Entwicklung und Untersuchung von *Moving Least Square* Verfahren zur numerischen Simulation hydrodynamischer Gleichungen

DISSERTATION
zur Erlangung des Grades eines Doktors
der Naturwissenschaften

der Fakultät für Physik
der Eberhard–Karls–Universität zu Tübingen

vorgelegt von

Matthias Kunle

aus
Bad Urach

2001

Selbstverlegt von:	Matthias Kunle Kastanienweg 5 72076 Tübingen
Tag der mündlichen Prüfung:	7. November 2001
Dekan:	Prof. Dr. G.J. Wagner
1. Berichterstatter:	Prof. Dr. H. Ruder
2. Berichterstatter:	Prof. Dr. W. Kley

Entwicklung und Untersuchung von *Moving Least Square* Verfahren zur numerischen Simulation hydrodynamischer Gleichungen

Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung und Erprobung neuer Verfahren zur numerischen Lösung der hydrodynamischen Gleichungen. Dabei sollen sowohl Kollokationsverfahren als auch Galerkin–Verfahren untersucht werden. Der generelle Ansatz dieser Verfahren basiert auf einer Approximation, welcher die *Moving Least Square* Methode zur Grunde liegt. Mit diesen Approximationen von Funktionen werden nun diskrete Gleichungen aufgestellt, sowohl in Eulerscher als auch Lagrangescher Beschreibungsweise einer Strömung.

Die praktische Umsetzung und Erprobung der gefundenen Verfahren erfolgt anhand einfacher Testbeispiele wie der Advektionsgleichung, des eindimensionalen Stoßrohres und einer starr rotierenden Gasscheibe.

Im ersten Teil dieser Arbeit werden die durch die *Moving Least Square* Methode erhaltenen Approximationen auf wichtige Eigenschaften untersucht. Die wohl wichtigste Eigenschaft betrifft die Basisfunktionen bezüglich derer eine Funktion entwickelt wird. Es stellt sich heraus, daß die Basisfunktionen exakt approximiert werden. Diese Tatsache begründet die Konsistenz der folgenden Verfahren. Insbesondere bilden die Kernfunktionen, welche sich aus den Basisfunktionen und einer Gewichtsfunktion zusammensetzen, eine Partition der Eins. Ein beeindruckendes Merkmal spiegelt sich in der Wahl der Gewichtsfunktion wider, wobei zwischen einem interpolierenden und nichtinterpolierenden Verfahren unterschieden wird. Genauere Untersuchen legen in Folge nahe, daß das nichtinterpolierende Verfahren große Gradienten nicht abbilden kann, so daß dieses Verfahren speziell für die hydrodynamischen Gleichungen ungeeignet ist. Eine Untersuchung des numerischen Fehlers bzw. der Ordnung unter Verwendung des interpolierenden Verfahrens runden die Grundlagen ab.

Im zweiten Teil der Arbeit wird die *Moving Least Square* Methode und die daraus folgenden Diskretisierungen in drei unterschiedlichen Verfahren detailliert vorgestellt. Bei diesen handelt es sich um das Kollokationsverfahren, das Galerkin–Verfahren und das Lagrangesche Verfahren. Im Kollokationsverfahren werden die *Moving Least Square* Approximationen direkt auf die Funktionen in den vorhandenen Differentialgleichungen angewandt. Bei einer regelmäßigen Stützstellenverteilung entsprechen die Ergebnisse dem eines Verfahrens mit Finiten Differenzen der jeweils zugehörigen Ordnung. Ein Vorteil des Kollokationsverfahrens gegenüber den Verfahren mit Finiten Differenzen ist die einfache Anpassung der Ordnung, welche mit Hilfe eines Parameters geregelt wird. Zudem wird gezeigt, daß die Anwendug des Kollokationsverfahrens auf eine irreguläre Stützstellenverteilung möglich ist, was speziell eine lokale Verfeinerung des Gitters sehr einfach gestaltet. Im Galerkin–Verfahren findet die schwache Formulierung einer Differentialgleichung Verwendung, was den wesentlichsten Unterschied zum Kollokationsverfahren ausmacht. Bei den gefundenen Diskretisierungen der hydrodynamischen Gleichungen, ergeben sich Erhaltungssätze für Gesamtmasse, Gesamtimpuls und Gesamtenergie. Während im Kollokationsverfahren und im Galerkin–Verfahren ein starres Gitter Verwendung findet, wird im Lagrangeschen Verfahren darauf verzichtet. Die Stützstellen besitzen eine explizite Zeitabhängigkeit, das bedeutet, sie können sich eigenständig durch das Simulationsgebiet bewegen. Bei den gefundenen Diskretisierungen der hydrodynamischen Gleichungen ergeben sich Erhaltungssätze für die Masse einer Stützstelle, den Gesamtimpuls und der Gesamtenergie, so daß sich die Stützstellen als Teilchen interpretieren lassen und das Verfahren als ein Teilchenverfahren bezeichnet werden kann.

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Motivation

Die Frage, was Hydrodynamik mit Astrophysik gemein hat, kann eigentlich nur dadurch beantwortet werden, daß sich das Universum als ein wunderbares Hydrodynamiklabor darbietet. Fast jeder Typ von Gasströmung, den man auf der Erde beobachtet, findet sich im Universum auf riesigen Skalen. Überschallströmungen, magnetohydrodynamische Prozesse, Turbulenzen, Instabilitäten usw., das alles wird einem in einer Reichhaltigkeit und, je nach verwendetem Beobachtungsinstrument, sehr detailliert präsentiert. Es verwundert daher nicht, daß der theoretische Astrophysiker die hydrodynamischen Gleichungen ausführlich studiert.

Analytische Lösungen sind aufgrund der Komplexität und Nichtlinearität der hydrodynamischen Gleichungen nur in wenigen Ausnahmefällen bestimmbar. Es ist daher notwendig, numerische Verfahren zu entwickeln, die die Charakteristika der jeweiligen Strömung mit hoher Genauigkeit widerspiegeln. Ein großes Problem bei der numerischen Simulation von astrophysikalischen Gasströmungen ist deren immense Variabilität in den Skalen. Es treten im Universum Geschwindigkeiten von wenigen Kilometern pro Sekunde bis in den relativistischen Bereich auf, Dichteunterschiede, die beispielsweise vom Inneren eines Neutronensterns innerhalb weniger Kilometer auf einen Bruchteil von 10^{-14} abfallen oder Temperaturen von 10 Kelvin bis 10^8 Kelvin.

Die numerische Lösung solcher astrophysikalischer Strömungen basiert seit vielen Jahren auf Verfahren mit Finiten Differenzen. Besonderes Interesse liegt hierbei in den sogenannten *High–Resolution–Shock–Capturing* (HRSC) Methoden, bei denen zu jedem Zeitpunkt ein lokales Riemann–Problem zwischen benachbarten Gitterzellen zu lösen ist (Godunov (1959), van Leer (1977), Colella, Woodward (1984)). Da bei diesen Verfahren die analytische Lösung des Riemann–Problems eingeht, wird eine Strömung mit Diskontinuitäten, wie Schocks, numerisch ausgezeichnet simuliert. Allerdings ist die Erweiterung dieser HRSC Verfahren auf mehrere Dimensionen mit erheblichen Schwierigkeiten verbunden, vor allem bei Anwendung adaptiver Gitterverfeinerungen.

Aufgrund solcher Problematiken ist man dazu übergegangen, sich mit gitterlosen Diskretisierungen zu beschäftigen. Ein in der Astrophysik häufig anzutreffendes Verfahren ist die *Smoothed Particle Hydrodynamics* (SPH). Sie wurde erstmals von Gingold, Monaghan (1977) und von Lucy (1977) vorgeschlagen und nimmt seitdem einen hohen Stellenwert in vielen Bereichen der numerischen Astrophysik ein. Die mit der SPH Methode mittlerweile durchgeführten Simulationen reichen von klassischen Anwendungsgebieten, wie der Simulation von Akkretionsscheiben (Lubow (1992)), bis in relativistische Bereiche (Laguna, Miller, Zurek (1993), Siegler (2000)). Bei der SPH Methode handelt es sich um ein Lagrangesches Teilchenverfahren, bei dem die hydrodynamischen Gleichungen an mitbewegten Stützstellen approximiert werden. Dabei bietet die SPH Methode eine Vielzahl von Vorzügen: Sie ist sehr robust, d.h. es treten kaum numerische Instabilitäten auf, sie ist sehr flexibel, was speziell für komplexe Geometrien vorteilhaft ist, sie ist sehr einfach in einen Computercode zu implementieren und sie ist potentiell adaptiv. Demgegenüber steht bei der SPH Methode auch eine Reihe wesentlicher Nachteile, wie zum Beispiel hohe Fluktuation bei der Darstellung gesuchter Lösungsfunktionen. Aber der wohl bedeutendste Nachteil ist die nicht vorhandene Konsistenz. Das bedeutet, daß nicht einmal eine konstante Funktion lokal exakt approximiert werden kann. Mathematische Aussagen über Stabilität, Konsistenz und Konvergenz gelingen daher nur für wenige spezielle Beispiele (Morris (1994), Balsara (1995), Sweagle, Hicks, Attaway (1995), Lisio, Grenier, Pulvirenti (1998)), sind aber generell nicht geklärt, so daß den Simulationen oft eine große Skepsis entgegengebracht wird.

Eine interessante Alternative zur SPH Methode bietet die erst kürzlich entwickelte *Finite Mass Method* (FFM), bei der es sich auch um ein Lagrangesches Verfahren handelt (Yserentant 1997). Im Gegensatz zur SPH Methode wird bei FFM die Strömung in sogenannte Massepakete endlichen Volumens aufgeteilt, welche jeweils eigene Masse, Impuls, Drehimpuls und Energie zur Gesamtlösung beitragen. Damit wird erreicht, daß das Verfahren konsistent und konvergent ist (Yserentant 1994). Es zeichnet sich jedoch ab, daß das Verfahren numerisch sehr aufwendig ist.

Ziel dieser Arbeit ist nun die Entwicklung und Erprobung numerischer Verfahren zur Simulation hydrodynamischer Gleichungen, welche durch Anwendung des *Moving Least Square* Ansatzes definierbaren lokalen Approximationseigenschaften genügen. Dabei sollen sowohl Eulersche als auch Lagrangesche Verfahren untersucht werden. Da es sich hier um die Entwicklung neuartiger Ansätze für Diskretisierungen von Differentialgleichungen handelt, sind weiterführende Literaturangaben nur in Ausnahmefällen angebbar.

Der Ursprung der *Moving Least Square* Methode liegt eigentlich nicht bei der Diskretisierung und Simulation von Differentialgleichungen. Die Problemstellung bei der Herleitung des Ansatzes stammt vielmehr aus der Theorie der Interpolation und Approximation von Funktionen an irregulär verteilten Datenpunkten. Diese findet man beispielsweise in Bereichen der Meteorologie oder Geologie, in denen man nicht davon ausgehen kann, daß eine regelmäßige Anordnung von Meßstationen vorhanden ist. Das Ziel liegt nun darin, eine Interpolation zu finden, welche aus diesen irregulär verteilten Datenpunkten eine Aussage über das ganze Gebiet macht, also zwischen den Datenpunkten interpoliert. Erste Ansätze in dieser Richtung kamen von Shepard (1968), welcher eine Interpolationsformel erster Ordnung fand. Die Verallgemeinerung auf Interpolationen höherer Ordnungen zur *Moving Least Square* Methode gelang Lancaster und Šalkauskas (1981). Eine ausführliche Darstellung dieser Methode findet sich auch bei Lancaster, Šalkauskas (1986). Wie der Name schon sagt, beruht der Ansatz dieses Verfahrens auf einer lokalen Approximation nach der Methode der kleinsten Quadrate. Die Lokalität der Approximation wird durch eine sogenannte „*moving*“–Prozedur aufgehoben, wobei eine globale Approximation an ihre Stelle tritt.

Die in dieser Arbeit vorzustellenden Verfahren, basierend auf der *Moving Least Square* Methode, bieten nun einige Vorteile gegenüber den oben genannten Verfahren. Gegenüber den finiten Differenzenverfahren beispielsweise ist eine lokale Verfeinerung des Gitters und damit eine potentielle Adaptivität des Verfahrens durch den Ansatz im wesentlichen schon gegeben — es ist also nicht notwendig, durch neue Programmierung lokale Verfeinerungen einzubauen. Auch die Wahl der Genauigkeit und damit die Ordnung des Verfahrens ist durch Änderung eines Parameters, der Interpolationsordnung, sehr leicht zu kontrollieren — auch hier ist es nicht nötig, ein neues Programm höherer Ordnung zu entwickeln. Gegenüber SPH haben die *Moving Least Square* Verfahren den großen Vorteil, konsistent zu sein. Dabei kann nicht nur eine konstante Funktion exakt approximiert werden, sondern je nach Interpolationsordnung auch Polynome höherer Ordnung. Dadurch erreicht man bei Simulationen wesentlich geringere Fluktuationen in den Lösungsfunktionen. Die beschriebene potentielle Adaptivität bleibt speziell im Lagrangeschen *Moving Least Square* Verfahren erhalten.

Weitere, gerade für Physiker sehr beruhigende Eigenschaften der *Moving Least Square* Verfahren bieten die Diskretisierungen der hydrodynamischen Gleichungen im Galerkin und Lagrangeschen Verfahren aus Kapitel 5 bzw. Kapitel 6. Dort finden sich für die Diskretisierungen dieser Differentialgleichungen Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie, also für die Größen, die bei der Herleitung der hydrodynamischen Grundgleichungen als Erhaltungsgrößen vorausgesetzt sind.

1.2 Aufbau der Arbeit

Die Arbeit ist folgendermaßen gegliedert: Dieser Einleitung folgend, findet im zweiten Kapitel eine kurze Präsentation der hydrodynamischen Grundgleichungen, welche später mit verschiedenen, noch vorzustellenden *Moving Least Square* Verfahren diskretisiert und simuliert werden, statt.

Im dritten Kapitel ist eine ausführliche Diskussion der *Moving Least Square* Methode vorgesehen. Dabei wird speziell auf einige wichtige Eigenschaften der verwendeten Kernfunktionen eingegangen.

Das vierte Kapitel stellt die *Moving Least Square* Methode als ein Kollokationsverfahren vor, das heißt, die Funktionswerte werden direkt an den Stützstellen ausgewertet. Ein wesentlicher Bestandteil liegt in der Diskussion über die richtige Wahl der Kernfunktionen. Numerische Beispiele dienen zur Veranschaulichung, und die hydrodynamischen Gleichungen werden anhand des eindimensionalen Stoßrohres und der starr rotierenden Gasscheibe simuliert.

Im fünften Kapitel wird die *Moving Least Square* Methode im Galerkin–Verfahren angewandt. Die Differentialgleichungen sind dabei in schwacher Formulierung gewählt. Die Advektionsgleichung und das eindimensionale Stoßrohr sind die verwendeten Testbeispiele.

Das sechste Kapitel, in dem die *Moving Least Square* Methode im Lagrangeschen Verfahren realisiert wird, verzichtet auf starre Stützstellen. Diese genügen vielmehr eigenständigen Bewegungsgleichungen. Auch hier bilden die Advektionsgleichung und das eindimensionale Stoßrohr die Testbeispiele für die gefundenen Diskretisierungen.

Der Schluß bildet das siebte Kapitel mit einer Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse und einem Ausblick auf noch zu tätigende Untersuchungen und Weiterentwicklungen dieser verschiedenen Ansätze der *Moving Least Square* Methode.

Kapitel 2

Hydrodynamik

Dieses Kapitel bietet einen Überblick über die in dieser Arbeit verwendeten hydrodynamischen Gleichungen. Eine ausführliche Herleitung dieser Gleichungen findet sich beispielsweise in Landau (1987), Shore (1992), Chorin, Marsden (1990). Obwohl man bei den Simulationen in den folgenden Kapiteln von idealen Fluiden ausgeht, werden hier die viskosen Gleichungen hergeleitet. Zum einen sind die idealen Gleichungen durch Vernachlässigung der viskosen Terme einfach abzuleiten, zum anderen spielt in den Simulationen eine künstliche Viskosität eine wesentliche Rolle. Ein Vergleich mit den Viskositätstermen der Navier–Stokes–Gleichungen dient zur Veranschaulichung dieser künstlichen Viskositätsterme.

Da in dieser Arbeit sowohl die Eulersche Betrachtungsweise, welche im Kollokationsverfahren und im Galerkin–Verfahren von *Moving Least Square* realisiert wird, als auch die Lagrangesche Betrachtungsweise, welche man im Lagrangeschen Verfahren realisiert, Anwendung finden, beginnt das Kapitel mit der Gegenüberstellung dieser beiden Beschreibungsweisen der Hydrodynamik. Es folgen die Grundgleichungen der Hydrodynamik, welche sich in Kontinuitätsgleichung, Bewegungsgleichung bzw. Impulsgleichung und Energiegleichung manifestieren. Es sei darauf hingewiesen, daß bei der Herleitung der Gleichungen auf Terme, welche eine äußere Kraft — wie beispielsweise die Gravitationskraft — beinhalten, der Einfachheit wegen verzichtet wird. Den Abschluß bildet eine Diskussion über die verwendeten Zustandsgleichungen, welche das genannte Gleichungssystem vervollständigen.

2.1 Beschreibungsweisen

Die hydrodynamischen Gleichungen kann man durch verschiedene Betrachtungsweisen aus den Erhaltungssätzen für Masse, Impuls und Energie herleiten. Dabei liegt der wichtigste Unterschied in der Wahl des jeweiligen Koordinatensystems.

Der Lagrangesche Zugang zur Hydrodynamik ist eine natürliche Erweiterung der Newtonschen Teilchenmechanik in den Bereich der Fluide. Man stellt sich das Fluid derartig vor, daß dieses aus kleinen Massepaketen, die bewegten und zeitlich veränderlichen Volumina entsprechen, aufgebaut ist. Die Lagrangeschen Koordinaten sind jetzt als individuelle Markierungen, die an diese Massepakete angebracht sind, definiert. Daher wird dieses Koordinatensystem als ein mit der Strömung mitbewegtes bezeichnet. Die Koordinaten selbst sind Funktionen der Zeit, und Geschwindigkeiten werden als Relativgeschwindigkeiten zu dem Bewegungszustand eines einzelnen Massepaketes betrachtet.

Im Gegensatz dazu werden in der Eulerschen Beschreibungsweise nicht die individuellen Massepakete, sondern ein ortsfestes Volumen betrachtet, man befindet sich sozusagen im Laborsystem. Die Koordinaten sind nicht mehr zeitabhängig, und Geschwindigkeiten werden alle bezüglich dieses Laborsystems angegeben. Bei der Herleitung der Bestimmungsgleichung einer gesuchten Größe ist es nun notwendig, eine Bilanzgleichung aufzustellen, das heißt man bestimmt die Änderung dieser Größe infolge einer Strömung durch das festgelegte Volumen.

Mathematisch unterscheiden sich die zwei Beschreibungsweisen im wesentlichen in der Abwesenheit eines Advektionsterms bei der Lagrangeschen Beschreibungsweise. In dieser wird demzufolge eine substantielle Ableitung nach der Zeit für eine Größe f eingeführt, wodurch man eine Beziehung zwischen der Lagrangeschen und der Eulerschen Beschreibungsweise erhält

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f}{\partial t} + (\boldsymbol{v} \cdot \nabla) f \quad . \tag{2.1}$$

Auf der linken Seite ist die Darstellung in Lagrangeschen Koordinaten, auf der rechten Seite in Eulerschen Koordinaten aufgeführt.

Die folgenden Herleitungen der hydrodynamischen Gleichungen werden alle in der Eulerschen Beschreibungsweise vorgenommen, da sie einerseits die bequemere ist und da andererseits die Lagrangesche Form dieser Gleichungen in der vorliegenden Arbeit nicht benötigt wird.

2.2 Die Kontinuitätsgleichung

Die Kontinuitätsgleichung beschreibt, wie sich die Masse in einem gegebenen Volumen ändert. Aufgrund von Massenerhaltung kann sich die Masse in diesem Volumen nur dadurch ändern, daß Masse durch die Oberfläche des Volumens strömt, also

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \varrho \,\mathrm{d}V + \oint_{\partial V} \varrho < \boldsymbol{v}, \boldsymbol{n} > \mathrm{d}o = 0 \quad . \tag{2.2}$$

Mit Hilfe des Gauß'schen Satzes läßt sich der zweite Term in ein Volumenintegral umformen, und man erhält dadurch die differentielle Form der Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \mathrm{div}(\varrho\,\boldsymbol{v}) = 0 \quad . \tag{2.3}$$

2.3 Die Impulsgleichung

Entsprechend der Herleitung der Kontinuitätsgleichung läßt sich auch eine Bilanzgleichung für den Impuls aufstellen. Diese lautet in Abwesenheit äußerer Volumenkräfte

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \varrho\boldsymbol{v} \,\mathrm{d}V = -\oint_{\partial V} \varrho\boldsymbol{v} < \boldsymbol{v}, \boldsymbol{n} > \mathrm{d}o - \oint_{\partial V} p\,\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}o + \oint_{\partial V} \boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}o \quad . \tag{2.4}$$

Dabei ergibt sich die Änderung des Impulses in einem vorgegebenen Volumen zum einen als Impulsstrom durch die Oberfläche des Volumens, was durch den ersten Term auf der rechten Seite beschrieben wird. Zum anderen ändert sich der Impuls durch die auf die Oberfläche des Volumens wirkenden Kräfte. Der zweite Term der rechten Seite beschreibt dabei die durch den Druck p hervorgerufene Kraft und der dritte Term kann als Reibungskraft interpretiert werden mit $\boldsymbol{\sigma}$ als viskosem Spannungstensor.

Anwendung des Gauß'schen Satzes auf die Oberflächenterme liefert die differentielle Form der Bewegungsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varrho\boldsymbol{v}) + \mathrm{div}(\varrho\boldsymbol{v}\;\boldsymbol{v}) = -\nabla p + \mathrm{div}\,\boldsymbol{\sigma} \quad . \tag{2.5}$$

Hier ist zu beachten, daß unter dem Produkt der Geschwindigkeitsvektoren in der Divergenz kein Skalarprodukt zu verstehen ist. Vielmehr versteht sich die Divergenz als Summation über die Komponenten des Gradienten multipliziert mit den entsprechenden Komponenten des zweiten Geschwindigkeitsvektors. Und die Divergenz auf den viskosen Spannungstensor ist folgendermaßen zu verstehen

$$(\operatorname{div}\boldsymbol{\sigma})_i = \sum_{j=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_j}\sigma_{ij} \quad . \tag{2.6}$$

Betrachtet man nun den Spezialfall eines reibungsfreien Fluids, bei dem also der Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}$ verschwindet, so erhält man die Euler–Gleichungen

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varrho\boldsymbol{v}) + \operatorname{div}(\varrho\boldsymbol{v}\,\boldsymbol{v}) = -\nabla p \quad . \tag{2.7}$$

Unter Verwendung der Kontinuitätsgleichung (2.3) kommt man zur bekannteren Form dieser Bewegungsgleichungen

$$\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{v} + (\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\boldsymbol{v} = -\frac{1}{\varrho}\nabla p \quad . \tag{2.8}$$

Eine entsprechende Umformung ergibt im Falle eines viskosen Fluids, also unter Berücksichtigung des viskosen Spannungstensors, die Navier–Stokes–Gleichungen

$$\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{v} + (\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\boldsymbol{v} = -\frac{1}{\varrho}\nabla p + \frac{1}{\varrho}\operatorname{div}\boldsymbol{\sigma} \quad . \tag{2.9}$$

Für den viskosen Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}$ verwendet man im allgemeinen den Ansatz

$$\sigma_{ij} = \eta\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\,\delta_{ij}\operatorname{div}\boldsymbol{v}\right) + \zeta\,\delta_{ij}\operatorname{div}\boldsymbol{v} \quad , \tag{2.10}$$

wobei η als Scherviskosität und ζ als Volumenviskosität bezeichnet wird. Diese Viskositätskoeffizienten sind immer positiv und hängen üblicherweise von der Temperatur und dem Druck ab.

2.4 Die Energiegleichung

Die Gesamtenergie eines Fluids in einem Volumen wird üblicherweise in zwei Terme aufgespalten

$$E = \frac{1}{2}\,\varrho\,\boldsymbol{v}^2 + \varepsilon \quad . \tag{2.11}$$

Dabei beschreibt der erste Term auf der rechten Seite die kinetische Energie und der zweite die sogenannte innere Energie. Die Größe $e = \varepsilon/\varrho$ wird spezifische innere Energie genannt, sie ist also Energie pro Masse. Die innere Energie ist Energie, die auf makroskopischer Ebene nicht erklärbar ist, sie beinhaltet vielmehr die Summe aller kinetischen und potentiellen Energien der Moleküle in sich und relativ zueinander, also beispielsweise Translations–, Rotations– und Vibrationsenergie sowie intermolekulare Wechselwirkungen.

Wie bei der Kontinuitätsgleichung und den Bewegungsgleichungen folgt die Bilanzgleichung für die Energie aus einem Erhaltungssatz, der Erhaltung der Gesamtenergie. Die Änderung der Gesamtenergie innerhalb eines gegeben Volumens V muß demzufolge der Gleichung

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\int_V E\,\mathrm{d}V = &- \oint_{\partial V} E <\boldsymbol{v},\boldsymbol{n}>\mathrm{d}o - \oint_{\partial V} p <\boldsymbol{v},\boldsymbol{n}>\mathrm{d}o \\ &+ \oint_{\partial V} <\boldsymbol{v},\boldsymbol{\sigma n}>\mathrm{d}o - \oint_{\partial V} <\boldsymbol{q},\boldsymbol{n}>\mathrm{d}o\end{aligned} \tag{2.12}$$

genügen, wobei wiederum Terme, welche eine äußere Volumenkraft beinhalten, sowie Strahlungsterme vernachlässigt werden. Der erste Term auf der rechten Seite ist der konvektive Energiestrom durch die Oberfläche des Volumens. Der zweite Term beschreibt die Arbeit, die Druckkräfte auf das Volumen ausüben, und der dritte Term die Arbeit, die durch die innere Reibung hervorgerufen wird. Der letzte Term schließlich beschreibt den Wärmestrom durch die Oberfläche des Volumens mit $\boldsymbol{q}$ als Wärmeflußvektor. Dieser wird oft proportional zum Temperaturgradienten gesetzt (Fouriersches Gesetz).

Wiederum folgt unter Anwendung des Gauß'schen Satzes auf die Oberflächenterme der Bilanzgleichung (2.12) die differentielle Form der Energiegleichung

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \mathrm{div}(E\boldsymbol{v}) = -\mathrm{div}(p\boldsymbol{v}) + \mathrm{div}(\boldsymbol{\sigma v}) - \mathrm{div}\,\boldsymbol{q} \quad . \tag{2.13}$$

Für ein ideales Fluid werden sowohl die Reibungskräfte als auch die Wärmeleitung vernachlässigt. Damit vereinfacht sich die differentielle Form der Energiegleichung zu

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \operatorname{div}\left[(E+p)\boldsymbol{v}\right] = 0 \quad . \tag{2.14}$$

Unter Verwendung von Gleichung (2.11), der Kontinuitätsgleichung (2.3) und den Bewegungsgleichungen (2.7) für ideale Fluide folgen daraus die Differentialgleichungen für die innere Energie ε bzw. für die spezifische innere Energie e zu

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \operatorname{div}(\varepsilon\, \boldsymbol{v}) + p \operatorname{div} \boldsymbol{v} = 0 \quad , \tag{2.15}$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \boldsymbol{v} \cdot \nabla e + \frac{p}{\varrho} \operatorname{div} \boldsymbol{v} = 0 \quad . \tag{2.16}$$

2.5 Die Zustandsgleichung

Das bisherige Gleichungssystem bestehend aus Kontinuitätsgleichung, Bewegungsgleichung und Energiegleichung ist noch nicht abgeschlossen, das heißt, die alleinige Kenntnis dieser Gleichungen genügt nicht, um die gesuchten Größen eindeutig zu bestimmen. Zur Vervollständigung des Gleichungssystems sind weitere Gleichungen notwendig, welche die Eigenschaften des Fluids beschreiben, die Zustandsgleichungen. Sie müssen einen Zusammenhang zwischen Dichte, Druck, Temperatur und Energie herstellen.

Eine wichtige, weil einfache Zustandsgleichung ist die des idealen Gases. Sie lautet

$$p = R\,T\,\varrho \tag{2.17}$$

mit der Gaskonstanten

$$R = \frac{k_B}{\mu\, m_u} \quad , \tag{2.18}$$

wobei k_B die Boltzmann–Konstante, m_u die atomare Masseneinheit und μ das mittlere Molekulargewicht des Gases ist.

Desweiteren ist die spezifische innere Energie für ein ideales Gas nur eine Funktion der Temperatur, also $e = e(T)$. Aus dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik erhält man bis auf eine unwichtige additive Konstante den Zusammenhang

$$e = c_V\,T = \frac{p}{\varrho\,(\gamma - 1)} \quad . \tag{2.19}$$

Die Größe $\gamma = c_p/c_V$ wird Adiabatenindex genannt und hängt mit der Zahl der Freiheitsgrade des Gases zusammen. Üblicherweise rangiert der Wert zwischen 5/3 für ein einatomiges Gas und 7/5 für ein zweiatomiges Gas.

Verwendet man nun die Bedingung konstanter Entropie — dies ist nur im Falle reibungsfreier Fluide möglich — folgt aus dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik die Relation

$$\mathrm{d}\,e = p\,\mathrm{d}\left(\frac{1}{\varrho}\right) \quad . \tag{2.20}$$

Substituiert man anstelle von e die Gleichung (2.19), so folgt daraus die Beziehung

$$\frac{\mathrm{d}p}{p} - \gamma\frac{\mathrm{d}\varrho}{\varrho} = 0 \qquad \text{bzw.} \qquad \mathrm{d}\left[\ln\left(\frac{p}{\varrho^\gamma}\right)\right] = 0 \tag{2.21}$$

und daraus die Adiabatengleichung

$$p\,\varrho^{-\gamma} = \text{konst.} \quad . \tag{2.22}$$

Für die Temperatur folgt unter Verwendung von Gleichung (2.17)

$$T\varrho^{-(\gamma-1)} = \text{konst.} \quad . \tag{2.23}$$

Im Spezialfall eines isothermen Fluids ist die Temperatur fest vorgegeben. Damit ist die spezifische innere Energie ebenfalls konstant und der Druck ist folglich direkt proportional zur Dichte (Gleichung (2.17)), also

$$p = c_0^2\;\varrho \tag{2.24}$$

mit $c_0 = \sqrt{RT}$ als isotherme Schallgeschwindigkeit.

Kapitel 3

Grundlagen des *Moving Least Square* Verfahrens

Dieses Kapitel legt die Grundlagen der in dieser Arbeit zu behandelnden numerischen Verfahren dar. Die konkreten Umsetzungen dieser Grundlagen in ausführbare Programmideen finden sich dann in den folgenden Kapiteln.

Zur Einstimmung wird im ersten Abschnitt die Methode der kleinsten Quadrate vorgestellt, die zum Verständnis der folgenden Ausführungen unabdingbar ist. Darauf aufbauend folgt im zweiten Abschnitt die theoretische Grundlage für das *Moving Least Square* Verfahren. Im anschließenden Teil wird etwas genauer auf die in diesem Verfahren verwendete Gewichtsfunktion eingegangen und darauf, wie ihre Wahl das Interpolationsverhalten der Approximation bestimmt. Im letzten Teil folgen schließlich wichtige Eigenschaften des Verfahrens, speziell der verwendeten Kernfunktion. Dabei wird unter anderem verdeutlicht, daß die Kernfunktionen eine Partition der Eins bilden und daß die verwendeten Basisfunktionen nicht approximiert, sondern exakt repräsentiert werden. Aber es soll auch geklärt werden, unter welchen Bedingungen das Verfahren eine eindeutige Lösung erlaubt.

3.1 Methode der kleinsten Quadrate

Um eine beliebige Funktion zu approximieren, kann man Funktionswerte an einzelnen Stellen abgreifen und diese dann durch Polynome approximieren. Eine beliebte Methode, die oft in der Experimentalphysik Anwendung findet, ist das Verfahren der sogenannten Ausgleichspolynome. Zur Bestimmung dieser Polynome verwendet man häufig die Methode der kleinsten Quadrate, bei der versucht wird, die Summe der vertikalen Abstandsquadrate der abgegriffenen Funktionswerte, hier auch Messwerte genannt, von dem gesuchten Polynom zu minimieren.

Zunächst geht man von der Annahme aus, daß eine beobachtbare Größe y von einer anderen beobachtbaren Größe x in einer bekannten polynomialen Weise abhängt. Die gemessenen Daten bestehen aus N unterschiedlichen Werten $x_1, x_2, \ldots, x_N$ auf der Abszisse und $y_1, y_2, \ldots, y_N$ auf der Ordinate. Aufgrund von Meßfehlern kann im allgemeinen die funktionale Abhängigkeit nicht genau erfüllt werden. Man versucht also, die Parameter des Polynoms so genau wie möglich den Meßwerten anzupassen.

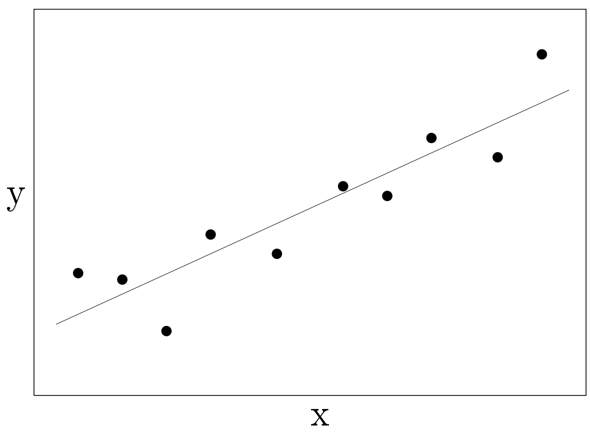


Abb. 3.1: Ausgleichsgerade als Beispiel einer Approximation mittels der Methode der kleinsten Quadrate.

Dies ist in Abbildung 3.1 exemplarisch an einer Ausgleichsgeraden aufgezeigt. Die schwarzen Punkte stellen die Werte der Messungen dar. Nun gilt es, ein Polynom $p(x)$ zu finden, welches möglichst nah an die Werte angepaßt werden kann. Dazu definiert man sich zunächst ein Funktional, welches den quadratischen Abstand der Meßpunkte zum Polynom bestimmt

$$\mathcal{Q} = \sum_{i=1}^{N} \left[p(x_i) - y_i\right]^2 \quad . \qquad (3.1)$$

Die Aufgabe besteht nun darin, das Funktional $\mathcal{Q}$ bezüglich der freien Parameter des Polynoms $p(x)$ zu minimieren. Diese Aufgabe ist eindeutig, das heißt, es gibt genau ein Polynom $p(x)$ für welches $\mathcal{Q}$ ein Minimum besitzt. Die notwendige Bedingungen dabei ist, daß die Ordnung des Polynoms kleiner oder gleich der Anzahl der Meßpunkte ist (Fischer, Kaul (1990)).

3.2 Die *Moving Least Square* Methode

Hier interessiert, im Gegensatz zum letzten Abschnitt, eine globale Interpolation nicht, da viele Funktionen nur lokal durch einfache Polynome, etwa Polynome der Ordnung kleiner drei bzw. vier, approximierbar sind. Sei also $u(\boldsymbol{x})$ eine zu approximierende Funktion, welche hinreichend glatt auf einem Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ definiert ist. Weiterhin sei $\boldsymbol{\xi}$ ein in $\overline{\Omega}$ fest fixierter Punkt. Damit läßt sich dann eine lokale Funktion $u^l(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi})$ um diesen Punkt $\boldsymbol{\xi}$ definieren als

$$u^l(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi}) := \begin{cases} u(\boldsymbol{x}) & \forall \boldsymbol{x} \in K_R(\boldsymbol{\xi}) \quad , \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases} \tag{3.2}$$

wobei die offene Kugel $K_R(\boldsymbol{\xi})$ durch

$$K_R(\boldsymbol{\xi}) := \{\boldsymbol{x} \,\big|\, \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\xi}\| < R,\, \boldsymbol{x} \in \overline{\Omega}\} \tag{3.3}$$

gegeben ist. Diese definiert das lokale Gebiet.

Eine solche lokale Funktion kann man jetzt mittels sogenannter Basisfunktionen $b_i(\boldsymbol{x})$ entwickeln. Dabei sollten die Basisfunktionen folgende Eigenschaften besitzen:

$$(i) \quad b_1(\boldsymbol{x}) = 1 \tag{3.4}$$

$$(ii) \quad b_i(\boldsymbol{x}) \in C^m(\Omega) \tag{3.5}$$

$$(iii) \quad \{b_i(\boldsymbol{x})\}_{i=1}^M \text{ ist linear unabhängig.} \tag{3.6}$$

Die Notwendigkeit von Eigenschaft (i) wird später (Abschnitt 3.4) noch ersichtlich. Eigenschaft (ii) ist für die Differenzierbarkeit der Approximation von Bedeutung und Bedingung (iii) benötigt man für den Ansatz der Approximation.

Beispiele von Basisfunktionen, die in der Numerik häufig verwendet werden, wie auch in der vorliegenden Arbeit, sind polynomiale Basisfunktionen. So wird man nach den oben genannten Regeln für die konstante Interpolation $(M = 1)$ die Basisfunktion

$$\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}) = \{1\} \tag{3.7}$$

nehmen, wobei $\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x})$ für den Vektor $(b_1(\boldsymbol{x}), b_2(\boldsymbol{x}), \ldots, b_M(\boldsymbol{x}))$ steht. Die Basis der linearen Interpolation wird erweitert zu

$$\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}) = \{1, x\} \quad \text{in 1D,} \qquad \boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}) = \{1, x, y\} \quad \text{in 2D.} \tag{3.8}$$

Entsprechend wird man die quadratische Interpolation mit den Basisfunktionen

$$\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}) = \left\{1, x, x^2\right\} \quad \text{in 1D}, \qquad \boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}) = \left\{1, x, y, x^2, xy, y^2\right\} \quad \text{in 2D} \tag{3.9}$$

durchführen.

Die Menge der Basisfunktionen ist jedoch nicht nur auf polynomiale Funktionen beschränkt. Fleming et al. (1997) verwenden in einer verwandten Methode die Basisfunktionen

$$\begin{aligned}\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}) = \Bigg\{1,\ x,\ y,\ \sqrt{r}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right),\ \sqrt{r}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right),& \\ \sqrt{r}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\sin(\theta),\ \sqrt{r}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\sin(\theta)\Bigg\}&\end{aligned} \tag{3.10}$$

zur Simulation stationärer Bruchstellen in zylindersymmetrischer Anordnung.

Hat man nun die geeigneten Basisfunktionen gewählt, so kann man in Bezug auf diese eine lokale Approximation ansetzen in der Form

$$u^l(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi}) \cong \sum_{\mu=1}^{M} a_\mu(\boldsymbol{\xi}) b_\mu(\boldsymbol{x}) = \ <\boldsymbol{a}(\boldsymbol{\xi}),\ \boldsymbol{b}(\boldsymbol{x})> \quad , \tag{3.11}$$

wobei die Koeffizienten $\boldsymbol{a}(\boldsymbol{\xi}) = (a_1(\boldsymbol{\xi}),\ a_2(\boldsymbol{\xi}), \ldots,\ a_M(\boldsymbol{\xi}))$ noch zu bestimmen sind. Diese hängen wie angedeutet nur von dem Punkt $\boldsymbol{\xi}$ ab, um den die lokale Funktion $u^l(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi})$ definiert ist.

Da diese Summe endlich ist, wird die lokale Funktion im allgemeinen nicht exakt wiedergegeben, d.h. man erhält eine Fehlerverteilung

$$r(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi}) := u(\boldsymbol{x}) - <\boldsymbol{a}(\boldsymbol{\xi}),\ \boldsymbol{b}(\boldsymbol{x})> \quad . \tag{3.12}$$

Diese Fehlerverteilung gilt es jetzt zu minimieren. Das geschieht wie im letzten Abschnitt beschrieben entsprechend der Methode der kleinsten Quadrate. Man bildet also das folgende Funktional, welches an bestimmten vorgegeben Stützstellen ausgewertet wird

$$\mathcal{Q}(\boldsymbol{a}) := \sum_{i=1}^{N} W(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{x}_i)\, r(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\xi})^2 \quad . \tag{3.13}$$

Im Gegensatz zum Funktional bei der Methode der kleinsten Quadrate aus Abschnitt 3.1 ist hier noch eine Gewichtsfunktion $W(\boldsymbol{\xi}-\boldsymbol{x})$ eingeführt worden. Diese beschränkt zum einen das zu approximierende Gebiet und zum anderen kann durch sie den Stützstellen unterschiedliche Bedeutung beigemessen werden. So wird man weiter entfernten Stützstellen bei der Approximation weniger Bedeutung beimessen als den näher liegenden. Eine ausführlichere Diskussion der Wahl dieser Gewichtsfunktion wird im nächsten Abschnitt erfolgen.

Das Funktional $\mathcal{Q}(\boldsymbol{a})$ wird nun bezüglich der gesuchten Koeffizienten a_ν minimiert und führt auf das Gleichungssystem

$$0=\frac{\partial \mathcal{Q}}{\partial a_\nu}=-2\sum_{i=1}^{N} W(\boldsymbol{\xi}-\boldsymbol{x}_i)b_\nu(\boldsymbol{x}_i)\left[u(\boldsymbol{x}_i)-\sum_{\mu=1}^{M} a_\mu(\boldsymbol{\xi})b_\mu(\boldsymbol{x}_i)\right] \qquad (3.14)$$

oder auf

$$\sum_{\mu=1}^{M}\left(\sum_{i=1}^{N} W(\boldsymbol{\xi}-\boldsymbol{x}_i)b_\mu(\boldsymbol{x}_i)b_\nu(\boldsymbol{x}_i)\right)a_\mu(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{i=1}^{N} W(\boldsymbol{\xi}-\boldsymbol{x}_i)u(\boldsymbol{x}_i)b_\nu(\boldsymbol{x}_i) \quad . \qquad (3.15)$$

Etwas übersichtlicher läßt sich dies darstellen als

$$\mathbf{A}(\boldsymbol{\xi})\,\boldsymbol{a}(\boldsymbol{\xi})=\boldsymbol{d}(\boldsymbol{\xi}), \qquad (3.16)$$

mit den Größen

$$A_{\mu\nu}(\boldsymbol{\xi})=\sum_{i=1}^{N} W(\boldsymbol{\xi}-\boldsymbol{x}_i)b_\mu(\boldsymbol{x}_i)b_\nu(\boldsymbol{x}_i) \qquad (3.17)$$

$$d_\mu(\boldsymbol{\xi})=\sum_{i=1}^{N} W(\boldsymbol{\xi}-\boldsymbol{x}_i)u(\boldsymbol{x}_i)b_\mu(\boldsymbol{x}_i) \quad . \qquad (3.18)$$

Ist die gewichtete Basisfunktionenmatrix $\mathbf{A}(\boldsymbol{\xi})$ invertierbar (siehe Abschnitt 3.4), so bestimmt Gleichung (3.16) den Koeffizientenvektor $\boldsymbol{a}(\boldsymbol{\xi})$ eindeutig

$$\boldsymbol{a}(\boldsymbol{\xi})=\mathbf{A}^{-1}(\boldsymbol{\xi})\boldsymbol{d}(\boldsymbol{\xi}) \quad . \qquad (3.19)$$

Man erhält also für die lokale Approximation die Gleichung

$$u^l(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\xi}) = \, < \mathbf{A}^{-1}(\boldsymbol{\xi})\boldsymbol{d}(\boldsymbol{\xi}),\, \boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}) > \quad . \tag{3.20}$$

So weit kann das Ergebnis als eine gewichtete Methode der kleinsten Quadrate um den Punkt $\boldsymbol{\xi}$ interpretiert werden. Um jedoch eine globale Approximation zu erhalten, wird nun eine sogenannte „*moving*“–Prozedur durchgeführt. Diese besteht formal aus zwei Schritten: Zunächst wird, wie oben bereits durchgeführt, eine lokale Approximation um einen Fixpunkt $\boldsymbol{\xi}$ ermittelt. Im zweiten Schritt läßt man die Vorstellung fallen, daß $\boldsymbol{\xi}$ ein fester Punkt im betrachteten Gebiet ist, er wird vielmehr als beliebig angenommen. Man bewegt also $\boldsymbol{\xi}$ über das ganze Gebiet, das heißt, man betrachtet den Grenzübergang $\boldsymbol{\xi} \mapsto \boldsymbol{x}$ und erhält somit die globale Approximation.

Damit verbleibt als globale Approximation die Gleichung

$$u^g(\boldsymbol{x}) = \lim_{\boldsymbol{\xi}\to\boldsymbol{x}} u^l(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\xi}) = \, < \mathbf{A}^{-1}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{d}(\boldsymbol{x}),\, \boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}) > \quad . \tag{3.21}$$

Durch Zusammenfassung läßt sich dies in einer etwas übersichtlicheren Form schreiben

$$u^g(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{N} u_i \; \phi_i(\boldsymbol{x}) \tag{3.22}$$

mit der Kernfunktion

$$\phi_i(\boldsymbol{x}) = W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_i) \sum_{\mu,\nu=1}^{M} A^{-1}_{\mu\nu}(\boldsymbol{x}) b_\mu(\boldsymbol{x}_i) b_\nu(\boldsymbol{x}) \tag{3.23}$$

und den Koeffizienten u_i.

Im folgenden wird der Index g in Gleichung (3.22) wieder vernachlässigt, da, wenn nicht explizit erwähnt, nur noch diese globale Approximation Verwendung findet.

3.3 Die Gewichtsfunktion

Eine wichtige Rolle in der Bestimmung der Kernfunktion $\phi_i(\boldsymbol{x})$ spielt neben der Verteilung der Stützstellen die Wahl der Gewichtsfunktion $W(\boldsymbol{x})$.

Dabei gibt es zwei verschiedene Ansätze, die sich wesentlich auf die Eigenschaften und auch auf die Verwendbarkeit der Gewichtsfunktion auswirken. Dies ist zum einen das nichtinterpolierende Verfahren, welches eine stetig differenzierbare Gewichtsfunktion verwendet und zum anderen das interpolierende Verfahren, in welches für die Berechnung der Kernfunktion $\phi_i(\boldsymbol{x})$ eine singuläre Gewichtsfunktion einbezogen wird.

Eigenschaften der Gewichtsfunktion
Die Gewichtsfunktion sollte folgende Bedingungen erfüllen:

- $W(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) > 0$ innerhalb einer Umgebung $K_R(\boldsymbol{y})$.
- $W(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) = 0$ außerhalb dieser Umgebung.
- $\nabla W(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) = 0$ am Rand.
- Symmetrie $W(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) = W(\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|)$.
- W(r) ist eine monoton fallende Funktion, wobei $r = \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|$.

Die erste Bedingung garantiert, wie später noch gezeigt wird, die positive Definitheit der Basisfunktionenmatrix $\mathbf{A}(\boldsymbol{x})$ (siehe Gleichung (3.17)). Für die zweite Bedingung spricht, daß eine Approximation durch eine lokale Darstellung gebildet werden kann. Die dritte Bedingung ist für die Differenzierbarkeit der Gewichtsfunktion am Rand von Nöten. Dies wirkt sich speziell bei der Behandlung des Galerkin–Verfahrens (Kapitel 5) und des Lagrangeschen Verfahrens (Kapitel 6) aus. Die vierte Bedingung schränkt die Wahl der Gewichtsfunktionen auf symmetrische Funktionen ein. Bei der fünften Bedingung greift die Vorstellung, daß vom Interpolationspunkt weiter entfernte Stützstellen weniger zur Interpolation beitragen, als diejenigen, welche näher am Interpolationspunkt liegen.

An dieser Stelle muß bei der Wahl der Gewichtsfunktion zwischen dem interpolierenden Fall und dem nichtinterpolierenden Fall unterschieden werden. Daß der interpolierende Fall dem nichtinterpolierenden Fall letztendlich vorzuziehen ist, wird in Kapitel 4 anhand einiger Beispiele dargelegt.

Im nichtinterpolierenden Fall ist die Gewichtsfunktion eine stetig differenzierbare Funktion, welche in dieser Arbeit die folgende funktionelle Abhängigkeit besitzt

$$W(r) = \begin{cases} 1 - 3(r/h)^2 + 2(r/h)^3 & \text{für } r < h, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \tag{3.24}$$

In der Arbeit von Lancaster, Šalkauskas (1981) werden für die Interpolation von Funktionswerten auch Exponentialfunktionen als Gewichtsfunktionen verwendet, welche jedoch wegen des unendlich großen Trägers verworfen werden können. Dies liegt im wesentlichen am numerischen Aufwand, welcher im Gegensatz zu einer Gewichtsfunktion mit endlichem Träger um ein Vielfaches erhöht ist, da zur Berechnung eines Funktionswertes bzw. der Ableitung an einer Stützstelle alle anderen Stützstellen miteinbezogen werden müssen.

Im interpolierenden Fall besitzt die Gewichtsfunktion an einer Stelle ihres Trägers eine Singularität

$$W(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) = \frac{\widetilde{W}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}{\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|^{\alpha}} \quad , \tag{3.25}$$

wobei diesmal $\widetilde{W}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})$ eine stetig differenzierbare Funktion ist und im folgenden mit der Gewichtsfunktion aus Gleichung (3.24) ersetzt wird. Der Parameter α muß positiv sein, und sein Wert gibt die Stärke der Singularität der Gewichtsfunktion an. Weitere Studien von Gordon und Wixom (1978) im Fall konstanter Interpolation ($M = 1$) belegen, daß dieser Parameter größer als eins sein muß, um die Differenzierbarkeit an den Stützstellen zu gewährleisten. Dies ist ebenfalls in den Bildern aus Abbildung 3.2 dargestellt. Es wurden fünf äquidistante Stützstellen verwendet (bei $x = 0.5$, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5), um eine Funktion zu interpolieren. Zur Verdeutlichung der Resultate wurde zur Berechnug der approximierten Funktion die Gewichtsfunktion $W(x) = x^{-\alpha}$ verwendet. Für die allgemeinere Gewichtsfunktion aus Gleichung (3.25) behalten die Ergebnisse ihre Gültigkeit, sie sind jedoch weit weniger ausgeprägt.

Auf der linken Seite von Abbildung 3.2 ist das Resultat der konstanten Interpolation ($M = 1$) abgebildet. Deutlich sind die Spitzen für $\alpha = 0.5$ und $\alpha = 1$ zu sehen, an denen die Funktion nicht differenzierbar ist. Ein interessantes Resultat bildet der Fall $\alpha \to \infty$, für den sich die approximierte Funktion einer Stufenfunktion nähert. Auf der rechten Seite der Abbildung sind die entsprechenden Ergebnisse für die lineare Interpolation ($M = 2$) dargestellt. Auch hier bilden sich die charakteristischen Spitzen an den Stützstellen aus. In der Arbeit von Gordon und Wixom (1978) wurde ebenfalls gezeigt, daß für $\alpha > 1$ die interpolierte Funktion mindestens einmal differenzierbar ist. Der Einfachheit halber wird daher in dieser Arbeit der Parameter $\alpha = 2$ gesetzt.

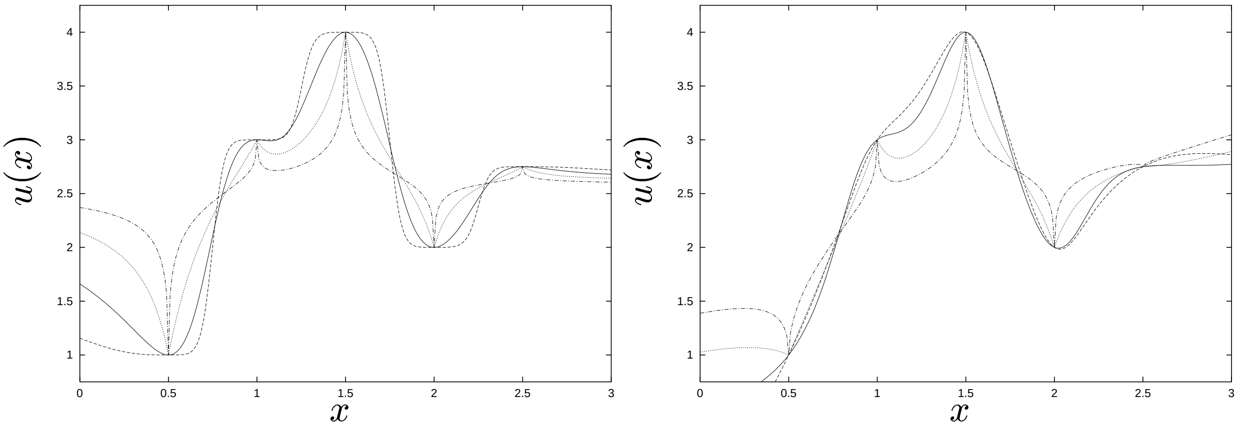


Abb. 3.2: Illustration einer Interpolation über fünf Stützstellen ($x = 0.5,\ 1.0,\ 1.5,\ 2.0,\ 2.5$) bei verschiedenen Werten des Parameters α ($\alpha = 2$: durchgezogene Linie, $\alpha = 4$: gestrichelte Linie, $\alpha = 1$: gepunktete Linie, $\alpha = 0.5$: Strich–Punkt Linie). Links findet sich der Fall konstanter Interpolation, rechts linearer Interpolation.

Wie im folgenden Abschnitt noch gezeigt wird, gilt für den interpolierenden Fall die Relation

$$\phi_i(\boldsymbol{x}_j) = \delta_{ij} \quad . \tag{3.26}$$

Diese Relation rechtfertigt den Begriff interpolierendes *Moving Least Square*, da nur dann die Entwicklungskoeffizienten u_i einer Funktion $u(\boldsymbol{x})$ bezüglich der Kernfunktionen auch die Funktionswerte an der jeweiligen Stützstelle darstellen, also

$$u(\boldsymbol{x}_i) = u_i \quad . \tag{3.27}$$

Der Fall konstanter Interpolation ($M = 1$) wurde bereits von Shepard (1968) zur Interpolation irregulär verteilter Datenpunkte verwendet. In Anlehnung daran wurde der Kernfunktion dann der Name Shepard–Kernfunktion verliehen

$$\phi_i(\boldsymbol{x}) = \frac{W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_i)}{\sum\limits_{j=1}^{N} W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_j)} \quad , \tag{3.28}$$

wobei für die Gewichtsfunktion $W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_i)$ der interpolierende Fall angenommen wurde, also eine singuläre Gewichtsfunktion Verwendung fand. In den folgenden numerischen Simulationen findet dieser Fall jedoch keine Beachtung, da die Ableitung an den Stützstellen verschwindet, also

$$\nabla \phi_i(\boldsymbol{x}_j) = 0 \qquad \forall\, i, j = 1 \dots N \quad . \tag{3.29}$$

Diese Eigenschaft ist in Abbildung 3.2 links dargestellt. Deutlich zu sehen ist, daß die approximierten Funktionswerte ihre Extrema an den Stützstellen einnehmen. Auf der rechten Seite der Abbildung 3.2, auf der die lineare Interpolation dargestellt ist, ist zu erkennen, daß diese Problematik nicht mehr auftritt. Daher wird in den Simulationen der folgenden Kapitel $M > 1$ vorausgesetzt.

In den Abbildungen 3.3 und 3.4 sind jeweils auf der linken Seite typische Kernfunktionen sowohl für den interpolierenden als auch für den nichtinterpolierenden Fall bei verschiedenen Interpolationsordnungen ($M = 1$, 2, 3, 4) dargestellt. Wie aus den Diagrammen ersichtlich, beträgt die Breite der Kernfunktionen $h = 0.8$ für $M = 1$, 2, 3 und $h = 1.2$ für $M = 4$. Auf der rechten Seite der Abbildungen ist jeweils die Überdeckung des Intervalls $[-1, 1]$ mit Kernfunktionen veranschaulicht. Dabei wird deutlich, daß trotz der Symmetrie der Gewichtsfunktionen die Kernfunktionen nicht symmetrisch sein müssen. Die Symmetrie ist eher der Ausnahmefall. Betrachtet man die Stützstellen, dargestellt als schwarze Punkte, und vergleicht diese mit den jeweiligen Funktionswerten, so tritt im interpolierenden Fall die Relation (3.26) deutlich hervor, während diese im nichtinterpolierenden Fall nicht erfüllt ist.

3.4 Eigenschaften

In diesem Abschnitt sind wichtige Eigenschaften der *Moving Least Square* Approximation (3.22) aufgezeigt. Dies ist zunächst die Eigenschaft, daß Basisfunktionen exakt repräsentiert werden. Daraus folgt, daß die Kernfunktionen eine Partition der Eins bilden. Anschließend wird genauer auf die Struktur der Matrix $\mathbf{A}(\boldsymbol{x})$ aus Gleichung (3.17) eingegangen und dargelegt, unter welchen Bedingungen diese invertierbar ist.

3.4.1 Eigenschaften der Gewichtsfunktion

Partition der Eins

Die folgende Rechnung wird zeigen, daß Basisfunktionen exakt repräsentiert

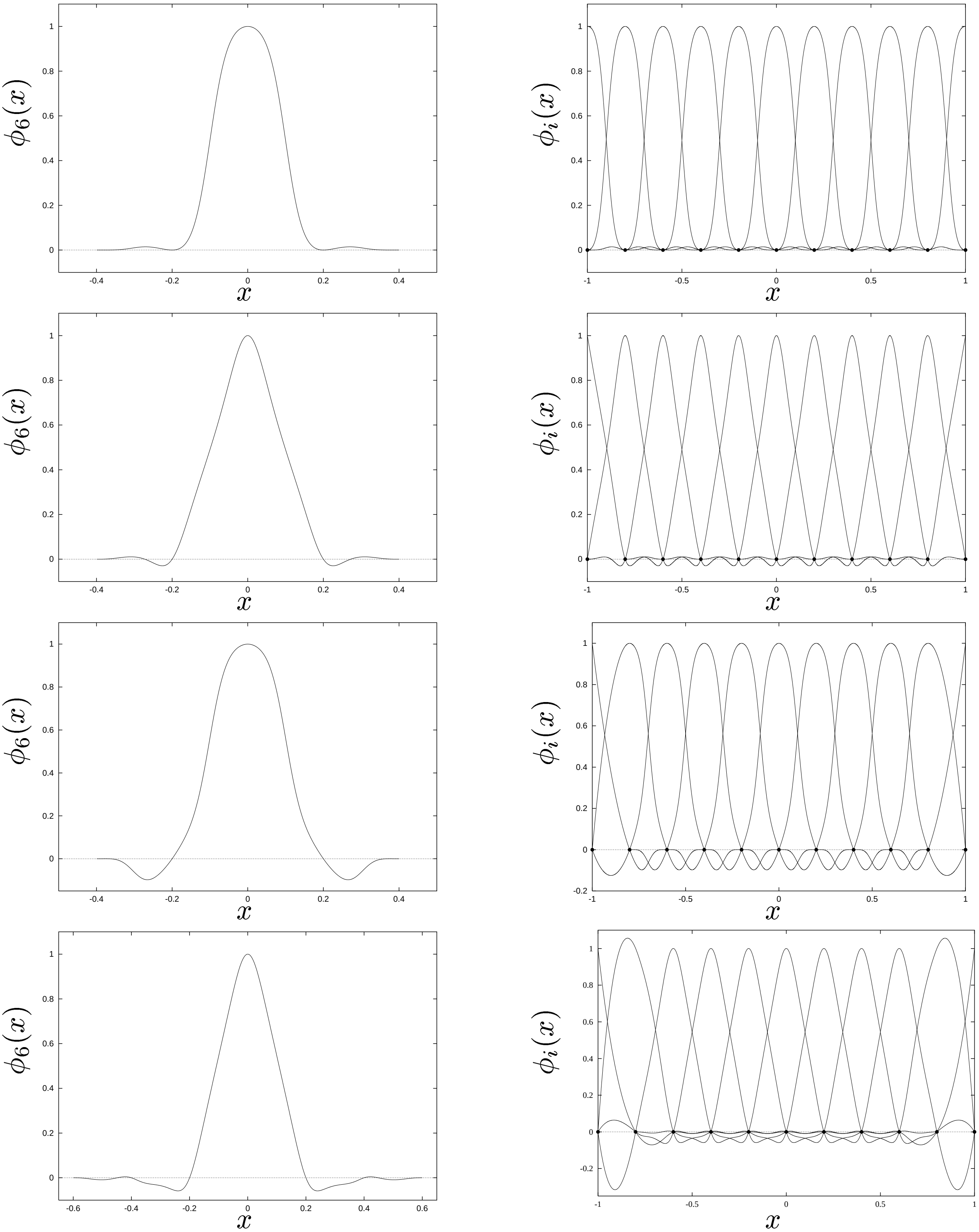


Abb. 3.3: Kernfunktionen und Überdeckung eines Intervalls bei regelmäßiger Stützstellenverteilung für $M = 1, 2, 3$ und 4 in der interpolierenden Formulierung. Die schwarzen Punkte geben die Stützstellen an.

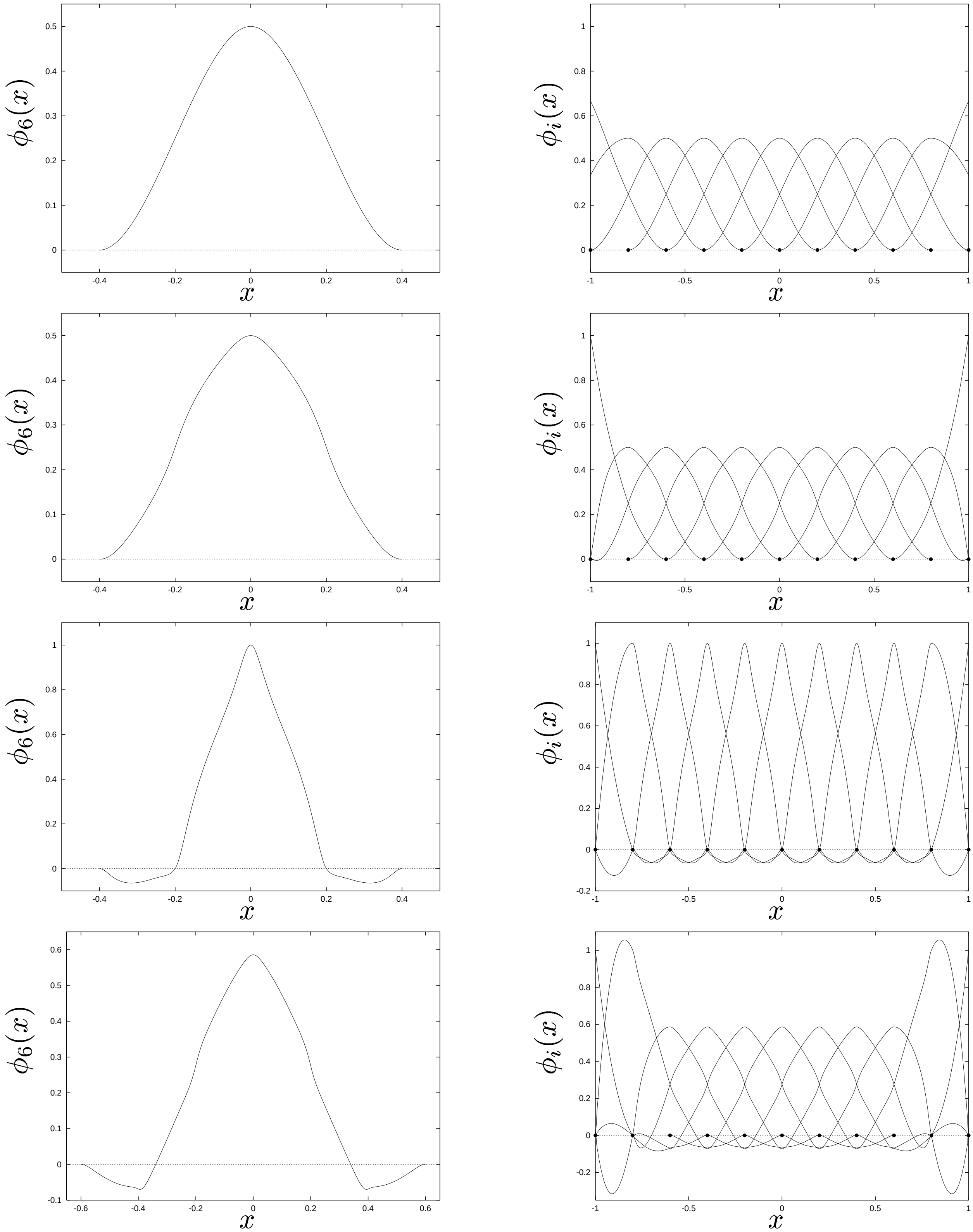


Abb. 3.4: Kernfunktionen und Überdeckung eines Intervalls bei regelmäßiger Stützstellenverteilung für $M = 1$, 2, 3 und 4 in der nichtinterpolierenden Formulierung. Die schwarzen Punkt geben die Stützstellen an.

werden. Das bedeutet, daß die Basisfunktionen selbst nicht approximiert werden, sondern die *Moving Least Square* Approximation aus Gleichung (3.22) für diese exakt erfüllt ist:

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^{N} b_\alpha(\boldsymbol{x}_j)\phi_j(\boldsymbol{x}) &= \sum_{j=1}^{N} b_\alpha(\boldsymbol{x}_j)\left(\sum_{\mu\nu}^{M} W(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x_j})A^{-1}_{\mu\nu}(\boldsymbol{x})b_\mu(\boldsymbol{x}_j)b_\nu(\boldsymbol{x})\right)\\ &= \sum_{\mu\nu}^{M}\left(\sum_{j=1}^{N} W(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x_j})b_\alpha(\boldsymbol{x}_j)b_\mu(\boldsymbol{x}_j)\right)A^{-1}_{\mu\nu}(\boldsymbol{x})b_\nu(\boldsymbol{x})\\ &= \sum_{\mu\nu}^{M} A_{\alpha\mu}(\boldsymbol{x})A^{-1}_{\mu\nu}(\boldsymbol{x})b_\nu(\boldsymbol{x})\\ &= b_\alpha(\boldsymbol{x}) \quad .\end{aligned} \tag{3.30}$$

Diese Eigenschaft ist von großer Wichtigkeit, denn nur sie garantiert die Konsistenz von *Moving Least Square* bis zur vorgegebenen Ordnung. Genauer ausgedrückt, verwendet man beispielsweise die lineare Interpolation für das Verfahren, so werden lineare Funktionen exakt wiedergegeben. Später wird sich zeigen, daß die Approximation nichtlineare Funktionen dann stückweise durch Geraden ersetzt. Entsprechendes gilt dann auch für die quadratische Interpolation bzw. die kubische Interpolation.

Eine direkte Folge dieser Eigenschaft ist, daß die Kernfunktionen $\phi_i(\boldsymbol{x})$ eine Partition der Eins bilden. Dies resultiert aus der Tatsache, daß die Eins ein Element des Basisfunktionenvektors bildet (siehe Gleichung (3.4)), mathematisch ausgedrückt

$$1 = \sum_{j=1}^{N} 1(\boldsymbol{x}_j)\phi_j(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{N} \phi_j(\boldsymbol{x}) \quad . \tag{3.31}$$

Die Eigenschaft der Partition der Eins ist auch deutlich in den Abbildungen 3.3 und 3.4 zu sehen.

Durch Anwendung des Ableitungsoperators auf Gleichung (3.31) folgt, daß die Summation über die Gradienten aller Kernfunktion Null ergibt, also

$$\sum_{j=1}^{N} \nabla\phi_j(\boldsymbol{x}) = 0 \quad . \tag{3.32}$$

3.4.2 Eigenschaften der Basisfunktionenmatrix

Struktur der Matrix A

Um die Struktur der Matrix $\mathbf{A}$ aus Gleichung (3.17) zu erkennen, wird diese zunächst noch in eine etwas andere Form gebracht:

$$\begin{aligned} A_{\mu\nu}(\boldsymbol{x}) &= \sum_{i=1}^{N} W(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i) b_\mu(\boldsymbol{x}_i) b_\nu(\boldsymbol{x}_i) \\ &= \sum_{i,j=1}^{N} b_\mu(\boldsymbol{x}_i) W(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_j)\delta_{ij} b_\nu(\boldsymbol{x}_j) \quad . \end{aligned} \tag{3.33}$$

Mit den Definitionen

$$B_{j\mu} = b_\mu(\boldsymbol{x}_j) \qquad \text{und} \qquad W_{ij} = W(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_j)\delta_{ij} \tag{3.34}$$

kann somit die Matrix $\mathbf{A}$ auch geschrieben werden als

$$\mathbf{A}(\boldsymbol{x}) = \mathbf{B}^T \mathbf{W}(\boldsymbol{x}) \mathbf{B} \quad . \tag{3.35}$$

Sei nun $\boldsymbol{v} \in \mathbb{R}^M$ ein beliebiger Vektor ($\boldsymbol{v} \neq 0$), so gilt

$$\begin{aligned} <\boldsymbol{v},\, \mathbf{A}\boldsymbol{v}> &= <\boldsymbol{v},\, \mathbf{B}^T\mathbf{W}\mathbf{B}\boldsymbol{v}> = <\mathbf{B}\boldsymbol{v},\, \mathbf{W}\mathbf{B}\boldsymbol{v}> \\ &= \sum_{j=1}^{N} W(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_j)(\mathbf{B}\boldsymbol{v})_j^2 \quad . \end{aligned} \tag{3.36}$$

Da die Gewichtsfunktion laut Abschnitt 3.3 innerhalb ihres Trägers immer positiv ist, gilt $<\boldsymbol{v},\, \mathbf{A}\boldsymbol{v}> \; \geq 0$ und damit ist die Matrix $\mathbf{A}$ positiv. Ist zusätzlich die folgende Inversionsbedingung erfüllt, so ist dieses Skalarprodukt größer Null und die Matrix ist positiv definit.

Inversionsbedingung für die Matrix A

Das mittels Minimierung des Funktionals $\mathcal{Q}(\boldsymbol{a})$ (Gleichung (3.13)) gesuchte Polynom ist, wie bei der Methode der kleinsten Quadrate, nicht immer eindeutig. Die Eindeutigkeit hängt vielmehr von der Ordnung des Polynoms und der Anzahl der Meßpunkte, über die interpoliert werden soll, ab. Ganz entsprechend verhält sich dies beim *Moving Least Square* Verfahren. Hier hängt die Eindeutigkeit der Interpolation von der Anzahl der Stützstellen, welche sich im Träger der Gewichtsfunktion befinden, und der Ordnung M der Interpolation ab. Mathematisch drückt sich die Eindeutigkeit durch die Invertierbarkeit der Matrix $\mathbf{A}$ aus.

Ist die Ordnung des Verfahrens M höher als die Anzahl der im Träger der Gewichtsfunktion enthaltenen Stützstellen K, also $M > K$, so findet sich ein Vektor $\boldsymbol{v} \in \mathrm{I\!R}^M$, der senkrecht zur Menge der Basisvektoren $\{b_1(\boldsymbol{x}_j), \dots, b_M(\boldsymbol{x}_j)\}$ an den Stützstellen $\boldsymbol{x}_j$ $(j = 1 \dots K)$ steht, da diese nur einen Unterraum von $\mathrm{I\!R}^M$ aufspannen. Dies bedeutet, daß für diesen Vektor $\mathbf{A}\boldsymbol{v} = 0$ gilt. Daraus folgt, daß der Kern der Matrix $\mathbf{A}$ neben dem Nullvektor noch mindestens den Vektor $\boldsymbol{v}$ enthält. Damit ist $\mathbf{A}$ nicht injektiv und nicht invertierbar.

Anders liegt der Sachverhalt, wenn die Ordnung des Verfahrens M gleich der Anzahl der im Träger der Gewichtsfunktion enthaltenen Stützstellen ist, also $M = K$. Diesmal bilden die Basisvektoren in $\mathrm{I\!R}^M$ eine Basis und jeder Vektor $\boldsymbol{v} \in \mathrm{I\!R}^M$ kann bezüglich dieser Basis entwickelt werden. Damit ist die Matrix regulär und die Inverse existiert. Entsprechendes gilt im Fall $M < K$, welcher in den praktischen Anwendungen am häufigsten angetroffen wird.

Bedingung für die Inversion der Matrix $\mathbf{A}$ ist also, daß die Anzahl der Stützstellen innerhalb des Trägers der Kernfunktion mindestens gleich der Ordnung des Verfahrens ist.

3.4.3 Inversion der singulären Basisfunktionenmatrix

In der Formel zur Bestimmung der *Moving Least Square* Kernfunktion besteht die Notwendigkeit der Inversion der Matrix $\mathbf{A}(\boldsymbol{x})$ (siehe Gleichung (3.23)). Während dies für das nichtinterpolierende Verfahren im allgemeinen kein Problem darstellt, ergibt sich für das interpolierende Verfahren zunächst eine größere Schwierigkeit, da die Matrix $\mathbf{A}$ an den Stützstellen singuläre Einträge besitzt. Der vorliegende Abschnitt befaßt sich nun mit der Inversion dieser Matrix und den daraus folgenden Resultaten für die Kernfunktion und die Ableitung der Kernfunktion.

Betrachtet wird die Kernfunktion $\phi_j(\boldsymbol{x})$ an der Stelle $\boldsymbol{x}_l$. Unter Beachtung der Singularität der Gewichtsfunktion $W(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_l)$ an der Stelle $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_l$ können die nichtsingulären Terme der Kernfunktion in Taylorreihen um diese Stützstelle entwickelt werden. Dabei unterscheidet man zwischen zwei Fällen, dem Fall $\phi_l(\boldsymbol{x}_l)$ und dem Fall $\phi_j(\boldsymbol{x}_l)$ mit $j \neq l$:

Fall 1: $\phi_l(\boldsymbol{x}_l)$

$$\phi_l(\boldsymbol{x}_l + \boldsymbol{\varepsilon}) = W(\varepsilon) \sum_{\mu,\nu=1}^{M} A^{-1}_{\mu\nu}(\boldsymbol{x}_l + \varepsilon) b_\mu(\boldsymbol{x}_l) \\ \times \left[b_\nu(\boldsymbol{x}_l) + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \nabla b_\nu(\boldsymbol{x}_l) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)\right]. \quad (3.37)$$

Fall2: $\phi_j(\boldsymbol{x}_l)$ mit $j \neq l$

$$\phi_j(\boldsymbol{x}_l + \boldsymbol{\varepsilon}) = [W(\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_l) + \mathcal{O}(\varepsilon)] \\ \times \sum_{\mu,\nu=1}^{M} A^{-1}_{\mu\nu}(\boldsymbol{x}_l + \varepsilon) b_\mu(\boldsymbol{x}_j) \left[b_\nu(\boldsymbol{x}_l) + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \nabla b_\nu(\boldsymbol{x}_l) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)\right]. \quad (3.38)$$

In beiden Fällen muß die Matrix $\mathbf{A}^{-1}$ an der Stelle $\boldsymbol{x}_l + \boldsymbol{\varepsilon}$ bestimmt werden

$$\begin{aligned} A_{\mu\nu}(\boldsymbol{x}_l + \boldsymbol{\varepsilon}) &= \sum_{i=1}^{N} W(\boldsymbol{x}_l + \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{x}_i) b_\mu(\boldsymbol{x}_i) b_\nu(\boldsymbol{x}_i) \\ &= W(\varepsilon) b_\mu(\boldsymbol{x}_l) b_\nu(\boldsymbol{x}_l) + B_{\mu\nu}(\boldsymbol{x}_l + \varepsilon) \quad , \end{aligned} \quad (3.39)$$

wobei im zweiten Teil der Gleichung der Term mit $W(\varepsilon)$ abgespalten und die Matrix $\mathbf{B}$ mittels

$$B_{\mu\nu}(\boldsymbol{x}_l + \boldsymbol{\varepsilon}) = \sum_{\substack{i=1,\\ i\neq l}}^{N} W(\boldsymbol{x}_l + \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{x}_i) b_\mu(\boldsymbol{x}_i) b_\nu(\boldsymbol{x}_i) \quad (3.40)$$

definiert wurde. Da die Matrix $\mathbf{B}$ nun keine singulären Terme mehr enthält (auch im Grenzfall $\boldsymbol{\varepsilon} \to 0$), läßt sich diese problemlos invertieren.

An dieser Stelle hilft die Sherman–Morrison Formel (Press et al. (1992)) weiter, welche einen Zusammenhang zwischen der Inversen einer bekannten Matrix und der Inversen einer leicht modifizierten Matrix gibt

$$(\mathbf{A} + \boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{v})^{-1} = \mathbf{A}^{-1} - \frac{(\mathbf{A}^{-1} \cdot \boldsymbol{u}) \otimes (\boldsymbol{v} \cdot \mathbf{A}^{-1})}{1 + \boldsymbol{v} \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot \boldsymbol{u}} \quad (3.41)$$

für beliebige Vektoren $\boldsymbol{u}$ und $\boldsymbol{v}$.

Mit Hilfe dieser Formel läßt sich nun auch die Inverse zur Matrix $\mathbf{A}$ bestimmen

$$A^{-1}_{\mu\nu}(\boldsymbol{x_l}+\boldsymbol{\varepsilon}) = B^{-1}_{\mu\nu} - \varphi(\boldsymbol{x_l},\varepsilon) \sum_{\kappa,\lambda=1}^{M} B^{-1}_{\mu\kappa} B^{-1}_{\nu\lambda} b_\kappa(\boldsymbol{x}_l) b_\lambda(\boldsymbol{x}_l) \tag{3.42}$$

wobei die Matrix $\mathbf{B}^{-1}$ an der Stelle $\boldsymbol{x_l}+\boldsymbol{\varepsilon}$ ausgewertet wird. Die Funktion $\varphi(\boldsymbol{x_l},\varepsilon)$ ist dabei definiert durch

$$\varphi(\boldsymbol{x_l},\varepsilon) = \frac{W(\varepsilon)}{1+W(\varepsilon)\sigma} \quad \text{mit} \quad \sigma = \sum_{\mu,\nu=1}^{M} B^{-1}_{\mu\nu} b_\mu(\boldsymbol{x}_l) b_\nu(\boldsymbol{x}_l) \quad . \tag{3.43}$$

Nachdem die Inversion der Matrix $\mathbf{A}(\boldsymbol{x})$ geklärt ist, wird nun der ursprünglichen Frage nach den Funktionswerten bzw. Ableitungen der Kernfunktion an den Stützstellen nachgegangen. Betrachtet wird zunächst der Fall 1, welcher die Kernfunktion $\phi_l(\boldsymbol{x})$ an der Stelle $\boldsymbol{x}_l$ auswertet. Dazu setzt man das Ergebnis der Matrixinversion aus Gleichung (3.42) und Gleichung (3.43) in die angenäherte Kernfunktion aus Gleichung (3.37) ein und erhält

$$\begin{aligned}\phi_l(\boldsymbol{x}_l+\boldsymbol{\varepsilon}) = {} & \frac{W(\varepsilon)\sigma}{1+W(\varepsilon)\sigma} \\ & + \boldsymbol{\varepsilon}\cdot\frac{W(\varepsilon)}{1+W(\varepsilon)\sigma} \sum_{\mu,\nu=1}^{N} B^{-1}_{\mu\nu} b_\mu(\boldsymbol{x}_l) \nabla b_\nu(\boldsymbol{x}_l) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad .\end{aligned} \tag{3.44}$$

Nun ist in der hier betrachteten interpolierenden Approximation die Gewichtsfunktion $W(\varepsilon)$ eine singuläre Funktion, d.h., sie kann ersetzt werden durch die modifizierte Gewichtsfunktion $\widetilde{W}(\varepsilon)/\varepsilon^\alpha$, wobei $\widetilde{W}(\varepsilon)$ regulär bei $\varepsilon = 0$ ist. Betrachtet man nun den ersten Term von Gleichung (3.44), so läßt sich dieser unter Verwendung der modifizierten Gewichtsfunktion durch

$$\frac{W(\varepsilon)\,\sigma}{1+W(\varepsilon)\,\sigma} = \frac{\widetilde{W}(\varepsilon)\,\sigma}{\varepsilon^\alpha+\widetilde{W}(\varepsilon)\,\sigma} = 1+\mathcal{O}(\varepsilon^\alpha) \tag{3.45}$$

ausdrücken. Entsprechendes gilt auch für den Vorfaktor des zweiten Terms aus Gleichung (3.44), welcher durch

$$\frac{W(\varepsilon)}{1+W(\varepsilon)\,\sigma} = \frac{\widetilde{W}(\varepsilon)}{\varepsilon^\alpha+\widetilde{W}(\varepsilon)\,\sigma} = \sigma^{-1}+\mathcal{O}(\varepsilon^\alpha) \tag{3.46}$$

ersetzt wird.

Damit verbleibt für die Kernfunktion $\phi_l(\boldsymbol{x})$ an der Stelle $\boldsymbol{x}_l$ der Ausdruck

$$\phi_l(\boldsymbol{x}_l + \boldsymbol{\varepsilon}) = 1 + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \sigma^{-1} \sum_{\mu,\nu=1}^{N} B_{\mu\nu}^{-1} b_\mu(\boldsymbol{x}_l) \nabla b_\nu(\boldsymbol{x}_l) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad . \tag{3.47}$$

Betrachtet man diesen Ausdruck im Grenzfall $\boldsymbol{\varepsilon} \to 0$, so läßt sich daran unmittelbar sowohl der Funktionswert als auch die Ableitung der Kernfunktion $\phi_l(\boldsymbol{x})$ an der Stützstelle $\boldsymbol{x}_l$ wie folgt ablesen

$$\phi_l(\boldsymbol{x}_l) = 1 \tag{3.48}$$

$$\nabla \phi_l(\boldsymbol{x}_l) = \sigma^{-1} \sum_{\mu,\nu=1}^{N} B_{\mu\nu}^{-1}(\boldsymbol{x}_l) b_\mu(\boldsymbol{x}_l) \nabla b_\nu(\boldsymbol{x}_l) \quad . \tag{3.49}$$

Betrachtet wird nun der zweite Fall, bei dem die Kernfunktion $\phi_j(\boldsymbol{x})$ an der Stützstelle $\boldsymbol{x}_l$ ausgewertet wird, wobei $j \neq l$ gilt. Wie im Fall 1 wird auch hier das Ergebnis der Matrixinversion aus den Gleichungen (3.42) und (3.43) in die approximierte Kernfunktion (3.38) eingesetzt und man erhält damit

$$\begin{aligned}\phi_j(\boldsymbol{x}_l + \boldsymbol{\varepsilon}) = \Big[W(\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_l) + \mathcal{O}(\varepsilon) \Big] \times \\ \Bigg\{ \frac{1}{1 + W(\varepsilon)\,\sigma} \sum_{\mu,\nu=1}^{M} B_{\mu\nu}^{-1} b_\mu(\boldsymbol{x}_j) b_\nu(\boldsymbol{x}_l) + \\ \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \sum_{\mu,\nu=1}^{M} \Theta_{\mu\nu}(\boldsymbol{x}_l, \boldsymbol{\varepsilon}) b_\mu(\boldsymbol{x}_j) \nabla b_\nu(\boldsymbol{x}_l) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \Bigg\} \quad ,\end{aligned} \tag{3.50}$$

wobei die Matrix $\Theta(\boldsymbol{x}_l, \boldsymbol{\varepsilon})$ für den Ausdruck

$$\Theta_{\mu\nu}(\boldsymbol{x}_l, \boldsymbol{\varepsilon}) = B_{\mu\nu}^{-1} - \frac{W(\varepsilon)}{1 + W(\varepsilon)\,\sigma} \sum_{\kappa,\lambda=1}^{M} B_{\mu\kappa}^{-1} B_{\nu\lambda}^{-1} b_\kappa(\boldsymbol{x}_l) b_\lambda(\boldsymbol{x}_l) \tag{3.51}$$

steht. Diese Matrix entspricht im übrigen gerade $\mathbf{A}^{-1}(\boldsymbol{x}_l + \boldsymbol{\varepsilon})$.

An dieser Stelle wird wiederum berücksichtigt, daß es sich hierbei um die interpolierende Approximation handelt, so daß für die Gewichtsfunktion $W(\varepsilon)$ die modifizierte Gewichtsfunktion $\widetilde{W}(\varepsilon)/\varepsilon^\alpha$ substituiert wird. Der Vorfaktor des ersten Terms der geschweiften Klammer in Gleichung (3.50) kann folglich ersetzt werden durch

$$\frac{1}{1+W(\varepsilon)\,\sigma} = \frac{\varepsilon^\alpha}{\varepsilon^\alpha + \widetilde{W}(\varepsilon)\,\sigma} = 0 + \mathcal{O}(\varepsilon^\alpha) \quad , \tag{3.52}$$

während der Vorfaktor des zweiten Terms der Matrix $\Theta(\boldsymbol{x}_l, \boldsymbol{\varepsilon})$ durch Gleichung (3.46) approximiert werden kann.

Betrachtet man unter diesen Gesichtspunkten die Kernfunktion aus Gleichung (3.50) so findet sich der Ausdruck

$$\phi_j(\boldsymbol{x}_l + \boldsymbol{\varepsilon}) = \boldsymbol{\varepsilon} \cdot W(\boldsymbol{x}_l - \boldsymbol{x}_j) \sum_{\mu,\nu=1}^{M} \Theta_{\mu\nu}(\boldsymbol{x}_l) b_\mu(\boldsymbol{x}_j) \nabla b_\nu(\boldsymbol{x}_l) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \tag{3.53}$$

mit

$$\Theta_{\mu\nu}(\boldsymbol{x}_l) = B^{-1}_{\mu\nu} - \sigma^{-1} \sum_{\kappa,\lambda=1}^{M} B^{-1}_{\mu\kappa} B^{-1}_{\nu\lambda} b_\kappa(\boldsymbol{x}_l) b_\lambda(\boldsymbol{x}_l) \quad . \tag{3.54}$$

Berücksichtigt man schließlich den Grenzfall $\boldsymbol{\varepsilon} \to 0$, folgen für Funktionswert und Ableitung der Kernfunktion $\phi_j(\boldsymbol{x})$ an der Stützstelle $\boldsymbol{x}_l$ $(j \neq l)$ die Ausdrücke

$$\phi_j(\boldsymbol{x}_l) = 0 \tag{3.55}$$

$$\nabla\phi_j(\boldsymbol{x}_l) = W(\boldsymbol{x}_l - \boldsymbol{x}_j) \sum_{\mu,\nu=1}^{M} \Theta_{\mu\nu}(\boldsymbol{x}_l) b_\mu(\boldsymbol{x}_j) \nabla b_\nu(\boldsymbol{x}_l) \quad . \tag{3.56}$$

Mit Gleichung (3.48) und Gleichung (3.55) wurde hiermit das bereits in Abschnitt 3.3 vorweggenomme Ergebnis

$$\phi_i(\boldsymbol{x}_j) = \delta_{ij} \tag{3.57}$$

für das interpolierende Verfahren bestätigt.

Kapitel 4

Moving Least Square als Kollokationsverfahren

Von diesem Kapitel an werden die *Moving Least Square* Approximationen auf Differentialgleichungen angewandt. Zunächst ist ein Kollokationsverfahren vorgesehen, bei dem man die zu approximierenden Funktionen und Operatoren direkt an den Stützstellen, den sogenannten Kollokationspunkten, ausgewertet.

Im ersten Abschnitt soll geklärt werden, wie der Ableitungsoperator beim nichtinterpolierenden Verfahren auf die Kernfunktion anzuwenden ist und ob das nichtinterpolierende Verfahren überhaupt geeignet ist, Ableitungen von Funktionen richtig darzustellen. Ein Vergleich des interpolierenden Verfahrens mit dem nichtinterpolierenden Verfahren legt dar, weshalb das interpolierende Verfahren schließlich vorzuziehen ist. Im folgenden Abschnitt wird eine Analyse des numerischen Fehlers bei verschiedenen Interpolationsordnungen auf einem regelmäßigen Gitter durchgeführt. Anschließend sind Anwendungen auf konkrete Differentialgleichungen vorgesehen. Diese beschränken sich auf die Advektionsgleichung und die hydrodynamischen Gleichungen idealer Fluide. Es folgt ein Einschub, der die numerische Umsetzung des Kollokationsverfahrens exemplarisch vorstellt. Den Abschluß bilden numerische Simulationen der Advektionsgleichung, sowie den hydrodynamischen Gleichungen.

4.1 Ableitungen

In diesem Abschnitt wird zunächst die Frage diskutiert, wie der Ableitungsoperator auf eine Funktion anzuwenden ist. Dabei unterscheidet man zwischen zwei Fällen, je nachdem wie die Reihenfolge von Limes und Ableitung bezüglich der Kernfunktion ist. Außer numerischen Schwierigkeiten zeigen sich jedoch nur geringe Unterschiede zwischen den beiden Fällen.

Anschließend findet ein Vergleich des interpolierenden und des nichtinterpolierenden Verfahrens statt. Anhand zweier Funktionen verschiedener Eigenschaften kann dargelegt werden, daß das nichtinterpolierende Verfahren für steile Gradienten ungeeignet ist. Daher wird am Ende des Abschnittes das nichtinterpolierende Verfahren verworfen und für die weiteren Untersuchungen nur das interpolierende Verfahren verwendet.

4.1.1 Bestimmung der Ableitung

Als Vorbereitung auf die folgenden Betrachtungen soll zunächst bei dem nichtinterpolierenden Verfahren geklärt werden, wie der Ableitungsoperator auf eine zu approximierende Funktion $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ anzuwenden ist. Die Beschränkung auf den nichtinterpolierenden Fall ergibt sich aus der Einfachheit der Durchführung, da auf Singularitäten der Gewichtsfunktionen keinerlei Rücksicht genommen werden muß.

Aus der Definition der Approximation dieser Funktion, welche sich aus Gleichung (3.22)

$$f(\boldsymbol{x}) \cong \sum_{i=1}^{N} f_i \; \phi_i(\boldsymbol{x}) \tag{4.1}$$

ergibt, folgt unmittelbar die Ableitung der Funktion als

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) \cong \sum_{i=1}^{N} f_i \; \nabla\phi_i(\boldsymbol{x}) \quad . \tag{4.2}$$

Die aufgeworfene Frage, wie der Ableitungsoperator auf eine Funktion anzuwenden ist, reduziert sich aufgrund dieser Gleichung auf die Problemstellung, wie die Ableitung der Kernfunktion zu verstehen ist. Dies läßt sich nicht unmittelbar beantworten, da die globale Approximation einer Funktion nach

Formel (3.21) der Limes einer lokalen Approximation ist. Das bedeutet auch, daß die globale Kernfunktion $\phi_i(\boldsymbol{x})$ als Limes einer lokalen Kernfunktion zu verstehen ist, also

$$\phi_i(\boldsymbol{x}) = \lim_{\boldsymbol{\xi}\to\boldsymbol{x}} \phi_i(\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{x}) = \lim_{\boldsymbol{\xi}\to\boldsymbol{x}} W(\boldsymbol{\xi}-\boldsymbol{x_i}) \sum_{\mu,\nu=1}^{M} A^{-1}_{\mu\nu}(\boldsymbol{\xi})\, b_\mu(\boldsymbol{x_i})\, b_\nu(\boldsymbol{x}) \quad . \tag{4.3}$$

Aus Gleichung (4.2) ist zu erwarten, daß der Gradient der Kernfunktion der Gleichung

$$\nabla\phi_i(\boldsymbol{x}) = \nabla \lim_{\boldsymbol{\xi}\to\boldsymbol{x}} \phi_i(\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{x}) \tag{4.4}$$

genügt. Dies ist jedoch nicht die einzige Möglichkeit, wie die Ableitung definiert werden kann. Es ist durchaus denkbar, daß die im letzten Kapitel erwähnte „*moving*"–Prozedur erst nach Anwendung des Gradienten durchgeführt wird, was zu dem Ausdruck

$$\nabla\phi_i(\boldsymbol{x}) = \lim_{\boldsymbol{\xi}\to\boldsymbol{x}} \nabla\phi_i(\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{x}) \tag{4.5}$$

führt. Welche der beiden Formulierungen die bessere Approximation des Gradienten einer Funktion liefert, muß das numerische Experiment entscheiden.

Dies soll nun im eindimensionalen Fall an der Funktion $f(x) = \exp(-7x^2)$ (Abbildung 4.1) untersucht werden. Zunächst wird der nichtinterpolierende Fall behandelt. Die Ergebnisse sind in den Diagrammen der Abbildung 4.2 bei einer regelmäßigen Stützstellenverteilung (100 Stützstellen im Intervall [-1,1]; Breite der Kernfunktion $h = 0.16$) dargestellt. Auf der linken Seite ist für die lineare Interpolation ($M = 2$) und kubische Interpolation ($M = 4$) jeweils der absolute Fehler in der Ableitung, die mit Gleichung (4.5) berechnet wurde, abgebildet. Auf der rechten Seite der Abbildung sind die entsprechenden absoluten Fehler unter Verwendung von Gleichung (4.4) dargestellt.

Betrachtet man die lineare Interpolation und die kubische Interpolation separat, so scheint kein großer Unterschied zwischen den beiden Formulierungen zu bestehen.

Vergleicht man jedoch die lineare und die kubische Interpolation direkt miteinander, so findet man das zunächst überraschende Ergebnis, daß der Fehler

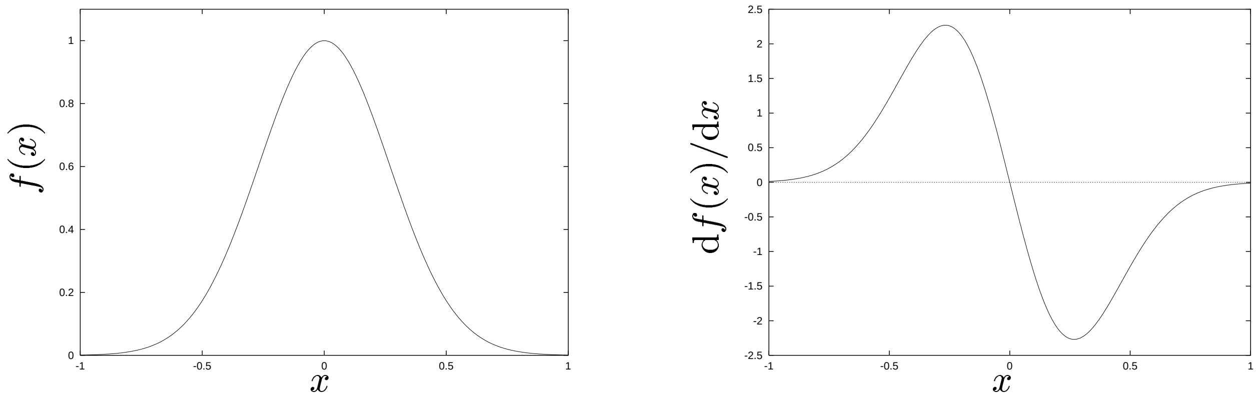


Abb. 4.1: Dargestellt ist links die Funktion $f(x) = e^{-7x^2}$, rechts ihre Ableitung.

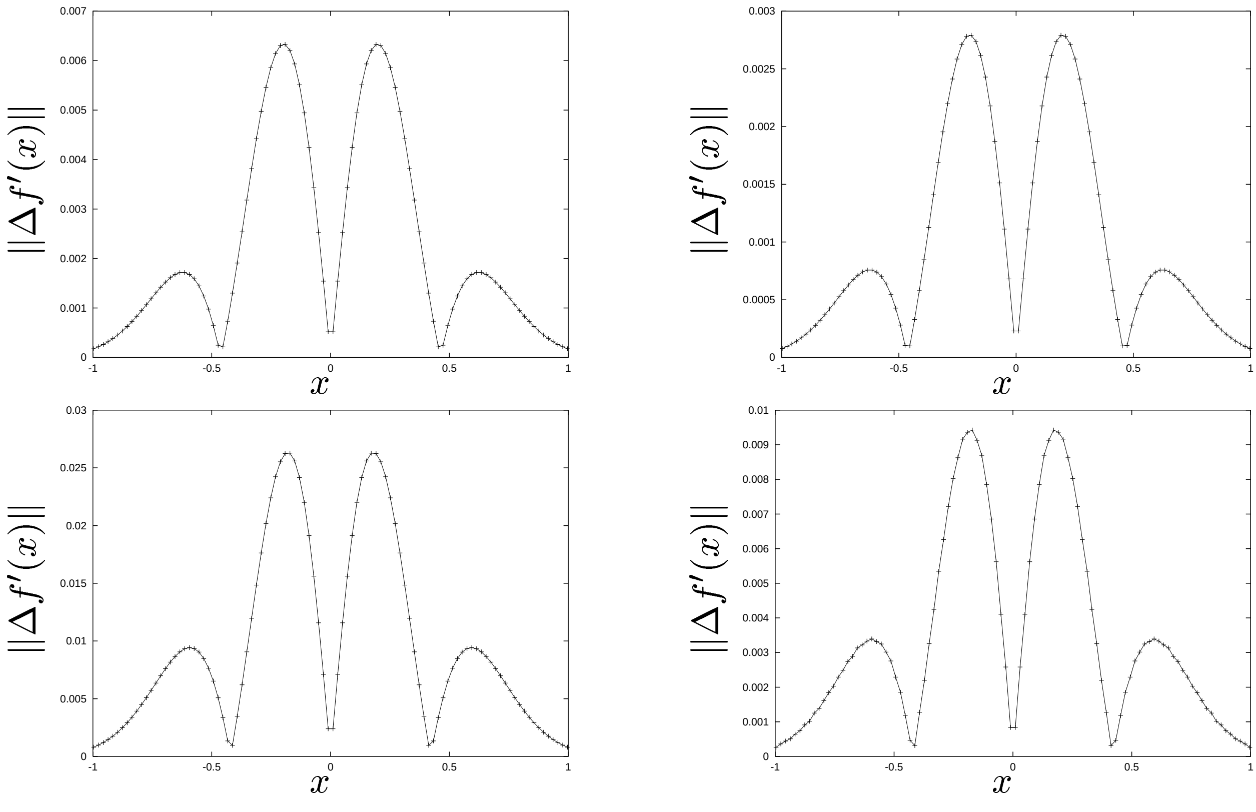


Abb. 4.2: Absoluter Fehler des nichtinterpolierenden Verfahrens bei 100 Stützstellen. Dargestellt ist die Abweichung der durch das Verfahren berechneten Ableitung von der analytisch gegebenen aus Abbildung 4.1 rechts. Links der Fehler nach Gleichung (4.5), rechts der Fehler nach Gleichung (4.4) für $M = 2$ (oben) und $M = 4$ (unten).

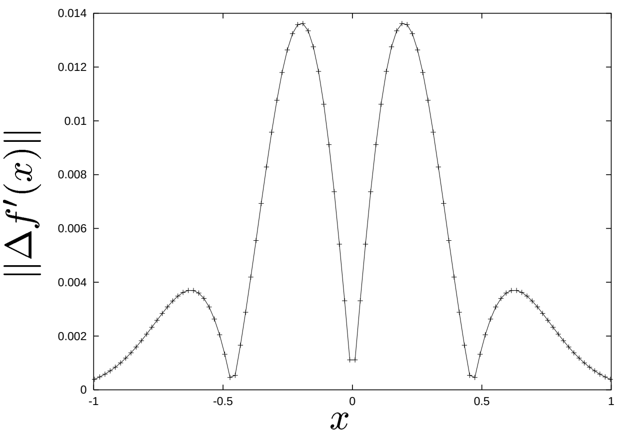
bei der kubischen Interpolation größer ist als derjenige bei der linearen Interpolation. Die Erklärung liegt in der numerischen Umsetzung, speziell der Inversionsroutine der Basisfunktionenmatrix $\mathbf{A}(\boldsymbol{x})$ aus Gleichung (3.23). Obwohl die Matrix $\mathbf{A}$ positiv definit ist, wie im letzten Kapitel bereits gezeigt, ist dies bei der kubischen Interpolation numerisch nicht mehr erfüllt. Das ist ein bekanntes Problem bei der numerischen Umsetzung von *Least Square* Aufgaben (Press et al. (1992)), speziell wenn die Konditionszahl (Verhältnis von größtem Eigenwert zu kleinstem Eigenwert) der dort auftretenden Matrizen sehr groß wird. Das bedeutet, daß zur Inversion dieser Matrix die üblicherweise verwendete LU–Zerlegung von $\mathbf{A}$ ein falsches Ergebnis liefert. Um dieses Problem zu umgehen, wurde die Matrix $\mathbf{A}$ alternativ mittels *Singular Value Decomposition* (SVD) (Press et al. (1992)) in zwei orthogonale Matrizen und eine Diagonalmatrix, welche die Eigenwerte dieser Matrix enthält, zerlegt. Da die Eigenwerte nun bekannt sind, werden diejenigen unter ihnen, welche ein negatives Vorzeichen haben, manuell ersetzt. Dieses Vorgehen birgt natürlich ein entsprechendes Fehlerpotential. Jedoch hält es sich in Grenzen, da die negativen Eigenwerte gegenüber den anderen einen zu vernachlässigenden absoluten Wert annehmen.

Bei der linearen Interpolation ergibt sich sowohl bei Verwendung von Gleichung (4.5) als auch bei Verwendung von Gleichung (4.4) kein Unterschied von SVD und LU–Zerlegung. Anders sieht es jedoch bei der kubischen Interpolation aus. Verwendet man Gleichung (4.5), so reduziert sich der Fehler von etwa 0.026 bei SVD auf etwa $6.8 \cdot 10^{-5}$ bei der LU–Zerlegung. Daher scheint die LU–Zerlegung klar im Vorteil zu liegen, daß dem aber nicht so ist, zeigt der Vergleich bei Anwendung der beiden Verfahren auf Gleichung (4.4). Die Ableitung einer Funktion kann in diesem Fall zwar durch SVD dargestellt werden, jedoch treten bei Verwendung der LU–Zerlegung große Abweichungen der numerischen Approximation von der analtisch berechneten Ableitung auf. Fazit: Aufgrund des geringeren Fehlers wird die Ableitung der Kernfunktion nach Gleichung (4.4) bevorzugt.

Auch im Falle des interpolierenden Verfahrens wird aufgrund der gemachten Erfahrungen für die Ableitung der Kernfunktion Gleichung (4.4) verwendet. Allerdings gerät man bei diesem Verfahren nicht in die oben genannten Schwierigkeiten, da die singulären Eigenwerte durch den Algorithmus, welcher in Abschnitt 3.4.3 vorgestellt wurde, bereits aus der Matrix $\mathbf{A}$ analytisch eliminiert wurden. Die Inversion der verbleibenden Matrix stellt kein numerisches Problem dar.

4.1.2 Vergleich der Formulierungen

In diesem Abschnitt soll ein direkter Vergleich zwischen der interpolierenden und der nichtinterpolierenden Formulierung Aufschluß geben, welcher der beiden Ansätze der geeignetere zur Simulation von Differentialgleichungen, speziell der hydrodynamischen, ist. Dieser Vergleich wird anhand zweier Funktionen vorgenommen, bei denen jeweils, wie bereits im letzten Abschnitt, der absolute Fehler in den Ableitungen miteinander verglichen wird. Zunächst betrachtet man die schon oben verwendete glatte Funktion $f(x) = \exp(-7x^2)$ auf dem Intervall $[-1, 1]$ mit 100 Stützstellen. Die Ergebnisse des nichtinterpolierenden Verfahrens in Abbildung 4.2 werden mit denen des interpolierenden Verfahrens in Abbildung 4.3 verglichen.



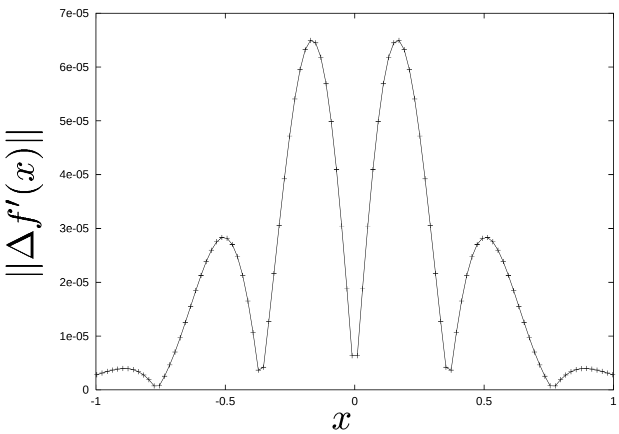


Abb. 4.3: Absoluter Fehler des interpolierenden Verfahrens bei 100 Stützstellen. Dargestellt ist die Abweichung der durch das Verfahren berechneten Ableitung von der analytisch gegebenen aus Abbildung 4.1 rechts. Links ist das Ergebnis für $M = 2$, rechts für $M = 4$.

Für die lineare Interpolation, also $M = 2$, scheint das nichtinterpolierende Verfahren im Vorteil zu liegen. Dieser Vorteil schmilzt jedoch bei der kubischen Interpolation ($M = 4$) deutlich. Der Grund liegt natürlich auch an der Problematik der numerischen Inversion der Matrix $\mathbf{A}$, welche schon im letzten Abschnitt besprochen wurde.

Als zweites Beispiel werden anhand der Funktion

$$f(x) = \frac{1}{2}\left\{1 + \tanh\left[10^3(x - 0.4)\right]\right\} e^{-[(x-0.4)/0.2]^2} \tag{4.6}$$

die beiden Formulierungen verglichen. Die Funktion und ihre Ableitung sind in der Abbildung 4.4 dargestellt. Der steile Gradient, welcher über eine

Längenskala von 10^{-3} geht, stellt ein geeignetes Modell für einen Schock dar, der durch künstliche Viskosität ausgeschmiert ist. Die Approximationen sollten sowohl diesen steilen Gradienten als auch den glatten Teil, der durch den Gauß'schen Term verursacht wird, gut approximieren können. Die numerischen Ergebnisse des interpolierenden Verfahrens sind in Abbildung 4.5 dargestellt. Die 100 verwendeten Stützstellen sind regelmäßig auf dem Intervall [0,1] angeordnet, und die Trägerbreite der Kernfunktionen beträgt $h = 0.05$ bei linearer Interpolation und $h = 0.07$ bei kubischer Interpolation.

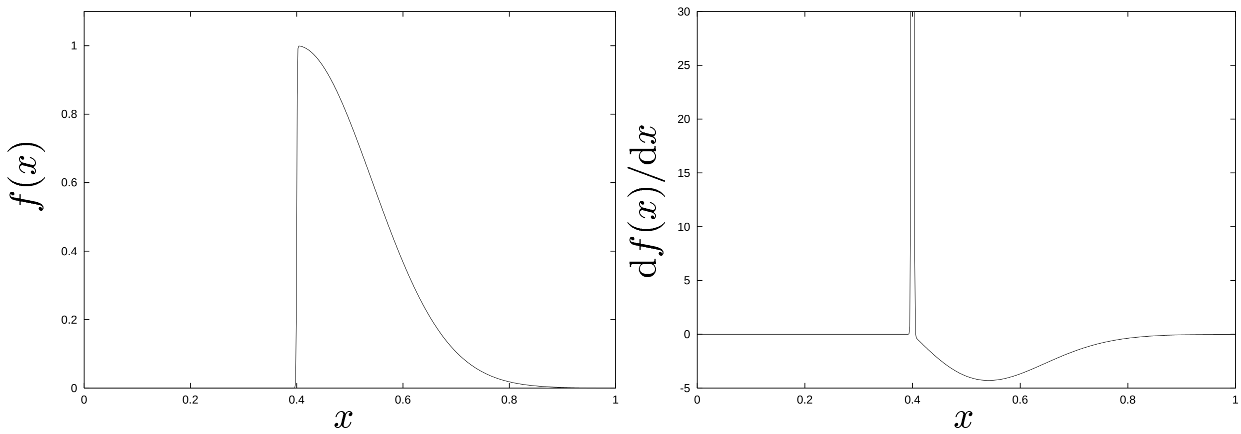


Abb. 4.4: Dargestellt ist links die Funktion aus Gleichung (4.6), rechts ihre Ableitung.

Auch bei der oben dargestellten glatten Exponentialfunktion reduziert sich der Fehler erwartungsgemäß bei der kubischer Interpolation gegenüber der linearen Interpolation. Die großen Fehler in der Umgebung des steilen Gradienten rühren hauptsächlich von der endlichen Ausbreitung der Kernfunktion her. Verwendet man eine dichtere Punkteverteilung um diesen steilen Gradienten herum und damit eine kleinere Breite der Kernfunktion, so wird auch die Auflösung dieses Gradienten wesentlich besser.

Ein anderes Ergebnis liegt bei dem nichtinterpolierenden Verfahren vor. Obwohl die Funktion selbst gut approximiert wird, stimmt dies nicht mehr bei der Ableitung. Die approximierte Ableitung zeigt wilde Oszillationen über das ganze Intervall hinweg — das Verfahren kann keine steilen Gradienten reproduzieren. Dies schränkt die Verwendbarkeit des nichtinterpolierenden Verfahrens drastisch ein, denn speziell in der Hydrodynamik, in der mit Schockwellen gerechnet werden muß, ist dieses Verfahren daher völlig ungeeignet.

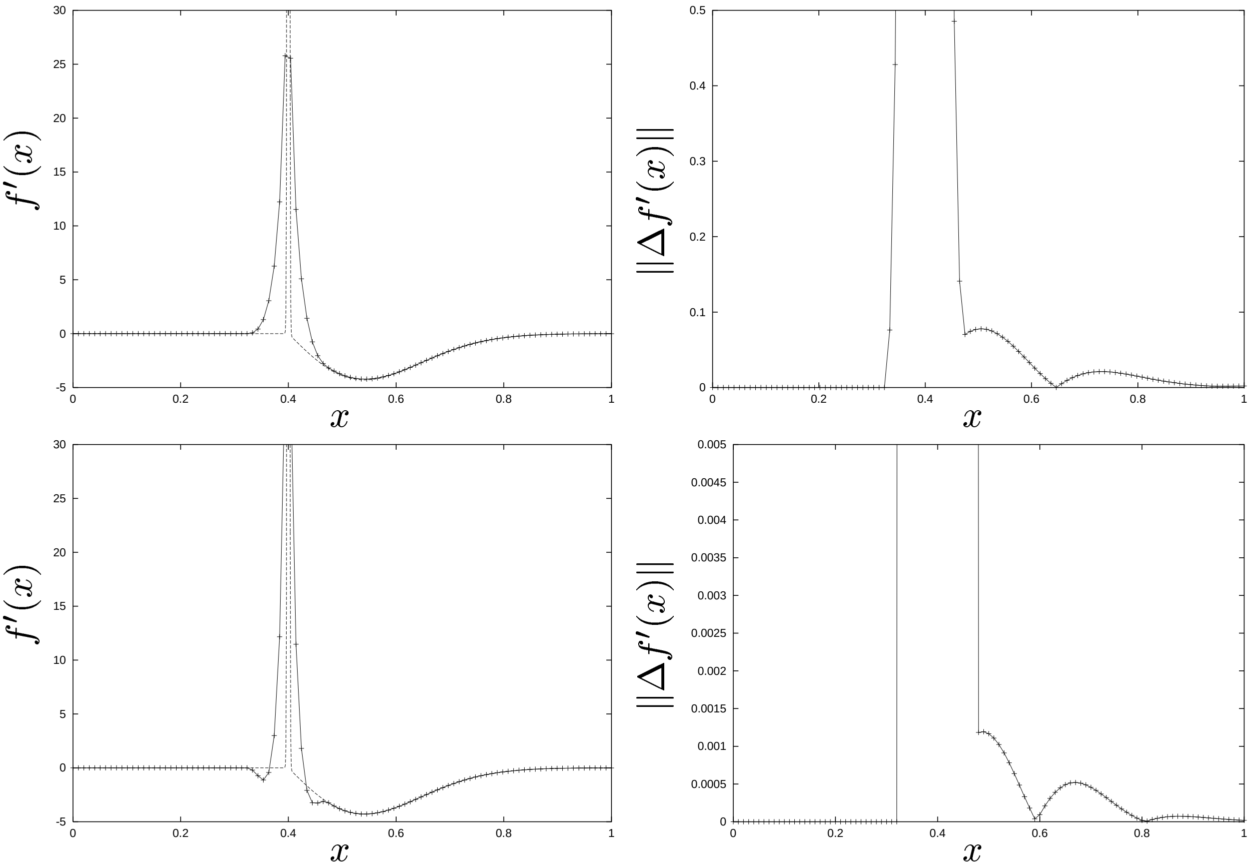


Abb. 4.5: Auf der linken Seite ist die Approximation der Ableitung der Funktion aus Gleichung (4.6) für $M = 2$ (oben) und $M = 4$ (unten) dargestellt. Die rechten Seite bildet den dazugehörigen absoluten Fehler dieser Approximation bei 100 Stützstellen ab.

Um diese Problematik zu umgehen, schlagen Belytschko et al. (1996) in einem verwandten Verfahren die Anwendung einer sogenannten *Diffraction Method* vor. Sie besteht darin, die Unstetigkeitsstellen durch Modifikation der Gewichtsfunktion zu umgehen. Allerdings stellt dieses Vorgehen einen erheblichen Mehraufwand dar. Die Verallgemeinerung auf dreidimensionale Probleme ist ebenfalls noch nicht geklärt. In der vorliegenden Arbeit hingegen wird aufgrund des erheblichen Mehraufwandes bei der Berechnung der Interpolationswerte im folgenden das nichtinterpolierende Verfahren fallengelassen und bei den Simulationen nur auf das interpolierende Verfahren zurückgegriffen.

4.2 Fehleranalyse

Im letzten Abschnitt wurde der nichtinterpolierende Fall für Belange, die in dieser Arbeit betrachtet werden, ausgeschlossen. Daher ist die Fehleranalyse nur für den interpolierenden Fall von Relevanz. Des Weiteren wird für die Fehleranalyse der Übersichtlichkeit halber nur auf den eindimensionalen Fall zurückgegriffen. Da eine unregelmäßige Stützstellenverteilung zu keiner gut interpretierbaren Fehlerabschätzung führt, wird in diesem Abschnitt nur der Fall einer regelmäßigen Stützstellenverteilung betrachtet.

Untersucht wird zunächst die Approximation in linearer Interpolation, also der Fall $M = 2$. Um die Eindeutigkeit der Interpolation zu garantieren, müssen neben der zentralen Stützstelle noch mindestens zwei weitere Stützstellen im Träger der Gewichtsfunktion liegen. Dies folgt aus der symmetrischen Anordnung der Stützstellen. Die minimale Anzahl der im Träger der Gewichtsfunktion enthaltenen Stützstellen bei linearer Interpolation sind demnach drei Stütztellen. In diesem Fall reduziert sich die Summation über die Stützstellen bei Bestimmung der Ableitung einer Funktion $f(x)$ auf drei Terme, also

$$f'(x_l) \cong \sum_{i=1}^{N} f_i \, \phi_i'(x_l) = f_{l-1}\phi_{l-1}'(x_l) + f_l\phi_l'(x_l) + f_{l+1}\phi_{l+1}'(x_l) \quad . \tag{4.7}$$

Bestimmt man die Ableitungen der Kernfunktionen aus den Formeln in Abschnitt 3.4.3 an der Stelle x_l, so reduziert sich diese Gleichung auf

$$f'(x_l) \cong \frac{1}{2\Delta x}(f_{l+1} - f_{l-1}) \quad . \tag{4.8}$$

Für eine regelmäßige Stützstellenverteilung, wie sie auch hier vorliegt, ist diese Formel aus dem Differenzenverfahren bekannt. Sie stellt die zentrale Differenz der Ordnung $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ mit all ihren Vor– und Nachteilen dar. Daher ist auch unter diesen Bedingungen die Approximation von der Ordnung $\mathcal{O}(\Delta x^2)$.

Erweitert man den Träger der Gewichtsfunktion, so daß in ihm nun anstelle von drei Stützstellen fünf Stützstellen enthalten sind, so folgt für die Ableitung der Funktion $f(x)$ an der Stelle x_l die Gleichung

$$f'(x_l) \cong \frac{1}{2\Delta x}(f_{l+1} - f_{l-1}) + \frac{1}{(4+c)\Delta x}(f_{l+2} - 2f_{l+1} + 2f_{l-1} - f_{l-2}) \tag{4.9}$$

wobei die Konstante c für das Verhältnis $W(\Delta x)/W(2\Delta x)$ der Gewichtsfunktionen steht. Um hier die Ordnung des Verfahrens zu bestimmen, betrachtet man die beiden Terme auf der rechten Seite von Gleichung (4.9) separat. Der erste Term steht wie oben für die zentrale Differenz der ersten Ableitung und ist von der Ordnung $\mathcal{O}(\Delta x^2)$. Die Bedeutung des zweiten Terms erschließt sich aus der Vorwärtsdifferenz $\Delta x^2 f''(x_l) = f_l - 2f_{l+1} + f_{l+2}$ und der Rückwärtsdifferenz $\Delta x^2 f''(x_l) = f_{l-2} - 2f_{l-1} + f_l$ der zweiten Ableitungen der Funktion $f(x)$ an der Stelle x_l im Differenzenverfahren. Sowohl die Rückwärtsdifferenz als auch die Vorwärtsdifferenz sind von der Ordnung $\mathcal{O}(\Delta x)$. Subtrahiert man die Vorwärtsdifferenz von der Rückwärtsdifferenz, so erhält man genau den zweiten Term in Klammern der Gleichung (4.9), multipliziert mit Δx. Umgekehrt bedeutet dies jedoch, daß der zweite Term von Gleichung (4.9) in der Ordnung $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ Null ist. Daher bleibt auch unter diesen Bedingungen die Ordnung $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ der Approximation erhalten.

Bei der quadratischen Interpolation, also $M = 3$, ändert sich wegen der symmetrischen Anordnung der Stützstellen gegenüber der linearen Interpolation ($M = 2$) nichts. Der Fehler ist demnach auch in diesem Falle von der Ordnung $\mathcal{O}(\Delta x^2)$.

Betrachtet man jetzt den Fall der kubischen Interpolation ($M = 4$), so müssen neben der zentralen Stützstelle mindestens vier weitere Stützstellen im Träger der Gewichtsfunktion liegen, um die Eindeutigkeit der Interpolation zu garantieren. Entsprechend zu dem linearen Fall ergibt sich für die Ableitung die Approximation

$$f'(x_l) \cong \frac{1}{12\Delta x}(f_{l-2} - 8f_{l+1} + 8f_{l+1} - f_{l+2}) \quad . \tag{4.10}$$

Diese Gleichung läßt sich als zentrale Differenz der Ordnung $\mathcal{O}(\Delta x^4)$ interpretieren.

Es sei an dieser Stelle noch einmal darauf hingewiesen, daß die hier behandelte Abschätzung des numerischen Fehlers der Approximation unter der idealen Annahme einer regulären Stützstellenverteilung besteht. Für eine irreguläre Stützstellenverteilung ist die Ordnung des Verfahrens nicht mehr so einfach zu bestimmen. Numerische Experimente legen jedoch die Vermutung nahe, daß sich in diesem Fall die Ordnung der Approximationen um mindestens Δx verringert.

4.3 Die Advektionsgleichung

Bisher wurden nur allgemeine Betrachtungen über die *Moving Least Square* Methode als Kollokationsverfahren durchgeführt. Nun soll in diesem Abschnitt das Verfahren konkret auf eine Differentialgleichung angewandt werden. Im Hinblick auf die im nächsten Abschnitt folgenden hydrodynamischen Gleichungen ist die eindimensionale Advektionsgleichung mit zeitunabhängigem aber örtlich variablem Geschwindigkeitsfeld $a(x)$ vorgesehen

$$\frac{\partial}{\partial t}\varrho(x,t) + \frac{\partial}{\partial x}\big[a(x)\varrho(x,t)\big] = 0 \quad . \tag{4.11}$$

Als Approximation für Dichte $\varrho(x,t)$ verwendet man den *Moving Least Square* Ausdruck

$$\varrho(x,t) \cong \sum_{i=1}^{N} \varrho_i(t)\ \phi_i(x) \quad . \tag{4.12}$$

Der Advektionskoeffizient $a(x)$ wird, obwohl er analytisch gebenen ist, ebenfalls entwickelt, also

$$a(x) \cong \sum_{i=1}^{N} a_i\ \phi_i(x) \quad . \tag{4.13}$$

Dieses Vorgehen gründet vor allem darauf, daß dadurch ein Vergleich mit der Diskretisierung der Kontinuitätsgleichung (2.3) leichter fällt. In den Simulationen findet sich kein Unterschied, ob dieser Advektionskoeffizient wie oben entwickelt wird oder nicht.

Mit diesen Approximationen und der Bedingung $\phi_i(x_j) = \delta_{ij}$ für das interpolierende Verfahren (Gleichung (3.26)) findet man für die Advektionsgleichung (4.11) die Diskretisierung

$$\dot{\varrho}_i(t) + \sum_{j=1}^{N} \big[a_i\varrho_j(t) + a_j\varrho_i(t)\big]\frac{\partial}{\partial x}\phi_j(x_i) = 0 \quad . \tag{4.14}$$

4.4 Die hydrodynamischen Gleichungen

Die Diskretisierung der Advektionsgleichung gibt bereits einen recht guten Eindruck, wie die *Moving Least Square* Approximationen auf Differentialgleichungen anzuwenden sind. Nun soll in diesem Abschnitt das Verfahren auf die hydrodynamischen Gleichungen angewandt werden. Dabei ist zu beachten, daß hier nur die Gleichungen des idealen Fluids behandelt werden, also sämtliche Viskositätsterme zu vernachlässigen sind.

4.4.1 Die Kontinuitätsgleichung

Ausgangspunkt der Herleitung für die Approximationen der hydrodynamischen Gleichungen ist die Kontinuitätsgleichung (2.3) bzw.

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \mathrm{div}(\varrho\, \boldsymbol{v}) = 0 \quad . \tag{4.15}$$

Da in dieser Gleichung die unbekannten Größen die Dichte ϱ und die Geschwindigkeit $\boldsymbol{v}$ sind, werden diese nun gemäß des *Moving Least Square* Verfahrens folgendermaßen angesetzt

$$\varrho(\boldsymbol{x}, t) \cong \sum_{i=1}^{N} \varrho_i(t)\, \phi_i(\boldsymbol{x}) \tag{4.16}$$

und

$$\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}, t) \cong \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{v}_i(t)\, \phi_i(\boldsymbol{x}) \quad . \tag{4.17}$$

An dieser Stelle wird deutlich, wie das vorliegende Verfahren eine Separation des Zeitanteils und des Ortsanteils vornimmt, so daß aus der partiellen Differentialgleichung (4.15) eine gewöhnliche werden wird. Dabei geht man wie folgt vor: Zunächst werden die Approximationen (4.16) und (4.17) in die Kontinuitätsgleichung (4.15) eingesetzt und anschließend an einer beliebigen Stützstelle ausgewertet. Damit erhält man unter Berücksichtigung der Relation $\phi_i(\boldsymbol{x}_j) = \delta_{ij}$ die folgende Approximation zur Kontinuitätsgleichung

$$\dot{\varrho}_i + \sum_{j=1}^{N} (\varrho_j \boldsymbol{v}_i + \varrho_i \boldsymbol{v}_j) \cdot \nabla \phi_j(\boldsymbol{x}_i) = 0 \quad . \tag{4.18}$$

4.4.2 Die Impulsgleichung

Die Kontnuitätsgleichung beinhaltet noch eine Unbekannte, die Geschwindigkeit $\boldsymbol{v}$. Um diese zu bestimmen, werden die Bewegungsgleichung bzw. die

Euler–Gleichungen in der Form von Gleichung (2.7) herangezogen

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varrho \boldsymbol{v}) + \operatorname{div}(\varrho \boldsymbol{v}\, \boldsymbol{v}) = -\nabla p \quad . \tag{4.19}$$

Das entsprechende Vorgehen, wie bereits für die Kontinuitätsgleichung dargelegt, liefert die Gleichung

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t}(\varrho_i \boldsymbol{v}_i) + \sum_{j=1}^{N} (\varrho_j \boldsymbol{v}_i + \varrho_i \boldsymbol{v}_j)\, \boldsymbol{v}_i \cdot \nabla \phi_j(\boldsymbol{x}_i) \\ &\qquad + \varrho_i \boldsymbol{v}_i \sum_{j=1}^{N} \boldsymbol{v}_j \cdot \nabla \phi_j(\boldsymbol{x}_i) = -\sum_{j=1}^{N} p_j \nabla \phi_j(\boldsymbol{x}_i) \quad , \end{aligned} \tag{4.20}$$

wobei an dieser Stelle auch für den Druck die Approximation

$$p(\boldsymbol{x}) \cong \sum_{i=1}^{N} p_i\, \phi_i(\boldsymbol{x}) \tag{4.21}$$

Verwendung findet. Die Koeffizienten p_i können durch die Zustandsgleichung bestimmt werden.

Da aber in Gleichung (4.20) der Differentialoperator bezüglich der Zeit t auf das Produkt von Dichte– und Geschwindigkeitskoeffizienten angewandt wird, subtrahiert man von (4.20) die mit $\boldsymbol{v}_i$ durchmultiplizierte diskrete Kontinuitätsgleichung (4.18). Damit folgt als Differentialgleichung für die Geschwindigkeitskoeffizienten

$$\varrho_i \dot{\boldsymbol{v}}_i + \varrho_i \boldsymbol{v}_i \sum_{j=1}^{N} \boldsymbol{v}_j \cdot \nabla \phi_j(\boldsymbol{x}_i) = -\sum_{j=1}^{N} p_j \nabla \phi_j(\boldsymbol{x}_i) \quad . \tag{4.22}$$

4.4.3 Die Energiegleichung

Bei Fluiden, bei denen die innere Energie ε zur Beschreibung des Bewegungsablaufes eine wesentliche Rolle spielt, wird diese durch die Differentialgleichung (2.15) bzw.

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \operatorname{div}(\varepsilon\, \boldsymbol{v}) + p \operatorname{div} \boldsymbol{v} = 0 \tag{4.23}$$

beschrieben. Damit ist eine weitere Größe, die innere Energie, gemäß der Approximationsvorschrift

$$\varepsilon(\boldsymbol{x}, t) \cong \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i(t)\, \phi_i(\boldsymbol{x}) \tag{4.24}$$

anzusetzen.

Folgt man dem Vorgehen bei den bereits behandelten Gleichungen, so folgt aus der Differentialgleichung für die innere Energie deren Diskretisierung

$$\dot{\varepsilon}_i + \sum_{j=1}^{N} (\varepsilon_j \boldsymbol{v}_i + \varepsilon_i \boldsymbol{v}_j) \cdot \nabla\phi_j(\boldsymbol{x}_i) + p_i \sum_{j=1}^{N} \boldsymbol{v}_j \cdot \nabla\phi_j(\boldsymbol{x}_i) = 0 \quad . \tag{4.25}$$

Dies ist jedoch nicht die einzige Möglichkeit, wie die hydrodynamischen Gleichungen an das Schema angepaßt werden können. So ist zum Beispiel auch die Verwendung der Flußfunktionen $\boldsymbol{J} = \varrho\, \boldsymbol{v}$ anstelle der Geschwindigkeit $\boldsymbol{v}$ möglich. Diese Anwendung führt dann formal zu einer konservativen Formulierung der Gleichungen. Welche Formulierung sich am Ende als besser erweist, kommt auf das konkrete Anwendungsbeispiel an. Gerade bei den nachfolgenden Stoßrohrsimulationen findet man, daß die Niveaus der Dichte oder spezifischen inneren Energie bei Verwendung der konservativen Formulierung etwas besser repräsentiert werden.

4.5 Numerische Implementierung

Dieser Abschnitt dient in erster Linie dazu, vorzustellen, wie die *Moving Least Square* Methode numerisch umgesetzt werden kann. Dies findet hier am Beispiel des Kollokationsverfahrens statt, jedoch ändert sich für die in den folgenden Kapiteln betrachteten Verfahren wenig. Die prinzipielle Programmstruktur, wie sie hier präsentiert wird, bleibt erhalten; es sind nur noch wenige Größen, wie beispielsweise die Volumina, zusätzlich zu berechnen — doch dazu mehr in den folgenden Kapiteln.

Nach einer kurzen Einführung, welche die prinzipielle Programmstruktur vorstellt, wird auf spezielle Probleme bei der Implementierung genauer eingegangen. Dazu gehört zum einen die Verwendung einer künstlichen Viskosität zur Dämpfung von Oszillationen in der Umgebung von Unstetigkeitsstellen und zum anderen die Nachbarschaftssuche, die vor allem bei mehrdimensionalen Problemen die Rechenzeit signifikant senken kann.

4.5.1 Programmstruktur

Prinzipiell besteht das Programm aus vier separaten Hauptteilen, welche nun kurz vorgestellt werden.

Der erste Teil, die Initialisierungsroutine, setzt die Parameter der Simulation. Dort werden also neben der Stützstellenverteilung die Entwicklungskoeffizienten der *Moving Least Square* Approximation einer vorgegebenen Anfangsverteilung festgelegt.

Im zweiten Teil werden die Ableitungen der Kernfunktion bestimmt. Dies ist im Kollokationsverfahren, bei dem die Stützstellen sich zeitlich nicht verändern, nur einmal notwendig. Beim Galerkin–Verfahren des folgenden Kapitels ist dies ebenfalls nur einmal nötig, während beim Lagrangeschen Verfahren aus Kapitel 6 die Berechnung der Ableitungen nach jedem Zeitschritt vorgenommen werden muß. Die Gleichungen zur Berechnung der Ableitungen für das in dieser Arbeit verwendete interpolierende Verfahren finden sich im Abschnitt 3.4.3.

Der dritte Teil ist für die Zeitintegration verantwortlich. Es existieren in der Literatur eine Reihe verschiedener numerischer Verfahren, um ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen zu integrieren. Der Vergleich diverser Verfahren wurde in dieser Arbeit nicht weiter verfolgt, da die Eigenschaften dieser Verfahren bereits in der Literatur (Hirsch (1988)) ausführlich dargestellt sind. Aus Abschnitt 4.2 ist jedoch ersichtlich, daß ein explizites Euler–Verfahren für die Zeitintegration zu numerischen Instabilitäten führt (Ferziger (1981)). Um dies zu umgehen, wurde ein sogenanntes *Leap–Frog* Verfahren benutzt, bei dem der Zeitschritt bereits im vorhinein festgelegt ist; es hat die in dieser Arbeit ausreichende Ordnung $\mathcal{O}(\Delta t^2)$. Dies ist jedoch nur bei einfachen Strömungen, wie sie in dieser Arbeit betrachtet werden, möglich. Bei schwierigeren Strömungen ist eine adaptive Anpassung des Zeitschrittes, die etwa durch die Courant–Bedingung gesteuert wird, unumgänglich.

Der vierte Teil schließlich behandelt die Ausgabe der berechneten Daten.

4.5.2 Künstliche Viskosität

Ein großes Problem numerischer Simulationen von nichtlinearen Differentialgleichungen ist das Auftreten von Unstetigkeiten in den Lösungsfunktionen.

Gerade bei den Euler–Gleichungen sind Schockfronten, also Unstetigkeiten in Dichte, Geschwindigkeit, Druck und innerer Energie häufig anzutreffen. Unstetigkeiten führen jedoch zum Auftreten numerischer Instabilitäten (Hirsch (1988)). So können in der numerischen Lösungsfunktion große unphysikalische Postschock–Oszillationen auftreten, die zu vermeiden oder wenigstens zu dämpfen sind. Dies erfolgt üblicherweise durch die Verwendung unphysikalischer Viskositätsterme, die den entsprechenden Gleichungen hinzugefügt werden.

Es wird generell zwischen zwei Arten der künstlichen Viskosität unterschieden. Zum einen ist dies die künstliche Volumenviskosität

$$p_\alpha = -\alpha \varrho c_0 l \operatorname{div} \boldsymbol{v} \quad , \tag{4.26}$$

wobei der Parameter α frei wählbar ist und experimentell den Gegebenheiten anzupassen ist. In den folgenden Simulationen des eindimensionalen Stoßrohres liegt dieser Parameter bei etwa 1.0. Aus Dimensionsgründen wurde neben der Dichte ϱ noch eine typische Länge l eingeführt, welche üblicherweise mit der Trägerbreite der Kernfunktion identifiziert wird. Ebenso erklärt sich das Auftreten der lokalen Schallgeschwindigkeit c_0.

Den Namen erhält diese Art künstliche Viskosität durch einen Vergleich mit den Viskositätstermen der Navier–Stokes–Gleichungen. Addiert man den Ausdruck (4.26) zum Druck in den Euler–Gleichungen, so entsteht durch den in den Euler–Gleichungen auftretenden Druckgradienten ein Term, der der Volumenviskosität in den Navier–Stokes–Gleichungen ähnelt.

Die zweite Art der künstlichen Viskosität ist die sogenannte von Neumann–Richtmyer–Viskosität

$$p_\beta = \beta \varrho^2 l^2 (\operatorname{div} \boldsymbol{v})^2 \quad , \tag{4.27}$$

wobei β, entsprechend zum Parameter α der künstlichen Volumenviskosität, ein frei wählbarer Parameter ist. In den folgenden Simulationen nimmt dieser Werte im Bereich vn 1.0 bis 2.0 an. Die weiteren Größen werden, wie bei der künstlichen Volumenviskosität, aus Dimensionsgründen eingeführt. Der Ausdruck (4.27) beruht auf den Erfahrungen bei finiten Differenzenverfahren, welche diesen Druck bereits zur numerischen Behandlung von Unstetigkeiten verwenden (Hirsch (1988)).

Da die künstliche Viskosität nur bei Unstetigkeitsstellen wirksam werden soll, wird die Anwendung dieser auf Orte beschränkt, bei denen $\operatorname{div} \boldsymbol{v} < 0$

gilt. Demnach wird im Programm der Druck an der Stelle $\boldsymbol{x}_i$ durch folgenden Ausdruck ersetzt

$$p(\boldsymbol{x}_i) \to \begin{cases} p(\boldsymbol{x}_i) + p_\alpha(\boldsymbol{x}_i) + p_\beta(\boldsymbol{x}_i) & \text{für} \quad \operatorname{div} \boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}_i) < 0 \\ p(\boldsymbol{x}_i) & \text{sonst.} \end{cases} \tag{4.28}$$

Diese beiden Terme haben nicht nur den Effekt, die unerwünschten Postschock–Oszillationen zu dämpfen, sondern vermindern unerwünschterweise die Auflösung des Verfahrens im Bereich der Unstetigkeitsstelle. Dies hat zur Folge, daß die Unstetigkeitsstelle über einen Bereich ausgeschmiert wird, der mit den Parametern α und β ansteigt. Für die numerischen Simulationen gilt es daher bei der Festlegung dieser Parameter zwischen der Auflösung des Verfahrens und den Oszillationen abzuwägen.

4.5.3 Nachbarschaftssuche

Wie die Gleichungen aus Abschnitt 3.4.3 darlegen, treten beispielsweise zur Berechnung der Ableitung von Kernfunktionen Doppelsummen über die Stützstellenanzahl auf. Man spricht daher von einem N^2–Algorithmus, wobei N die Anzahl der Stützstellen ist. Dies stellt bei einer kleinen Anzahl von Stützstellen noch kein Problem dar. Verwendet man jedoch sehr viele Stützstellen, wie es gerade bei mehrdimensionalen Anordnungen vorkommt, so wird die Rechenzeit nicht mehr akzeptabel. Daher ist es notwendig, daß bei den Summationen nur diejenigen Summanden berechnet werden, die einen nichtverschwindenden Anteil zur Summe beitragen. Dies sind diejenigen Stützstellen, welche im Träger der auszuwertenden Stützstelle enthalten sind. Man spricht in diesem Fall von Nachbarstützstellen. Einer Möglichkeit der Umsetzung dieser Idee ist, sich eine List aller Nachbarn einer Stützstelle anzulegen, auf die dann während der Simulation immer wieder zurückgegriffen werden kann.

Bei einer regulären Anordnung der Stützstellen ist es kein Problem, eine solche Liste zu erstellen. So vergleicht man die Gitterweite mit der Trägerbreite der Gewichtsfunktion und entscheidet, welche Stützstellen in die Summe mit eingeschlossen werden sollen. Ein Vorteil von *Moving Least Square* sollte jedoch die irreguläre Anordnung der Stützstellen sein. In diesem Falle müssen Verfahren entwickelt werden, die möglichst effizient alle Nachbarn einer Stützstelle auffinden.

Beim Aufbau solch einer Liste liegt es nahe, den Wechselwirkungsradius einer Stützstelle mit den Abständen sämtlicher anderer Stützstellen zu vergleichen. Dabei werden aber nur diejenigen Stützstellen in die Liste einbezogen, deren Abstände kleiner sind als die Trägerbreite der Gewichtsfunktion dieser einen Stützstelle. Das Verfahren ist jedoch äußerst aufwendig, da für jede Stützstelle der Abstand zu allen anderen Stützstellen bestimmt werden muß. Dies hat zur Folge, daß es sich wiederum um einen N^2–Algorithmus handelt, den es ja zu vermeiden galt.

Eine deutliche Verbesserung in der Rechenzeit ergibt sich beispielsweise durch Verwendung verketteter Listen (*linked lists*). Dabei legt man über das Simulationsgebiet ein regelmäßiges Hilfsgitter, in welches zunächst alle Stützstellen einzuordnen sind (Hockney, Eastwood (1989)). Zugleich werden alle Stützstellen, die in derselben Gitterzelle zu liegen kommen, durch Indizes miteinander verknüpft und in einer Liste gespeichert (Flebbe (1994)). Nachdem dadurch pro Hilfsgitterzelle eine verkettete Liste erzeugt wurde, kann diese mit Zeigern durchgefahren werden, bis eine Abbruchbedingung anzeigt, daß ein Ende erreicht ist, sich also keine weiteren Stützstellen in einer Hilfsgitterzelle befinden.

In der Nachbarschaftssuche wird dann für jede Stützstelle nur der Bereich des Hilfsgitters untersucht, in dem die möglichen Wechselwirkungspartner liegen. Da das Hilfsgitter regelmäßig angeordnet ist, werden nur die Zellen berücksichtigt, welche sich von der Stützstelle mit maximal der Trägerbreite entfernt liegen.

Eine weitere in der Literatur bekannte Möglichkeit der Nachbarschaftssuche ist die Verwendung hierarchischer Baumstrukturen. Da diese jedoch in der vorliegenden Arbeit keine Verwendung finden, wird auf die Literatur verwiesen (Pfalzner, Gibbon (1996)).

4.6 Numerische Tests

In diesem Abschnitt werden nun die Eigenschaften und Fähigkeiten der numerischen Implementierung anhand einiger analytischer Testprobleme untersucht.

So wird zunächst das eindimensionale Advektionsproblem betrachtet. Dies dient zur Darstellung einiger grundlegender Eigenschaften des Verfahrens wie Diffusionsverhalten, *Upwind*–Problematik und Verhalten bei irregulären Gittern. Als erstes physikalisches Beispiel findet das eindimensionale Stoßrohr Verwendung. Hier können das Verhalten bei steilen Gradienten der Lösungsfunktion und die Eigenschaften der künstlichen Viskosität genauer untersucht werden. Dabei treten die besonderen Eigenschaften der *Moving Least Square* Methode gerade bei lokalen Verfeinerungen des Gitters deutlich hervor. Als abschließendes Beispiel findet sich die zweidimensionale Simulation einer starr rotierenden Gasscheibe, welche sich aufgrund des Drucks radial ausdehnt.

Für die Zeitintegration der Entwicklungsgleichungen findet ein *Leap Frog* Integrator, welcher von der Ordnung $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ ist, Verwendung.

4.6.1 Die Advektionsgleichung

Als erstes Testbeispiel wird die eindimensionale Advektionsgleichung mit zeitunabhängigem aber örtlich variablem Geschwindigkeitsfeld behandelt.

Zunächst betrachte man Gleichung (4.14) mit konstanter Geschwindigkeit $a(x) = 1.0$. Als Anfangsverteilung wird die Gauß–Funktion

$$\varrho_0(x) = e^{-50(x+0.5)^2} \tag{4.29}$$

angesetzt. Als analytisches Resultat erwartet man, daß diese Funktion ohne Änderung der Form und Amplitude advektiert wird. In Abbildung 4.6 ist auf der linken Seite neben der Anfangsverteilung, welche als durchgezogene Linie dargestellt ist, das numerische Ergebnis zur Zeit $T = 1.0$ wiedergegeben. Von oben nach unten finden sich die Ergebnisse für die lineare Interpolation ($M = 2$), quadratische Interpolation ($M = 3$) und kubische Interpolation ($M = 4$) bei jeweils 100 Stützstellen.

Wie bereits bei der Fehleranalyse verdeutlicht, gibt es zwischen der linearen Interpolation und der kubischen Interpolation aufgrund der regelmäßigen Anordnung der Stützstellen keinen Unterschied in dem numerischen Ergebnis. Bemerkenswert ist die kleine negative Senke links neben dem Maximum des numerischen Ergebnisses. Diese resultiert aus der Tatsache, daß zur numerischen Berechnung des nächsten Zeitschrittes zentrale Differenzen im Raum Verwendung finden, was ein bekanntes Problem aus der Theorie der finiten Differenzen ist. Zur Vermeidung der Senke in der numerischen

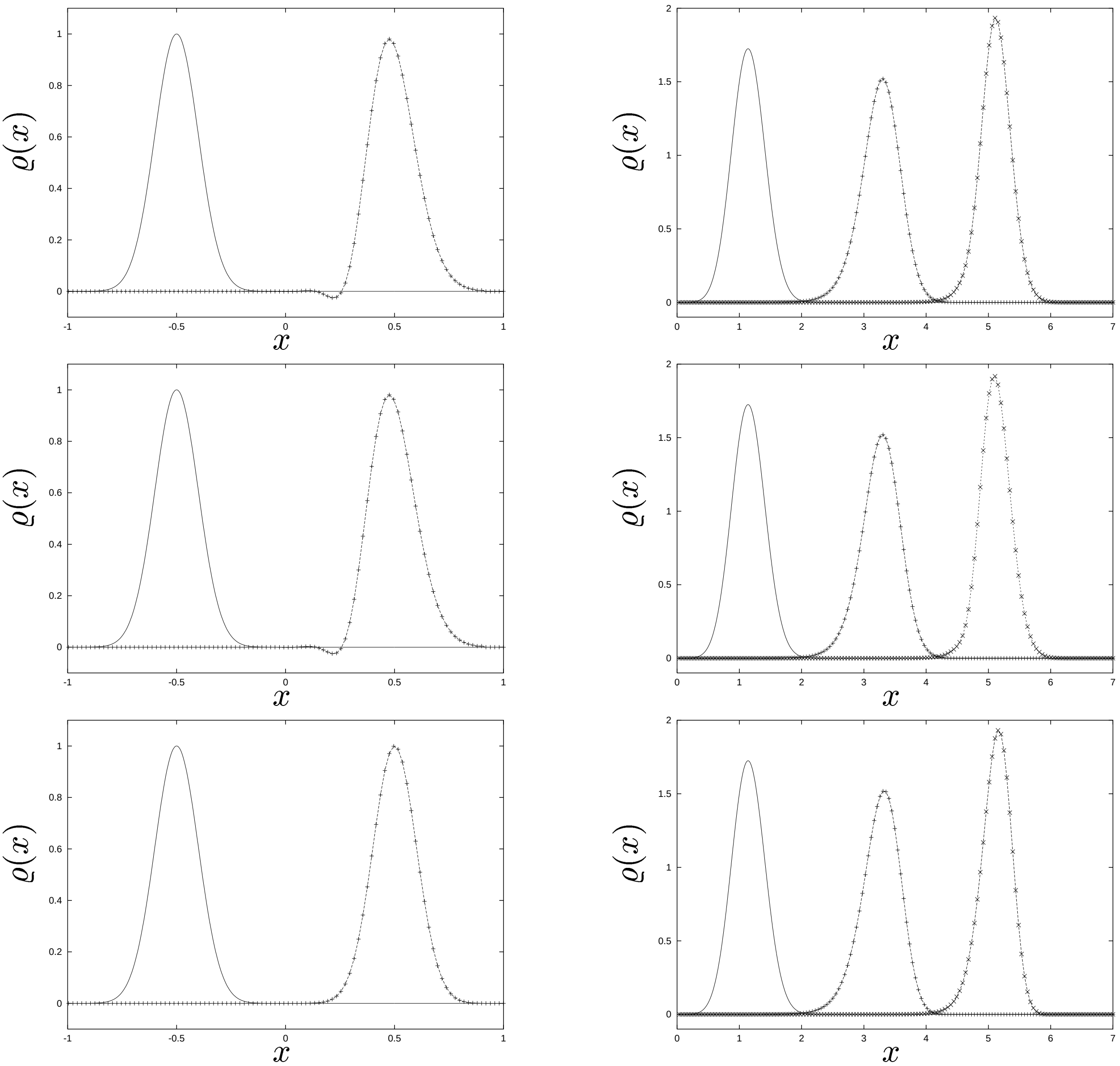


Abb. 4.6: Lösung des eindimensionalen Advektionsproblems mit vorgegebenem Geschwindigkeitsfeld $a(x) = 1.0$ (links) bzw. $a(x) = x/(1 + 0.2\,x^2)$ (rechts) für die Interpolationsordungen $M = 2, 3$ und 4 (von oben nach unten). Die durchgezogene Linie ist die jeweilige Anfangsverteilung.

Lösung werden bei den finiten Differenzen sogenannte *Upwind*–Verfahren angewandt. Dies ist hier jedoch nicht ohne weiteres möglich. Beobachtungen ergeben, daß die Senke verschwindet, wenn man die Auflösung durch Verwendung einer größeren Stützstellendichte erhöht. Auch eine Erhöhung der Ordnung des Verfahrens kann zum gewünschten Ergebnis führen, wie die kubische Interpolation in Abbildung 4.6 zeigt.

Das zweite Testbeispiel behandelt die Advektionsgleichung mit einem räumlich variablen, jedoch zeitlich konstanten Geschwindigkeitsprofil

$$a(x) = \frac{x}{1 + 0.2\,x^2} \quad . \tag{4.30}$$

Die Anfangsverteilung wird wiederum durch ein Gauß–Profil bestimmt

$$\varrho_0(x) = 1.5\,x^2\,e^{-6.25(x-1)^2} \quad . \tag{4.31}$$

Im Gegensatz zum vorigen Testbeispiel ist zu erwarten, daß sich hier die Anfangsverteilung sowohl in der Form als auch in der Amplitude ändert. Ein analytisches Resultat kann nicht angegeben werden, jedoch läßt sich eine Referenzlösung durch Verwendung Finiter Differenzen numerisch sehr genau bestimmen. In Abbildung 4.6 auf der rechten Seite sind neben der Anfangsverteilung als durchgezogene Linie die numerischen Ergebnisse zu den Zeiten $T = 2.0$ und $T = 4.0$ dargestellt. Wiederum finden sich von oben nach unten die Ergebnisse für die lineare Interpolation ($M = 2$), quadratische Interpolation ($M = 3$) sowie der kubischen Interpolation ($M = 4$). Um das Profil bei $T = 4.0$ aufzulösen und eventuell auftretende *Upwind* Problematiken zu vermeiden, wurde die Anzahl der Stützstellen auf 150 erhöht. Die Abbildung zeigt, daß in allen drei Fällen das numerische Ergebnis und die Referenzlösung mit großer Genauigkeit übereinstimmen und somit auch räumlich variable Geschwindigkeitsprofile approximiert werden können.

Ein Vergleich zeigt, daß die bisher erhaltenen Ergebnisse mit denjenigen, welche man mittels Finiten Differenzen Verfahren erhält, übereinstimmen, vorausgesetzt man verwendet zentrale Differenzen. Im Grunde ist dieses Übereinstimmung nicht weiter verwunderlich, wie aus der Fehleranalyse 4.2 ersichtlich ist. Im Gegensatz zu Verfahren mit Finiten Differenzen jedoch ist das *Moving Least Square* Verfahren nicht auf ein reguläres Gitter beschränkt. Um die Eigenschaften des Verfahrens auf einem irregulären Gitter zu testen, wurde die reguläre Anordnung der Stützstellen innerhalb eines bestimmten Prozentsatzes der Gitterweite zufällig gestört. Speziell bei starker Irregularität erweist es sich als vorteilhaft, wenn nicht mit starren Trägern der Gewichtsfunktion gearbeitet wird, sondern vielmehr die Breite der Träger so angepaßt wird, daß eine bestimmte Anzahl von Stützstellen zur Bestimmung der Kernfunktion beitragen.

In Abbildung 4.7 sind die Ergebnisse für die Advektionsgleichung mit konstanter Geschwindigkeit unter der Anfangsbedingung (4.29) dargestellt. Die

Rechnungen wurden mit 200 Stützstellen durchgeführt, wobei die Träger der Gewichtsfunktionen so angepaßt wurden, daß sich jeweils sechs Stützstellen darin befinden. Diese Anzahl der Stützstellen ist notwendig, um ein eventuell auftretendes *Upwind* Problem zu vermeiden.

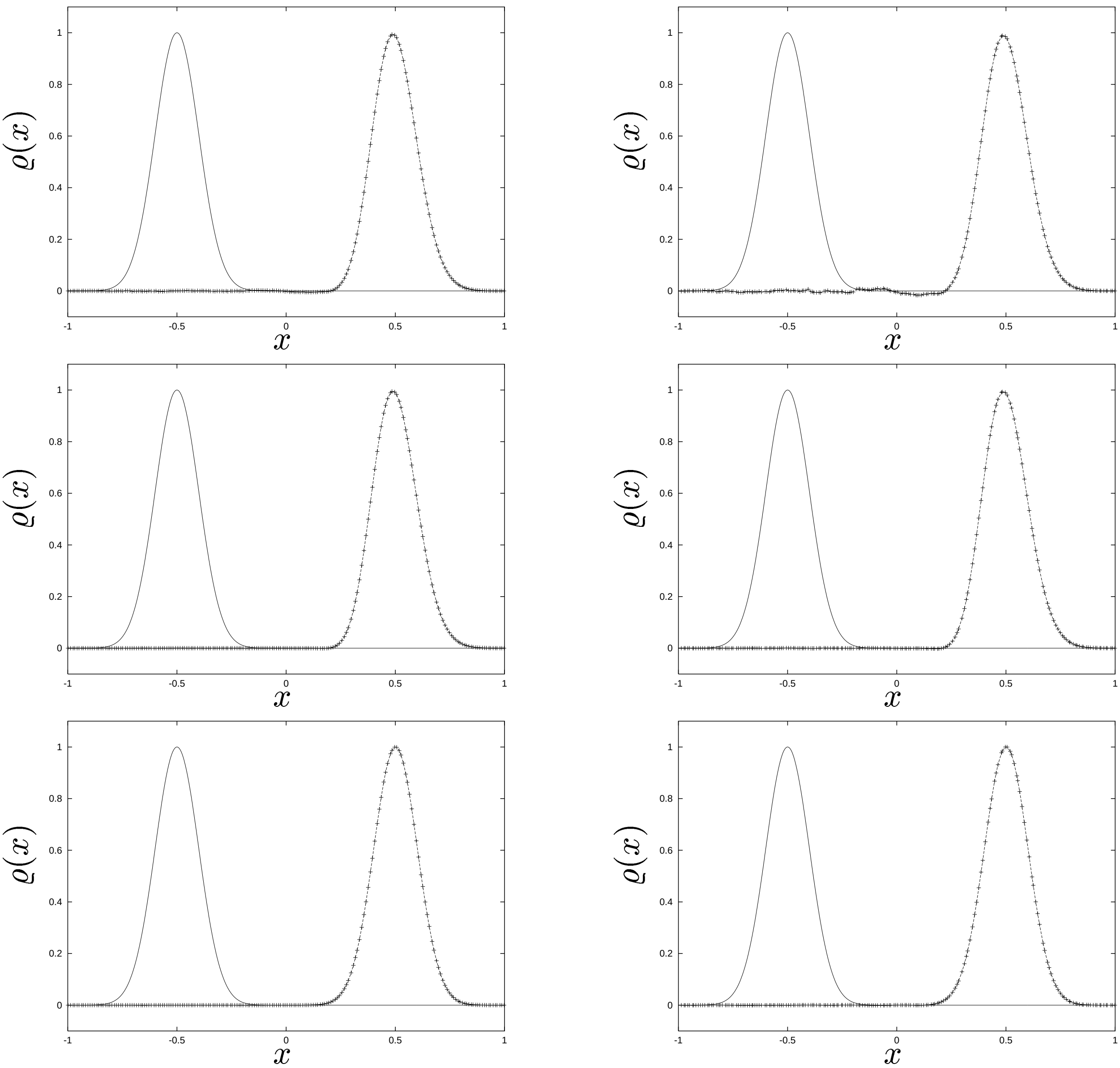


Abb. 4.7: Lösung des eindimensionalen Advektionsproblems mit konstantem Geschwindigkeitsfeld bei einer irregulären Anordnung der Stützstellen. Dargestellt sind die Ergebnisse bei maximal 20% Abweichung (links) und maximal 40% Abweichung (rechts) von der Gleichverteilung für die Interpolationsordnungen $M = 2$, 3 und 4.

Wie diese Abbildung zeigt, ist bei einer geringen Irregularität der Stützstellen (maximal 20% Abweichung von der regulären Anordnung) kein wesentlicher Unterschied zwischen den einzelnen Ordnungen des Verfahrens ausmachbar. Sowohl bei der linearen als auch bei der quadratischen und bei der kubischen Interpolation stimmen die numerischen Ergebnisse mit den analytisch erwarteten überein.

Problematischer ist die starke Irregularität der Stützstellen (maximal 40% Abweichung von der regulären Anordnung). Hier findet man bei der linearen Interpolation erhebliche Abweichungen von der analytischen Lösung. Eine ähnliche Beobachtung wurde kürzlich bei allgemeinen Betrachtungen von Kollokationsmethoden angestellt (Fürst, Sonar (2001)). Diese Abweichungen treten jedoch nicht mehr auf, wenn die Ordnung des Verfahrens erhöht wird. Sowohl die Ergebnisse bei der quadratischen als auch bei der kubischen Interpolation stimmen wieder sehr gut mit der analytischen Lösung überein.

4.6.2 Das eindimensionale Stoßrohr

In diesem Abschnitt werden die hydrodynamischen Gleichungen, welche in 4.4 hergeleitet wurden, im eindimensionalen Fall numerisch gelöst. Dies geschieht anhand des eindimensionalen Stoßrohres, dessen analytische Lösung im Anhang A aufgezeigt wird.

Bei diesem System handelt es sich um eine Röhre, in der sich zunächst ein Diaphragma befindet, welches diese Röhre in zwei Bereiche unterteilt. In dem einen Bereich befindet sich ein ideales Gas mit hoher Dichte, in dem anderen ebenfalls ein ideales Gas aber mit geringerer Dichte jeweils in Ruhe. Die spezifischen inneren Energien der beiden Gase seien identisch. Zum Startzeitpunkt wird das Diaphragma instantan entfernt. Daraufhin breitet sich eine Schockwelle in das Medium geringerer Dichte aus und eine Verdünnungswelle in das Medium höherer Dichte. Zwischen der Schockfront und der Verdünnungswelle befindet sich die Kontaktunstetigkeit, bei der zwar Dichte und spezifische innere Energie eine Diskontinuität besitzen, jedoch Druck und Geschwindigkeit ihren Wert nicht ändern.

Es ist zu beachten, daß im folgenden für Größen wie Dichte, Geschwindigkeit, Druck und spezifische innere Energie willkürliche Einheiten verwendet werden, es werden also keine physikalischen Einheiten angegeben.

Wegen den auftretenden Unstetigkeiten in den betrachteten Größen ist die Verwendung einer künstlicher Viskosität, wie sie in Abschnitt 4.5.2 beschrieben ist, in den folgenden Simulationen eine Methode, mit der die unerwünschten und unphysikalischen Effekte, wie Postschock–Oszillationen, gedämpft werden. Jedoch wird auf eine Parameterstudie, die aufzeigt, wie man durch die Änderung der Koeffizienten α und β diese Oszillationen beeinflusst bewußt verzichtet. Vielmehr finden in den hier aufgeführten Beispielen nur Werte Verwendung, welche die Oszillationen hinreichend dämpfen.

In Abbildung 4.8 ist neben dem numerischen Ergebnis der Stoßrohrsimulation das analytisch berechnete Ergebnis als gestrichelte Linie dargestellt. Von oben nach unten finden sich jeweils Dichte $\varrho(x)$, Geschwindigkeit $v(x)$, Druck $p(x)$ und die spezifische innere Energie $e(x)$ zum Zeitpunkt $T = 1.5$. Auf der linken Seite dieser Abbildung ist das Simulationsergebnis der linearen Interpolation, auf der rechten Seite das Ergebnis der kubischen Interpolation. Auf das Ergebnis der quadratischen Interpolation wurde verzichtet, da — wie bereits bei der Simulation der Advektionsgleichung — kein Unterschied zur linearen Interpolation erkennbar ist. Die 500 Stützstellen sind in diesen Simulationen jeweils äquidistant auf dem Simulationsgebiet verteilt. Man findet zunächst sowohl bei der linearen als auch bei der kubischen Interpolation eine gute Übereinstimmung mit der analytischen Lösung. Die Verbreiterung der Schockfront rührt daher, daß einerseits die künstliche Viskosität verwendet wird und daß andererseits durch die Breite der Kernfunktion die Auflösung herabgesetzt wird, wobei der erste Effekt deutlich dominiert. Die erheblichen Schwingungen hinter der Kontaktunstetigkeit können durch Verstärkung der künstlichen Viskosität weiter gedämpft werden. Dieses Vorgehen verbreitert jedoch die Stoßfront, so daß ein Ausweichen auf die kubische Interpolation, bei der mit gleichen Parameterwerten geringere Oszillationen vorherrschen, empfehlenswert ist.

In Abbildung 4.9 ist das Ergebnis bei einer irregulären Verteilung der Stützstellen dargestellt. Wie in Abbildung 4.8 wurden 500 Stützstellen in dem Intervall $[-3, 3]$ verteilt, in diesem Fall jedoch irregulär. Entsprechend zu den Simulationen des Advektionsproblems wurden die Simulationen auf einem schwach irregulären Gitter mit maximal 20% Abweichung von der gleichmäßigen Verteilung der Stützstellen und einem stark irregulärem Gitter mit maximal 40% Abweichung durchgeführt. Desweiteren wurden die Simulationen aus der Erfahrung von Abbildung 4.8 mit der kubischen Interpolation ausgeführt. Auch hier findet man eine weitgehende Übereinstimmung mit der analytischen Lösung des Stoßrohrproblems. Die Stoßfronten wer-

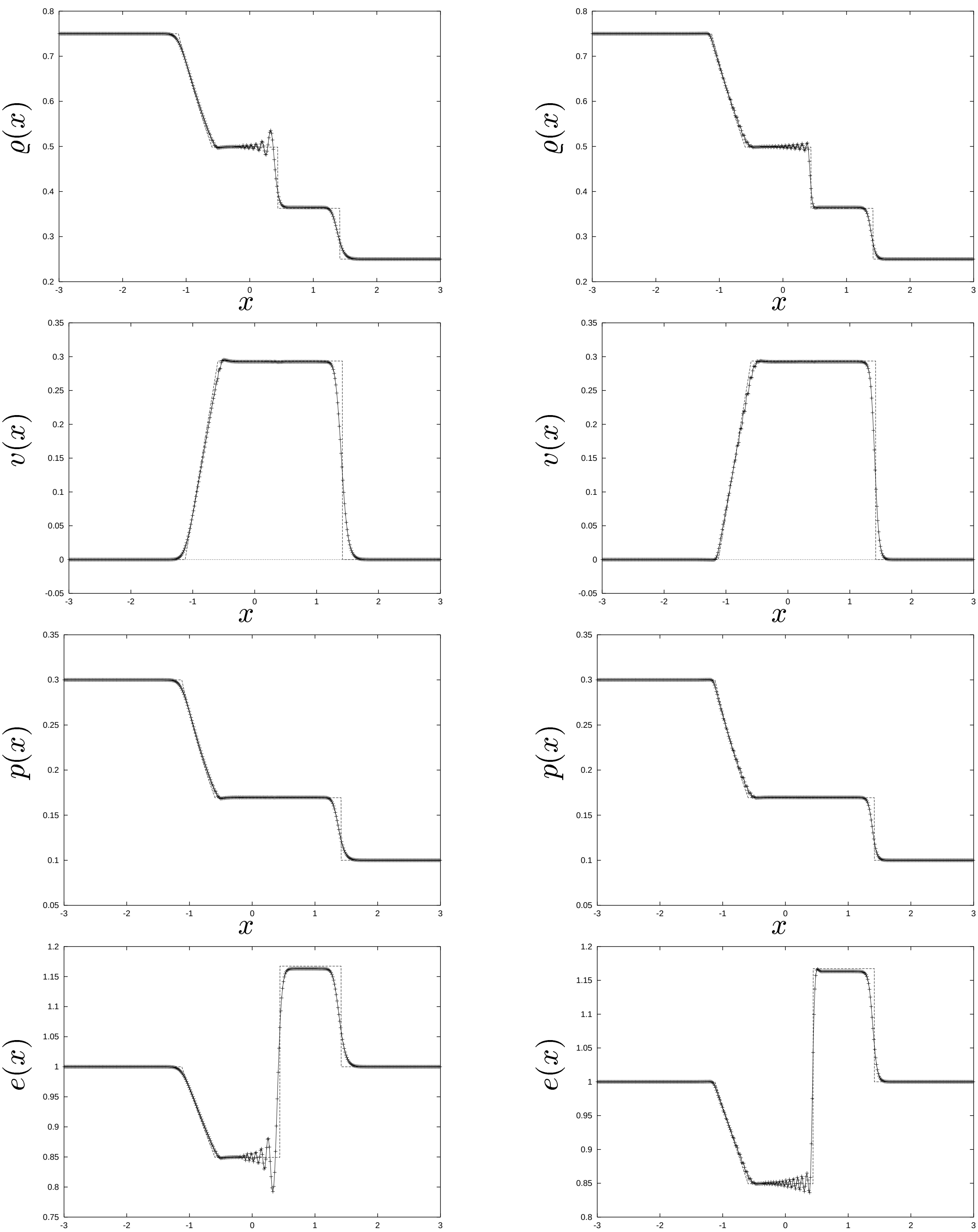


Abb. 4.8: Simulation des eindimensionalen Stoßrohres. Dargestellt sind die Ergebnisse für die Interpolationsordnungen $M = 2$ (links) und $M = 4$ (rechts) mit jeweils 500 Stützstellen.

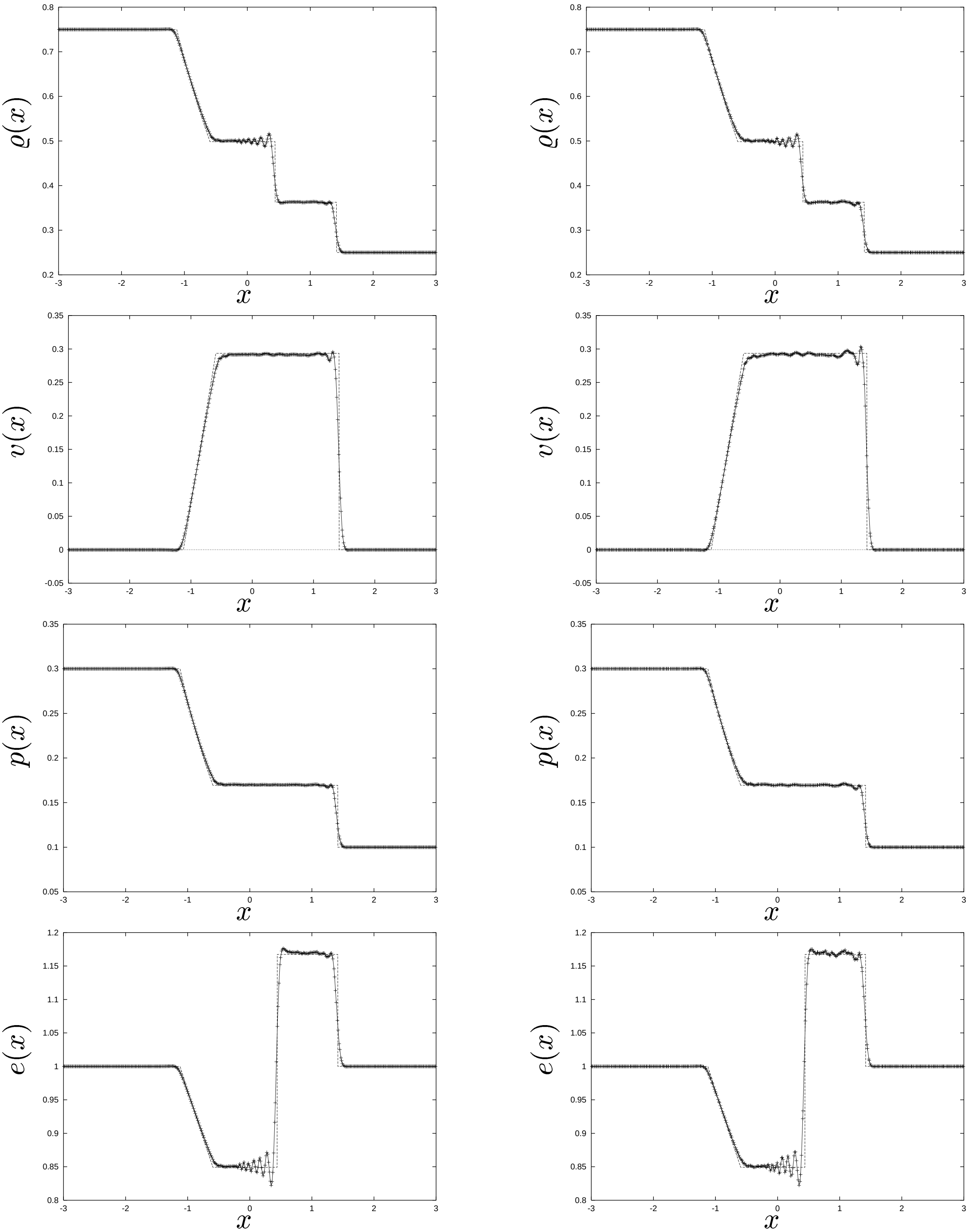


Abb. 4.9: Simulation des eindimensionalen Stoßrohres mit 500 irregulär verteilten Stützstellen. Dargestellt sind die Ergebnisse bei maximal 20% Abweichung (links) bzw. 40% Abweichung (rechts) von der Gleichverteilung.

den richtig wiedergegeben und abgesehen von geringen Schwankungen auch die Plateaus. Im Gegensatz zu Abbildung 4.8 sind jedoch die Oszillationen hinter der Kontaktunstetigkeit vergrößert. An dieser Stelle sei auch an die entsprechende Begründung beim Advektionsproblem erinnert, bei dem beliebige Irregularitäten praktisch ausgeschlossen wurden.

Solche völlig irregulären Gitter werden in der Praxis kaum verwendet. Vielmehr ist man daran interessiert, ein Gitter lokal zu verfeinern. Speziell ist es bei der Simulation des Stoßrohres von Interesse, die steilen Gradienten bei der Stoßfront und der Kontaktunstetigkeit genauer aufzulösen, während die Verdünnungswelle und die unbeeinflußten Regionen ein weniger feines Gitter benötigen. So wurde in der nächsten Simulation die Dichte der Stützstellen im Intervall $[0, 1.5]$ gegenüber dem Rest des Simulationsgebietes erhöht. Um durch große Schwankungen der Stützstellendichte auftretende numerische Artefakte zu vermeiden, wurde in einem kleinen Gebiet der Breite 0.1 links und rechts dieses Intervalls die Dichte der Stützstellen kontinuierlich verändert, so daß ein stetiger Übergang der Stützstellendichten erfolgt. In Abbildung 4.10 ist auf der rechten Seite das Ergebnis dieser Simulation dargestellt, während auf der linken Seite eine reguläre Anordnung der Stützstellen als Vergleich verwendet wird. In dieser Abbildung ist deutlich zu erkennen, wie durch die lokale Verfeinerung nicht nur die Unstetigkeiten wesentlich besser aufgelöst wurden, sondern auch die bereits besprochenen Schwingungen im Anschluß der Unstetigkeiten gedämpft sind. Es zeigt sich also, daß mit einer lokalen Verfeinerung des Gitters ein deutlich besseres Simulationsergebnis zu erreichen ist. An dieser Stelle sei nochmal darauf hingewiesen, daß für das *Moving Least Square* Verfahren die Verfeinerung des Gitters im Gegensatz zum finiten Differenzenverfahren wesentlich weniger Programmierarbeit bedeutet, da die Ableitungen an den Stützstellen numerisch berechnet werden.

4.6.3 Die starr rotierende Gasscheibe

In diesem Teil der Arbeit wird das Verfahren im zweidimensionalen Fall getestet. Als Testmodell dient eine rotationssymmetrische, starr rotierende Gasscheibe, die sich aufgrund des Drucks mit der Zeit radial ausdehnt.

Da bei einer Scheibe die Höhe wesentlich geringer ist als die radiale Ausdehnung, kann man eine Raumrichtung gegenüber den anderen beiden vernachlässigen. Das wirkt sich nun in den hydrodynamischen Gleichungen

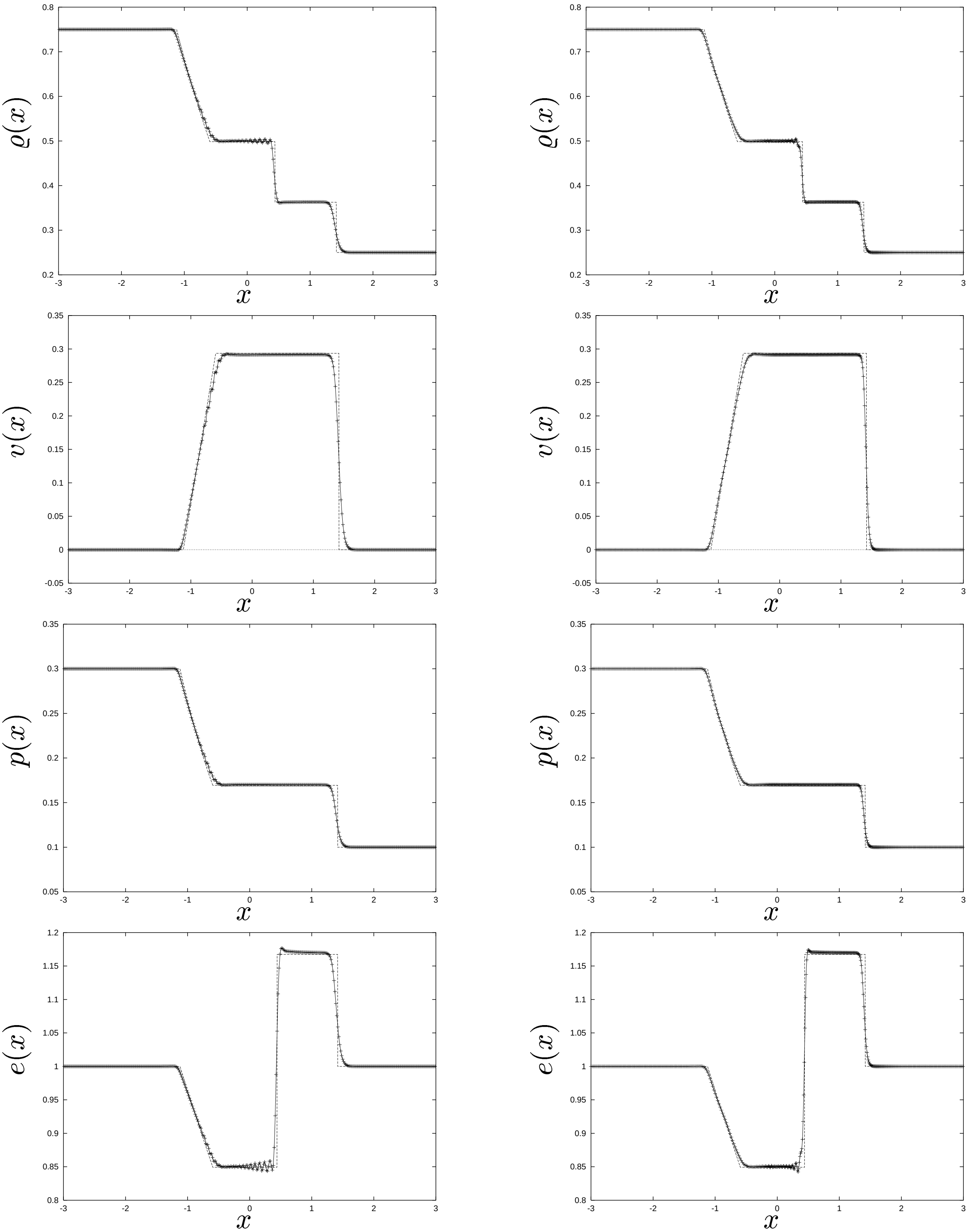


Abb. 4.10: Simulation des eindimensionalen Stoßrohres mit jeweils 452 Stützstellen. Dargestellt ist links das Ergebnis mit gleichverteilten Stützstellen, rechts das Ergebnis mit lokaler Verfeinerung im Bereich $[-0.1, 1.6]$.

derart aus, daß man sie über die vernachlässigte Raumrichtung integriert, bzw. mittelt. Damit erhalten diese Gleichungen einen zweidimensionalen Charakter. Speziell trifft dieses Vorgehen auch für die Dichte zu, so daß hier die Dichte die Bedeutung einer integrierten Dichte oder auch Flächendichte erlangt. Auch der Druck wird entsprechend durch einen integrierten Druck ersetzt. Die bisherige Nomenklatur wird jedoch beibehalten, so daß hier für die Flächendichte weiterhin das Symbol ϱ und für den (integrierten) Druck das Symbol p verwendet wird. Der Geschwindigkeitskoeffizient in der vernachlässigten Raumrichtung wird auf Null gesetzt.

Als weitere Vereinfachung gehorche das ideale Gas der isothermen Zustandsgleichung, so daß zwischen Flächendichte ϱ und dem Druck p folgender Zusammenhang gilt

$$p = c_0^2 \, \varrho \tag{4.32}$$

mit c_0 = konst. als Schallgeschwindigkeit. Die analytische Lösung dieses Testproblems wird in Anhang B behandelt.

An dieser Stelle sei wieder der Hinweis angebracht, daß für die Simulationen willkürliche Einheiten verwendet werden. Es finden sich also keine Einheiten sowohl in der folgenden Angabe der Simulationsparameter, als auch in den Abbildungen.

Zum Startzeitpunkt $t = 0$ befindet sich die Scheibe in einer starren Rotation. Die Azimutalgeschwindigkeit habe also den Wert $v_\varphi(r) = \omega r$ mit der konstanten Winkelgeschwindigkeit ω. Die Radialgeschwindigkeit zum Startzeitpunkt verschwinde, also $v_r(r) = 0$. Zum Startzeitpunkt $t = 0$ wird der Flächendichte ϱ ein Gaußprofil auferlegt

$$\varrho(r) = \frac{m}{2\pi} \frac{\omega^2}{c_0^2} \beta \exp\left(-\frac{\beta}{2} \frac{\omega^2}{c_0^2} \, r^2 \right) \quad , \tag{4.33}$$

wobei der Parameter β ein Maß für die Breite des Gaußprofils ist. Die Flächendichte wurde so geeicht, daß m für die Gesamtmasse der Scheibe steht.

Als physikalische Parameter wurde die Winkelgeschwindigkeit auf $\omega = 1$ gesetzt, ebenso die Schallgeschwindigkeit auf $c_0 = 1$ und als Gesamtmasse $m = 1$ gewählt. Der frei zu wählende Parameter β hat in den folgenden Simulationen den Wert $\beta = 1$.

Simuliert wurde diese Scheibe auf einer kartesischen äquidistanten Anordnung der Stützstellen. Das 85×85 –Gitter überspannt das Simulationsgebiet $U = \{(x, y) \mid -9 \leq x, y \leq 9\}$, um auftretende Störungen des Randes auf die relevanten Bereiche, also Orte, an denen die Dichte deutlich größer als Null ist, zu unterdrücken.

In den Abbildungen 4.11 und 4.12 ist außer der Anfangsverteilung die zeitliche Entwicklung des Dichtprofiles, der Radialgeschwindigkeit sowie der Azimutalgeschwindigkeit zu den Zeitpunkten $t = 0$, $t = 0.5$, $t = 1$ und $t = 1.5$ dargestellt. Es ist zu sehen, daß das *Moving Least Square* Verfahren die zeitliche Entwicklung sehr gut wiedergibt. Jedoch findet man Abweichungen von der analytischen Lösung sowohl der Radial– als auch der Azimutalgeschwindigkeit bei den Zeiten $t = 0.5$ und $t = 1.0$. Diese Abweichungen treten jedoch nur an den Stellen auf, an denen die Dichte verschwindend gering ist. Daher haben diese Abweichungen keinen wesentlichen Einfluß auf den weiteren Verlauf der Simulation und verschwinden sogar für spätere Zeiten.

Wie im eindimensionalen Fall gibt es auch hier beim zweidimensionalen *Moving Least Square* Verfahren keinen Unterschied zwischen der linearen Interpolation und der quadratischen Interpolation. Eine Verbesserung ist erst wieder mit der kubischen Interpolation erreichbar. Ein Vergleich zwischen der linearen Interpolation und der kubischen Interpolation bei gleicher Gitterweite findet sich in Abbildung 4.13, in der jeweils das Simulationsergebnis zur Zeit $t = 0.75$ dargestellt ist. Deutlich ist zu erkennen, daß die analytischen Funktionsverläufe bei der kubischen Interpolation wesentlich besser approximiert werden.

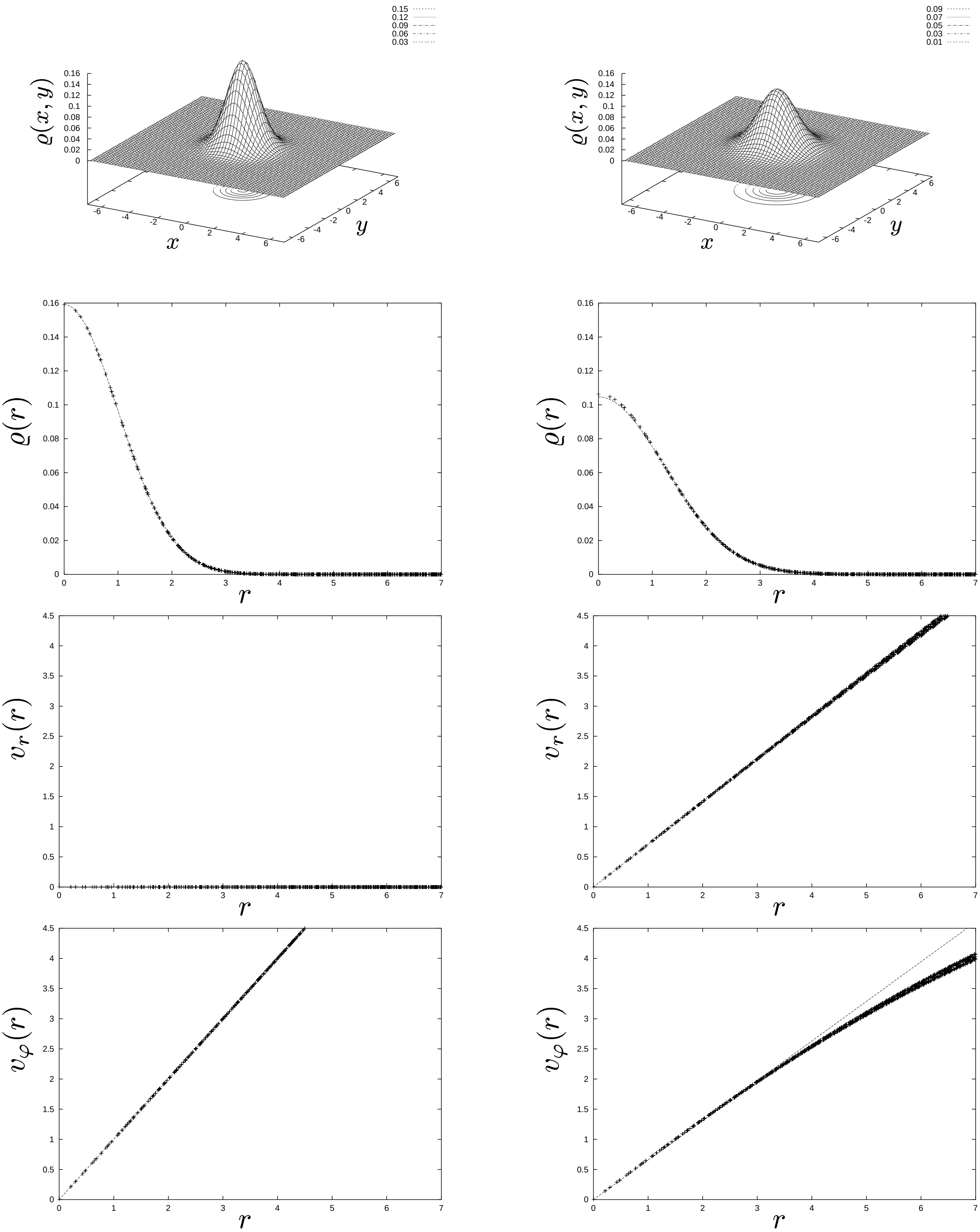


Abb. 4.11: Simulation der starr rotierenden Gasscheibe. Dargestellt ist die Anfangsverteilung (links) und das numerische Ergebnis zur Zeit $t = 0.5$.

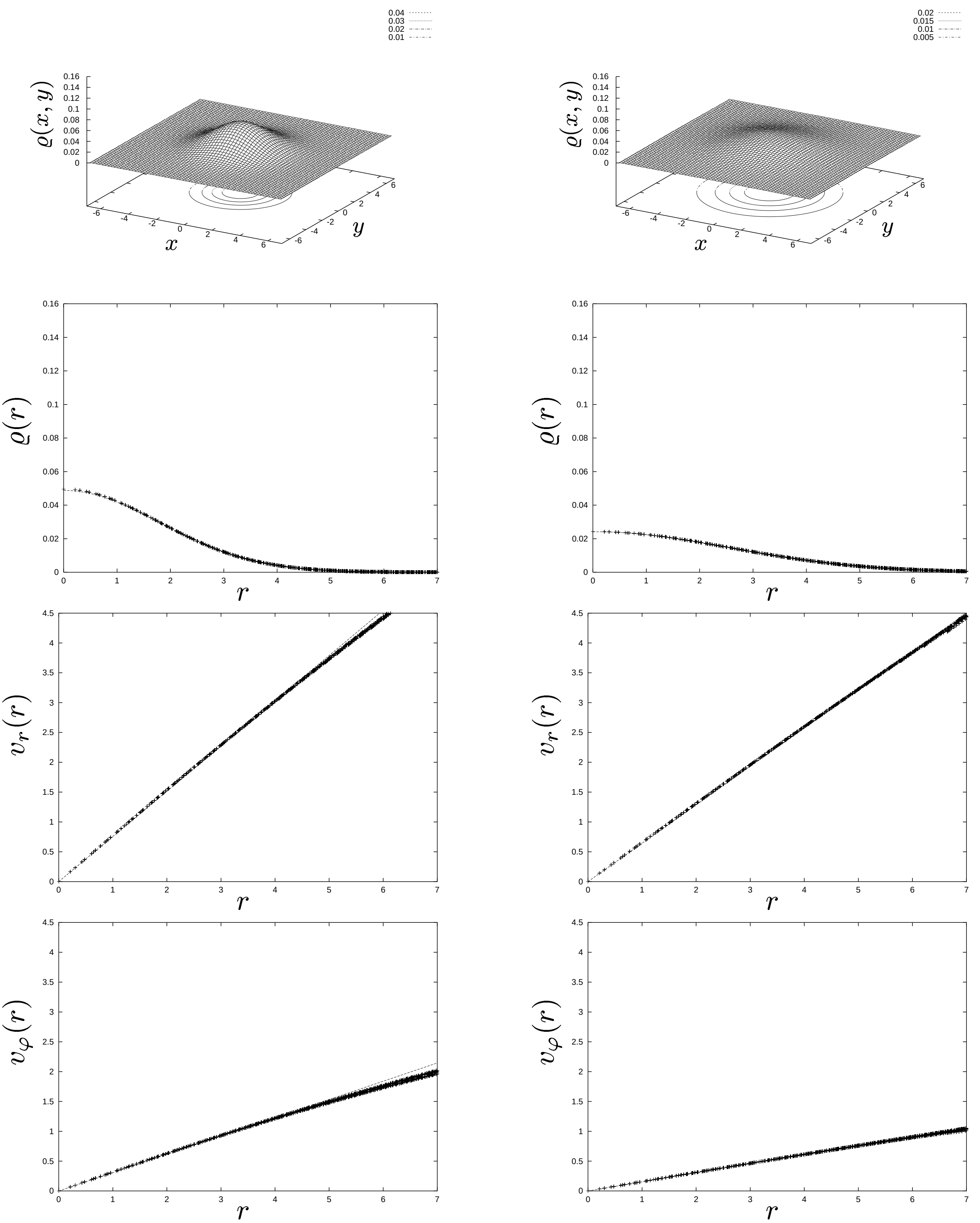


Abb. 4.12: Simulation der starr rotierenden Gasscheibe. Dargestellt sind die Ergebnisse zu den Zeiten $t = 1.0$ (links) und $t = 1.5$ (rechts).

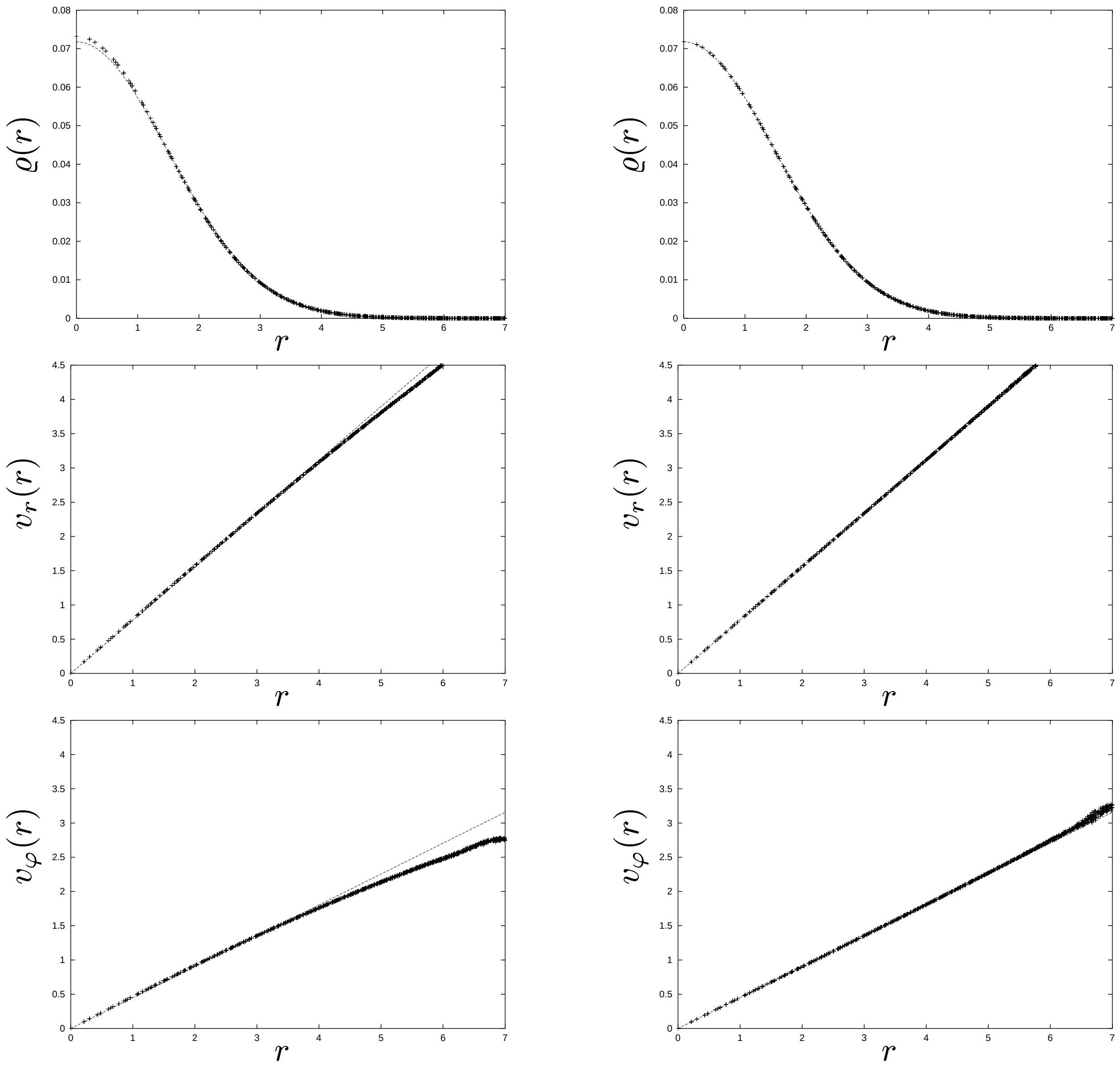


Abb. 4.13: Vergleich der Ergebnisse von linearer und kubischer Interpolation bei der starr rotierenden Gasscheibe zur Zeit $t = 0.75$.

Kapitel 5

Moving Least Square als Galerkin–Verfahren

In diesem Kapitel wird die Lösungsklasse der *Moving Least Square* Approximationen erweitert. Obwohl das Kollokationsverfahren aus dem letzten Kapitel bereits auf unstetige Funktionen angewandt wurde, ist dies streng genommen nicht gültig, da aufgrund der Struktur der Differentialgleichung die Funktionen mindestens stetig differenzierbar sein müßten. Dieses Problem wird in diesem Kapitel durch die Einführung der schwachen Formulierung einer Differentialgleichung umgangen. Dort wird die Differenzierbarkeitsanforderung an die Funktion auf sogenannte Testfunktionen, welche im allgemeinen beliebig oft differenzierbar sind, abgewälzt. Dadurch erreicht man, daß auch nicht stetige Funktionen als Lösung formal akzeptiert werden. Erkauft wird dieser Vorteil jedoch durch die Auswertung von Integralen, was zu einer anderen Diskretisierungsform der Differentialgleichungen führt.

Entsprechend erfolgt der Aufbau dieses Kapitels. Nach einer kurzen Einführung in die schwache Formulierung einer Differentialgleichung folgen noch einige für das Verständnis dieses und des nächsten Kapitels wichtige Definitionen. Anschließend wird das Verfahren anhand einer einfachen Differentialgleichung, der Advektionsgleichung, vorgestellt. Es folgt ein ausführlicherer Abschnitt, in welchem die diskreten hydrodynamischen Gleichungen hergeleitet werden, um sie am Stoßrohrproblem auf ihre Eignung hin zu testen.

5.1 Die schwache Formulierung

Wie bereits in der Einleitung beschrieben, wird durch die Einführung der schwachen Formulierung der Lösungsbegriff einer Differentialgleichung erweitert. Bisher konnten formal als Lösung nur solche Funktionen verwendet werden, welche die nötige Differenzierbarkeitsbedingung der jeweiligen Differentialgleichung erfüllen. Speziell bei der Betrachtung des Stoßrohrproblems aus Abschnitt 4.6.2 treten jedoch auch unstetige Funktionen als Lösung der hydrodynamischen Differentialgleichungen auf. Um solche Lösungen mit geringerer Differenzierbarkeitsanforderung, als die dazugehörige Differentialgleichung sie verlangt, ebenfalls berücksichtigen zu können, wurde der Begriff der schwachen Formulierung geprägt.

Da alle in dieser Arbeit behandelten Differentialgleichungen Erhaltungsgleichungen sind, kann man sich auf das folgende Beispiel einer partiellen Differentialgleichung beschränken:

$$\frac{\partial}{\partial t}\, u(\boldsymbol{x},t) + \operatorname{div} \boldsymbol{F}[u(\boldsymbol{x},t)] = \boldsymbol{q}(\boldsymbol{x},t) \quad . \tag{5.1}$$

Hierbei beschreibt $u(\boldsymbol{x},t)$ die gesuchte Lösungsfunktion, $\boldsymbol{F}$ wird als Flußfunktion bezeichnet und $\boldsymbol{q}$ als Quellterm. Hieran ist zu erkennen, daß aufgrund der Divergenz die Lösungsfunktion bezüglich den Raumkoordinaten mindestens einmal stetig differenzierbar sein muß, eine nicht stetige Lösung also erst gar nicht zugelassen ist.

Die grundlegende Idee der schwachen Formulierung liegt nun darin, die Differentialgleichung (5.1) mit einer sogenannten Testfunktion $\varphi(\boldsymbol{x})$ ausreichender Differenzierbarkeit und kompakten Trägers durchzumultiplizieren, über das betrachtete Volumen V zu integrieren und anschließend durch partielle Integration die Divergenz auf die Testfunktion abzuwälzen. Man erhält also die Integralgleichung

$$\int_V \left\{ \frac{\partial}{\partial t}\, u(\boldsymbol{x},t)\; \varphi(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{F}[u(\boldsymbol{x},t)] \cdot \nabla\varphi(\boldsymbol{x}) \right\} \mathrm{d}V = \int_V \boldsymbol{q}(\boldsymbol{x},t)\varphi(\boldsymbol{x})\mathrm{d}V\,. \tag{5.2}$$

In dieser Form der Differentialgleichung kann die Lösungsfunktion $u(\boldsymbol{x},t)$ eine geringere Differenzierbarkeitsanforderung besitzen als in der klassischen Form (5.1) — sie kann sogar einen unstetigen Verlauf nehmen, was für die Beschreibung von Stoßproblemen in der Hydrodynamik unabdingbar ist.

Als nächste Frage stellt sich nun, wie diese Testfunktionen $\varphi(\boldsymbol{x},t)$ zu wählen sind. Prinzipiell sind, abgesehen von den oben genannten Anforderungen, diese Testfunktionen frei wählbar, so daß sich im Laufe der Zeit entsprechend viele Verfahren entwickelten (Hirsch (1988)). Das am meisten verbreitete Verfahren, das Galerkin–Verfahren, benutzt als Testfunktionen die Interpolationsfunktionen, bezüglich derer die gesuchten Größen entwickelt werden. Das bedeutet für *Moving Least Square* als Galerkin–Verfahren, daß als Testfunktionen die Kernfunktionen $\phi_i(\boldsymbol{x})$ Verwendung finden.

5.2 Definitionen

Bevor die Gleichungen und Testbeispiele betrachtet werden können, müssen erst einmal einige Größen definiert werden.

Jeder Stützstelle $\boldsymbol{x}_i$ wird ein Volumen V_i zugeordnet, welches sich als Integral über die Kernfunktion $\phi_i(\boldsymbol{x})$ definiert, also

$$V_i = \int_V \phi_i(\boldsymbol{x}) \mathrm{d}V \quad . \tag{5.3}$$

Dies kann in der Tat als ein Volumen interpretiert werden, da aufgrund der Partition der Eins der Kernfunktionen (Gleichung (3.31)) für die Summe aller Einzelvolumina V_i

$$\sum_{i=1}^{N} V_i = \int_V \sum_i \phi_i(\boldsymbol{x}) \mathrm{d}V = \int_V 1 \, \mathrm{d}V = V \tag{5.4}$$

gilt, wobei V das gesamte Volumen des betrachteten Gebietes ist.

Eine weitere Größe, die in den folgenden Gleichungen auftritt, ist das Integral über das Produkt aus Kernfunktion und ihrer Ableitung an verschiedenen Stützstellen. Dies wird im folgenden durch die Größe

$$\boldsymbol{D}_{ij} = \frac{1}{V_j} \int_V \phi_j(\boldsymbol{x}) \, \nabla \phi_i(\boldsymbol{x}) \, \mathrm{d}V \tag{5.5}$$

definiert. Um die numerisch aufwendige Berechnung des Integrales zu vermeiden, wird diese Größe in den folgenden Testbeispielen durch

$$\boldsymbol{D}_{ij} \approx \nabla \phi_i(\boldsymbol{x}_j) \quad . \tag{5.6}$$

ersetzt. Dies mag auf den ersten Blick keine besonders gute Approximation sein, ist jedoch, wie die Testbeispiele darlegen, zunächst hinreichend. Die

Ordnung dieser Approximation liegt bei $\mathcal{O}(\Delta x^2)$, was durch eine Taylorentwicklung der Kernfunktion $\phi_j(\boldsymbol{x})$ in der Gleichung (5.4) gezeigt werden kann. Dies ist auch der Grund, warum bei den folgenden Testbeispielen auf eine Betrachtung der Ergebnisse mit höherer Interpolationsordnung als linearer verzichtet wurde, da der Fehler dieser Interpolationsordnung ebenfalls in dieser Größenordnung liegt (Kapitel 4.2).

Eine weitere Approximation, welche in den Gleichungen vorkommen wird, ist das sogenannte *Mass Lumping* (Hirsch (1988)). Hierbei handelt es sich um ein Vorgehen, welches eine banddiagonale Matrix auf eine Diagonalmatrix reduziert. Diese Methode hat zumindest für innere Punkte des Simulationsgebietes keine Auswirkung auf die Stabilität und wirkt sich nur sehr geringfügig auf die Genauigkeit des Verfahrens aus (Fletcher, Srinivas (1984)). Das Integral über zwei Kernfunktionen $\phi_i(\boldsymbol{x})$ und $\phi_j(\boldsymbol{x})$ reduziert sich durch die *Mass Lumping* Technik auf

$$\int_V \phi_i \phi_j \, \mathrm{d}V \looparrowright \delta_{ij} \sum_{k=1}^{N} \int_V \phi_k \phi_j \, \mathrm{d}V = \delta_{ij} \int_V \phi_j \, \mathrm{d}V = \delta_{ij} V_j \quad . \tag{5.7}$$

Das erste Gleichheitszeichen folgt aus der Eigenschaft, daß die Kernfunktionen eine Partition der Eins bilden (3.31). Als weiteres Beispiel soll noch das in den anschließenden Gleichungen vorkommende Integral über zwei Kernfunktionen und dem Gradienten einer weiteren Kernfunktion angeführt werden. Dieses reduziert sich bei Anwendung von *Mass Lumping* auf den Ausdruck

$$\begin{aligned} \int_V \phi_i \phi_j \nabla \phi_k \mathrm{d}V \looparrowright \delta_{ij} \sum_{l=1}^{N} \int_V \phi_l \phi_j \nabla \phi_k \mathrm{d}V &= \delta_{ij} \int_V \phi_j \nabla \phi_k \mathrm{d}V \\ &= \delta_{ij} V_j \boldsymbol{D}_{kj} \quad . \end{aligned} \tag{5.8}$$

5.3 Die Advektionsgleichung

Wie im vorherigen Kapitel wird zunächst die eindimensionale Advektionsgleichung mit zeitunabhängigem aber örtlich variablem Geschwindigkeitsfeld $a(x)$ behandelt

$$\frac{\partial}{\partial t} \varrho(x,t) + \frac{\partial}{\partial x} \left[a(x) \varrho(x,t) \right] = 0 \quad . \tag{5.9}$$

Diese lautet in schwacher Formulierung unter Verwendung der Kernfunktionen $\phi_i(x)$ als Testfunktionen

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_I \varrho(x,t)\,\phi_i(x)\,\mathrm{d}x - \int_I a(x)\,\varrho(x,t)\,\frac{\partial}{\partial x}\phi_i(x)\,\mathrm{d}x = 0 \quad . \tag{5.10}$$

Unter Verwendung der folgenden *Moving Least Square* Approximationen für Dichte $\varrho(x,t)$ und Geschwindigkeit $a(x)$

$$\varrho(x,t) \cong \sum_{i=1}^{N} \varrho_i(t)\,\phi_i(x) \qquad \text{und} \qquad a(x) \cong \sum_{i=1}^{N} a_i\,\phi_i(x) \tag{5.11}$$

folgt die Gleichung

$$\sum_{j=1}^{N} \dot{\varrho}_j(t)\int_I \phi_i(x)\,\phi_j(x)\,\mathrm{d}x \\ - \sum_{j,k=1}^{N} a_k\,\varrho_j(t)\int_I \phi_j(x)\,\phi_k(x)\frac{\partial}{\partial x}\phi_i(x)\,\mathrm{d}x = 0 \quad . \tag{5.12}$$

Unter der Anwendung von *Mass Lumping* in den beiden Termen dieser Gleichung und anschließender Verwendung der Größe D_{ij}, wie sie in Gleichung (5.5) definiert wurde, folgt

$$\dot{\varrho}_i = \frac{1}{V_i}\sum_{j=1}^{N} a_j\,\varrho_j V_j D_{ij} \quad . \tag{5.13}$$

In numerischen Anwendungen findet man jedoch, daß diese Form der Diskretisierung nicht immer die gewünschten Resultate erbringt. Dies liegt daran, daß aufgrund von Diskretisierungsfehlern die Dichteänderung bei konstanter Stromdichte, also $\varrho_i a_i = \varrho_j a_j$, nicht notwendigerweise verschwindet. Daher ist es vorteilhaft, diese Gleichung durch Einfügen einer mathematischen Null zu modifizieren. Behilflich ist dabei, daß für die Summe

$$\sum_{j=1}^{N} V_j D_{ij} = \sum_{j=1}^{N}\int_V \phi_j \nabla\phi_i \mathrm{d}x = \int_V \nabla\phi_i \mathrm{d}x = 0 \tag{5.14}$$

gilt. Multipliziert man diese mit der Stromdichte $a_i\,\varrho_i$ und subtrahiert anschließend den resultierenden Term von Gleichung (5.13), so folgt die diskrete

Form der Advektionsgleichung

$$\dot{\varrho}_i = \frac{1}{V_i} \sum_{j=1}^{N} (a_j \varrho_j - a_i \varrho_i) V_j D_{ij} \quad . \tag{5.15}$$

5.4 Die hydrodynamischen Gleichungen

In diesem Abschnitt sind die Diskretisierungen der hydrodynamischen Gleichungen idealer Fluide vorgestellt. Eine Behandlung der physikalischen Viskositätsterme, wie sie in den Navier–Stokes–Gleichungen aus Kapitel 2 angegeben sind, findet demnach nicht statt, obwohl in den folgenden Simulationen auf künstliche Viskositätsterme nicht verzichtet wird. Ein wesentlicher Punkt bei der Herleitung der Diskretisierungen sind die Erhaltungssätze von Masse, Impuls und Energie, die auch für die diskreten Größen Gültigkeit haben.

5.4.1 Die Kontinuitätsgleichung

Ausgangspunkt bei der Herleitung der Approximationsgleichung ist die Kontinuitätsgleichung (2.3) bzw.

$$\frac{\partial}{\partial t} \varrho + \mathrm{div}(\varrho \boldsymbol{v}) = 0 \quad . \tag{5.16}$$

Entsprechend der Advektionsgleichung lautet diese in schwacher Formulierung mit den Kernfunktionen $\phi_i(\boldsymbol{x})$ als Testfunktionen

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \varrho \, \phi_i(\boldsymbol{x}) \mathrm{d}V = \int_V \varrho \boldsymbol{v} \cdot \nabla \phi_i(\boldsymbol{x}) \mathrm{d}V \quad . \tag{5.17}$$

Unter Verwendung der *Moving Least Square* Approximation für die Dichte ϱ

$$\varrho \cong \sum_{j=1}^{N} \varrho_j \phi_j(\boldsymbol{x}) \tag{5.18}$$

läßt sich die linke Seite der Gleichung(5.17) durch den Term

$$\sum_{j=1}^{N} \dot{\varrho}_j \int_V \phi_j \phi_i \mathrm{d}V \approx \sum_{j=1}^{N} \dot{\varrho}_j V_j \delta_{ij} = \dot{\varrho}_i V_i \tag{5.19}$$

approximieren, wobei das Integral durch die *Mass Lumping* Prozedur ersetzt wurde. Damit folgt anstelle von Gleichung (5.17) der Ausdruck

$$\dot{\varrho}_i V_i = \int_V \varrho \boldsymbol{v} \cdot \nabla \phi_i(\boldsymbol{x}) \mathrm{d}V \quad . \tag{5.20}$$

Im nächsten Schritt wird in der rechten Seite dieser Gleichung die Dichte durch die Approximation (5.18) und die Geschwindigkeit durch die entsprechende Approximation

$$\boldsymbol{v} \cong \sum_{j=1}^{N} \boldsymbol{v}_j \phi_j(\boldsymbol{x}) \tag{5.21}$$

ersetzt. Nach Anwendung einer weiteren *Mass Lumping* Approximation und der Verwendung von $\boldsymbol{D}_{ij}$ wie in Gleichung (5.5) folgt schließlich

$$\dot{\varrho}_i V_i = \sum_{j=1}^{N} V_j (\varrho_j \boldsymbol{v}_j - \varrho_i \boldsymbol{v}_i) \cdot \boldsymbol{D}_{ij} \quad , \tag{5.22}$$

wobei wie bei der Herleitung der Advektionsgleichung noch eine mathematische Null eingefügt wurde, um ein besseres numerisches Ergebnis zu erhalten.

Ein weiterer Vorteil dieser Formulierung ist die einfache physikalische Interpretierbarkeit dieser Gleichung. In Kapitel 2 wurde die Kontinuitätsgleichung unter der Voraussetzung von Massenerhaltung hergeleitet. Dies sollte sich auch in den Approximationsgleichungen widerspiegeln. Summiert man daher Gleichung (5.22) bzw. (5.20) über sämtliche Stützstellen i, so folgt

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial}{\partial t}(\varrho_i V_i) = \sum_{i=1}^{N} V_i \dot{\varrho}_i &= \sum_{i,j=1}^{N} V_j \varrho_j \boldsymbol{v}_j \cdot \boldsymbol{D}_{ij} \\ &= \sum_{j=1}^{N} V_j \varrho_j \boldsymbol{v}_j \cdot \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{D}_{ij} = 0 \quad . \end{aligned} \tag{5.23}$$

Das letzte Gleichheitszeichen folgt aus der Eigenschaft, daß die Kernfunktionen eine Partition der Eins bilden (Gleichung (3.31)). Interpretiert man nun die Größe $m_i = \varrho_i V_i$ als Masse an der Stützstelle i, so kann man das Ergebnis dieser Gleichung als Erhaltung der Gesamtmasse M interpretieren, also $\partial M/\partial t = 0$, wobei M die Summe aller Einzelmassen m_i ist.

5.4.2 Die Impulsgleichung

Als Ausgangspunkt für die Herleitung der Bewegungsgleichungen finden hier die Euler–Gleichungen in der Form von Gleichung (2.7) bzw.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varrho \boldsymbol{v}) + \mathrm{div}(\varrho \boldsymbol{v}\, \boldsymbol{v}) = -\nabla p \tag{5.24}$$

Verwendung. Entsprechend der Kontinuitätsgleichung des letzten Abschnittes lautet diese in schwacher Formulierung mit der Kernfunktion $\phi_i(\boldsymbol{x})$ als Testfunktion

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \varrho \boldsymbol{v}\, \phi_i \mathrm{d}V = \int_V \varrho \boldsymbol{v}\, \boldsymbol{v} \cdot \nabla \phi_i \mathrm{d}V + \int_V p \nabla \phi_i \mathrm{d}V \quad . \tag{5.25}$$

Man betrachte zunächst die linke Seite dieser Gleichung. Unter Verwendung der *Moving Least Square* Approximationen für die Dichte $\varrho(\boldsymbol{x}, t)$

$$\varrho \cong \sum_{j=1}^{N} \varrho_j \phi_j(\boldsymbol{x}) \tag{5.26}$$

und für die Geschwindigkeit $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}, t)$

$$\boldsymbol{v} \cong \sum_{k=1}^{N} \boldsymbol{v}_k \phi_k(\boldsymbol{x}) \tag{5.27}$$

folgt für die linke Seite die Approximation

$$\begin{aligned} \sum_{j,k=1}^{N} \frac{\partial}{\partial t}(\varrho_j \boldsymbol{v}_k) \int_V \phi_j \phi_k \phi_i \mathrm{d}V &\approx \sum_{j,k=1}^{N} \frac{\partial}{\partial t}(\varrho_j \boldsymbol{v}_k) V_j \delta_{ij} \delta_{ik} \\ &= \frac{\partial}{\partial t}(\varrho_i \boldsymbol{v}_i) V_i \quad , \end{aligned} \tag{5.28}$$

wobei zur Auswertung des Integrals über die Kernfunktionen die *Mass Lumping* Technik Anwendung fand. Damit läßt sich die Gleichung (5.25) in

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varrho_i \boldsymbol{v}_i) V_i = \int_V \varrho \boldsymbol{v}\, \boldsymbol{v} \cdot \nabla \phi_i \mathrm{d}V + \int_V p \nabla \phi_i \mathrm{d}V \quad . \tag{5.29}$$

umschreiben.

Gesucht ist hier jedoch nicht eine Differentialgleichung für die Stromdichte $\varrho_i \boldsymbol{v}_i$, sondern eine Gleichung für die Geschwindigkeit $\boldsymbol{v}_i$. Daher folgt nach Anwendung der Produktregel für die Ableitung der Stromdichte nach der Zeit die Gleichung

$$\dot{\boldsymbol{v}}_i \varrho_i V_i = -\boldsymbol{v}_i \dot{\varrho}_i V_i + \int_V \varrho \boldsymbol{v}\, \boldsymbol{v} \cdot \nabla \phi_i \mathrm{d}V + \int_V p \nabla \phi_i \mathrm{d}V \quad . \tag{5.30}$$

Der erste Term auf der rechten Seite kann nun mit Hilfe der Kontinuitätsgleichung (5.20) in ein Integral überführt werden, wobei die zeitliche Ableitung der Dichte in der Gleichung verschwindet

$$\dot{\boldsymbol{v}}_i \varrho_i V_i = -\boldsymbol{v}_i \int_V \varrho \boldsymbol{v} \cdot \nabla \phi_i \mathrm{d}V + \int_V \varrho \boldsymbol{v}\, \boldsymbol{v} \cdot \nabla \phi_i \mathrm{d}V + \int_V p \nabla \phi_i \mathrm{d}V \quad . \tag{5.31}$$

Somit erhält man eine Differentialgleichung für die Geschwindigkeiten $\boldsymbol{v}_i$ allein.

Es verbleibt, eine Diskretisierung der rechten Seite von Gleichung (5.31) herzuleiten. Setzt man zunächst auch hier die *Moving Least Square* Approximationen für Dichte $\varrho(\boldsymbol{x}, t)$ und Geschwindigkeit $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}, t)$ ein, so folgt unter Anwendung der *Mass Lumping* Technik die Gleichung

$$\dot{\boldsymbol{v}}_i \varrho_i V_i = \sum_{j=1}^{N} (\boldsymbol{v}_j - \boldsymbol{v}_i) \varrho_j \boldsymbol{v}_j \cdot \int_V \phi_j \nabla \phi_i \mathrm{d}V + \int_V p \nabla \phi_i \mathrm{d}V \quad . \tag{5.32}$$

Ersetzt man auch den Druck $p(\boldsymbol{x})$ durch die *Moving Least Square* Approximation

$$p \cong \sum_{j=1}^{N} p_j \phi_j(\boldsymbol{x}) \quad , \tag{5.33}$$

so ergibt sich unter Verwendung der Größe $\boldsymbol{D}_{ij}$ aus Gleichung (5.5) für die Integrale über Kernfunktionen und ihre Gradienten die diskrete Bewegungsgleichung

$$\dot{\boldsymbol{v}}_i \varrho_i V_i = \sum_{j=1}^{N} (\boldsymbol{v}_j - \boldsymbol{v}_i) \varrho_j V_j \boldsymbol{v}_j \cdot \boldsymbol{D}_{ij} + p_j V_j \boldsymbol{D}_{ij} \quad . \tag{5.34}$$

Wie die Kontinuitätsgleichung folgt auch die Bewegungsgleichung aus einem Erhaltungssatz, der Erhaltung des Impulses. Dementsprechend wäre es wünschenswert, wenn sich dies in den Eigenschaften von Gleichung (5.34) widerspiegeln würde. Summiert man Gleichung (5.29) über sämtliche Stützstellen i, so findet man aufgrund der Partition der Eins der Kernfunktionen

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial}{\partial t}(\varrho_i \boldsymbol{v}_i)V_i = \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial}{\partial t}(\varrho_i \boldsymbol{v}_i V_i) = \frac{\partial}{\partial t}\sum_{i=1}^{N} m_i \boldsymbol{v}_i = 0 \quad . \tag{5.35}$$

Verwendet wurde hier die Größe $m_i = \varrho_i V_i$, welche ja als die Masse einer Stützstelle interpretiert werden kann. Da der Gesamtimpuls eines Systems gerade die Summe aus dem Produkt von Masse und Geschwindigkeit aller einzelnen Untersysteme darstellt, kann Gleichung (5.35) als Gesamtimpulserhaltung interpretiert werden.

5.4.3 Die Energiegleichung

Ausgangspunkt für die Herleitung einer diskreten Gleichung der inneren Energie $\varepsilon(\boldsymbol{x}, t)$ bildet die Differentialgleichung für die Gesamtenergie (2.14) bzw.

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\varrho}{2}\boldsymbol{v}^2 + \varepsilon\right) + \operatorname{div}\left[\left(\frac{\varrho}{2}\boldsymbol{v}^2 + \varepsilon + p\right)\boldsymbol{v}\right] = 0 \tag{5.36}$$

eines idealen Fluids. In schwacher Formulierung lautet diese Gleichung mit der Kernfunktion $\phi_i(\boldsymbol{x})$ als Testfunktion

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \left(\frac{\varrho}{2}\boldsymbol{v}^2 + \varepsilon\right)\phi_i \mathrm{d}V = \int_V \frac{\varrho}{2}\,\boldsymbol{v}^2\boldsymbol{v}\cdot\nabla\phi_i \mathrm{d}V + \int_V (\varepsilon + p)\boldsymbol{v}\cdot\nabla\phi_i \mathrm{d}V\,. \tag{5.37}$$

Verwendet man auf der linken Seite die *Moving Least Square* Approximationen für Dichte $\varrho(\boldsymbol{x}, t)$ und Geschwindigkeit $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}, t)$, so folgt unter Ausnutzung der *Mass Lumping* Technik aus Abschnitt 5.2 die Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\varrho_i}{2}V_i\boldsymbol{v}_i^2 + \int_V \varepsilon\phi_i \mathrm{d}V\right) = \int_V \frac{\varrho}{2}\,\boldsymbol{v}^2\boldsymbol{v}\cdot\nabla\phi_i \mathrm{d}V + \int_V (\varepsilon + p)\boldsymbol{v}\cdot\nabla\phi_i \mathrm{d}V\,. \tag{5.38}$$

Da aber im Gegensatz zur Gesamtmasse bzw. zum Gesamtimpuls die innere Energie keine Erhaltungsgröße ist, wird aus der diskreten Differentialgleichung für die innere Energie auch kein Erhaltungssatz folgen. Die Gesamtenergie muß jedoch auch im diskreten Fall erhalten bleiben. Dies kann bereits an Gleichung (5.38) abgelesen werden. Summiert man nämlich diese über alle Stützstellen i, so ist die rechte Seite dieser Gleichung null. Es gilt also

$$\frac{\partial}{\partial t}\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\varrho_i}{2}V_i\boldsymbol{v}_i^2+\int_V\varepsilon\phi_i\mathrm{d}V\right)=0 \quad . \tag{5.39}$$

Dies folgt, wie in den letzten beiden Abschnitten, aus der Eigenschaft, daß die Kernfunktionen $\phi_i(\boldsymbol{x})$ eine Partition der Eins bilden und daher der Gradient über die Summe der Kernfunktionen verschwindet.

Da im folgenden eine Differentialgleichung für die innere Energie zu suchen ist, wird der erste Term auf der linken Seite von Gleichung (5.38) auf die rechte Seite gebracht und mit Hilfe der Produktregel in zwei Terme zerlegt

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\int_V\varepsilon\phi_i\mathrm{d}V=&-\boldsymbol{v}_i\cdot\frac{\partial}{\partial t}(\varrho_i\boldsymbol{v}_i)V_i+\frac{1}{2}\dot{\varrho}_iV_i\boldsymbol{v}_i^2+\int_V\frac{\varrho}{2}\boldsymbol{v}^2\boldsymbol{v}\cdot\nabla\phi_i\mathrm{d}V\\&+\int_V(\varepsilon+p)\boldsymbol{v}\cdot\nabla\phi_i\mathrm{d}V \quad .\end{aligned} \tag{5.40}$$

Wie bei der Herleitung der diskreten Bewegungsgleichung werden auch hier die zeitlichen Ableitungen in den ersten beiden Termen dieser Gleichung durch Volumenintegrale ersetzt. Folglich verwendet man für die zeitliche Änderung der Dichte ϱ_i an der Stützstelle i die Gleichung (5.20) und für die zeitliche Änderung der Stromdichte $\varrho_i\boldsymbol{v}_i$ an der Stützstelle i entsprechend Gleichung (5.29). Damit ergibt sich

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\int_V\varepsilon\phi_i\mathrm{d}V=&-\boldsymbol{v}_i\cdot\int_V\varrho\boldsymbol{v}\cdot\nabla\phi_i\mathrm{d}V-\boldsymbol{v}_i\cdot\int_V p\nabla\phi_i\mathrm{d}V\\&+\frac{1}{2}\boldsymbol{v}_i^2\int_V\varrho\boldsymbol{v}\cdot\nabla\phi_i\mathrm{d}V+\int_V\frac{\varrho}{2}\boldsymbol{v}^2\boldsymbol{v}\cdot\nabla\phi_i\mathrm{d}V\\&+\int_V(\varepsilon+p)\boldsymbol{v}\cdot\nabla\phi_i\mathrm{d}V \quad .\end{aligned} \tag{5.41}$$

Setzt man nun auf der rechten Seite dieser Gleichung die *Moving Least Square* Approximationen für die Dichte $\varrho(\boldsymbol{x},t)$ und die Geschwindigkeit $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x},t)$ ein, so läßt sich diese Gleichung unter weiterer Verwendung der *Mass Lumping*

Technik in

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\int_V \varepsilon\phi_i \mathrm{d}V = & \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\varrho_j(\boldsymbol{v}_j-\boldsymbol{v}_i)^2\boldsymbol{v}_j\cdot\int_V \phi_j\nabla\phi_i\mathrm{d}V \\
& +\sum_{j=1}^{N}\boldsymbol{v}_j\int_V \varepsilon\phi_j\nabla\phi_i\mathrm{d}V \\
& +\sum_{j=1}^{N}(\boldsymbol{v}_j-\boldsymbol{v}_i)\int_V p\phi_j\nabla\phi_i\mathrm{d}V
\end{aligned}
\tag{5.42}
$$

umschreiben. Verwendet man nun auch für die innere Energie $\varepsilon(\boldsymbol{x},t)$ und den Druck $p(\boldsymbol{x})$ die *Moving Least Square* Approximationen

$$
\varepsilon \cong \sum_{i=1}^{N}\varepsilon_i\phi_i(\boldsymbol{x}) \qquad \text{und} \qquad p \cong \sum_{i=1}^{N}p_i\phi_i(\boldsymbol{x}) \quad , \tag{5.43}
$$

so folgt unter erneuter Verwendung von *Mass Lumping* und der Größe $\boldsymbol{D}_{ij}$, wie sie in Gleichung (5.5) definiert wurde, die diskrete Form einer Differentialgleichung für die innere Energie

$$
\begin{aligned}
\dot{\varepsilon}_i V_i = & \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\varrho_j V_j(\boldsymbol{v}_j-\boldsymbol{v}_i)^2\boldsymbol{v}_j\cdot\boldsymbol{D}_{ij}+\sum_{j=1}^{N}V_j(\varepsilon_j\boldsymbol{v}_j-\varepsilon_i\boldsymbol{v}_i)\cdot\boldsymbol{D}_{ij} \\
& +\sum_{j=1}^{N}V_j p_j(\boldsymbol{v}_j-\boldsymbol{v}_i)\cdot\boldsymbol{D}_{ij} \quad .
\end{aligned}
\tag{5.44}
$$

Ein Vergleich dieser Gleichung mit der integralen Formulierung (5.42) zeigt, daß in dem Term, welcher die diskrete innere Energie enthält, eine mathematische Null eingefügt wurde, so wie es in den bereits beschriebenen Gleichungen der Fall war.

Zusammenfassend kann festgehalten werden, daß die diskreten Gleichungen bestehend aus (5.22), (5.34) und (5.44) zusammen mit der Zustandsgleichung $p_i = (\gamma - 1)\ \varepsilon_i$ (γ als Adiabatenindex) das Gleichungssystem bilden, mit welchem das folgende hydrodynamische Beispiel simuliert wird.

5.5 Numerische Tests

In diesem Abschnitt sind Testbeispiele, welche die Eignung der behandelten Diskretisierungen und deren numerische Implementierung darlegen, aufgeführt.

Die Simulationen der Advektionsgleichung und der hydrodynamischen Gleichungen finden im Gegensatz zum Kollokationsverfahren jedoch nur unter Verwendug der linearen Interpolation, also $M = 2$ statt. Der Grund liegt, wie in Abschnitt 5.2 dargelegt, in der Approximationseigenschaft der Größe D_{ij}. Für die zeitliche Entwicklung findet hier, wie im letzten Kapitel auch, ein *Leap–Frog* Integrator der Ordnung $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ Verwendung.

5.5.1 Die Advektionsgleichung

Zunächst betrachtet man Gleichung (5.15) mit konstanter Geschwindigkeit $a(x) = 1.0$. Als Anfangsverteilung wird die Gauß–Funktion

$$\varrho_0(x) = e^{-50(x+0.5)^2} \tag{5.45}$$

verwendet. Als analytisches Resultat erwartet man, daß diese Funktion ohne Änderung der Form oder Amplitude advektiert wird. In Abbildung 5.1 auf der linken Seite ist neben der Anfangsverteilung, welche als durchgezogene Linie dargestellt ist, das numerische Ergebnis zur Zeit $t = 1.0$ wiedergegeben.

Wie im Kollokationsverfahren bildet sich auch bei diesem Verfahren eine kleine negative Senke links neben dem Maximum des numerischen Ergebnisses. Diese läßt sich wiederum durch die *Upwind*–Problematik erklären. Die Senke verschwindet jedoch bei Verwendung einer höheren Stützstellendichte.

Mit dem zweiten Testbeispiel wird die Advektionsgleichung mit einem räumlich variablen, jedoch zeitlich konstantem Geschwindigkeitsprofil

$$a(x) = \frac{x}{1 + 0.2\,x^2} \tag{5.46}$$

behandelt. Als Anfangsverteilung findet das Gauß–Profil

$$\varrho_0(x) = 1.5\,x^2 e^{-6.25(x-1)^2} \tag{5.47}$$

Verwendung. In diesem Beispiel wird sich die Gestalt der Anfangsverteilung mit der Zeit sowohl in der Form als auch in der Amplitude ändern. In

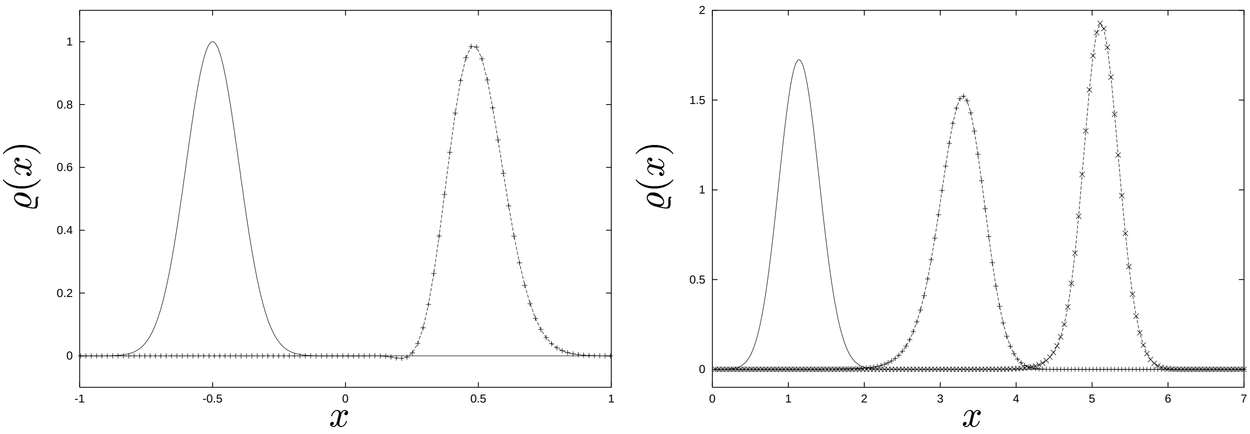


Abb. 5.1: Lösung des eindimensionalen Advektionsproblems mit vorgegebenem Geschwindigkeitsfeld $a(x) = 1.0$ (links) bzw. $a(x) = x/(1 + 0.2\,x^2)$ (rechts). Die durchgezogene Linie beschreibt die Anfangsverteilung.

Abbildung 5.1 auf der rechten Seite ist neben der Anfangsverteilung (durchgezogene Linie) das numerische Ergebnis zu den Zeiten $t = 2.0$ und $t = 4.0$ dargestellt. Der Vergleich mit der Abbildung 4.6 zeigt eine sehr gute Übereinstimmung der Ergebnisse. Es bleibt also festzuhalten, daß die Advektionsgleichung sehr gut erfüllt werden kann, sowohl im Fall eines konstanten als auch eines räumlich variablen Geschwindigkeitsprofils.

5.5.2 Das eindimensionale Stoßrohr

Das eindimensionale Stoßrohr findet wie im vorausgegangenen Kapitel Verwendung für die Simulation der gefundenen Diskretisierungen der hydrodynamischen Gleichungen idealer Fluide.

Man betrachte wieder ein Gas, welches durch ein Diaphragma zunächst in zwei Bereiche unterteilt wird. In dem einen Bereich befindet sich das ideale Gas mit hoher Dichte, in dem anderen Bereich mit geringerer Dichte, jeweils in Ruhe. Die spezifische innere Energie der beiden Gase wird zum Startzeitpunkt identisch gesetzt. Zum Startzeitpunkt entfernt man das Diaphragma instantan, wodurch sich eine Stoßfront in den Bereich der geringeren Dichte ausbreitet. Die analytische Lösung findet sich in Anhang A.

Zu beachten ist, daß auch in diesen Simulationen dimensionslose Größen verwendet werden, es finden sich also keine Einheiten für Dichte, Druck, Geschwindigkeit und innere Energie.

Wegen der auftretenden Unstetigkeiten in den betrachteten Größen und zur Vermeidung der daraus folgenden unphysikalischen Postschock–Oszillationen ist die Verwendung einer künstlichen Viskosität, wie sie in Abschnitt 4.5.2 vorgestellt wurde, vorgesehen. Die frei wählbaren Parameter α und β nehmen hier jeweils den Wert 1.0 an.

In Abbildung 5.2 ist neben dem numerischen Ergebnis der Stoßrohrsimulation das analytisch bestimmte Ergebnis als gestrichelte Linie dargestellt. Die 500 Stützstellen sind äquidistant auf das Simulationsgebiet verteilt. Das Ergebnis ist dem Ergebnis des Kollokationsverfahrens (in Abbildung 4.8 auf der linken Seite) von der Genauigkeit und den Approximationseigenschaften her vergleichbar. Die Übereinstimmung mit der analytischen Lösung ist gut. Die Verbreiterung der Schockfront rührt einerseits von der Verwendung der künstlichen Viskositätsterme und andererseits von der durch die Breite

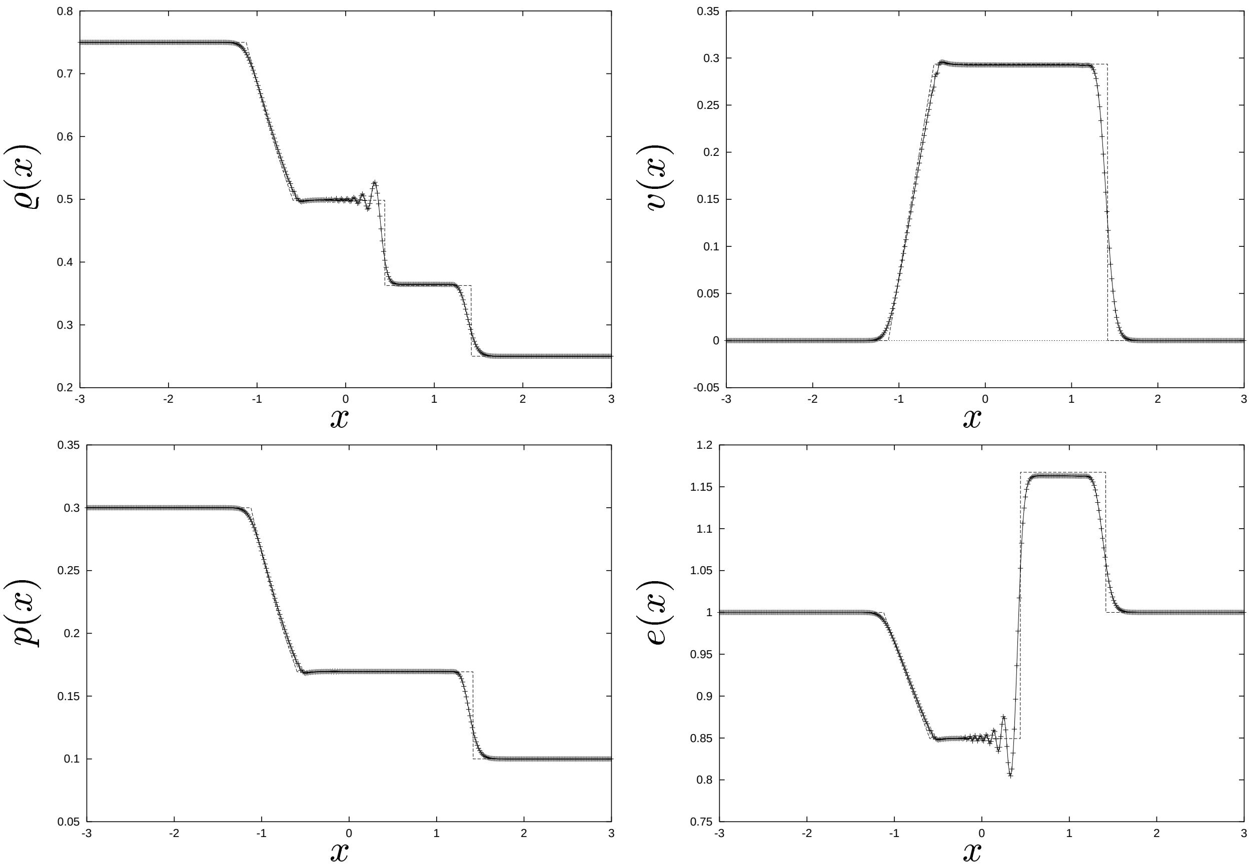


Abb. 5.2: Simulation des eindimensionalen Stoßrohres. Dargestellt ist das Ergebnis mit 500 Stützstellen. Die gestrichelte Linie beschreibt die analytische Lösung.

der Kernfunktion gegebenen Auflösung her. Die Oszillationen, die vor allem bei der Kontaktunstetigkeitsstelle in Dichte und spezifischer innerer Energie hervortreten, reduzieren sich bei Verwendung einer größeren künstlichen Viskosität, was jedoch eine weitere Verbreiterung der Stoßfronten zur Folge hat.

Kapitel 6

Moving Least Square als Lagrangesches Verfahren

Dieses Kapitel baut auf den Ergebnissen des letzten auf. Das Konzept der schwachen Formulierung einer Differentialgleichung wird beibehalten, auch der einfacheren physikalischen Interpretation wegen. Im Gegensatz zu den bisherigen Betrachtungen werden die Stützstellen jedoch nicht statisch angeordnet. Sie genügen ihrerseits eigenständigen Differentialgleichungen. Im Lagrangeschen Fall bedeutet dies, daß sich die Stützstellen mit der Strömung mitbewegen. Die Herleitung der Entwicklungsgleichungen ist zwar nicht auf diesen einen Fall beschränkt, aber die Lagrangesche Betrachtungsweise wird im folgenden ab einem gewissen Zeitpunkt in der Herleitung vorausgesetzt.

Die Bedingung, daß nun bewegliche Stützstellen betrachtet werden, hat aber auch Konsequenzen für die Kernfunktionen. Da diese über die Stützstellen implizit von der Zeit abhängen, muß die bisherige Separation von Raum– und Zeitanteil der *Moving Least Square* Approximationen aufgegeben werden. Es wird vielmehr nötig sein, eine zeitliche Ableitung für die Kernfunktion zu finden. Dieser Aufgabe soll im ersten Abschnitt nachgegangen werden. Im Anschluß daran ist die ausführliche Herleitung von Diskretisierungen der Advektionsgleichung und den hydrodynamischen Gleichungen idealer Fluide vorgesehen. Ein wichtiger Punkt liegt bei den Erhaltungssätzen von Masse, Impuls und Energie. Den Abschluß bilden Testbeispiele für die Advektionsgleichung und die hydrodynamischen Gleichungen.

6.1 Die Ableitung der Kernfunktion

Wie bereits in der Einleitung zu diesem Kapitel erwähnt, wird nun auf eine starre Anordnung der Stützstellen verzichtet und verlangt, daß die Stützstellen sich dynamisch über das Simulationsgebiet bewegen. Das bedeutet, daß für die Stützstellen noch zusätzliche Bewegungsgleichungen aufgestellt werden müssen. Diese unterliegen zunächst keinen Einschränkungen. Darunter versteht man, daß die Stützstellen eine noch zu bestimmende zeitliche Abhängigkeit $\boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{x}_i(t)$ besitzen. Im speziellen Fall des in diesem Kapitel zu betrachtenden Lagrangeschen *Moving Least Square* Verfahrens besteht die Zeitabhängigkeit darin, daß sich die Stützstellen mit dem Fluß mitbewegen sollen, die zeitliche Änderung der Positionen der Stützstellen also gerade das Geschwindigkeitsfeld widerspiegeln.

Da die Stützstellen eine explizite Zeitabhängigkeit besitzen, stellt sich die Frage, welche Konsequenzen daraus für die Kernfunktionen zu ziehen sind. Wie aus der Herleitung der Kernfunktionen hervorgeht (Kapitel 3.2), hängt die Form der Kernfunktionen explizit von der Anordnung der Stützstellen ab. Damit wird die Kernfunktion nun implizit durch die Zeitabhängigkeit der Stützstellen von der Zeitkoordinate abhängen. Das bedeutet also $\phi_i = \phi_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_j(t))$, wobei der Index j die Werte $1 \ldots N$ annimmt.

Diese Zeitabhängigkeit der Kernfunktionen hat auch direkt Auswirkungen auf die *Moving Least Square* Approximationen der gesuchten Größen in den Differentialgleichungen, speziell deren Zeitableitungen. Indem man eine Funktion durch ihre *Moving Least Square* Approximation ersetzt, konnte bisher der Zeit– vom Ortsanteil separiert werden (siehe beispielsweise Gleichung (4.16)). Dadurch wurde erreicht, daß eine partielle Differentialgleichung auf eine gewöhnliche reduziert werden konnte. Da dieses Konzept beibehalten werden soll, muß jetzt eine Gleichung gefunden werden, welche die Zeitableitung der Kernfunktion beschreibt. Einen plausiblen Ansatz kann die Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}\phi_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_j(t)) = -\dot{\boldsymbol{x}}_i(t) \cdot \nabla\phi_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_j(t)) + d_i(\boldsymbol{x}, t) \tag{6.1}$$

mit Restglied d_i und $j = 1 \ldots N$ darstellen. Der Punkt auf der Stützstelle $\boldsymbol{x}_i(t)$ im ersten Term der rechten Seite bezeichnet die Zeitableitung dieser Größe bzw. die Geschwindigkeit, mit der sich die Stützstelle über das Simulationsgebiet bewegt. Der Übersichtlichkeit halber wird im folgenden wieder auf die explizite Angabe der Funktionswerte verzichtet, außer an Stellen, an denen dies nötig erscheint.

Es bleibt nun die Aufgabe einen Ausdruck für das Restglied d_i zu bestimmen. Verwendung findet zunächst die Eigenschaft der Kernfunktionen, welche eine Partition der Eins bilden, also

$$\sum_{i=1}^{N} \phi_i = 1 \quad . \tag{6.2}$$

Daraus folgt, wie in Kapitel 3.4 aufgeführt, daß die Ortsableitungen aller Kernfunktion sich zu Null addieren. Entsprechendes gilt auch für die Summe über die Ableitungen der Kernfunktionen nach der Zeit

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial}{\partial t} \phi_i = 0 \quad . \tag{6.3}$$

Setzt man nun in diese Gleichung den Ansatz (6.1) ein, so folgt die Relation

$$\sum_{i=1}^{N} d_i = \sum_{i=1}^{N} \dot{\boldsymbol{x}}_i \cdot \nabla \phi_i \quad . \tag{6.4}$$

Ein einfacher Ansatz, welcher dieser Beziehung genügt, ist

$$d_i = \phi_i \sum_{j=1}^{N} \dot{\boldsymbol{x}}_j \cdot \nabla \phi_j \quad . \tag{6.5}$$

Dieser Ansatz scheint zunächst willkürlich zu sein, erfüllt aber zum einen die Beziehung (6.4), und zum anderen verschwindet der Ausdruck für feste Stützstellen, so daß die Ableitung der Kernfunktion nach der Zeit in diesem Fall ebenfalls verschwindet. Des Weiteren zeigt eine einfache Rechnung im Fall konstanter Interpolation (also $M = 1$), daß im Lagrangeschen Formalismus die Relation (6.5) zu der Aussage führt, daß die Geschwindigkeitsverteilung innerhalb des Trägers einer Kernfunktion i durch die konstante Geschwindigkeit an der Stützstelle i angenähert wird. Ein weiterer Faktor, der für den Ansatz (6.5) spricht, liegt in der folgenden Herleitung der hydrodynamischen Gleichungen. Wie im Galerkin–Verfahren des letzten Kapitels findet man durch die angewandten Approximationen für die diskreten Gleichungen Erhaltungssätze für Masse, Impuls und Energie.

6.2 Die Advektionsgleichung

Erstes Beispiel für die Behandlung des Lagrangeschen *Moving Least Square* sei die eindimensionale Advektionsgleichung mit zeitunabhängigem, aber örtlich variablem Geschwindigkeitsfeld $a(x)$

$$\frac{\partial}{\partial t}\varrho(x,t) + \frac{\partial}{\partial x}\left[a(x)\varrho(x,t)\right] = 0 \quad . \tag{6.6}$$

Wie im letzten Kapitel auch, so verwendet man hier nicht die Advektionsgleichung direkt, sondern vielmehr deren schwache Formulierung mit der Kernfunktion $\phi_i(x, x_j(t))$ als Testfunktion. Im Gegensatz zur schwachen Formulierung des letzten Kapitels darf die Zeitableitung hier nicht vor das Integral gezogen werden, da die Kernfunktion selbst nun eine zeitliche Abhängigkeit besitzt. Daher lautet die Advektionsgleichung in schwacher Formulierung hier

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t}\varrho(x,t)\,\phi_i(x,x_j(t))\mathrm{d}V - \int_V a(x)\varrho(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\phi_i(x,x_j(t))\mathrm{d}V = 0 \quad . \tag{6.7}$$

An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, daß die folgende Herleitung einer diskreten Gleichung nicht eindeutig ist. Es ergeben sich vielmehr weitere Möglichkeiten, die auch auf andere Formen von Diskretisierungen führen, die sogar in den Simulationen unterschiedliche Ergebnisse liefern können. Der hier gewählte Weg basiert darauf, eine physikalisch interpretierbare Diskretisierung zu finden, welche in den simulierten Beispielen mit analytisch gegebenen Referenzlösungen übereinstimmen.

Man betrachtet zunächst den ersten Term der Gleichung (6.7). Wird in diesen die *Moving Least Square* Approximation für die Dichte

$$\varrho(x,t) \cong \sum_{i=1}^{N} \varrho_i(t)\,\phi_i(x,x_i(t)) \tag{6.8}$$

eingesetzt, so findet sich der Ausdruck

$$\sum_{k=1}^{N} \dot{\varrho}_k \int_V \phi_k\phi_i\,\mathrm{d}V + \sum_{k=1}^{N} \varrho_k \int_V \dot{\phi}_k\phi_i\,\mathrm{d}V \quad . \tag{6.9}$$

Der Punkt über den Funktionen bezeichnet die Ableitung nach der Zeit. Unter Berücksichtigung der Ansätze (6.1) und (6.5) für die Ableitung der Kernfunktion nach der Zeit folgt daraus zunächst

$$\dot{\varrho}_i V_i - \sum_{j=1}^{N} \varrho_j \dot{x}_j \int_V \phi_i \nabla \phi_j \, \mathrm{d}V + \sum_{j,k=1}^{N} \varrho_k \dot{x}_j \int_V \phi_i \phi_k \nabla \phi_j \, \mathrm{d}V \quad , \tag{6.10}$$

wobei bereits der erste Term dieser Gleichung durch die *Mass Lumping* Technik, wie sie in Kapitel 5.2 beschrieben ist, vereinfacht wurde. Des Weiteren steht V_i für das Integral über eine Kernfunktion (Gleichung (5.3)). Der zweite Term kann einer partiellen Integration unterworfen und durch die Größe D_{ij} aus Definition (5.5) ersetzt werden. Der dritten Term von Gleichung (6.10) wird durch die Anwendung von *Mass Lumping* erst reduziert, dann entsprechend dem zweiten Term einer partiellen Integration unterworfen. Es folgt schließlich

$$\dot{\varrho}_i V_i + \sum_{j=1}^{N} \varrho_j V_j \dot{x}_j D_{ij} - \varrho_i \sum_{j=1}^{N} \dot{x}_j V_j D_{ij} \quad . \tag{6.11}$$

Die Behandlung des zweiten Terms von Gleichung (6.7) folgt derjenigen aus dem letzten Kapitel, so daß das Einsetzen der *Moving Least Square* Approximationen für Dichte $\varrho(x,t)$ und Geschwindigkeit

$$a(x) \cong \sum_{i=1}^{N} a_i \, \phi_i(x, x_j(t)) \tag{6.12}$$

unter Verwendung der *Mass Lumping* Technik und der Größe D_{ij} schließlich auf die diskrete Form der Advektionsgleichung

$$\dot{\varrho}_i V_i + \sum_{j=1}^{N} \varrho_j V_j (\dot{x}_j - a_j) D_{ij} = \varrho_i \sum_{j=1}^{N} \dot{x}_j V_j D_{ij} \tag{6.13}$$

führt. Es sei angemerkt, daß diese Gleichung noch Allgemeingültigkeit besitzt; es wurde bisher zu keinem Zeitpunkt eine Aussage über die konkrete Form der Bewegungsgleichungen der Stützstellen unternommen. Dies soll sich jetzt ändern, das Verfahren soll einen Lagrangeschen Charakter bekommen. Doch zunächst ist noch ein Vergleich mit der diskreten Advektionsgleichung im Galerkin–Verfahren angebracht. Dort waren die Stützstellen statisch angeordnet, genügten also der Differentialgleichung $\dot{\boldsymbol{x}}_i = 0$. Unter dieser Voraussetzung zeigt sich eine erwartungsgemäße Übereinstimmung der jeweiligen Diskretisierungen (5.13) und (6.13).

Für ein Lagrangesches Verfahren wird, wie am Anfang der Arbeit bereits beschrieben, verlangt, daß die Geschwindigkeit der Stützstellen dem Geschwindigkeitsfeld der Differentialgleichung entspricht. Das bedeutet konkret für die Advektionsgleichung, daß die Stützstellen den Bewegungsgleichungen $\dot{x}_j = a(x_j)$ unterworfen sind. Setzt man diese Bedingung in Gleichung (6.13) ein, so folgt

$$\dot{\varrho}_i = \frac{\varrho_i}{V_i} \sum_{j=1}^{N} a_j V_j D_{ij} \quad . \tag{6.14}$$

Es zeigt sich in numerischen Simulationen, daß diese Form der Diskretisierung oft zu Artefakten führt. Dies kann, wie im Galerkin–Verfahren, durch Einfügen einer mathematischen Null umgangen werden, so daß man schließlich zu folgender Diskretisierung der Advektionsgleichung gelangt

$$\dot{\varrho}_i = \frac{\varrho_i}{V_i} \sum_{j=1}^{N} (a_j - a_i) V_j D_{ij} \quad . \tag{6.15}$$

6.3 Die hydrodynamischen Gleichungen

In diesem Abschnitt wird auf die Diskretisierung der hydrodynamischen Gleichungen für ideale Fluide eingegangen. Eine Behandlung der physikalischen Reibungsterme findet demnach nicht statt, obwohl man auf eine künstliche Viskosität zur Dämpfung unphysikalischer Oszillationen im Bereich von Unstetigkeitsstellen der Lösung nicht verzichtet. Zunächst werden jedoch ausführlich die Diskretisierungen von Kontinuitätsgleichung, Impulsgleichung und Energiegleichung diskutiert, wobei besonderes Augenmerk auf die Erhaltung von Masse, Impuls und Energie gerichtet wird.

Es sei an dieser Stelle nochmal darauf hingewiesen, daß die folgende Herleitung der Diskretisierungen nicht eindeutig ist. Vielmehr wird hier ein Weg vorgeschlagen, der auf physikalisch interpretierbare Diskretisierungen führt, welche ferner bei den Simulationen eine gute Übereinstimmung von numerischer Lösung zur analytisch vorgegeben Lösung zeigen.

6.3.1 Die Kontinuitätsgleichung

Die Herleitung der Kontinuitätsgleichung entspricht derjenigen der Advektionsgleichung, wobei an dieser Stelle ein leicht veränderter Ansatz Verwendung findet, welcher schließlich zu einem Erhaltungssatz, der Erhaltung von Masse, führt.

Zunächst aber wird die Kontinuitätsgleichung (2.3) bzw.

$$\frac{\partial}{\partial t}\varrho + \operatorname{div}(\varrho \boldsymbol{v}) = 0 \tag{6.16}$$

in ihre schwache Formulierung mit der Kernfunktion $\phi_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_j(t))$ als Testfunktion überführt

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t}\varrho\, \phi_i \,\mathrm{d}V = \int_V \varrho \boldsymbol{v} \cdot \nabla \phi_i \,\mathrm{d}V \quad . \tag{6.17}$$

Im Gegensatz zur Herleitung der diskreten Form der Advektionsgleichung wird die Dichte nicht sofort in ihre *Moving Least Square* Approximation entwickelt, sondern man zerlegt den linken Teil dieser Gleichung durch Anwendung der Produktregel in zwei separate Terme und verwendet anschließend die Ansätze (6.1) und (6.5) für die zeitliche Ableitung der Kernfunktion. Man erhält damit für die linke Seite von Gleichung (6.17) den Ausdruck

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \varrho\phi_i \,\mathrm{d}V + \dot{\boldsymbol{x}}_i \cdot \int_V \varrho\nabla\phi_i \,\mathrm{d}V - \sum_{k=1}^{N} \dot{\boldsymbol{x}}_k \cdot \int_V \varrho\phi_i\nabla\phi_k \,\mathrm{d}V \quad , \tag{6.18}$$

wobei der Punkt über den Funktionen wie bisher für die Ableitung nach der Zeit steht. In diese Gleichung wird nun die *Moving Least Square* Approximation für die Dichte

$$\varrho(\boldsymbol{x}, t) \cong \sum_{i=1}^{N} \varrho_i(t)\, \phi_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_j(t)) \tag{6.19}$$

eingesetzt, wobei das Integral im ersten Term durch Anwendung der *Mass Lumping* Technik (Kapitel 5.2) auf einen Term reduziert werden kann, welcher nur einen Dichtewert und das dazugehörige Volumen der Stützstelle enthält. Es verbleibt also

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varrho_i V_i) + \sum_{j=1}^{N} \varrho_j \dot{\boldsymbol{x}}_i \cdot \int_V \phi_j \nabla\phi_i \,\mathrm{d}V - \sum_{j,k=1}^{N} \varrho_j \dot{\boldsymbol{x}}_k \cdot \int_V \phi_i\phi_j\nabla\phi_k \,\mathrm{d}V \quad . \tag{6.20}$$

Indem man den dritten Term dieser Gleichung einer partiellen Integration unterwirft und bei den daraus folgenden zwei Termen die *Mass Lumping* Technik anwendet, kann Gleichung (6.20) auf zwei Terme reduziert werden. An die Stelle der Terme aus (6.18) tritt der Ausdruck

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varrho_i V_i) + \sum_{j=1}^{N} \varrho_j \dot{\boldsymbol{x}}_j \cdot \int_V \phi_j \nabla \phi_i \quad . \tag{6.21}$$

Die Umformung der rechte Seite von Gleichung (6.17) entspricht derjenigen aus dem Galerkin–Verfahren. Man ersetzt die Dichte $\varrho(\boldsymbol{x}, t)$ und die Geschwindigkeit $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}, t)$ durch ihre jeweiligen *Moving Least Square* Approximationen und reduziert anschließend mit Hilfe der *Mass Lumping* Technik das auftretende Integral zu dem Ausdruck

$$\sum_{j=1}^{N} \varrho_j \boldsymbol{v}_j \cdot \int_V \phi_j \nabla \phi_i \,\mathrm{d}V \quad . \tag{6.22}$$

Kombiniert man nun die beiden Seiten (6.21) und (6.22) der schwachen Formulierung der Kontinuitätsgleichung (6.17), führt dies auf die diskrete Form

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varrho_i V_i) + \sum_{j=1}^{N} V_j \varrho_j (\dot{\boldsymbol{x}}_j - \boldsymbol{v}_j) \cdot \boldsymbol{D}_{ij} = 0 \quad , \tag{6.23}$$

wobei die Größe $\boldsymbol{D}_{ij}$, wie in Gleichung (5.5) definiert, für das Integral über die Kernfunktion und ihren Gradient steht.

Die bisherige Herleitung der diskreten Form der Kontinuitätsgleichung enthält noch keine Annahmen über das Verhalten der Stützstellen, sie hat daher Allgemeingültigkeit. Eine weitere Rechtfertigung der Herleitung dieser Gleichung ergibt sich im Vergleich mit dem Galerkin–Verfahren. Setzt man die Bedingung statischer Stützstellen, also $\dot{\boldsymbol{x}}_i = 0$, in (6.23) ein und berücksichtigt, daß das Volumen in diesem Fall keine Zeitabhängigkeit besitzt, so folgt unmittelbar die Diskretisierung, welche im Galerkin–Verfahren hergeleitet wurde (Gleichung (5.22)).

Dieses Kapitel spezialisiert sich jedoch auf den Fall Lagrangescher Bewegungsgleichungen, das heißt, die Stützstellen bewegen sich mit der Strömung, genügen also der Differentialgleichung $\dot{\boldsymbol{x}}_j = \boldsymbol{v}_j$. Verwendet man diese Bedingung in der Gleichung (6.23), gelangt man zu dem einfachen Ausdruck

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varrho_i V_i) = 0 \quad . \tag{6.24}$$

Dieser Form der Bewegungsgleichung läßt sich, wie im Galerkin–Verfahren, eine physikalische Interpretation zuordnen. Wie bereits beschrieben, kann die Größe V_i als das zugehörige Volumen der Stützstelle i interpretiert werden (Kapitel 5.2) und damit $m_i = \varrho_i V_i$ als Masse einer Stützstelle. Die Bewegungsgleichung (6.24) bedeutet nun, daß sich die Masse einer jeden Stützstelle im Laufe der Zeit nicht ändert. Zu erwarten ist, daß wie im Galerkin–Verfahren aus der Impulsgleichung und Energiegleichung Erhaltungssätze für den diskreten Gesamtimpuls und die diskrete Gesamtenergie folgen. Damit kann man sogar die Stützstellen als Teilchen mit definierter Masse betrachten, die sich unter Erhalt von Masse, Impuls und Energie durch das Simulationsgebiet bewegen.

Aus Gleichung (6.24) folgt dann auch die Differentialgleichung für die Dichte. Dazu separiert man Gleichung (6.24) unter Verwendung der Produktregel und ersetzt die zeitliche Ableitung des Volumens durch den Ausdruck

$$\begin{aligned}\dot{V}_i = \frac{\partial}{\partial t}\int_V \phi_i \,\mathrm{d}V &= -\dot{\boldsymbol{x}}_i \cdot \int_V \nabla\phi_i \,\mathrm{d}V + \sum_{j=1}^{N} \dot{\boldsymbol{x}}_j \cdot \int_V \phi_i \nabla\phi_j \,\mathrm{d}V \\ &= -\sum_{j=1}^{N} V_j\, \dot{\boldsymbol{x}}_j \cdot \boldsymbol{D}_{ij} \quad .\end{aligned} \tag{6.25}$$

Dabei wurden wieder die Ansätze (6.1) und (6.5) für die Ableitung der Kernfunktion nach der Zeit verwendet. Das letzte Gleichheitszeichen folgt aus der Kenntnis, daß die Kernfunktion außerhalb ihres Trägers verschwindet und daher das Integral über den Gradienten der Kernfunktion Null ergibt. Ersetzt man nun die zeitliche Ableitung der Funktionen $\boldsymbol{x}_i(t)$, bezüglich denen sich die Stütztellen bewegen, mit der Lagrangeschen Bedingung $\dot{\boldsymbol{x}}_j = \boldsymbol{v}_j$, so folgt die Entwicklungsgleichung für die Dichte

$$\dot{\varrho}_i = \frac{\varrho_i}{V_i} \sum_{j=1}^{N} V_j (\boldsymbol{v}_j - \boldsymbol{v}_i) \cdot \boldsymbol{D}_{ij} \quad . \tag{6.26}$$

Bei dieser Gleichung wurde, wie im Galerkin–Verfahren, eine mathematische Null eingefügt, um numerische Artefakte bei konstantem Geschwindigkeitsfeld zu vermeiden.

6.3.2 Die Impulsgleichung

Das Vorgehen, um zu einer diskreten Form der Impulsgleichung zu gelangen, entspricht in vielen Aspekten demjenigen Vorgehen, wie es in der Kontinuitätsgleichung vorgeführt wurde.

Der Ausgangspunkt liegt in den Euler–Gleichungen in der Formulierung von Gleichung (2.7) bzw.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varrho \boldsymbol{v}) + \nabla(\varrho \boldsymbol{v}\,\boldsymbol{v}) = -\nabla p \quad , \tag{6.27}$$

welche zur Herleitung eines Erhaltungssatzes besonders geeignet sind. Diese Gleichungen lauten in schwacher Formulierung mit den Kernfunktionen $\phi_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_j(t))$ als Testfunktionen

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t}(\varrho \boldsymbol{v})\phi_i \,\mathrm{d}V = \int_V \varrho \boldsymbol{v}\,\boldsymbol{v} \cdot \nabla\phi_i \,\mathrm{d}V + \int_V p\,\nabla\phi_i \,\mathrm{d}V \quad . \tag{6.28}$$

Der linke Teil dieser Gleichungen wird nun mit Hilfe der Produktregel in zwei Terme aufgespalten, in einen, welcher die Zeitableitung über das gesamte Integral besitzt, und in einen weiteren, welcher nur die Zeitableitung bezüglich der Kernfunktion $\phi_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_j(t))$ enthält. Im letzteren wird diese Zeitableitung durch die Ansätze (6.1) und (6.5) ersetzt und man erhält damit den Ausdruck

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \varrho \boldsymbol{v}\phi_i \,\mathrm{d}V + \int_V \varrho \boldsymbol{v}\;\dot{\boldsymbol{x}}_i \cdot \nabla\phi_i \,\mathrm{d}V - \sum_{k=1}^{N}\int_V \varrho \boldsymbol{v}\phi_i\dot{\boldsymbol{x}}_k \cdot \nabla\phi_k \,\mathrm{d}V \quad , \tag{6.29}$$

wobei der Punkt über den Funktionen wieder die Zeitableitung bezeichnet. Setzt man nun in diese Terme die *Moving Least Square* Approximation für die Dichte $\varrho(\boldsymbol{x}, t)$ aus Gleichung (6.19) und deren Pendant für die Geschwindigkeit $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}, t)$ ein, so folgt unter Anwendung der *Mass Lumping* Technik

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}(\varrho_i V_i \boldsymbol{v}_i) &+ \sum_{j=1}^{N} \varrho_j \boldsymbol{v}_j\;\dot{\boldsymbol{x}}_i \cdot \int_V \phi_j \nabla\phi_i \,\mathrm{d}V \\ &- \sum_{j,k=1}^{N} \varrho_j \boldsymbol{v}_j\;\dot{\boldsymbol{x}}_k \cdot \int_V \phi_i\phi_j \nabla\phi_k \,\mathrm{d}V \quad .\end{aligned} \tag{6.30}$$

Unterwirft man den dritten Term dieser Formel einer partiellen Integration und wendet bei den resultierenden zwei Termen jeweils die *Mass Lumping* Technik an, so reduziert sich der Ausdruck (6.30) auf zwei Terme, und die linke Seite der schwachen Formulierung der Impulsgleichung lautet

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varrho_i V_i \boldsymbol{v}_i) + \sum_{j=1}^{N} \varrho_j \boldsymbol{v}_j \; \dot{\boldsymbol{x}}_j \cdot \int_V \phi_j \nabla \phi_i \, \mathrm{d}V \quad . \tag{6.31}$$

Man betrachte nun die rechte Seite der Impulsgleichung in schwacher Formulierung (6.28). Im ersten Term werden die Dichte $\varrho(\boldsymbol{x}, t)$ und die Geschwindigkeit $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}, t)$ durch ihre jeweiligen *Moving Least Square* Approximationen ersetzt. Eine folgende Anwendung der *Mass Lumping* Technik ergibt

$$\sum_{j=1}^{N} \varrho_j \boldsymbol{v}_j \; \boldsymbol{v}_j \cdot \int_V \phi_j \nabla \phi_i \, \mathrm{d}V + \int_V p \, \nabla \phi_i \mathrm{d}V \quad . \tag{6.32}$$

Kombiniert man nun die beiden Seiten (6.31) und (6.32), so folgt die diskrete Form der Impulsgleichung in schwacher Formulierung

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\varrho_i V_i \boldsymbol{v}_i\right) + \sum_{j=1}^{N} \varrho_j V_j \boldsymbol{v}_j \left(\dot{\boldsymbol{x}}_j - \boldsymbol{v}_j\right) \cdot \boldsymbol{D}_{ij} = \int_V p \, \nabla \phi_i \mathrm{d}V \quad , \tag{6.33}$$

wobei die Größe $\boldsymbol{D}_{ij}$ durch Gleichung (5.5) definiert wurde.

Die bisherige Herleitung der Diskretisierung der Impulsgleichung in schwacher Formulierung beinhaltet noch keine Aussagen über die konkreten Bewegungsgleichungen für die Stützstellen $\boldsymbol{x}_i(t)$. Gleichung (6.33) besitzt also noch Allgemeingültigkeit. Da in dieser Arbeit die Lagrangesche Beschreibungsweise vorgesehen ist, wird für den Rest dieses Abschnittes die Bedingung $\dot{\boldsymbol{x}}_i = \boldsymbol{v}_i$ vorausgesetzt. Damit reduziert sich die diskrete Form der Impulsgleichung (6.33) auf

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varrho_i V_i \boldsymbol{v}_i) = \int_V p \, \nabla \phi_i \mathrm{d}V \quad . \tag{6.34}$$

Im Gegensatz zur Diskretisierung der Kontinuitätsgleichung läßt sich an dieser Gleichung kein Erhaltungssatz für ein einzelnes Teilchen ablesen. Ordnet man jedoch das Produkt von Dichte ϱ_i und Volumen V_i einer Stützstelle i

der Masse m_i zu und summiert über sämtliche Stützstellen des Simulationsgebietes, so folgt

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_{i=1}^{N} m_i \boldsymbol{v}_i\right) = 0 \quad . \tag{6.35}$$

Das Integral über den Druck verschwindet, da die Kernfunktionen die Eigenschaft besitzen, eine Partition der Eins zu bilden (Gleichung (3.31)).

Die Interpretation des Ausdruckes (6.35) als Erhaltung des Gesamtimpulses liegt auf der Hand und bildet daher neben der Erhaltung der Masse einer einzelnen Stützstelle bzw. eines einzelnen Teilchens (6.24) den zweiten wichtigen Erhaltungssatz.

Die Differentialgleichung für die Geschwindigkeit $\boldsymbol{v}_i$ der Stützstelle i folgt unmittelbar aus der Gleichung (6.34). Zerlegt man mit Hilfe der Produktregel die linke Seite und beachtet den Erhalt der Masse $\dot{m}_i = 0$, so folgt

$$\dot{\boldsymbol{v}}_i = \frac{1}{\varrho_i V_i} \int_V p \, \nabla \phi_i \, \mathrm{d}V \quad . \tag{6.36}$$

Indem man für den Druck p seine *Moving Least Square* Approximation

$$p \cong \sum_{i=1}^{N} p_i \phi_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_j(t)) \tag{6.37}$$

substituiert, kommt man schließlich zu einer Differentialgleichung, welche in der folgenden Simulation Verwendung findet

$$\dot{\boldsymbol{v}}_i = \frac{1}{\varrho_i V_i} \sum_{j=1}^{N} (p_j - p_i) V_j \, \boldsymbol{D}_{ij} \quad , \tag{6.38}$$

wobei zur Vermeidung numerischer Artefakte im Fall konstanten Drucks eine mathematische Null eingefügt wurde.

6.3.3 Die Energiegleichung

Die Herleitung einer diskreten Form der Energiegleichung ähnelt zwar in wesentlichen Schritten derjenigen der Impulsgleichung, wird aber hier der Vollständigkeit wegen nochmals aufgeführt.

Ausgehend von der Energiegleichung (2.14) bzw.

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\varrho}{2}\boldsymbol{v}^2+\varepsilon\right)+\operatorname{div}\left[\left(\frac{\varrho}{2}\boldsymbol{v}^2+\varepsilon+p\right)\boldsymbol{v}\right]=0 \tag{6.39}$$

folgt deren schwache Formulierung mit der Kernfunktion $\phi_i(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_j(t))$ als Testfunktion

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\varrho}{2}\boldsymbol{v}^2+\varepsilon\right)\phi_i \mathrm{d}V=\int_V\left(\frac{\varrho}{2}\boldsymbol{v}^2+\varepsilon\right)\boldsymbol{v}\cdot\nabla\phi_i\mathrm{d}V+\int_V p\boldsymbol{v}\cdot\nabla\phi_i\mathrm{d}V\,. \tag{6.40}$$

Man zerlegt nun den linken Teil dieser Gleichung mit Hilfe der Produktregel in zwei Terme und substituiert für die zeitliche Ableitung der Kernfunktion die Ansätze (6.1) und (6.5) und erhält den Ausdruck

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\int_V\left(\frac{\varrho}{2}\boldsymbol{v}^2+\varepsilon\right)\phi_i\mathrm{d}V+\dot{\boldsymbol{x}}_i\cdot\int_V\left(\frac{\varrho}{2}\boldsymbol{v}^2+\varepsilon\right)\nabla\phi_i\mathrm{d}V&\\ -\sum_{k=1}^{N}\dot{\boldsymbol{x}}_k\cdot\int_V\left(\frac{\varrho}{2}\boldsymbol{v}^2+\varepsilon\right)\nabla\phi_k\mathrm{d}V\quad&,\end{aligned} \tag{6.41}$$

wobei wie bisher der Punkt über einer Funktion für die Zeitableitung steht. Setzt man jetzt in diese Gleichung die *Moving Least Square* Approximationen für die Dichte $\varrho(\boldsymbol{x},t)$ aus Gleichung (6.19) und die entsprechenden Approximationen für die Geschwindigkeit $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x},t)$ und innere Energie $\varepsilon(\boldsymbol{x},t)$ ein, so folgt unter Anwendung der *Mass Lumping* Technik (Kapitel 5.2) der Ausdruck

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\varrho_i V_i}{2}\boldsymbol{v}_i^2+\varepsilon_i V_i\right)+\dot{\boldsymbol{x}}_i\cdot\sum_{j=1}^{N}\left(\frac{\varrho_j}{2}\boldsymbol{v}_j^2+\varepsilon_j\right)\int_V\phi_j\nabla\phi_i\mathrm{d}V&\\ -\sum_{j,k=1}^{N}\left(\frac{\varrho_j}{2}\boldsymbol{v}_j^2+\varepsilon_j\right)\dot{\boldsymbol{x}}_k\cdot\int_V\phi_i\phi_j\nabla\phi_k\mathrm{d}V\quad&.\end{aligned} \tag{6.42}$$

Die letzten zwei Terme dieser Formel können zu einem zusammengefaßt werden, indem man auf den letzten Term eine partielle Integration anwendet und die daraus folgenden zwei Terme unter wiederholter Anwendung der *Mass Lumping* Technik mit dem zweiten Term aus Formel (6.42) verbindet. Es ergibt sich also für die linke Seite der Energiegleichung in schwacher Formulierung

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\varrho_i V_i}{2}\boldsymbol{v}_i^2 + \varepsilon_i V_i\right) + \sum_{j=1}^{N}\left(\frac{\varrho_j}{2}\boldsymbol{v}_j^2 + \varepsilon_j\right)\dot{\boldsymbol{x}}_j \cdot \int_V \phi_j \nabla\phi_i \mathrm{d}V \quad . \tag{6.43}$$

In die rechte Seite der schwachen Energiegleichung (6.40) werden, wie in der linken Seite, für Dichte $\varrho(\boldsymbol{x}, t)$, Geschwindigkeit $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}, t)$ und innere Energie $\varepsilon(\boldsymbol{x}, t)$ die jeweiligen *Moving Least Square* Approximationen eingesetzt. Man erhält somit unter erneuter Verwendung der *Mass Lumping* Technik den Ausdruck

$$\sum_{j=1}^{N}\left(\frac{\varrho_j}{2}\boldsymbol{v}_j^2 + \varepsilon_j\right)\boldsymbol{v}_j \cdot \int_V \phi_j \nabla\phi_i \mathrm{d}V + \sum_{j=1}^{N}\boldsymbol{v}_j \cdot \int_V p\,\phi_j \nabla\phi_i \mathrm{d}V \quad . \tag{6.44}$$

Um nun zur diskreten Form der Energiegleichung in schwacher Formulierung zu gelangen, werden die beiden Seiten (6.43) und (6.44) zu einer Gleichung kombiniert

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\varrho_i V_i}{2}\boldsymbol{v}_i^2 + \varepsilon_i V_i\right) + \sum_{j=1}^{N} V_j\left(\frac{\varrho_j}{2}\boldsymbol{v}_j^2 + \varepsilon_j\right)(\dot{\boldsymbol{x}}_j - \boldsymbol{v}_j)\cdot \boldsymbol{D}_{ij}& \\ = \sum_{j=1}^{N}\boldsymbol{v}_j \cdot \int_V p\,\phi_j \nabla\phi_i \mathrm{d}V &\quad . \end{aligned}\tag{6.45}$$

Wie in den vorherigen zwei Abschnitten wurde diese Gleichung unter allgemeinen Voraussetzungen hergeleitet, das heißt, es sind bisher keine Informationen über die Bewegungsgleichungen für die Stützstellen $\boldsymbol{x}_i(t)$ eingeflossen. Da aber dieses Kapitel sich auf das Lagrangesche Verfahren spezialisiert, in welchem sich die Stützstellen mit dem Fluid mitbewegen, wird im folgenden die Bedingung $\dot{\boldsymbol{x}}_i = \boldsymbol{v}_i$ vorausgesetzt. Damit kann man anstelle der diskreten Energiegleichung (6.45) die Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\varrho_i V_i}{2}\boldsymbol{v}_i^2 + \varepsilon_i V_i\right) = \sum_{j=1}^{N}\boldsymbol{v}_j \cdot \int_V p\,\phi_j \nabla\phi_i \mathrm{d}V \quad . \tag{6.46}$$

verwenden.

Entsprechend der diskretisierten Impulsgleichung (6.34) ist der diskretisierten Energiegleichung kein Erhaltungssatz für eine einzelne Stützstelle anzusehen. Verwendet man wiederum anstelle des Produktes aus Dichte ϱ_i und Volumen V_i der Stützstelle i die Masse m_i und summiert über alle Stützstellen N des Simulationsgebietes, so ist mit

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{m_i}{2}\boldsymbol{v}_i^2 + \varepsilon_i V_i\right) = 0 \tag{6.47}$$

die Gesamtenergie eine Erhaltungsgröße. Dies folgt aus der Eigenschaft, daß die Kernfunktionen eine Partition der Eins bilden (Gleichung (3.31)) und daher die Summe der Gradienten aller Kernfunktion verschwindet.

Nachdem neben dem Gesamtimpuls und der Masse einer einzelnen Stützstelle die Gesamtenergie als Erhaltungsgröße bestätigt wurde, muß nun eine Entwicklungsgleichung für die innere Energie ε_i an der Stützstelle i gefunden werden. Dazu formt man die Ableitung der kinetischen Energie nach der Zeit aus Gleichung (6.46) in den Ausdruck

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\varrho_i V_i}{2}\boldsymbol{v}_i^2\right) = \boldsymbol{v}_i \cdot \frac{\partial}{\partial t}\left(\varrho_i V_i \boldsymbol{v}_i\right) = \boldsymbol{v}_i \cdot \int_V p\, \nabla\phi_i \mathrm{d}V \tag{6.48}$$

um, wobei für die Zeitableitung des Impulses $\varrho_i V_i \boldsymbol{v}_i$ die diskrete Impulsgleichung (6.34) Verwendung findet. Damit folgt anstelle der diskreten Energiegleichung (6.46) die Differentialgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_i V_i) = \sum_{j=1}^{N} (\boldsymbol{v}_j - \boldsymbol{v}_i) \cdot \int_V p\, \phi_j \nabla\phi_i \,\mathrm{d}V \quad . \tag{6.49}$$

Schließlich kann man den Druck p durch seine *Moving Least Square* Approximation (6.37) sowie die Ableitung des Volumens V_i durch Gleichung (6.25) ersetzen und gelangt zur Entwicklungsgleichung für die innere Energie ε_i an der Stützstelle i

$$\dot{\varepsilon}_i = \frac{\varepsilon_i}{V_i}\sum_{j=1}^{N} V_j(\boldsymbol{v}_j - \boldsymbol{v}_i)\cdot \boldsymbol{D}_{ij} + \frac{1}{V_i}\sum_{j=1}^{N} V_j p_j (\boldsymbol{v}_j - \boldsymbol{v}_i)\cdot \boldsymbol{D}_{ij} \quad , \tag{6.50}$$

wobei man zur Auswertung des Integrals in Gleichung (6.49) ein weiteres Mal die *Mass Lumping* Technik anwendet und die Größe $\boldsymbol{D}_{ij}$ wie in Gleichung (5.5) definiert. Außerdem wurde im ersten Term der Differentialgleichung für die innere Energie ε_i eine mathematische Null eingefügt, um numerische Artefakte bei konstantem Geschwindigkeitsfeld zu vermeiden.

6.4 Numerische Tests

In diesem Abschnitt wird nun die Eignung der Diskretisierungen und der numerischen Implementierung anhand einiger Testprobleme aufgezeigt.

Wie im Galerkin–Verfahren werden die numerischen Simulationen nur für die lineare Interpolation, also $M = 2$, durchgeführt. Auch hier liegt der Grund in der Approximationsordnung von $\boldsymbol{D}_{ij}$ (Kapitel 5.2). Generell kann jedoch gesagt werden, daß die Rechnungen aufwendiger sind als diejenigen des Kollokationsverfahrens oder des Galerkin–Verfahrens. Dies liegt zum einen natürlich darin, daß zusätzlich zu den Diskretisierungen die Bewegungsgleichungen für die Stützstellen mitintegriert werden müssen. Zum anderen, und darin liegt der Hauptteil der numerischen Rechenarbeit, muß man für jeden Zeitschritt die Ableitungen $\boldsymbol{D}_{ij}$ erneut berechnen, da sich die Stützstellen unabhängig voneinander bewegen können. Das Verfahren hat aber den Vorteil, in einigen Anwendungen, wie zum Beispiel hier bei der Advektionsgleichung, weniger Stützstellen zu benötigen, da nicht das gesamte Simulationsgebiet mit Stützstellen überdeckt werden muß. Es bleibt also abzuwägen, welches der Verfahren im konkreten Fall zu bevorzugen ist. In dieser Arbeit wird jedoch nur auf die Realisierung dieser Verfahren Wert gelegt, nicht auf den konkreten Vergleich.

6.4.1 Die Advektionsgleichung

Für die erste Anwendung des Verfahrens betrachte man die Advektionsgleichung mit konstantem Geschwindigkeitsfeld $a(x) = 1.0$. Als Zeitintegrator findet ein *Leap–Frog* Schema der Ordnung $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ Verwendung, als Anfangsverteilung dient die Gauß–Funktion

$$\varrho_0(x) = e^{-50(x+0.5)^2} \quad . \tag{6.51}$$

Erwarten kann man, daß diese Verteilung mit der gegebenen Geschwindigkeit ohne Änderung von Gestalt und Amplitude advektiert wird. Das numerische Ergebnis findet sich in Abbildung 6.1 auf der linken Seite. Deutlich ist zu erkennen, daß diese Bedingungen sehr gut erfüllt werden. Auch die Bewegung der Stützstellen ist klar zu erkennen.

Im zweiten Testbeispiel wird das Geschwindigkeitsfeld $a(x)$ durch eine räumlich variable, aber zeitlich konstante Funktion ersetzt

$$a(x) = \frac{x}{1 + 0.2\,x^2} \quad . \tag{6.52}$$

Als Anfangsverteilung findet das Gauß–Profil

$$\varrho_0(x) = 1.5x^2 e^{-6.25(x-1)^2} \tag{6.53}$$

Verwendung. Im Gegensatz zum vorigen Testbeispiel wird sich bei diesem Geschwindigkeitsfeld sowohl Gestalt als auch Amplitude der Anfangsverteilung ändern. Die numerischen Ergebnisse zu den Zeiten $t = 2.0$ und $t = 4.0$ sind in Abbildung 6.1 auf der rechten Seite dargestellt. Ein Vergleich mit den Ergebnissen aus den Abbildungen 4.6 links und 5.1 links vom Kollokationsverfahren bzw. Galerkin–Verfahren zeigt eine sehr gute Übereinstimmung. Deutlich ist auch zu erkennen, wie die Stützstellen sich von ihren Ausgangspositionen wegbewegt haben und speziell im Fall des räumlich variablen Geschwindigkeitsfeldes im Verlauf der Simulation eine unregelmäßige Anordnung einnehmen. Die Stützstrellen nähern oder entfernen sich voneinander je nach Größe des Geschwindigkeitsfeldes.

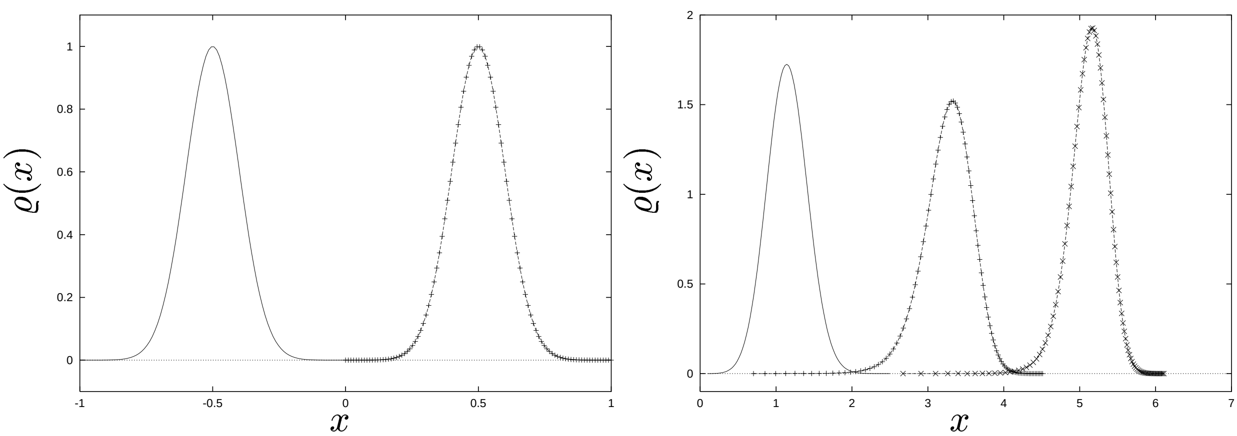


Abb. 6.1: Lösung des eindimensionalen Advektionsproblems mit vorgegebenem Geschwindigkeitsfeld $a(x) = 1.0$ (links) bzw. $a(x) = x/(1 + 0.2\,x^2)$ (rechts). Die durchgezogene Linie beschreibt die Anfangsverteilung.

6.4.2 Das eindimensionale Stoßrohr

Wie in den letzten Kapiteln auch, bildet das eindimensionale Stoßrohr das Testbeispiel zur Überprüfung der Gültigkeit der hydrodynamischen Diskretisierungen. Die analytische Lösung dieses Stoßrohrproblems findet sich in Anhang A.

Das sich in einer Röhre befindende ideale Gas wird zunächst durch ein Diaphragma in zwei Bereiche unterteilt. Links des Diaphragmas befindet sich das Gas mit höherer Dichte, rechts davon dasjenige niedrigerer Dichte. Des Weiteren wird vorausgesetzt, daß sich die beiden Gase anfangs in Ruhe befinden und die inneren Energien beider Gase identisch sind. Zum Startzeitpunkt der Simulation wird nun das Diaphragma instantan entfernt. Daraufhin breitet sich eine Stoßwelle in das Medium geringerer Dichte aus und eine Verdünnungswelle in das Medium höherer Dichte. Zwischen der Schockfront und der Verdünnungswelle befindet sich die Kontaktunstetigkeit, bei der Dichte und spezifische innere Energie eine Diskontinuität besitzen, dagegen Geschwindigkeit und Druck ihren Wert nicht verändern.

Wie in den bereits durchgeführten Simulationen werden für die Rechnungen hier willkürliche Einheiten verwendet. Dementsprechend sind in den Diagrammen keine physikalischen Einheiten angegeben.

Durch auftretende Unstetigkeitsstellen an den Stoßfronten ist die Verwendung einer künstlichen Viskosität, wie sie in Abschnitt 4.5.2 beschrieben wurde, unabdingbar. Dadurch werden die unerwünschten Postschock–Oszillationen weitgehend weggedämpft. Die verwendeten Werte für die frei wählbaren Parameter der künstlichen Viskosität α, β liegen bei 1.0.

Abbildung 6.2 zeigt das numerische Ergebnis der Simulation mit 500 Stützstellen. Neben der Dichteverteilung $\varrho(x)$ sind Geschwindigkeit $v(x)$, Druck $p(x)$ und spezifische innere Energie $e(x)$ zum Zeitpunkt $T = 1.5$ dargestellt. Die gestrichelte Linie zeigt das analytische Ergebnis. Die verwendeten Stützstellen waren zum Startzeitpunkt äquidistant über das Simulationsgebiet verteilt und wurden dann sich selbst überlassen, sie bewegten sich also mit der Strömung. Das Ergebnis zeigt eine sehr gute Übereinstimmung zwischen der analytischen Lösung und den simulierten Werten. Auch die Stoßfronten besitzen eine beeindruckende Auflösung.

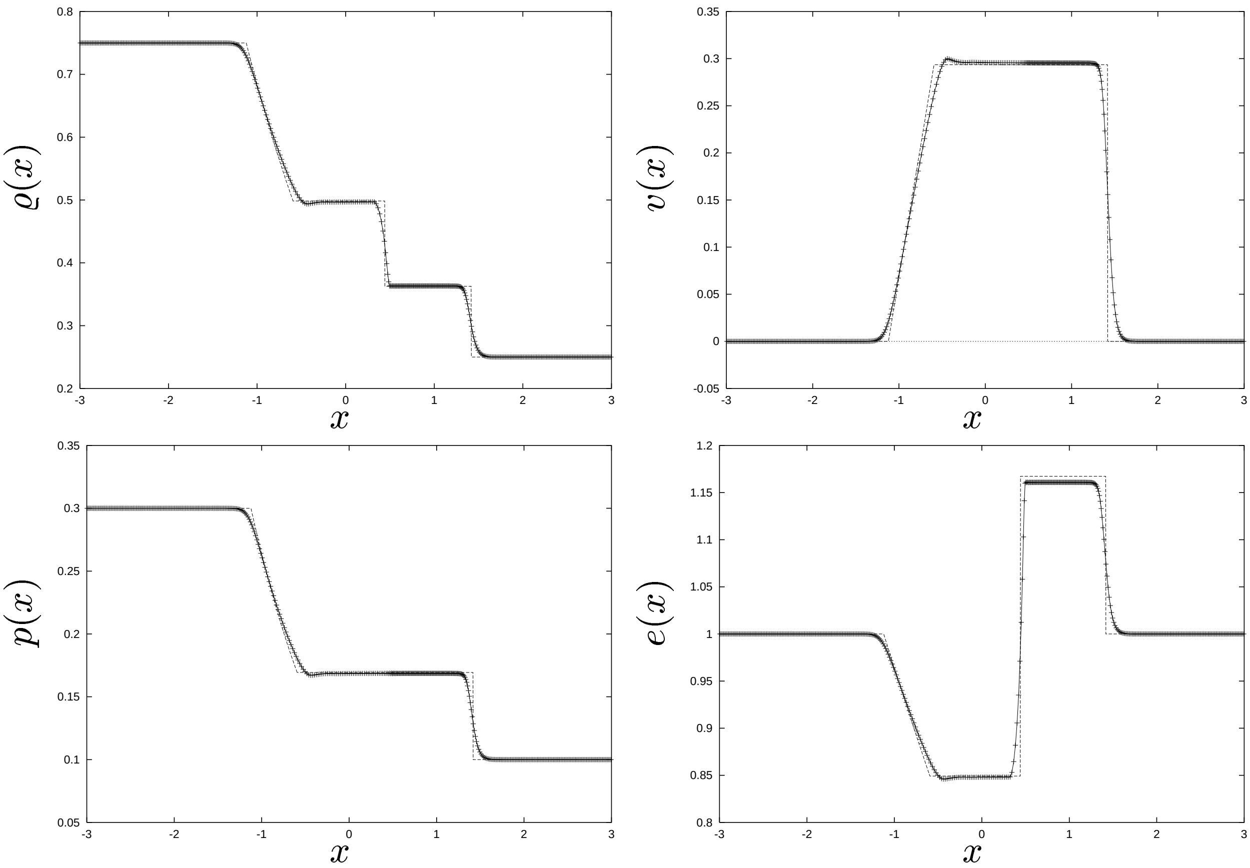


Abb. 6.2: Simulation des eindimensionalen Stoßrohres. Dargestellt ist das Ergebnis mit 500 Stützstellen. Die gestrichelte Linie beschreibt die analytische Lösung.

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

7.1 Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit befaßt sich mit der Anwendung des *Moving Least Square* Ansatzes im Bereich der partiellen Differentialgleichungen, speziell der hydrodynamischen Grundgleichungen. Dabei werden drei verschiedenen Verfahren untersucht, das Kollokationsverfahren, das Galerkin–Verfahren und das Lagrangesche Verfahren. Wichtige Punkte sind die Herleitung der jeweiligen Diskretisierungen und die Überprüfung von deren Eignung zur Simulation von Differentialgleichungen. Als Testbeispiele dienen die Advektionsgleichung, das eindimensionalen Stoßrohres und speziell im Kollokationsverfahren die starr rotierenden Gasscheibe.

Ausgangspunkt dieser Arbeit ist eine Diskussion der *Moving Least Square* Methode, einer Methode, die ursprünglich dazu entwickelt wurde, um unstrukturierte Meßdaten zu interpolieren. Die Interpolationsordnung hängt davon ab, wieviele Basisvektoren man zur Berechnung der Kernfunktionen hinzuzieht. Für die Simulationen der betrachteten Testbeispiele werden hier ausschließlich polynomiale Basisvektoren verwendet. Es zeigt sich, daß der Wahl der Gewichtsfunktion für die Berechnung der Kernfunktion eine wichtige Rolle zukommt. Je nach der Struktur der Gewichtsfunktion unterscheidet man zwischen einer interpolierenden und einer nichtinterpolierenden *Moving Least Square* Methode: Besitzt die Gewichtsfunktion eine Singularität an der zugehörigen Stützstelle, so folgt, daß die Entwicklungskoeffizienten einer Funktion den Funktionswerten an diesen Stützstellen entsprechen. Man spricht daher von einem interpolierenden Verfahren. Besitzt die Gewichtsfunktion jedoch keine Singularität, ist sie also innerhalb ihres Trägers mindestens einmal stetig differenzierbar, so handelt es sich um ein nichtinterpolierendes Verfahren und die Entwicklungskoeffizienten entsprechen nicht den Funktionswerten an den jeweils zugehörigen Stützstellen. Es stellt sich ferner heraus, daß der Koeffizient, welcher die Stärke der Singularität bei dem interpolierenden Verfahren angibt, von untergeordneter Bedeutung ist. Die einzige Beschränkung liegt darin, diesen größer als eins zu wählen. Unabhängig von der Methode gilt jedoch, daß für beliebige Stützstellenverteilungen die Basisfunktionen exakt approximiert werden. Dadurch wird die Konsistenz des Verfahrens schließlich garantiert. Darüberhinaus bilden die Kernfunktionen eine Partition der Eins.

Die *Moving Least Square* Methode wird anschließend im Kollokationsverfahren auf Differentialgleichungen angewendet. Dazu muß zunächst geklärt werden, wie der Ableitungsoperator auf Funktionen bzw. auf die Kernfunktionen anzuwenden ist. Ein direkter Vergleich der interpolierenden mit der nichtinterpolierenden *Moving Least Square* Methode ergibt, daß speziell bei steilen Gradienten die nichtinterpolierende Methode der interpolierenden deutlich unterlegen ist, da sie nicht in der Lage ist, diese Gradienten darzustellen. Daher wird im folgenden auf eine weitere Betrachtung der nichtinterpolierenden Methode verzichtet. Es folgt eine genauere Analyse des numerischen Fehlers, welcher durch die *Moving Least Square* Methode für die Ableitungen hervorgerufen wird. Es zeigt sich dabei, daß dieser unmittelbar von der Interpolationsordnung der Methode abhängt und damit durch einen einzelnen Parameter geändert werden kann. Dies ist ein wesentlicher Vorteil gegenüber Verfahren mit Finiten Differenzen, bei denen je nach Ordnung ein ganz neues Programm geschrieben werden muß. Die Simulation von Advektionsgleichung und hydrodynamischen Gleichungen anhand des eindimensionalen Stoßrohres legen das Potential des Verfahrens dar. Bei einer regelmäßiger Stützstellenverteilung entspricht das Ergebnis, wie auch die Fehleranalyse beweist, dem eines Finiten Differenzenverfahrens der jeweils zugehörigen Ordnung. Es stellt sich ebenfalls heraus, daß das Kollokationsverfahren auch auf eine irreguläre Stützstellenverteilung anwendbar ist, die Irregularität jedoch nicht beliebig stark sein darf. Dies eröffnet jedoch die Möglichkeit, eine lokale Verfeinerung des Gitters in solchen Bereichen des Simulationsgebietes, in denen beispielsweise der Gradient sehr steil wird und daher eine regelmäßige Stützstellenverteilung nicht geeignet erscheint, vorzunehmen. Auch eine adaptive Gitterverfeinerung ist denkbar. Dies ist bei Finiten Differenzenverfahren nur unter einem erhöhten Programmieraufwand realisierbar, ein weiterer Vorteil der *Moving Least Square* Technik. Anhand der starr rotierenden Gasscheibe kann gezeigt werden, daß die Verallgemeinerung auf zwei Dimensionen (und damit auch auf weitere) möglich ist, und prinzipiell nur durch eine Erweiterung der Menge der Basisvektoren erfolgt.

Eine weitere Version, in der sich die *Moving Least Square* Methode erfolgreich anwenden läßt, ist das Galerkin–Verfahren. Dabei muß die Differentialgleichung zunächst in ihre schwache Formulierung umgeschrieben werden. Der Vorteil dieses Verfahrens liegt zum einen in der mathematisch korrekten Beschreibung von nicht stetigen Lösungen einer Differentialgleichung, zum anderen ist die physikalische Interpretation der diskreten Gleichungen einfacher. So wird jeder Stützstelle ein Volumen zugeordnet, welches sich als Integral über die Kernfunktion definiert. Betrachtet man die hydrodynamischen Gleichungen für ideale Fluide, welche sich aus den Erhaltungssätzen von Masse, Impuls und Energie ableiten, so finden sich bei der jeweiligen diskreten Form ebenfalls Erhaltungssätze für Gesamtmasse, Gesamtimpuls und Gesamtenergie. Die Gesamtmasse ist dabei durch die Summe aus den Produkten von Dichte und Volumen, der Gesamtimpuls durch die Summe aus den Produkten von Dichte, Volumen und Geschwindigkeit aller Stützstellen definiert. Entsprechend gilt das für die Gesamtenergie, welche sich aus kinetischer Energie und innerer Energie zusammensetzt. Die Herleitung der diskreten Gleichungen der betrachteten Differentialgleichungen fand unter extensivem Gebrauch von Methoden, die aus der Theorie der finiten Elemente stammen, wie der *Mass Lumping* Technik, statt.

Den Abschluß der vorliegenden Arbeit bildet die *Moving Least Square* Methode im Lagrangeschen Verfahren. Wie im Galerkin–Verfahren wird auch hier die schwache Formulierung einer Differentialgleichung gewählt. Jedoch besitzen die Stützstellen nun eine explizite Zeitabhängigkeit, das bedeutet, sie können sich eigenständig durch das Simulationsgebiet bewegen. Das hat unmittelbar Auswirkungen auf die Kernfunktionen, denn diese hängen nun über die Stützstellen implizit ebenfalls von der Zeit ab. Daher war es nötig, eine Gleichung zu finden, welche die Zeitabhängigkeit der Kernfunktion auf die Stützstellen überträgt. Der dafür gefundene Ansatz lieferte zunächst neue Diskretisierungen der hydrodynamischen Gleichungen, welche neben den Variablen auch Zeitableitungen der Funktionen, welche die Bahnen der Stützstellen beschreiben, beinhalten. Betrachtet man speziell die diskrete Kontinuitätsgleichung unter der Annahme statischer Stützstellen, so findet man die diskrete Gleichung im Galerkin–Verfahren. Dies ist eine sehr gute Bestätigung des Ansatzes für die Zeitableitung der Kernfunktionen. Im Lagrangeschen Fall bewegen sich die Stützstellen mit der Strömung. Die Zeitableitung der Funktionen, welche die Bahnen der Stützstellen beschreiben, entspricht also dem Geschwindigkeitsfeld am Ort der jeweiligen Stützstelle. Betrachtet man unter dieser Voraussetzung die diskreten hydrodynamischen Gleichungen, so finden sich, wie im Galerkin–Verfahren, Erhaltungssätze. Diese sind die Erhaltung der Masse einer einzelnen Stützstelle, die Erhaltung des Gesamtimpulses und die Erhaltung der Gesamtenergie, so daß man die Stützstellen selber als Teilchen bezeichnen kann und das Verfahren als ein Teilchenverfahren.

7.2 Ausblick

Zum Abschluß sollen in aller Kürze auf weitere Entwicklungen und offene Problem der vorgestellten *Moving Least Square* Verfahren eingegangen werden.

Eine wichtige Weiterentwicklung der vorgestellten Verfahren liegt in der Erweiterung der in dieser Arbeit vorgestellten Diskretisierungen auf den Bereich viskoser Fluide. Dies beinhaltet das Aufstellen diskreter zweiter Ableitungen und deren Überprüfung an einfachen Beispielen. Obwohl hier bereits erste Ansätze unternommen wurden, steht ein genaueres Studium noch aus. Auch die Untersuchung des Verhaltens der vorgestellten Diskretisierungen unter einer äußeren Volumenkraft ist ein wichtiges, wenn auch problemloses, Vorhaben.

Ein sicherlich noch umfangreicheres Unterfangen ist die Formulierung von Randwerten. Betrachtet man die Kernfunktionen am Rand eines Intervalls, stellt man fest, daß diese aufgrund der Asymmetrie der Stützstellenverteilung erheblich in Gestalt und Eigenschaften von denjenigen Kernfunktionen, welche sich innerhalb des Simulationsgebietes befinden, abweichen. Inwieweit dies Konsequenzen für die Randwerte besitzt, ist noch zu untersuchen. Ein Vergleich der Randwertbehandlung bei Methoden der Finiten Elemente scheint in diesem Fall aussichtsreich. Eine weitere Möglichkeit wäre die

Einführung von virtuellen Stützstellen. Das sind Stützstellen, welche man zusätzlich am Rand in einer begrenzten Schicht des Außengebietes plaziert. Dabei werden die Funktionen an diesen Stützstellen so angepaßt, daß die vorgegebenen Randwerte zu jedem Zeitschritt erfüllt sind. In diesem Fall sei auf die Arbeiten von Speith (1998) und Kuhnert (1999) verwiesen. Natürlich gibt es noch eine Reihe weiterer Ansätze, wie Randwerte angesetzt werden können, die jedoch im allgemeinen numerisch recht aufwendig erscheinen. Dazu gehören unter anderem die Einführung von Lagrangeschen Multiplikatoren (Belytschko et al. (1994)). Welche dieser Methoden schließlich zum Erfolg führt, ist Gegenstand weiterer Untersuchungen.

Eine interessante Weiterentwicklung betrifft das *Moving Least Square* Verfahren in Lagrangescher Formulierung. Die Herleitung der diskreten Darstellung einer Differentialgleichung wurde zunächst mit keinerlei Voraussetzungen, wie sich die Stützstellen über das Simulationsgebiet bewegen, verknüpft. Die Lagrangesche Bedingung, daß sich die Stützstellen mit der Strömung mitbewegen, führte schließlich auf Gleichungen sowohl für die Differentialgleichung als auch für die Stützstellen selber. Für die Simulation ist die Lagrangesche Bedingung jedoch nicht zwingend erforderlich. Es wäre durchaus vorstellbar, daß die Stützstellen anderen Bewegungsgleichungen genügen. Interessant wäre es zum Beispiel, den Ansatz von Dorfi, Drury (1987) weiterzuverfolgen, bei dem sich während des Ablaufes der Simulation die Stützstellen entsprechend dem Gradienten der Lösungsfunktion verteilen. Das bedeutet, daß an Stellen, an denen eine hohe räumliche Auflösung nötig ist, vorzugsweise an steilen Gradienten, sich die Stützstellen akkumulieren, und an Stellen, an denen eine niedrige räumliche Auflösung genügt, die Stützstellen einen größeren gegenseitigen Abstand einnehmen könnten. Obwohl erste Ansätze in dieser Richtung bereits unternommen wurden, steht eine numerische Implementierung noch aus.

Neben diesen technischen Weiterentwicklungen sei die konkrete Anwendung der vorgestellten *Moving Least Square* Verfahren auf physikalische Fragestellungen nicht vergessen. Obwohl in dieser Arbeit aus dem hydrodynamischen Anwendungsbereich nur wenige exemplarische Beispiele herausgegriffen worden sind, kann davon ausgegangen werden, daß diese Verfahren sich in weiteren Beispielen bewähren und eröffnen dadurch ein weites Feld theoretischer Untersuchen. Dabei sind die Verfahren natürlich nicht nur auf die hydrodynamischen Gleichungen beschränkt, sondern bieten Anwendungsmöglichkeiten in allen Bereichen der Physik.

Anhang A

Analytische Lösung des eindimensionalen Stoßrohres

Dieser Anhang befaßt sich mit einer kurzen Darstellung der analytischen Lösung des eindimensionalen Stoßrohres, welches immer wieder als Testbeispiel in den Simulationen Verwendung findet. Für eine ausführliche Darstellung sei beispielsweise auf Anderson (1990) verwiesen.

Wie die Abbildung der Dichteverteilung nach einer Simulationszeit $T > 0$ links zeigt, läßt sich das Stoßrohr prinzipiell in fünf Bereiche unterteilen. Das Ziel ist nun, aus den bekannten Größen in Bereichen I und V den Verlauf von Dichte, Geschwindigkeit, Druck und innerer Energie in den übrigen Bereichen zu bestimmen.

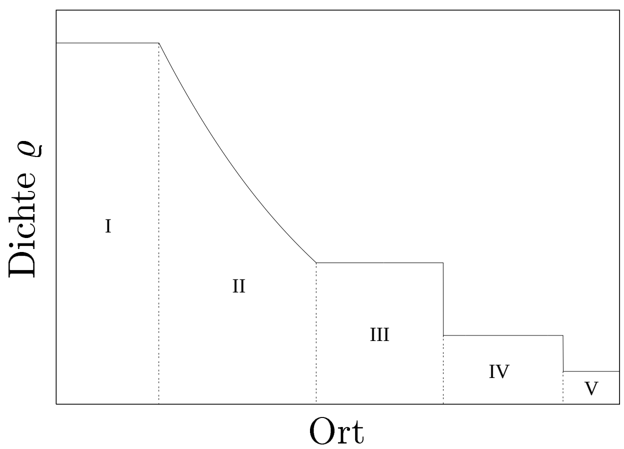


Abb. A.1: Dichteverteilung innerhalb eines Stoßrohres.

Gegeben seien also die Dichten ϱ_I und ϱ_V sowie die spezifischen inneren Energien e_I und e_V. Damit folgen auch die Drücke p_I und p_V aus der Zustandsgleichung. Die Geschwindigkeiten in den Gebieten I und V werden laut Anfangsbedingung auf null gesetzt.

Es gilt für den Druck p_{IV} nach der Stoßfront die Beziehung

$$\frac{p_I}{p_V} = \frac{p_{IV}}{p_V}\left\{1 - \frac{(\gamma-1)(c_V/c_I)(p_{IV}/p_V - 1)}{\sqrt{2\gamma[2\gamma + (\gamma+1)(p_{IV}/p_V - 1)]}}\right\} \quad . \tag{A.1}$$

Diese Gleichung kann nur numerisch nach der gesuchten Größe p_{IV} aufgelöst werden. c_I und c_V bezeichnen jeweils die Schallgeschwindigkeiten in den Gebieten I und V. Sie ergeben sich aus der Relation $c = \sqrt{\gamma\, p/\varrho}$ unter Verwendung der jeweiligen Dichten und Drücke.

Die spezifische innere Energie im Bereich IV folgt aus dem nun bekannten Druckverhältnis zu

$$\frac{e_{IV}}{e_V} = \frac{p_{IV}}{p_V}\left(\frac{\dfrac{\gamma+1}{\gamma-1} + \dfrac{p_{IV}}{p_V}}{1 + \dfrac{\gamma+1}{\gamma-1}\dfrac{p_{IV}}{p_V}}\right) \quad . \tag{A.2}$$

Eine entsprechende Relation, welche durch die Formel

$$\frac{\varrho_{IV}}{\varrho_V} = \frac{1 + \dfrac{\gamma+1}{\gamma-1}\dfrac{p_{IV}}{p_V}}{\dfrac{\gamma+1}{\gamma-1} + \dfrac{p_{IV}}{p_V}} \tag{A.3}$$

gegeben ist, liefert die Dichte im Gebiet IV.

Die Stoßfront breitet sich mit der Geschwindigkeit

$$V_s = c_V\sqrt{\frac{\gamma+1}{2\gamma}\left(\frac{p_{IV}}{p_V} - 1\right) + 1} \tag{A.4}$$

aus, und die Geschwindigkeit im Bereich IV folgt aus der Relation

$$v_{IV} = \frac{c_V}{\gamma}\left(\frac{p_{IV}}{p_V} - 1\right)\sqrt{\frac{\dfrac{2\gamma}{\gamma+1}}{\dfrac{p_{IV}}{p_V} + \dfrac{\gamma-1}{\gamma+1}}} \quad . \tag{A.5}$$

Damit sind die gesuchten Größen im Bereich IV alle bekannt.

Die Geschwindigkeit im Bereich III ist die gleiche wie im Bereich IV, bleibt also konstant über die Kontaktunstetigkeit. Die anderen gesuchten Größen folgen aus der Adiabatengleichung zu

$$\frac{p_{III}}{p_I} = \left(\frac{\varrho_{III}}{\varrho_I}\right)^{\gamma} = \left(\frac{e_{III}}{e_I}\right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \quad . \tag{A.6}$$

Es verbleibt also nur noch die gesuchten Größen im Bereich II, der Verdünnungswelle, zu ermitteln.

Die Geschwindigkeitsverteilung im Bereich II ergibt sich aus der Beziehung

$$v_{II} = \frac{2}{\gamma+1}\left(c_I + \frac{x}{t}\right) \quad . \tag{A.7}$$

Damit können die Dichte, der Druck und die innere Energie im Bereich II bestimmt werden zu

$$\frac{\varrho_{II}}{\varrho_I} = \left[1 - \frac{\gamma-1}{2}\frac{v_{II}}{c_I}\right]^{\frac{2}{\gamma-1}} \quad , \tag{A.8}$$

$$\frac{p_{II}}{p_I} = \left[1 - \frac{\gamma-1}{2}\frac{v_{II}}{c_I}\right]^{\frac{2\gamma}{\gamma-1}} \quad , \tag{A.9}$$

$$\frac{e_{II}}{e_I} = \left[1 - \frac{\gamma-1}{2}\frac{v_{II}}{c_I}\right]^{2} \quad . \tag{A.10}$$

Anhang B

Analytische Lösung der starr rotierenden Gasscheibe

In diesem Anhang betrachtet man eine dünne Gasscheibe, welche so dünn ist, daß ihre Vertikalausdehnung gegenüber den Horizontalausdehnungen vernachlässigbar ist. Damit kann man das zu lösende Gleichungssystem, welches im allgemeinen eine dreidimensionale Struktur besitzt, auf zwei Dimensionen beschränken.

Dementsprechend haben die hydrodynamischen Größen Dichte und Druck auch andere Bedeutungen. So wird beispielsweise anstatt der Feldgröße ϱ eine integrierte Größe verwendet, die nicht mehr von der z–Koordinate abhängt. Die Dichte interpretiert man folglich als Flächendichte, die Geschwindigkeitsterme in z-Richtung werden auf null gesetzt, also $v_z = 0$, und alle Ableitungen in z-Richtung verschwinden ebenfalls, speziell $\partial \boldsymbol{v}/\partial z = 0$. Ferner soll das ideale Gas der Scheibe einer isothermen Zustandsgleichung genügen. Unter diesen Voraussetzungen kann man eine analytische Lösung der zweidimensionalen idealen Gasgleichungen angeben, welche im folgenden vorgestellt wird.

Da die starr rotierende Scheibe rotationssymmetrisch ist, verwendet man zur Berechnung der analytischen Lösung Zylinderkoordinaten, eine Radialkoordinate r und eine Azimutalkoordinate φ. Die hydrodynamischen Gleichungen in diesen Koordinaten lauten (Landau, 1987)

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\varrho v_r) = 0 \tag{B.1}$$

$$\frac{\partial v_r}{\partial t} + v_r\frac{\partial v_r}{\partial r} - \frac{1}{r}v_\varphi^2 + \frac{1}{\varrho}\frac{\partial p}{\partial r} = 0 \tag{B.2}$$

$$\frac{\partial v_\varphi}{\partial t} + v_r\frac{\partial v_\varphi}{\partial r} + \frac{1}{r}v_r v_\varphi = 0 \tag{B.3}$$

mit der isothermen Zustandsgleichung

$$p = c_0^2\varrho \tag{B.4}$$

wobei $c_0 =$ konst. die isotherme Schallgeschwindigkeit ist.

Die starre Rotation erzwingt man durch den speziellen Ansatz

$$v_\varphi = \omega r f(t) \quad \text{mit} \quad \omega = \text{konst.} \quad . \tag{B.5}$$

Dabei ist die Funktion $f(t)$ eine noch zu bestimmende Funktion der Zeit t, die das Zerfließen der Scheibe beschreibt.

Dieser Ansatz wird nun in Gleichung (B.3) eingesetzt und nach v_r aufgelöst. Damit folgt

$$v_r = -\frac{1}{2}\,r\,\frac{\dot{f}}{f} \quad . \tag{B.6}$$

Die Geschwindigkeiten (B.5) und (B.6) werden zusammen mit der Zustandsgleichung (B.4) in Gleichung (B.2) eingesetzt und man gelangt zur Relation

$$c_0^2\frac{1}{\varrho}\frac{\partial \varrho}{\partial r} = r\,g(t) \quad \Longleftrightarrow \quad c_0^2\frac{\partial \ln\varrho}{\partial r} = r\,g(t) \tag{B.7}$$

mit

$$g(t) = \omega^2 f^2 - \frac{1}{4}\left(\frac{\dot{f}}{f}\right)^2 + \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\dot{f}}{f}\right) \quad . \tag{B.8}$$

Die Differentialgleichung (B.7) kann integriert werden zu

$$c_0^2\ln\varrho = A(t) + \frac{1}{2}r^2 g(t) \quad , \tag{B.9}$$

wobei $A(t)$ eine zeitabhängige Integrationskonstante ist.

Indem man die Kontinuitätsgleichung mit $1/\varrho$ durchmultipliziert, erhält man

$$\frac{\partial \ln \varrho}{\partial t} + v_r \frac{\partial \ln \varrho}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r v_r) = 0 \quad . \tag{B.10}$$

In diese Gleichung werden nun die radiale Geschwindigkeit (B.6) und die Dichte (B.9) eingesetzt, und es folgt die Relation

$$\dot{A} - c_0^2 \frac{\dot{f}}{f} = \frac{r^2}{2}\left(\frac{\dot{f}}{f} g - \dot{g}\right) \quad . \tag{B.11}$$

Diese Gleichung ist nur dann erfüllt, wenn beide Seiten für sich verschwinden, da diese Gleichung für beliebige Radien r erfüllt sein muß.

Damit erhält man

$$A(t) = c_0^2(\alpha + \ln f(t)) \tag{B.12}$$

$$g(t) = - c_0^2 \left(\frac{\omega}{c_0}\right)^2 \beta f(t) \tag{B.13}$$

mit α, β als Integrationskonstante.

Die Dichte ϱ hängt dann nur noch von der Funktion $f(t)$ ab und ist durch

$$\varrho = A_0 f(t) \exp\left(-\frac{\beta}{2}\left(\frac{\omega r}{c_0}\right)^2 f(t)\right) \tag{B.14}$$

gegeben.

Um die Konstante A_0 zu bestimmen, wird über das Volumen integriert und das Ergebnis als Gesamtmasse m interpretiert

$$m = 2\pi \int_0^\infty \varrho r \mathrm{d}r = \frac{2\pi}{\beta}\frac{c_0^2}{\omega^2} A_0 \quad . \tag{B.15}$$

Damit folgt

$$\varrho = \frac{m}{2\pi}\frac{\omega^2}{c_0^2}\beta f(t) \exp\left(-\frac{\beta}{2}\left(\frac{\omega r}{c_0}\right)^2 f(t)\right) \quad . \tag{B.16}$$

Es verbleibt nur noch, die Funktion $f(t)$ zu bestimmen. Dies geschieht mit Hilfe von Gleichung (B.13) und Gleichung (B.8), welche kombiniert zu dem Ausdruck

$$\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\dot{f}}{f}\right)-\frac{1}{4}\left(\frac{\dot{f}}{f}\right)^2+\omega^2 f^2+\omega^2\beta f=0 \tag{B.17}$$

führen. Diese Differentialgleichung kann durch Einführung einer neuen Variablen $\tau=\omega t$ vereinfacht werden zu

$$\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\tau}\left(\frac{1}{f}\frac{\partial f}{\partial\tau}\right)-\frac{1}{4}\frac{1}{f^2}\left(\frac{\partial f}{\partial\tau}\right)^2+f^2+\beta f=0 \quad . \tag{B.18}$$

Mit dem Ansatz

$$\frac{\partial f}{\partial\tau}=w(f) \quad\Rightarrow\quad \frac{\partial^2 f}{\partial\tau^2}=\frac{\partial w}{\partial f}\frac{\partial f}{\partial\tau}=w\frac{\partial w}{\partial f} \tag{B.19}$$

gelangt man zu der Differentialgleichung

$$\frac{1}{2f}w\frac{\partial w}{\partial f}-\frac{3}{4}\frac{w^2}{f^2}+f^2+\beta f=0 \quad . \tag{B.20}$$

Substituiert man $y=w^2$ folgt

$$\frac{1}{4}\frac{\partial y}{\partial f}-\frac{3}{4}\frac{y}{f^2}+f^2+\beta f=0 \quad , \tag{B.21}$$

und mit der weiteren Substitution

$$y=\zeta f^3 \quad\Rightarrow\quad \frac{\partial y}{\partial f}=f^3\frac{\partial\zeta}{\partial f}+3f^2\zeta \tag{B.22}$$

kommt man schließlich auf die Differentialgleichung

$$\frac{\partial\zeta}{\partial f}=-4-\frac{4\beta}{f} \quad . \tag{B.23}$$

Diese besitzt die Lösung

$$\zeta=4a-4f-4\beta\ln f \tag{B.24}$$

mit a als Integrationskonstanten.

Eine anschließende Rücksubstitution der verwendeten Variablen liefert

$$w = \frac{\partial f}{\partial \tau} = \frac{1}{\omega}\frac{\partial f}{\partial t} = \pm 2 f^{3/2}\sqrt{a - f - \beta \ln f} \quad . \tag{B.25}$$

Die Integrationskonstante a kann durch die Anfangsbedingungen bestimmt werden. Es wird angenommen, daß zur Zeit $t = 0$ die Radialgeschwindigkeit verschwindet, also $v_r(0) = 0$, und die Azimutalgeschwindigkeit einer starren Rotation entspricht, also $v_\varphi(0) = \omega r$. Daraus folgt unmittelbar $f(0) = 1$ (Gleichung (B.5)) und $\dot{f}(0) = 0$ (Gleichung (B.6)). Damit ergibt sich aus Gleichung (B.25) schließlich $a = 1$. Für die Anfangsdichteverteilung gilt demnach

$$\varrho(0) = \frac{m}{2\pi}\frac{\omega^2}{c_0^2}\beta \exp\left(-\frac{\beta}{2}\frac{\omega^2}{c_0^2}\, r^2\right) \quad . \tag{B.26}$$

Um das Vorzeichen der Differentialgleichung (B.25) bestimmen zu können, wird die Taylorentwicklung von f um $t = 0$ betrachtet:

$$\begin{aligned} f(t) &= f(0) + \dot{f}(0)t + \frac{1}{2}\ddot{f}(0)t^2 + \frac{1}{3}\dddot{f}(0)t^3 + \mathcal{O}(t^4) \\ &= 1 - (1+\beta)\omega^2 t^2 + \mathcal{O}(t^4) \quad . \end{aligned} \tag{B.27}$$

Daran sieht man nun, daß die Ableitung stets negativ ist und somit anstelle von Gleichung (B.25) die Gleichung

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -2\omega f^{3/2}\sqrt{1 - f - \beta \ln f} \tag{B.28}$$

tritt.

Die Funktion f ist numerisch problemlos berechenbar. Jedoch kann man noch einige Eigenschaften festhalten:

- f ist streng monoton fallend.
- Es gilt $0 \leq f \leq 1$ wegen der Anfangsbedingungen.
- Für $t \to \infty$ gilt $f \to 0$ und die Ableitung verschwindet ebenfalls.

Anhang C

Verzeichnis der verwendeten Symbole

a	Index
	Hilfsgröße
	Geschwindigkeitsfeld
$\boldsymbol{a}$	Vektor
a_i	Komponente des Vektors $\boldsymbol{a}$
	Koeffizienten des Geschwindigkeitsfeldes a
a_μ	Entwicklungskoeffizient
$\boldsymbol{b}$	Basisfunktionenvektor
b_i	Basisfunktion
c	Konstante
c_p	spezifische Wärme bei konstantem Druck
c_V	spezifische Wärme bei konstantem Volumen
c_0	Schallgeschwindigkeit
$c_I, c_{II}, c_{III}, c_{IV}, c_V$	Werte der Schallgeschwindigkeit
d_i	Restglied
$\mathrm{d}o$	Oberflächenelement
$\mathrm{d}V$	Volumenelement
e	spezifische innere Energie
$e_I, e_{II}, e_{III}, e_{IV}, e_V$	Werte der spezifischen inneren Energie
f	beliebige skalare Funktion (i.a. stetig differenzierbar)

f'	Ableitung der Funktion f nach x
$\dot{f}$	Ableitung der Funktion f nach der Zeit
f_i	Entwicklungskoeffizienten
h	Radius der Gewichtsfunktion bzw. Kernfunktion
k_B	Boltzmann–Konstante
l	Längenskala
m_i	Masse einer Stützstelle
m_u	atomare Masseneinheit
$\boldsymbol{n}$	Normalenvektor
o	Oberfläche
p	Druck
	Polynom
p_i	Druckwert an der Stützstelle $\boldsymbol{x}_i$
p_α	Druckanteil der künstliche Volumenviskosität
p_β	Druckanteil der von Neumann–Richtmyer–Viskosität
$p_I, p_{II}, p_{III}, p_{IV}, p_V$	Druckwerte
$\boldsymbol{q}$	Wärmeflußvektor
	Quellterm
r	Radius, Abstand
	Fehlerverteilung
	Radialkoordinate
t	Zeitkoordinate
u	beliebige skalare Funktion
u^g	globale Approximation der Funktion u
u^l	lokale Approximation der Funktion u
u_i	Entwicklungskoeffizient
$\boldsymbol{v}$	Geschwindigkeitsvektor
$\boldsymbol{v}_i$	Geschwindigkeitswert an der Stützstelle $\boldsymbol{x}_i$
v_i	Komponente des Geschwindigkeitsvektors
v_r	Radialgeschwindigkeit
v_ϕ	Azimutalgeschwindigkeit
v_z	z–Koordinate der Geschwindigkeit
$v_I, v_{II}, v_{III}, v_{IV}, v_V$	Geschwindigkeitswerte
w	Hilfsgröße
$\boldsymbol{x}$	Raumvektor
$\boldsymbol{x}_i$	Stützstelle
x	Basisfunktion
	Raumkoordinate
x_i	Komponente des Raumvektors

	Stützstelle
y	Basisfunktion
	Raumkoordninate
	Hilfsgröße
y_i	Meßwert
z	Raumkoordinate
$\mathbf{A}$	Matrix
$A_{\mu\nu}$	Koeffizienten der Matrix $\mathbf{A}$
C^m	Menge der m–mal stetig differenzierbaren Funktionen
$\boldsymbol{D}_{ij}$	Integral über Kernfunktion multipliziert mit Ableitung
E	Gesamtenergie
$\boldsymbol{F}$	Flußfunktion
$\boldsymbol{J}$	Massefluß
K	Anzahl der Stützstellen im Träger einer Gewichtsfunktion.
K_R	offene Kugel mit Radius R
M	Ordnung des Verfahrens
	Gesamtmasse
N	Anzahl der Stützstellen
R	Gaskonstante
T	Temperatur
	bestimmter Zeitpunkt
	als Index: Transponierte Matrix
U	Simulationsgebiet
V	Volumen
V_i	Volumen der Stützstelle $\boldsymbol{x}_i$
V_s	Geschwindigkeit der Stoßfront
W	Gewichtsfunktion
$\widetilde{W}$	stetig differenzierbare Gewichtsfunktion
$\mathcal{O}$	von der Ordnung
$\mathcal{Q}$	Funktional
α	Stärke der Singularität der Gewichtsfunktion
	Koeffizient der künstlichen Volumenviskosität
	Index
	Hilfsgröße
β	Koeffizient der von Neumann–Richtmyer–Viskosität
	freier Parameter

	Hilfsgröße
γ	Adiabatenindex
δ_{ij}	Kronecker-Symbol
Δx	Gitterweite
$\boldsymbol{\varepsilon}$	Vektor, dessen Betrag klein ist
ε	innere Energie
	kleine Zahl
ε_i	Wert der inneren Energie an der Stützstelle $\boldsymbol{x}_i$
ζ	Volumenviskosität
	Hilfsgröße
η	Scherviskosität
θ	Winkel
Θ	Matrix
Θ_{ij}	Koeffizienten der Matrix Θ
μ	mittleres Molekulargewicht
$\boldsymbol{\xi}$	Raumvektor
π	Pi
ϱ	Dichte
ϱ_i	Dichtewert an der Stützstelle $\boldsymbol{x}_i$
ϱ_0	Anfangsverteilung
$\varrho_I, \varrho_{II}, \varrho_{III}, \varrho_{IV}, \varrho_V$	Dichtewerte
$\boldsymbol{\sigma}$	viskoser Spannungstensor
σ	skalare Funktion
σ_{ij}	Komponenten des Spannungstensors
τ	Hilfsgröße
ϕ_i	Kernfunktion zur Stützstelle $\boldsymbol{x}_i$
ϕ_i'	Ableitung der Kernfunktion nach x
φ	Testfunktion
	skalare Funktion
	Azimutalkoordinate
Ω	Gebiet
$\overline{\Omega}$	kompaktes Gebiet
ω	Winkelgeschwindigkeit
d	gewöhnliches Differenzial
div	Diveregenz
∂	partielles Differenzial
∂V	Oberfläche des Volumens V
∇	Gradient

lim	Limes
exp	Exponentialfunktion
tanh	tangens hyperbolicus
$. \cdot ., < .,. >$	Skalarprodukt
$\otimes$	Tensorprodukt
$\|.\|$	Norm, Betrag
$\int$	Integral
$\oint$	Oberflächenintegral
$\sum$	Summenzeichen
$\subset$	Teilmenge
$\in$	Element von
$\forall$	für alle
$\mathbb{R}^n$	n-dimensionaler Raum der reelen Zahlen
∞	unendlich

Abbildungsverzeichnis

Literaturverzeichnis

[1] J.D. Anderson, Modern Compressible Flow: With Historical Perspective, McGraw–Hill, 1990.

[2] D.S. Balsara, von Neumann Stability Analysis of Smoothed Particle Hydrodynamics – Suggestion of Optimal Algorithms, Journal of Computational Physics, **121**, 357, 1995.

[3] T. Belytschko, Y. Krongauz, D. Organ, M. Fleming, P. Krysl, Meshless Methods: An Overview and Recent Developments, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, **139**, 3, 1996.

[4] T. Belytschko, Y.Y. Lu, L. Gu, Element–Free Galerkin Methods, International Journal for Numerical Methods in Engineering, **37**, 229, 1994.

[5] A.J. Chorin, J.E. Marsden, A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics, Springer–Verlag New York, 1990.

[6] P. Colella, P.R. Woodward, The Piecewise Parabolic Method (PPM) for Gas–Dynamical Simulations, Journal of Computational Physics, **54**, 174, 1984.

[7] E.A. Dorfi, L. O'C. Drury, Simple Adaptive Grids for 1D Initial Value Problems, Journal of Computational Physics, **69**, 175, 1987.

[8] J.H. Ferziger, Numerical Methods for Engineering Application, John Wiley & Sons, Inc., 1981.

[9] H. Fischer, H. Kaul, Mathematik für Physiker, Teubner, 1990.

[10] O. Flebbe, Smoothed Particle Hydrodynamics: Modellierung von Superhump–Lichtkurven. Dissertation, Eberhard–Karls–Universität Tübingen, 1994.

[11] M. Fleming, Y.A. Chu, B. Moran, T. Belytschko, Enriched Element–Free Galerkin Methods for crack tip fields, International Journal for Numerical Methods in Engineering, **40**, 1483, 1997.

[12] C.A.J. Fletcher, K. Srinivas, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, **46**, 313, 1984.

[13] J. Fürst, T. Sonar, On Meshless Collocation Approximations of Conservation Laws: Preliminary Investigations on Positive Schemes and Dissipation Models, Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik, **81**, 403, 2001.

[14] R.A. Gingold, J.J. Monaghhan, Smoothed Particle Hydrodynamics: Theory and Application to Non-Spherical Stars, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, **181**, 375, 1977.

[15] S.K. Godunov, A Difference Scheme for Numerical Computation of Discontinuous Solution of Hydrodynamic Equations, Matematicheskii Sbornik, 47, 271, 1959.

[16] W.J. Gordon, J.A. Wixom, Shepard's Method of "Metric Interpolation" to Bivariate and Multivariate Interpolation, Mathematics of Computation, **32**, 253, 1978.

[17] C. Hirsch, Numerical Computation of Internal and External Flows, Volume 1: Fundamentals of Numerical Discretization, John Wiley & Sons Ltd., 1988.

[18] R.W. Hockney, J.W. Eastwood, Computer Simulation Using Particles, Adam Hilger, Bristol, 1989.

[19] J. Kuhnert, General Smoothed Particle Hydrodynamics, Dissertation, Universität Kaiserslautern, 1999.

[20] P. Laguna, W.A. Miller, W.H. Zurek, Smoothed Particle Hydrodynamics Near a Black Hole, The Astrophysical Journal, **404**, 678, 1993.

[21] P. Lancaster, K. Salkauskas, Surfaces Generated by Moving Least Squares Method, Mathematics of Computation, **37**, 141, 1981.

[22] P. Lancaster, K. Šalkauskas, Curve and Surface Fitting: An Introduction, Academic Press Inc. LTD, London 1986.

[23] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, Course of Theoretical Physics, Volume 6: Fluid Dynamics, Pergamon Press Ltd., 1987.

[24] B. van Leer, Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. IV. A New Approach to Numerical Convection, Journal of Computational Physics, **23**, 276, 1977.

[25] R. Di Lisio, E. Grenier, M. Pulvirenti, The Convergence oft the SPH Method, Computers & Mathematics with Applications, **35**, 95, 1998.

[26] S.H. Lubow, Dynamics of Eccentric Disks with Application to Superhump Binaries, The Astrophysical Journal, **401**, 317, 1992.

[27] L.B. Lucy, A Numerical Approach to the Testing of the Fission Hypothesis, The Astronomical Journal, **82**, 1013, 1977.

[28] J.P.A. Morris. A Study of the Stability Properties of SPH, Applied Mathematics Reports and Preprints 94/22, Monsh University, Department of Mathematics, 1994.

[29] S. Pfalzner, P. Gibbon, Many–Body Tree Methods in Physics, Cambridge University Press, 1996.

[30] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, Numerical Recipes in C, Cambridge University Press, 1992.

[31] D. Shepard, A Two-Dimensional Interpolation Function for Irregularly–Spaced Data, Proceedings 1968 ACM National Conference, 517, 1968.

[32] S.N. Shore, An Introduction to Astrophysical Hydrodynamics, Academic Press, Inc., 1992.

[33] S. Siegler, Entwicklung und Untersuchung eines Smoothed–Particle–Hydrodynamics–Verfahrens für relativistische Strömungen, Dissertation, Eberhard–Karls–Universität Tübingen, 2000.

[34] R. Speith, Untersuchung von Smoothed Particle Hydrodynamics anhand astrophysikalischer Beispiele, Dissertation, Eberhard–Karls–Universität Tübingen, 1998.

[35] J.W. Sweagle, D.L. Hicks, S.W. Attaway, Smoothed Particle Hydrodynamics Stability Analysis, Journal of Computational Physics, **116**, 123, 1995.

[36] H. Yserentant, Stability and Convergence of a Particle Method, Bericht Nr. 2, SFB 382, Universität Tübingen, 1994.

[37] H. Yserentant, A Particle Model of Compressible Fluids, Numerische Mathematik, **76**, 111, 1997.

Danksagung

An dieser Stelle bedanke ich mich bei allen, die wesentlichen Anteil zum Gelingen der vorliegenden Dissertation beigetragen haben. Besonderen Dank gilt meinem Betreuer Priv.–Doz. Dr. Harald Riffert, mit dem ich jederzeit über auftretende Probleme diskutieren konnte.

Desweiteren schulde ich Prof. Dr. Hanns Ruder Dank, der mich bei der Anfertigung dieser Arbeit stets großzügig unterstützt hat.

Allen Institutsmitgliedern danke ich für die angenehme Arbeitsatmosphäre. Insbesondere danke ich Dr. Ute Kraus und Dr. Roland Speith für das Korrekturlesen, sowie für die zahlreichen kritischen und hilfreichen Anmerkungen.

Bedanken möchte ich mich auch bei meiner Frau Dr. Qiong Wang für die große Geduld, die sie meiner Arbeit entgegengebracht hat.

Zum Schluß danke ich noch meinen Eltern für ihre vielfältige Unterstützung, auf die ich mich immer verlassen konnte.

Lebenslauf

Matthias Kunle

Geboren am 20. August 1970 in Bad Urach

Schulen

1977 - 1981	Uhlandschule Dettingen/Erms
1981 - 1990	Graf–Eberhard–Gymnasium Bad Urach
Mai 1990	Abitur

Studium

Okt. 1990 - Sept. 1997	Studium der Physik an der Universität Tübingen
Jan. 1993	Diplom–Vorprüfung
Aug. 1994 - Juli 1995	Auslandsjahr an der University of Arizona, Tucson
Sept. 1997	Diplom
Jan. 1998 - Juli 2001	Anfertigung der vorliegenden Dissertation „Entwicklung und Untersuchung von *Moving Least Square* Verfahren zur numerischen Simulation hydrodynamischer Gleichungen" am Institut für Astronomie und Astrophysik der Eberhard–Karls–Universität Tübingen Betreuer: Priv.–Doz. Dr. H. Riffert

Tätigkeiten

Okt. 1993 - Juli 1994	Wissenschaftliche Hilfskraft am Mathematischen Institut der Universität Tübingen
Okt. 1996 - Juli 1997	Wissenschaftliche Hilfskraft am Institut für Astronomie und Astrophysik der Universität Tübingen
seit Oktober 1997	Wissenschaftlicher Angestellter an der Universität Tübingen (SFB 382)

Akademische Lehrer

In Tübingen: M. Baumann, H. Clement, H.-D. Ebert, K.-H. Gaukler, W.-D. Hartmann, A. Fäßler, H. Herold, C. Jönsson, E. Kasper, H. Kaul, W. Kley, U. Kraus, H. Lichte, F. Lenz, H. Mauder, G. Mertens, H. Müther, W. Nakel, H.-P. Nollert, H. Ruder, H. Riffert, A. Schwenk, R. Staubert, G. Staudt, J. Strähle, K. Werner, H.-W. Wittern, M. Wolff, A. Wörz
In Tucson: A. Burrows, J. Cocke, L.-Z. Fang, H. Fasel, M. Tabor