daß immer weniger Photonen in das streuende Medium vordringen können. Um die einzelnen Kurven besser miteinander vergleichen zu können, wird die senkrecht austretende spezifische Intensität auf den Maximalwert normiert. Die Photonen benötigen mit zunehmender optischer Dicke deutlich mehr Zeit, um aus der streuenden Schicht zu entweichen,

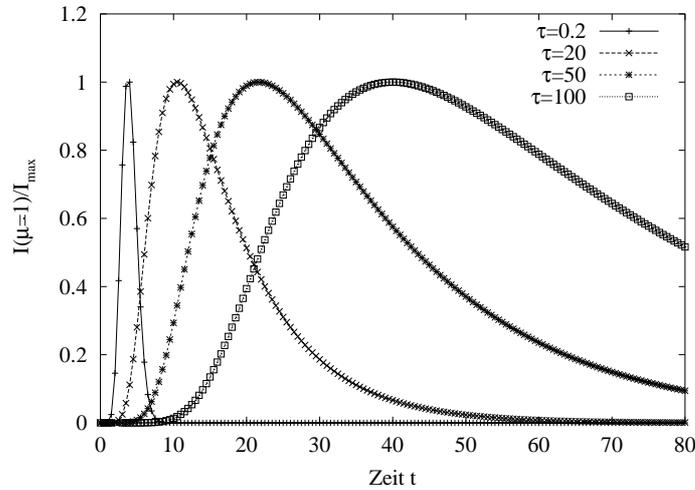


Abbildung 26: Zeitlicher Verlauf der Intensität eines Lichtpulses für unterschiedliche optische Tiefen τ einer streuenden Schicht. Die senkrecht aus der Schicht austretende Intensität $I(\mu = 1)$ ist auf ihren Maximalwert I_{\max} normiert. μ ist der Kosinus des Winkels zwischen der Flächennormalen der plan-parallelen Schicht und der Strahlrichtung.

was auf die Zunahme der Streuprozesse zurückzuführen ist. Der nächste Erweiterungsschritt wäre die Annahme eines Zwei-Niveau-Atoms unter Berücksichtigung der vollständigen Wiederverteilung (vgl. Kunasz 1983), so wie es in der vorliegenden Arbeit beschrieben wurde, nur daß ein zusätzlicher Ableitungsterm bezüglich der Zeit hinzukommen würde.

Bei der Behandlung des multidimensionalen Strahlungstransports unter NLTE-Bedingungen mit mehreren Energieniveaus wäre es angebracht, zunächst ein statisches Medium mit kohärenter Streuung zu betrachten. Für diese Konfiguration ist die stationäre, monochromatische Strahlungstransportgleichung mit vorgegebenen Quellen zu lösen, und zwar für zahlreiche diskrete Frequenzen, die sich aus der Lage der Energieniveaus der Atome (bzw. Ionen oder Moleküle) und den Linienprofilen ergeben. Dabei hängt der Absorptionskoeffizient von den Besetzungszahldichten der verschiedenen Energieniveaus ab. Die Besetzungszahldichten selbst bestimmen sich für jeden Ort durch die zeitabhängigen Ratengleichungen aus den spezifischen Intensitäten. Sie zeigen enge formale Verwandtschaft zu chemischen Reaktionssystemen, wobei hier dem diffusiven bzw. konvektiven Speziestransport der Photonentransport durch Strahlung entspricht. Aus Müller (2001) sind Eigen-

schaften der zeitabhängigen Ratengleichungen bekannt, die darauf hindeuten, daß kein steifes System vorliegt. Um etwa ein Be-Stern-System zu simulieren, sollten 10 Energieniveaus und 500 Frequenzpunkte berücksichtigt werden.

Danksagung

Besonders danken möchte ich Herrn Prof. Rainer Wehrse für die Vergabe dieses äußerst interessanten Dissertationsthemas, die zahlreichen sachbezogenen Diskussionen, und seine Hilfsbereitschaft während der Betreuung dieser Arbeit.

Herrn Prof. Rolf Rannacher danke ich vielmals für die Erstellung des Zweitgutachtens, aber auch für die gute Betreuung und das Ermöglichen dieser interdisziplinären Arbeit.

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft danke ich für die finanzielle Unterstützung, die es mir im Rahmen des Sonderforschungsbereichs 359 „Reaktive Strömungen, Diffusion und Transport“ ermöglichte, diese Dissertation fertigzustellen.

Neben meinem allgemeinen Dank an die Kollegen und Mitarbeiter des Instituts für Theoretische Astrophysik und des Instituts für Angewandte Mathematik (Numerik) für die gute Arbeitsatmosphäre und stete Hilfsbereitschaft, gilt mein besonderer Dank Sabine Richling und Guido Kanschat für die vielen anregenden Diskussionen und die gute Zusammenarbeit.

Nicht zuletzt gebührt mein Dank meinen Eltern, meiner Frau Andrea und meinem Sohn Till, die mich stets bei meiner Arbeit unterstützt haben.

Literatur

- Adam J. 1990, A&A 240, 541
- Adams T.F. 1972, ApJ 174, 439
- Adams R.A. 1975, Sobolev Spaces, Academic Press, New York
- Ahn S.-H., Lee H.-W., Lee H. M. 2001, ApJ 554, 604
- Ahn S.-H., Lee H.-W., Lee H. M. 2002, ApJ 567, 992
- Ainsworth M., Oden J.T. 1997, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 142, 1–88
- Auer L.H., Mihalas D. 1969, ApJ 158, 641
- Bachiller R. 1996, ARA&A 34, 111
- Bally J., Sutherland R.S., Devine D., Johnstone D. 1998, AJ 116, 293
- Baschek B., Efimov G.V., von Waldenfels W., Wehrse R. 1997a, A&A 317, 630
- Baschek B., Grüber C., von Waldenfels W., Wehrse R. 1997b, A&A 320, 920
- Baschek B., Wehrse R. 1999, Physics Reports 311, 201
- Becker R., Rannacher R. 1996, East-West J. Numer. Math. 4, 237–264
- Becker R., Rannacher R. 2001, Acta Numerika 2001, Cambridge University Press, im Druck
- Bicknell G.V., Sutherland R.S., van Breugel W.J.M., et al. 2000 ApJ 540, 678
- Böttcher K. 1996, Adaptive Schrittweitenkontrolle beim unstetigen Galerkin-Verfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen, Diplomarbeit, Universität Heidelberg
- Bommier V. 1997, A&A 328, 706
- Bommier V. 1997, A&A 328, 726
- Braess D. 1997, Finite Elemente, Springer, Berlin
- Brenner S.C., Scott L.R. 1996, The Mathematical Theory of Finite Element Methods, Springer, New York

- Capetti A., Axon D.J., Macchetto F., Sparks W.B., Boksenberg A. 1995a, ApJ 446, 155
- Capetti A., Axon D.J., Macchetto F., Sparks W.B., Boksenberg A. 1995b, ApJ 448, 600
- Capetti A., Macchetto F., Axon D.J., Sparks W.B., Boksenberg A. 1995c, ApJ 452, 87
- Chandrasekhar S. 1960, Radiative Transfer, Dover, New York
- Ciarlet P.G. 1978, The Finite Element Method for Elliptic Problems, North Holland, New York
- Collison A., Fix J. 1991, ApJ 368, 545
- Colomb F.R., Pöppel W.G.L., Heiles C. 1980, A&A 40, 47
- Dautray R., Lions J.-L. 1993, Math. Anal. and Num. Meth. for Sci. and Tech., Vol. 6, Springer, Berlin-Heidelberg
- De Breuck C., Röttgering H., Miley G., van Breugel W., Best P. 2000, A&A 362, 519
- Dullemond C.P., Turolla R. 2000, A&A 360, 1187
- Efimov G.V., von Waldenfels W., Wehrse R. 1995, J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf. 53, 59
- Efimov G.V., von Waldenfels W., Wehrse R. 1997, J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf. 58, 355
- Efimov G.V., Kryzhevoi N., von Waldenfels W., Wehrse R. 2002, in Vorbereitung
- Efstathiou A., Rowan-Robinson M. 1991, MNRAS 252, 528
- Eriksson K., Johnson C. 1987, SIAM J. Numer. Anal. 24, 12
- Eriksson K., Johnson C. 1991, SIAM J. Numer. Anal. 28, 43
- Eriksson K., Johnson C. 1993, Math. Comput. 60/201, 167
- Eriksson K., Johnson C., Thomée C. 1985, RAIRO Math. Anal. 19, 611
- Eriksson K., Estep D., Hansbo P., Johnson C. 1995, Acta Numerica 1995, Cambridge University Press, 105

- Führer C. 1993, Diplomarbeit, Universität Heidelberg
- Führer C., Kanschat G. 1995, Preprint 95-31, IWR, Universität Heidelberg
- Fynbo J.U., Thomsen B., Moller P. 2000, A&A 353, 457
- Fynbo J.U., Moller P., Thomsen B. 2001, A&A 374, 443
- Grosche G., Ziegler V., Ziegler D. 1996, Taschenbuch der Mathematik, Teil 1, Teubner, Stuttgart
- Großmann C., Roos H.-G. 1992, Numerik Partieller Differentialgleichungen, 2. Aufl., Teubner, Stuttgart
- Haardt F., Maraschi L. 1991, ApJ 380, L51
- Haber S. 1970, SIAM Review 12, 481
- Hackbusch W. 1993, Iterative Lösung großer schwachbesetzter Gleichungssysteme, Teubner, Stuttgart
- Hartmann R. 1998, A-posteriori Fehlerschätzung und adaptive Schrittweiten- und Ortsgittersteuerung bei Galerkin-Verfahren für die Wärmeleitungsgleichung, Diplomarbeit, Universität Heidelberg
- Hippelein H., Meisenheimer K. 1993, Nature 362, 224
- Hogerheijde M. 1998, The Molecular Environment of Low-Mass Protostars, Ph.D. Thesis, Rijks Univesiteit Leiden
- Hu E.M., Cowie L.L., McMahon R.G. 1998, ApJ 502, L99
- Hubney I. 1989, In: Meyer F., et al. (eds.) Theory of Accretion Disks, Kluwer
- Hummer D. 1962, MNRAS 125, 21
- Hummer D.G., Kunasz P.B. 1980, ApJ 236, 609
- Juvela M. 1998, A&A 322, 943
- Kalkofen W. (ed.) 1987, Numerical Radiative Transfer, Cambridge Univ. Press, Cambridge
- Kanschat G. 1996, Parallel and Adaptive Galerkin Methods for Radiative Transfer Problems, Dissertation, Universität Heidelberg
- Kanschat G. 1998, East-West J. Numer. Math. 6/4, 265

- Kanschat G. 2000, In: Björstad P. and Luskin M. (eds.) Parallel Solution of PDE. IMA Vol. in Math. and its Appl. 120, New York, Springer
- Kourganoff V. 1963, Basic Methods in Radiative Transfer, Cambridge Univ. Press, Cambridge
- Kudritzki R.-P., Mendez R.H., Feldmeier J.J., et al. 2000, ApJ 536, 19
- Kunasz P.B. 1983, ApJ 271, 321
- Kunasz P., Auer L.H. 1988, J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf. 39, 67
- Kurk J.D., Roettgering H.J.A., Penericci L., Miley G.K. 2001, RevMexAA (Serie de Conferencias), in press
- Lenzen R. 1987, A&A 173, 124
- Macchetto F., Capetti A., Sparks W.B., Axon D.J., Boksenberg A. 1994, Ap j 435, L15
- McCaughrean M.J., O'Dell C.R. 1996, AJ 111, 1977
- Meinköhn E., Richling S. 2002, A&A 392, 827
- Mihalas D. 1978, Stellar Atmospheres, W.H. Freeman and Company, Second Edition, San Francisco
- Mihalas D., Weibel-Mihalas B. 1984, Foundations of Radiation Hydrodynamics, University Press, Oxford
- Müller P. 2001, 3D-NLTE-Linienbildung in differentiell bewegten Molekülwolken mit protostellaren Kernen und analytische Untersuchungen zur hydrodynamischen Struktur axialsymmetrischer Systeme, Dissertation, Universität Heidelberg
- Murray S., Castor J., Klein R., McKee C. 1994, ApJ 435, 631
- Myers P.C., Fuller G.A., Goodman A.A., Benson P.J. 1991, ApJ 376, 561
- Neufeld, D.A. 1990, ApJ 350, 216
- Oxenius J. 1986, Kinetic Theory of Particles and Photons, Springer, Heidelberg
- Park Y.-S., Hong S.S. 1998, ApJ 494, 605
- Perron O., 1957, Die Lehre von den Kettenbrüchen, Band II, B.G.Teubner Verlagsgesellschaft, Stuttgart

- Pozdniakov L.A., Sobol I.M., Suniaev R.A. 1979, *A&A* 75, 214
- Rannacher R. 1998, In: Bulgak H. and Zenger C. (eds.), *Proc. Summer School Error Control and Adaptivity in Scientific Computing*, Kluwer, Academic Publisher, 247–278
- Rannacher R. 2001, *Numerische Methoden für Partielle Differentialgleichungen*, Vorlesungsskriptum, Universität Heidelberg (<http://gaia.iwr.uni-heidelberg.de/httpdoc/Lectures/Notes/notes.html>)
- Rhoads J.E., Malhotra S., Dey A. 2000, *ApJ* 545, L85
- Richling S., Meinköhn E., Kryzhevoi N., Kanschak G. 2001, *A&A* 380, 776
- Robertson J.G. and Tango W.J. (eds.) 1994, *Proc. of the 158th Symposium of the IAU*, 158, Kluwer, Dordrecht
- Rosen A., Bregman J.N. 1995, *AJ* 440, 634
- Rybicki G., Hummer D. 1991, *A&A* 245, 171
- Saad Y. 2000, *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, PWS Publ., Boston
- Scharmer G.B. 1981, *ApJ* 249, 720
- Schuster A. 1905, *ApJ* 21, 1
- Schwarz H.R. 1991, *Methode der finiten Elemente*, Teubner, Stuttgart
- Sleijpen G.L.G., Fokkema D.R. 1993, *Electronic Transactions on Numerical Analysis* 1, 11 (<http://etna.mcs.kent.edu>)
- Spaans M. 1996, *A&A* 307, 271
- Sonnhalter C., Preibisch T., Yorke H. 1995, *A&A* 299, 545
- Stenholm L.G., Störzer H., Wehrse R. 1991, *J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf.* 45, 47
- Steidel C.C., Adelberger K.L., Sharply A.E., Pettini M., Dickinson M., Giavalisco M. 2000, *ApJ* 532, 170
- Turek S. 1993, *Imp. Comp. Sci. Eng.* 5, 201
- Van der Vorst H. 1992, *J. Sci. Statist. Comput.* 13, 631

- van Ojik R., Röttgering H.J.A., Carilli C.L., Miley G.K., Bremer M.N., Macchetto F. 1996, A&A 313, 25
- van Ojik R., Röttgering H.J.A., Miley G.K., Hunstead R.W. 1997, A&A 317, 358
- Varga R.S. 2000, Matrix Iterative Analysis, Springer, Berlin-Heidelberg
- Verfürth R. 1996, A Review of A Posteriori Error Estimation and Adaptive Mesh Refinement Techniques, Wiley-Teubner, New York-Stuttgart
- Villar-Martín, M., Binette, L., Fosbury, R.A.E. 1999, A&A 346, 7
- Wehrse R., Meinköhn E., Kanschat G. 1999, In: Stee P. (ed.) Forum du GRE-TA, Transfert de Rayonnement en Astrophysique, CNRS-INSU-ASPS, 82 (<http://www.iwr.uni-heidelberg.de/sfb359/Preprints1999.html>)
- Wehrse R., Baschek B. 1999, Physics Reports 311, 187
- Wehrse R., Baschek B., Waldenfels W.v. 2000, A&A 359, 780
- Wild A. 1999, Diskretisierungen und Fehlerschätzer für Strahlungstransportmodelle, Diplomarbeit, Universität Heidelberg
- Wloka J, 1982, Partielle Differentialgleichungen, Sobolewräume und Randwertaufgaben, Teubner, Stuttgart
- Wolf S., Henning T., Stecklum B. 1999, A&A 349, 839
- Yorke H., Bodenheimer P., Laughlin G. 1993, ApJ 411, 274
- Zheng Z., Miralda-Escudé J. 2002, Monte Carlo Simulation of Ly α Scattering and Application to Damped Ly α Systems, zur Veröffentlichung akzeptiert von ApJ

A „Separable Representation Method“

Die „separable representation method“ (SR) von Efimov et al. (1995, 1997, 2002) liefert eine analytische Lösung der plan-parallelen Strahlungstransportgleichung

$$\mu \frac{d\mathcal{I}}{d\tau} = -\mathcal{I} + \frac{\gamma}{2} \int_{-1}^1 I d\mu' + (1 - \gamma), \quad (203)$$

in folgender Form

$$\mathcal{I}_{\text{out}}(\mu) = \frac{1 - \gamma}{\gamma} \frac{2}{\sqrt{\mu}} \frac{1}{w^{(0)}(\mu, \mu') - w^{(2)}(\mu, \mu')} \frac{E(\mu'^2)}{\sqrt{\mu'}}, \quad (204)$$

wobei die Integration von 0 bis 1 über μ' bereits enthalten ist. Die Operatoren $w^{(0)}(\mu, \mu')$, $w^{(2)}(\mu, \mu')$ und die Funktion $E(\mu^2)$ haben die Gestalt

$$\begin{aligned} E(\mu^2) &= \frac{4\gamma}{\tau} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{C_m} \cdot \frac{\mu^2}{1 + y_m^2 \mu^2}, \\ w^{(0)}(\mu, \mu') &= \left(1 + \tanh\left(\frac{\tau}{2\mu}\right) \right) \delta(\mu - \mu'), \\ w^{(2)}(\mu, \mu') &= \frac{4\gamma}{\tau} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{y_m^2}{C_m} \cdot \frac{\mu^{3/2}}{1 + y_m^2 \mu^2} \cdot \frac{\mu'^{3/2}}{1 + y_m^2 \mu'^2}, \end{aligned}$$

wobei

$$y_m = \frac{2\pi}{\tau} \left(m + \frac{1}{2} \right), \quad C_m = 1 - \gamma \frac{\arctan(y_m)}{y_m}.$$

γ ist die Albedo und τ die optische Tiefe.

Um die erforderliche Genauigkeit zu erhalten, müssen mehrere Tausend Summanden mitberücksichtigt werden. Dies führt zu einer äußerst langsamen Konvergenz der Summen, so daß diese Lösung in der Praxis nicht angewandt werden kann. Daher müssen geeignete Näherungen von $E(\mu^2)$ and $w^{(2)}(\mu, \mu')$ gefunden werden. Die Stieltjes-Markov Theorie der orthogonalen Funktionen (siehe Perron 1957) gestattet es, die unendlichen Summe durch endliche der Form

$$E(\mu^2) \approx E_N(\mu^2) = \sum_{n=1}^N \frac{a_n \mu^2}{1 + A_n \mu^2},$$

zu ersetzen, wobei a_n und A_n von τ abhängen. Mit Hilfe der Funktion $E(\mu^2)$ schreibt sich der Operator

$$w^{(2)}(\mu, \mu') = \mu^{3/2} \cdot \frac{\frac{E(\mu'^2)}{\mu'^2} - \frac{E(\mu^2)}{\mu^2}}{\mu'^2 - \mu^2} \cdot \mu'^{3/2},$$

was zur SR Darstellung von $w_N^{(2)}(\mu, \mu')$ führt:

$$w_N^{(2)}(\mu, \mu') \approx \sum_{n=1}^N \frac{\mu^{3/2}}{1 + A_n \mu^2} \cdot a_n A_n \cdot \frac{\mu'^{3/2}}{1 + A_n \mu'^2}.$$

Somit ergibt sich die endgültige Lösung

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{\text{out}}(\mu) &= \frac{1 - \gamma}{\gamma} \left(1 + e^{-\tau/\mu} \right) \times \\ &\times \left(\frac{1}{\mu} E_N(\mu^2) + \sum_{mn'}^N \frac{\mu}{(1 + A_n \mu^2)} S_{mn'} K_{n'} \right), \end{aligned} \quad (205)$$

wobei $S_{mn'}$ eine Matrix und $K_{n'}$ ein Vektor ist, die allerdings nur einmal für gegebene Parameter τ und γ berechnet werden müssen.

B Finite-Differenzen-Methode

B.1 Monochromatischer Strahlungstransport

Der Finite-Differenzen-Code (FD) basiert auf einer impliziten Diskretisierung der monochromatischen Strahlungstransportgleichung (27) aus Abschnitt 3.1 in kartesischen Koordinaten. Das resultierende lineare Gleichungssystem wird zusammen mittels Rekursion und einem iterativen Verfahren gelöst (siehe Stenholm et al. 1991): Falls $\vartheta = (\vartheta_x, \vartheta_y, \vartheta_z)$ die spezifische Strahlrichtung definiert und Δx , Δy und Δz die räumliche Auflösung charakterisiert, lautet die mittels einer erste Ordnung „upwind“-Methode diskretisierten monochromatische Strahlungstransportgleichung

$$\begin{aligned} \frac{\vartheta_x}{\Delta x} (\mathcal{I}_{i,j,k} - \mathcal{I}_{i-1,j,k}) + \frac{\vartheta_y}{\Delta y} (\mathcal{I}_{i,j,k} - \mathcal{I}_{i,j-1,k}) \\ + \frac{\vartheta_z}{\Delta z} (\mathcal{I}_{i,j,k} - \mathcal{I}_{i,j,k-1}) = -\chi_{i,j,k} (\mathcal{I}_{i,j,k} - Q_{i,j,k}), \end{aligned}$$

wobei i , j und k einen Punkt im durchnummerierten Ortsgitter beschreiben. Dieses System wird rekursiv gelöst durch

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{i,j,k} = \left(\frac{\vartheta_x}{\Delta x} \mathcal{I}_{i-1,j,k} + \frac{\vartheta_y}{\Delta y} \mathcal{I}_{i,j-1,k} + \frac{\vartheta_z}{\Delta z} \mathcal{I}_{i,j,k-1} \right. \\ \left. + \chi_{i,j,k} Q_{i,j,k} \right) / \left(\frac{\vartheta_x}{\Delta x} + \frac{\vartheta_y}{\Delta y} + \frac{\vartheta_z}{\Delta z} + \chi_{i,j,k} \right). \end{aligned}$$

Mit dem Extinktionskoeffizienten $\chi = \kappa + \sigma$ und der Albedo $\gamma = \sigma/\chi$ ist die gesamte Quellfunktion (inklusive Streuterm) gegeben durch

$$Q(x) = \frac{f(x)}{\chi(x)} + \gamma(x) \int_{S^2} P(\vartheta', \vartheta) \mathcal{I}(x, \vartheta') d\vartheta' \quad (206)$$

und wird mittels der Methode der Überrelaxation („successive overrelaxation“=SOR, siehe z.B. Schwarz 1991) iterativ bestimmt. Der Iterationsprozess wird so lange durchgeführt, bis $\max |(J^n - J^{n-1})/J^n| < \varepsilon$, wobei J^n die mittlere Intensität des n -ten Iterationsschrittes und ε eine sehr kleine Zahl ist. Diese relativ einfache Lösungsmethode ist für alle optischen Tiefen stabil und garantiert im gesamten Rechenggebiet positive Intensitäten. Jedoch treten insbesondere dann große Schwierigkeiten auf, wenn steile Gradienten der Koeffizienten oder der spezifischen Intensität auftreten. Da es sich um ein statisches Iterationsverfahren handelt, konvergiert es für große optische Tiefen und eine hohe Albedo ($\gamma \approx 1$) sehr langsam, so daß in akzeptablen CPU-Rechenzeiten keine korrekte Lösung garantiert werden kann (siehe Richling et al. 2001).

B.2 Frequenzabhängiger Strahlungstransport

Der erweiterte FD Code, der neben frequenzabhängigen Strahlungsfeldern auch beliebige Geschwindigkeitsfelder und die vollständige Wiederverteilung mitberücksichtigt, basiert auf der Kontinuums-Version von Stenholm et al. (1991), den wir in Anhang B.1 kurz beschrieben haben. Der Algorithmus gilt für das mitbewegte System, so daß keine anisotropen Extinktionskoeffizienten auftreten, die zu erheblichen Schwierigkeiten bei Winkeldiskretisierung führen würden (siehe Adam 1990).

Für Geschwindigkeiten $\beta(x) = v(x)/c \ll 1$ und logarithmische Frequenzen $\xi_0 = \ln v_0$ werden die invarianten Intensitäten $\mathcal{I}(x, \vartheta, \xi_0)$ bestimmt durch die frequenzabhängige Strahlungstransportgleichung für bewegte Medien (156). Der FD-Code verwendet jedoch wellenlängenabhängige Größen, so daß Gleichung (156) geschrieben wird als

$$\begin{aligned} \vartheta \cdot \nabla_x \mathcal{I}(x, \vartheta, \zeta_0) + w(x, \vartheta) \frac{\partial \mathcal{I}(x, \vartheta, \zeta_0)}{\partial \zeta_0} \\ = -\chi(x, \zeta_0) (\mathcal{I}(x, \vartheta, \zeta_0) - Q(x, \vartheta, \zeta_0)), \end{aligned} \quad (207)$$

wobei $\zeta = \ln \lambda$ die logarithmische Wellenlänge ist. In dieser Gleichung werden der Einheitsvektor in Strahlrichtung ϑ , der Ortsvektor x , der Geschwindigkeitsgradient in Strahlrichtung $w(x, \vartheta) = \vartheta \cdot \nabla_x (\vartheta \cdot \beta(x))$, der Extinktionskoeffizient $\chi(x, \zeta_0) =$

$\kappa(x, \zeta_0) + \sigma(x, \zeta_0)$ und die erweiterte Quellfunktion (inklusive Streuterm)

$$Q(x, \vartheta, \zeta_0) = \frac{1}{\chi(x, \zeta_0)} \left(\varepsilon \chi(x, \zeta_0) B(x, \zeta_0) + (1 - \varepsilon) \chi(x, \zeta_0) \int_{\mathbb{R}^+} \varphi(\zeta'_0) \int_{S^2} P(\vartheta', \vartheta) \mathcal{I}(x, \vartheta', \zeta'_0) d\vartheta' d\zeta'_0 \right) \quad (208)$$

verwendet, wobei $\varphi(\zeta_0)$ das Emissions- bzw. Absorptionsprofil, $\varepsilon = \kappa/\chi$ der Thermalisierungsfaktor, $B(x, \zeta_0)$ die Planck Funktion und $P(\vartheta', \vartheta)$ die in Gleichung (28) definierte Phasenfunktion ist.

Wie im monochromatischen Fall (siehe Anhang B.1) wird zur Lösung der Gleichung (208) ein finites Differenzenverfahren auf einem Tensorproduktgitter mit einer erste Ordnung „upwind“-Diskretisierung verwendet. Zusätzlich existiert eine äußere SOR-Iterationsschleife zur Bestimmung der Quellfunktion. Dh., unter der Annahme, daß ϑ nur positive Komponenten enthält, $w_{i,j,k} > 0$ (i, j, k charakterisieren die Ortsgitterpunkte und l bezieht sich auf die ζ -Diskretisierung) ist und daß eine Näherung für die Quellfunktion verfügbar ist, erhalten wir folgende Rekursionsformel

$$\mathcal{I}_{i,j,k,l} = \left(\frac{\vartheta_x}{\Delta x} \mathcal{I}_{i-1,j,k,l} + \frac{\vartheta_y}{\Delta y} \mathcal{I}_{i,j-1,k,l} + \frac{\vartheta_z}{\Delta z} \mathcal{I}_{i,j,k-1,l} + \chi_{i,j,k,l} Q_{i,j,k,l} + \frac{w_{i,j,k}}{\Delta \zeta} \mathcal{I}_{i,j,k,l-1} \right) / \left(\frac{\vartheta_x}{\Delta x} + \frac{\vartheta_y}{\Delta y} + \frac{\vartheta_z}{\Delta z} + \chi_{i,j,k,l} + \frac{w_{i,j,k,l}}{\Delta \zeta} \right), \quad (209)$$

wobei $\Delta \zeta$ die Auflösung des Wellenlängengitters charakterisiert. Das Durchlaufen der diskreten Wellenlängenpunkte erfolgt in der innersten Schleife, da w innerhalb des Rechengebiets für bestimmte Geschwindigkeitsfelder (z.B. Rotation) das Vorzeichen wechseln kann. Die Quellfunktion wird in einer äußeren Schleife durch eine Fixpunktiteration (SOR-Iteration) bestimmt. Das Verfahren ist für alle optischen Tiefen und Geschwindigkeitsgradienten stabil, wobei es keine steilen Gradienten auflösen kann. Wie im monochromatischen Fall ist die SOR-Methode eine statische Fixpunktiteration und es konvergiert für große optische Tiefen und eine hohe Albedo ($\gamma \approx 1$) sehr langsam, so daß in akzeptablen CPU-Rechenzeiten keine korrekte Lösung garantiert werden kann.