



OTTO-VON-GUERICKE-UNIVERSITÄT MAGDEBURG

FAKULTÄT FÜR MATHEMATIK

INSTITUT FÜR ANALYSIS UND NUMERIK

Diplomarbeit

Stabilisierte Finite-Elemente-Methoden für Konvektions-Diffusions-Gleichungen im dreidimensionalen Fall

eingereicht von: Daniel Quoos
Wirtschaftsmathematik 95
betreut durch: Prof. Dr. Lutz Tobiska
Dr. Volker John

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Problemklasse und Diskretisierung	5
2.1	Skalare Konvektions-Diffusions-Gleichungen	5
2.2	Diskretisierung	6
2.2.1	Schwache Formulierung	6
2.2.2	Standard-Galerkin-Diskretisierung	8
2.2.3	Stromlinien-Diffusion FEM (SDFEM)	10
2.2.4	Upwind-Diskretisierung	13
3	Methode der Finiten Elemente im Dreidimensionalen	17
3.1	Assemblierung des Gleichungssystems	17
3.2	Berechnung der lokalen Integrale	18
3.3	Transformation von Ableitungen	19
3.3.1	Triangulierung mittels Tetraeder	20
3.3.2	Triangulierung mittels Parallelepiped	21
3.3.3	Triangulierung mittels Hexaeder	23
4	Implementierung in MooNMD	25
4.1	Referenztransformationen	25
4.2	Upwind-Verfahren	28
5	Numerische Tests	31

5.1	Vorbetrachtungen	31
5.2	Parameter der Testrechnungen	34
5.3	Die Poisson-Gleichung	34
5.3.1	Problemstellung	34
5.3.2	Auswertung der Testrechnungen	35
5.4	Three-Boundary-Layer Problem	36
5.4.1	Problemstellung	36
5.4.2	Auswertung der Testrechnungen	39
5.5	Ein praktisches Beispiel	44
6	Abschließende Bemerkungen	51
7	Notation	53
8	Literaturverzeichnis	55
	Ehrenwörtliche Erklärung	57

1 Einleitung

Mit der enorme Entwicklung in der numerischen Mathematik, sowie im Bereich der Prozessoren und Computer, in den letzten Jahren spielt die praktische Unterstützung der Industrie durch die Mathematik eine immer größere Rolle. Bei der Entwicklung neuer effizienterer Prozesse und Verfahren, z.B. in der pharmazeutischen Industrie, können Simulationen einen erheblichen Teil zur korrekten Arbeitsweise und Optimierung der Systeme beitragen. Nunmehr sind Ziele und Kapazitäten gegeben, die es notwendig machen, die Finite-Elemente-Methode und deren Umsetzung im Programmpaket `moonMD` der Universität Magdeburg auf den dreidimensionalen Fall auszuweiten. Aufbauend auf den Grundlagen der Arbeitsgruppe von Prof. Tobiska am Institut für Analysis und Numerik der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg befaßt sich diese Arbeit mit einem Teil der Implementierungen für die Finite-Elemente-Methode im Dreidimensionalen - genauer der Referenztransformationen bei Verwendung einer Diskretisierung mittels Tetraedern, kantenparallelen und beliebigen Hexaedern, sowie der Upwind-Stabilisierung.

In der vorliegenden Arbeit wird die numerische Lösung von Gleichungen des Konvektions-Diffusions-Typs, welche bei vielen physikalischen Problemen auftreten, behandelt. Da die Lösung solcher Differentialgleichungen auf dem analytischen Weg im allgemeinen Fall sehr aufwendig und unter Umständen sogar unmöglich ist, wird die Verwendung von numerischen Verfahren unumgänglich. Ein weit verbreiteter Ansatz ist die Methode der Finiten Elemente. Die ausführlichen theoretischen Betrachtungen zur Diskretisierung des Ausgangsproblems und zur Erzeugung des endlichdimensionalen Problems (Steifigkeitsmatrix und diskrete rechte Seite) bilden die Grundlage der praktischen Umsetzung.

Nach diesen einleitenden Worten baut sich die Arbeit in der folgenden Struktur auf. Das zweite Kapitel befaßt sich genauer mit der Klasse der Konvektions-Diffusions-Probleme. Es wird näher auf den Aufbau und die Besonderheiten eines solchen Gleichungstyps eingegangen und einige Bedingungen an die Koeffizienten erläutert. Ausgehend von der schwachen Formulierung dieses Problems wird die Standard-Galerkin-Diskretisierung hergeleitet. Da bei dominanter Konvektion die Finite-Elemente-Methode Instabilitäten aufweist, wird im Anschluß

auf zwei weitere Diskretisierungen eingegangen. Ein erstes Verfahren zur Verbesserung dieser Probleme ist die Stromlinien-Diffusions-Methode, kurz: SDFEM, welche im Verlauf des Kapitels hergeleitet wird. Dieses Herangehen liefert gute globale Stabilitätseigenschaften, verbunden mit einer hohen Genauigkeit. Bei der Herleitung der Upwind-Diskretisierung wird deshalb der Diskretisierung des konvektiven Terms eine gesonderte Betrachtung zu Teil kommen, um so große Oszillationen in Grenzschichten der berechneten Lösung zu unterbinden. Für alle drei Diskretisierungen werden im Verlauf des Kapitels Konvergenzaussagen für den verwendeten Gleichungstyp getroffen.

Vor dem Hintergrund der Implementierung der Referenztransformationen bei Hexaedern und Tetraedern, wird im dritten Kapitel die Finite-Elemente-Methode im Dreidimensionalen besprochen. Es wird speziell auf die Erzeugung des aus der Diskretisierung entstehenden Gleichungssystems eingegangen. Die hieraus hergeleiteten Daten der Referenztransformation für die angesprochenen drei Fälle bilden die Grundlage der Implementierung in das Programmpaket `MOONMD`.

Die Programmierung der Referenztransformationen und des Upwind-Verfahrens bildet die Basis des Kapitels vier. Es werden die zur Umsetzung notwendigen Variablen und Objektklassen beschrieben. An einem einfachen Beispiel wird der Zusammenhang zwischen der Theorie des dritten Kapitels und der Implementierung aufgezeigt.

Im fünften Kapitel sind die numerischen Tests zusammengefaßt. Dieser Abschnitt wird eingeleitet mit der Definition der verwendeten (konformen und nichtkonformen) Finite-Elemente-Räume und fortgesetzt mit Aussagen zur Gittergenerierung, Bemerkungen zur Komplexität der entstehenden Systeme, einer Einführung der verwendeten Normen, sowie den Parametern der Testrechnungen. Für die Rechnungen wurden zuerst zwei akademische Testbeispiele betrachtet. Da die exakten Lösungen bekannt sind, können die auftretenden Fehler bestimmt und mit der Theorie abgeglichen werden. Anhand dieser Beispiele wird ebenfalls der Stabilisierungseffekt der Upwind-Diskretisierung verdeutlicht.

Den Abschluß dieser Arbeit bildet ein Beispiel aus der Praxis. Anhand der numerischen Berechnungen zu einem Spezialfall chromatographischer Prozesse werden die theoretischen Überlegungen nochmals untermauert, sowie auf weitere Besonderheiten hingewiesen.

2 Problemklasse und Diskretisierung

2.1 Skalare Konvektions-Diffusions-Gleichungen

Skalare Konvektions-Diffusions-Gleichungen beschreiben den Transport einer skalaren Größe. Gleichungen dieser Form treten oft in der Strömungsmechanik auf. Beispiele dafür sind:

- die Berechnung der Temperatur in einer Strömung
- die Gleichungen der Konzentration von Pollutanten in Fluiden
- die Momentengleichung in den Navier-Stokes-Gleichungen

Man unterscheidet dabei zwei Arten des Transportes, den diffusiven und den konvektiven. Der diffusive Transport beschreibt die eigenständige Vermischung von Flüssigkeiten und Gasen auf Basis der Brown'schen Bewegung und wird mit Hilfe der zweiten Ableitungen (Laplace-Operator) beschrieben. Der konvektive Transport entspricht dem Transport aufgrund bewegter Materie und wird durch die ersten Ableitungen (Gradient) definiert. Dominiert der konvektive Transport, so entstehen im allgemeinen Grenzschichten, d.h. Bereiche, in denen sich die Lösung extrem schnell mit kleiner werdendem Parameter ν ändert. Standardformulierungen von diskreten Formulierungen erweisen sich als instabil. Dieses sind Effekte, die auch bei Navier-Stokes-Gleichungen auftreten. Nach Meinung von Großmann und Roos [GR94] wurde die Untersuchung von Navier-Stokes-Gleichungen mit großen Reynoldszahlen in den ersten Arbeiten zur Numerik singular gestörter Differentialgleichungen auch stets als Anlaß genannt, Probleme der Form (2.1) im Fall $\nu \ll 1$ zu untersuchen. Grundlage für diese Argumentation: Die analytische Untersuchung und die numerische Lösung von Konvektions-Diffusions-Gleichungen ist oft wesentlich einfacher als die der Navier-Stokes-Gleichungen – es ist jedoch möglich, eine Reihe von analytischen als auch numerischen Methoden für Konvektions-Diffusions-Gleichungen auf die Navier-Stokes-Gleichungen zu übertragen.

In dieser Arbeit betrachten wir Konvektions-Diffusions-Gleichungen der Gestalt

$$\begin{aligned} -\nu\Delta u + b \cdot \nabla u + cu &= f && \text{in } \Omega \\ u &= g && \text{auf } \partial\Omega \end{aligned} \tag{2.1}$$

Hierbei ist $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ ein beschränktes Gebiet mit Lipschitz-Rand $\partial\Omega$. Die Funktion $\nu \in L^\infty(\Omega)$ ist beschränkt und positiv

$$\nu(x) \geq \nu_0 > 0 \quad \forall x \in \Omega.$$

Für die anderen Koeffizienten von (2.1) treffen wir folgende Voraussetzungen:

$$b \in (C^1(\bar{\Omega}))^d, c \in L^\infty(\Omega), f \in H^{-1}(\Omega), g \in H^{1/2}(\partial\Omega).$$

Der erste Summand der ersten Gleichung in (2.1) wird Diffusionsterm genannt, der zweite Konvektionsterm und der dritte Reaktionsterm. Ist

$$|\nu| \ll \|b(x)\|_\infty := \max_i \left\{ \max_{x \in \Omega} |b_i(x)| \right\},$$

so spricht man von singular gestörten Problemen, da die Lösung $u(\cdot, \nu)$ des Problems (2.1) für $\nu \rightarrow 0$ im allgemeinen nicht überall gegen die Lösung konvergiert, die man erhält, wenn im Ausgangsproblem $\nu \equiv 0$ gesetzt wird.

Ist $b \equiv 0$ und $c \equiv 0$, so ergibt sich der Spezialfall der Poisson-Gleichung. Nähere Angaben zu diesem Gleichungstyp werden im Kapitel zu den numerischen Tests gemacht.

2.2 Diskretisierung

Die Besonderheiten bei der Diskretisierung von Konvektions-Diffusions-Gleichungen rühren daher, daß der stabilisierende Term $-\nu\Delta u$ der Diskretisierung für $\nu \rightarrow 0$ immer mehr an Einfluß verliert. Zudem stellt die ν -Abhängigkeit der exakten Lösung weitere Probleme, da der Konsistenzfehler bei Standard-Differenzenverfahren und der Approximationsfehler bei Standard-Finite-Elementen für $\nu \rightarrow 0$ bei fester (beliebig kleiner) Schrittweite unbeschränkt wächst.

2.2.1 Schwache Formulierung

Wir multiplizieren die erste Gleichung des Problems (2.1) mit

$$v \in V := H_0^1(\Omega) = \left\{ v \in L^2(\Omega) : \nabla v \in L^2(\Omega), v \equiv 0 \text{ auf } \partial\Omega \right\}$$

und integrieren über Ω .

$$\int_{\Omega} (-\nu \Delta u + b \cdot \nabla u + cu)v \, dx = \int_{\Omega} fv \, dx$$

Nach partieller Integration ergibt sich unter Nutzung der Greenschen Formel

$$\int_{\Omega} \nu \nabla u \cdot \nabla v \, dx - \int_{\partial\Omega} \nu \frac{\partial u}{\partial n} v \, ds + \int_{\Omega} (b \cdot \nabla u + cu)v \, dx = \int_{\Omega} fv \, dx,$$

so daß das zugehörige Variationsproblem durch

Finde $u \in V + g$ mit $\int_{\Omega} \nu \nabla u \cdot \nabla v \, dx + \int_{\Omega} (b \cdot \nabla u + cu)v \, dx = \int_{\Omega} fv \, dx \quad \forall v \in V$ $u = g \quad \text{auf } \partial\Omega$	(2.2)
---	-------

gegeben ist. Das Problem (2.2) läßt sich dann als schwache Formulierung mit konvektiver Form des Konvektionstermes schreiben:

Finde $u \in V + g$ mit $a(u, v) + b(u, v) + c(u, v) = (f, v) \quad \forall v \in V$ $u = g \quad \text{auf } \partial\Omega.$	(2.3)
---	-------

Hierbei bezeichnet (\cdot, \cdot) das Skalarprodukt in $L^2(\Omega)$, gegeben durch

$$(u, v) = \int_{\Omega} uv \, dx.$$

Die Bilinearformen sind als

$$a(u, v) = (\nu \nabla u, \nabla v), \quad b(u, v) = (b \cdot \nabla u, v), \quad c(u, v) = (cu, v)$$

definiert.

Großmann und Roos [GR94] beweisen unter der Voraussetzung $v \in H_0^1(\Omega)$ den

Satz 2.1 *Es sei $u \in H^1(\Omega)$, $u|_{\partial\Omega} = g$ eine Lösung der Variationsgleichung (2.2) und es gelte $u \in C^2(\bar{\Omega})$. Dann löst u auch das Randwertproblem (2.1).*

Auf Grundlage von Satz 2.1 bezeichnet man Randbedingungen von Dirichlet-Art als sogenannte *wesentliche Bedingungen*. Die Erfüllung der Randbedingungen leitet sich direkt aus der Formulierung der Variationsgleichung (2.2) ab, so daß die Einhaltung dieser Randbedingungen nicht zusätzlich im Ansatz gefordert werden muß, sondern durch den Übergang vom Randwert- zum Variationsproblem automatisch gesichert ist. Andere Randbedingungen, wie z.B. Neumann-Randbedingungen, die als *natürliche Randbedingungen* bei der Variationsformulierung „abfallen“, gehen nicht explizit in die Formulierung ein und werden nur approximativ erfüllt (vgl. Hackbusch, §7 [Hac86]).

2.2.2 Standard-Galerkin-Diskretisierung

Bei der Standard-Galerkin-Diskretisierung ersetzt man in der schwachen Formulierung (2.3) den Raum V durch einen endlichdimensionalen Raum V_h .

<p>Finde $u_h \in V_h + g_h$ mit</p> $a(u_h, v_h) + b(u_h, v_h) + c(u_h, v_h) = (f, v_h) \quad \forall v_h \in V_h$ $u_h = g \quad \text{auf } \partial\Omega.$	(2.4)
--	-------

Bemerkung: Zu denkbaren Räumen V_h , speziell für die FEM im Dreidimensionalen, wird in der Einführung zum Kapitel über die numerischen Tests genauer Stellung genommen.

Wir wählen eine Basis $\{v_h^i\}_{i=1\dots N}$ in V_h , wobei N die Dimension des Raumes V_h ist. Da $u_h \in V_h$ gilt, gibt es eine Darstellung der Form

$$u_h = \sum_{j=1}^N u_j v_h^j. \quad (2.5)$$

Die Gleichung (2.4) ist genau dann für alle $v_h \in V_h$ erfüllt, wenn sie für alle Basisfunktionen gilt. Aufgrund der Integraleigenschaften (Bilinearform) erhält man mit Darstellung (2.5) von u_h für jede Basisfunktion v_h^i die Gleichung

$$\sum_{j=1}^N u_j \int_{\Omega} \nu \nabla v_h^j \cdot \nabla v_h^i + (b \cdot \nabla v_h^j + c v_h^j) v_h^i \, dx = \int_{\Omega} f v_h^i \, dx. \quad (2.6)$$

Unter Berücksichtigung der Dirichlet-Randbedingung in (2.1) liefert diese Beziehung die i -te Gleichung eines Gleichungssystems

$$\begin{pmatrix} A \\ \mathbf{1}_N \end{pmatrix} u = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

mit

$$A = ((a_{ij})), a_{ij} = \int_{\Omega} \nu \nabla v_h^j \cdot \nabla v_h^i + (b \cdot \nabla v_h^j + c v_h^j) v_h^i dx$$

$$\mathbf{1}_N = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}^T, u = \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix}, f = \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_N \end{pmatrix} \text{ mit } f_i = \int_{\Omega} f v_h^i dx.$$

Die Lösung des Systems (2.7) ergibt die Koeffizienten der Linearkombination (2.5) und damit die diskrete Lösung u_h .

Sei mit γ die Konstante der Ungleichung $a(u, u) \geq \gamma \|u\|_V^2$ aus der Eigenschaft der V -Elliptizität und M über die Beziehung $|a(u, v)| \leq M \|u\|_V \|v\|_V$ definiert. Als Aussage zur Konvergenz des Galerkin-Verfahrens im Spezialfall der Poisson-Gleichung, bei $b = (0, 0, 0)^T$ und $c = 0$, gilt der auch häufig in der Literatur als Lemma von Cea bezeichnete

Satz 2.2 *Es sei $a(.,.)$ eine stetige, V -elliptische Bilinearform. Dann sind für jedes $f \in V^*$ die Aufgaben (2.3) bzw. (2.4) eindeutig lösbar. Für die zugehörigen Lösungen $u \in V$ bzw. $u_h \in V_h$ gilt die Abschätzung*

$$\|u - u_h\|_V \leq \frac{M}{\gamma} \inf_{v_h \in V_h} \|u - v_h\|_V. \quad (2.8)$$

Werden die Teilräume $V_h \subset V$ so gewählt, daß sie asymptotisch dicht in V liegen, d.h. jedes Element $z \in V$ läßt sich beliebig gut durch Elemente $v \in V_h$ für hinreichendes kleines $h > 0$ approximieren, so spricht man, basierend auf der Ungleichheit (2.8), von der Quasi-Optimalität des Verfahrens (2.4) zur näherungsweise Behandlung der Variationsgleichung (2.2), vgl. [GR94].

Wir stellen als Grundlage für die folgenden Sätze weitere Bedingungen an die Diskretisierungsparameter; definieren hierzu durch $\wp^s(\hat{K})$ die Klasse der Finiten Elemente mit $V_h \subset H^{s+1}(\Omega)$, $\rho_K = \sup\{\text{diam}(S) : S \text{ Kugel innerhalb von } K\}$, $h_K = \text{diam}(K)$.

(H1): Eine Familie von Zerlegungen \mathcal{T}_h ist regulär, wenn eine Konstante σ existiert, so daß

$$\frac{h_K}{\rho_K} \leq \sigma \quad \forall K \in \bigcup_h \mathcal{T}_h$$

(H2): Alle Finiten Elemente (K, P_K, Σ_K) sind affin-äquivalent zu einem Referenzelement $(\hat{K}, \hat{P}, \hat{\Sigma})$.

(H3): Alle Finiten Elemente (K, P_K, Σ_K) , $K \in \bigcup_h \mathcal{T}_h$ liegen in der Klasse \wp^0 .

Unter diesen Voraussetzungen beweisen Ciarlet und Lions [CL93] die Fehlerabschätzung (2.9), (2.10) für die Verwendung der Galerkin-Diskretisierung.

Satz 2.3 *Zusätzlich zur Gültigkeit von (H1), (H2) und (H3) nehmen wir die Existenz einer Konstanten $k \geq 1$ an, so daß folgende Beziehungen gelten*

$$P_k(\hat{K}) \subset \hat{P} \subset H^1(\hat{K}) \quad H^{k+1}(\hat{K}) \hookrightarrow \wp^s(\hat{K}).$$

Hierbei entspricht s der maximalen Ordnung der partiellen Ableitungen bzgl. der Definition von $\hat{\Sigma}$.

Ist $u \in V$ die Lösung des Variationsproblem (2.2), so ist diese auch Element des Raumes $H^{k+1}(\Omega)$. Es existiert eine Konstante C , unabhängig von h , mit

$$\|u - u_h\|_{1,\Omega} \leq Ch^k |u|_{k+1,\Omega}, \quad (2.9)$$

wobei $u_h \in V_h$ die diskrete Lösung ist.

Satz 2.4 *Es gelten die Bedingungen (H1), (H2) und (H3). Desweiteren sei $s = 0$, $n \leq 3$ und $u \in H^{k+1}(\Omega)$. Existiert eine Konstante $k \geq 1$ mit*

$$P_k(\hat{K}) \subset \hat{P} \subset H^1(\hat{K}),$$

so ist das Problem (2.4) regulär. Für die diskrete Lösung $u_h \in V_h$ gilt dann die Fehlerabschätzung

$$\|u - u_h\|_{0,\Omega} \leq Ch^{k+1} |u|_{k+1,\Omega}. \quad (2.10)$$

Für konvektionsdominante Probleme, $\nu \ll \|b\|_\infty$, stellt sich allerdings heraus, daß die Lösung u_h mit Hilfe der Diskretisierung (2.6) sehr große Oszillationen besitzt. Sie ist nicht gleichmäßig bzgl. ν , d.h. für $\nu \rightarrow 0$ divergiert die Norm des Fehlers mit $\|u - u_h\|_V \rightarrow \infty$; siehe [RST96], S.63. Die berechnete Lösung hat mit der Lösung u nichts zu tun. u_h ist somit unbrauchbar. Wir benötigen stabilere Diskretisierungen, welche in den beiden folgenden Abschnitten erläutert werden sollen.

2.2.3 Stromlinien-Diffusion FEM (SDFEM)

Die Stromlinien-Diffusions Methode wurde erstmals von Hughes und Brooks [HB79] für die numerische Lösung von konvektionsdominanten Konvektions-Diffusions-Gleichungen eingeführt. Inzwischen findet man in der Literatur auch Interpretationen als Petrov-Galerkin-Verfahren bzw. die Bezeichnungen streamline upwind Petrov-Galerkin-Verfahren (SUPG Verfahren). Die SDFEM kombiniert gute

globale Stabilitätseigenschaften mit einer hohen Genauigkeit auf Teilgebieten, die Grenzschichten ausschließen. Die Stabilisierung erfolgt bei dieser Methode durch eine geeignete Wahl der Testfunktionen.

Ausgehend von der schwachen Formulierung (2.3) der Konvektions-Diffusions-Gleichung und hinreichend glattem b , c und f ,

$$c - \frac{1}{2} \operatorname{div}(b) \geq c_0 > 0, \quad (2.11)$$

betrachten wir eine Zerlegung \mathcal{T}_h vom Gebiet Ω . Mit $K \in \mathcal{T}_h$ bezeichnen wir eine Gitterzelle dieser Zerlegung. Es sei $V_h \subset V$ ein konformer Finite-Elemente-Raum, der sich aus stückweise polynomialen Funktionen vom Grad k zusammensetzt, d.h.

$$V_h := \{v_h \in V : v_h|_K \in P_k(K) \text{ für alle } K \in \mathcal{T}_h\}.$$

Desweiteren nehmen wir an, daß Gitter sei quasiuniform und $u \in H^{k+1}(K)$ mit $k \geq 1$. Unter Nutzung einer Abschätzung für den Interpolationsfehler und der Normäquivalenz in endlichdimensionalen Räumen findet man in [RST96] die Gültigkeit der lokalen inversen Ungleichung

$$\|\Delta v_h\|_{0,K} \leq \mu_{inv} h_k^{-1} |v_h|_{1,K} \quad \forall v_h \in V_h \quad (2.12)$$

mit der von K und h unabhängigen Konstanten μ_{inv} .

Im Gegensatz zur Idee der Standard-Galerkin-Diskretisierung, welche die stetigen Räume durch diskrete Räume und die stetigen Bilinearformen durch diskrete Bilinearformen ersetzt, testet die SDFEM auf K zusätzlich mit dem Term $b \cdot \nabla v$. Unter Annahme der Regularität der Lösung u von (2.3) können wir im Fall von

$$-\nu \Delta u + b \cdot \nabla u + cu = f \quad \text{in } L^2(K) \quad \forall K$$

schlußfolgern, daß u der Gleichheit

$$a_h(u, v_h) = f_h(v_h) \quad \forall v_h \in V_h, \quad (2.13)$$

genügt. Wir definieren dazu

$$\begin{aligned} a_h(w, v) &:= \nu(\nabla w, \nabla v) + (b \cdot \nabla w, v) + (cw, v) \\ &\quad + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \delta_K (-\nu \Delta w + b \cdot \nabla w + cw, b \cdot \nabla v)_K \\ f_h(v) &:= (f, v) + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \delta_K (f, b \cdot \nabla v)_K, \end{aligned}$$

wobei $(\cdot, \cdot)_K$ das Skalarprodukt in $L^2(K)$ repräsentiert. Die vom Anwender gewählte Konstante δ_K wird als **SD-Parameter** bezeichnet. Da im allgemeinen $\Delta u_h \notin L^2(\Omega)$, jedoch $\Delta u_h \in L^2(K)$ für jede Zelle K gilt, berechnen wir Δu_h

elementweise.

Somit können wir die SDFEM wie folgt definieren:

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{Finde } u_h \in V_h, \text{ so daß für alle } v_h \in V_h \text{ gilt} \\ a_h(u_h, v_h) = f_h(v_h). \end{array}} \quad (2.14)$$

Zusammen mit Gleichheit (2.13) erhalten wir aus (2.14) für $u \in H^2(\Omega)$

$$a_h(u - u_h, v_h) = 0 \quad \forall v_h \in V_h. \quad (2.15)$$

Diese Orthogonalitätsbeziehung ist die Projektionseigenschaft der SDFEM; eine Finite-Elemente-Methode, die dieser Eigenschaft genügt, bezeichnet man als **konsistent**.

Zur Messung des Fehlers und der Stabilität verwenden wir eine Norm, welche sich auf die diskrete Bilinearform a_h bezieht:

$$\|v\|_{SD} := \left(\nu |v|_1^2 + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \delta_K \|b \cdot \nabla v\|_{0,K}^2 + c_0 \|v\|_{0,K}^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Um Aussagen über die Stabilität und die Konvergenzeigenschaften zu geben, müssen die benötigten Konstanten c_K, c_0 auf Ω der Bedingungen (2.11) genügen.

$$c_K := \max_{x \in K} |c(x)| \quad \text{für jedes } K \in \mathcal{T}_h$$

Die Stabilitätseigenschaften der SDFEM sind dann Folge von Lemma 2.5, welches bei Roos, Stynes und Tobiska [RST96] nachzulesen ist.

Lemma 2.5 *Der SD-Parameter δ_K genüge für jedes $K \in \mathcal{T}_h$*

$$0 < \delta_K \leq \frac{1}{2} \min \left(\frac{c_0}{c_K^2}, \frac{h_K^2}{\nu \mu_{inv}^2} \right).$$

Dann ist die diskrete Bilinearform koerzitiv, d.h.

$$a_h(v_h, v_h) \geq \frac{1}{2} \|v_h\|_{SD}^2 \quad \forall v_h \in V_h.$$

Aus theoretischen Überlegungen zur Elliptizität des Problems (2.14) und zur optimalen a-priori Fehlerabschätzung ergibt sich nach [RST96] eine geeignete Wahl des SD-Parameter von

$$\delta_K = \begin{cases} \delta_0 h_K & \text{für } \|b\|_{\infty,K} h_K > 2\nu \quad (\text{konvektionsdominant}) \\ \frac{\delta_1 h_K^2}{\nu} & \text{für } \|b\|_{\infty,K} h_K \leq 2\nu \quad (\text{diffusionsdominant}), \end{cases} \quad (2.16)$$

wobei h_K der Durchmesser von Gitterzelle K und δ_0, δ_1 festzulegende positive Konstanten sind.

Satz 2.6 *Seien die Voraussetzungen von Lemma 2.5 erfüllt und der SD-Parameter wie in (2.16) gegeben. Dann genügt die Lösung u_h der SDFEM der globalen Fehlerabschätzung*

$$\| \| u - u_h \| \|_{SD} \leq C \left(\nu^{\frac{1}{2}} + h^{\frac{1}{2}} \right) h^k |u|_{k+1}.$$

Bemerkung: Im konvektionsdominanten Fall zeigen Roos, Stynes und Tobiska [RST96], daß der L^2 -Fehler der Ableitung in Stromlinienrichtung optimal, jedoch die Schranke von $\| u - u_h \|_0$ eine halbe Ordnung geringer als das Optimum ist.

2.2.4 Upwind-Diskretisierung

Ein Grund für große Oszillationen innerhalb von Grenzschichten der berechneten Lösung bei Verwendung der Standard-Galerkin-Diskretisierung und dominanter Konvektion ist die Existenz einer vorherrschenden Richtung, in der Informationen über die Lösung transportiert werden. Diesem Fall sollte bei der Diskretisierung des konvektiven Terms eine gesonderte Betrachtung zu Teil werden.

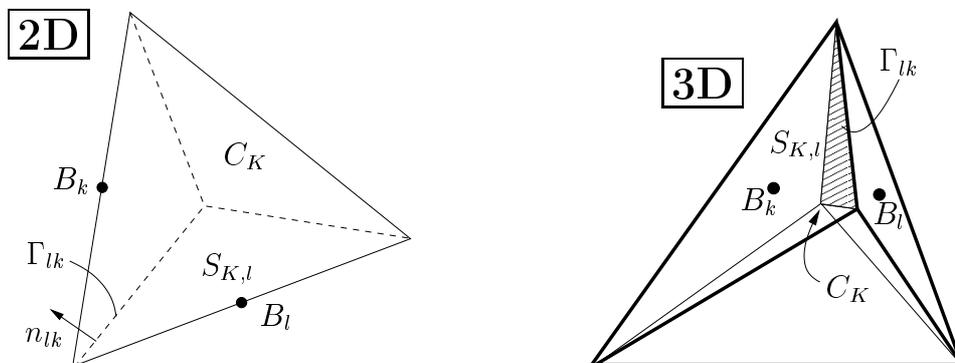


Abbildung 2.1: Konstruktion des d -dimensionalen Simplex $S_{K,l}$

Hierzu wollen wir die Upwind-Diskretisierung für nichtkonforme Finite Elemente betrachten, welche erstmals durch Ohmori/Ushijima [OU84] für nichtkonforme P_1 -Elemente und skalare Konvektions-Diffusions-Gleichungen im Jahre 1984 veröffentlicht wurde. Diese Technik basiert auf der Zerlegung des Gebietes Ω in sogenannte duale Gebiete R_l . Bezeichne Γ_l die Seitenflächen, C_K den Schwerpunkt des Elementes K und $S_{K,l}$ den d -dimensionalen Simplex in K , welcher durch die Flächen Γ_l und den zusätzlichen Knoten C_K aufgespannt wird (siehe Abbildung

2.1). Mit Λ_l sei die Menge aller Indizes $k \neq l$ bezeichnet, für welche die Knoten B_k und B_l zu einem gemeinsamen Element gehören. Für diesen Fall definieren wir $\Gamma_{lk} := \partial S_{K,l} \cap \partial S_{K,k}$ als die gemeinsame $(d-1)$ -dimensionale Fläche von $S_{K,l}$ und $S_{K,k}$. Für innere Flächen Γ_l existieren zwei Elemente K und K' mit $\Gamma_l = \partial K \cap \partial K'$ (vergleiche Abbildung 2.2), für welche wir das duale Gebiet R_l als $R_l := S_{K,l} \cup S_{K',l}$ definieren. Im Fall einer Randfläche $\Gamma_l \subset \partial K \cap \partial \Omega$ setzen wir $R_l := S_{K,l}$.

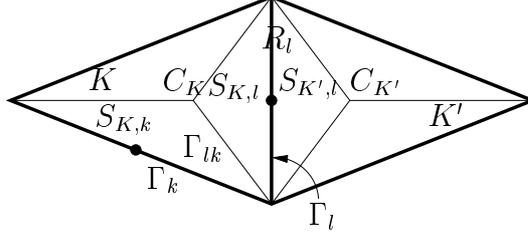


Abbildung 2.2: Konstruktion der dualen Gebiete R_l

Wir führen den **Lumping-Operator** L_h ein, welcher eine gegebene Funktion $v \in V_h$ auf eine stückweise konstante Funktion $L_h v$ durch die Vorschrift

$$(L_v)(x) := v(B_l) \quad \forall x \in R_l \quad (2.17)$$

transformiert.

Um Informationen über die Konvektionsrichtung einfach nutzen zu können, wird der konvektive Term mit Hilfe des Operators L_h durch ein Integral über die Ränder der dualen Gebiete approximiert.

$$\begin{aligned} (b \cdot \nabla u, v) &= \sum_l (b \cdot \nabla u, v)_{R_l} \\ &= \sum_l [(\nabla \cdot (ub), v)_{R_l} - (\nabla \cdot b, uv)_{R_l}] \\ &\approx \sum_l [(\nabla \cdot (ub), L_h v)_{R_l} - (\nabla \cdot b, L_h(uv))_{R_l}] \\ &= \sum_l v(B_l) ((\nabla \cdot (ub), 1)_{R_l} - u(B_l)(\nabla \cdot b, 1)_{R_l}) \\ &= \sum_l \sum_{k \in \Lambda_l} (\langle ub \cdot n_{lk}, 1 \rangle_{\Gamma_{lk}} - u(B_l) \langle b \cdot n_{lk}, 1 \rangle_{\Gamma_{lk}}) v(B_l) \\ &= \sum_l \sum_{k \in \Lambda_l} \langle b \cdot n_{lk}, u - u(B_l) \rangle_{\Gamma_{lk}} v(B_l) \end{aligned} \quad (2.18)$$

Hierbei bezeichnet n_{lk} den äußeren Normalvektor auf Γ_{lk} in Bezug auf R_l , $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\Gamma_{lk}}$ das Skalarprodukt in $L^2(\Gamma_{lk})$ und die Notation $\nabla \cdot (ub)$ die Divergenz des Vektors ub , definiert durch

$$\nabla \cdot (ub) = \sum_{j=1}^d \partial_j (ub_j).$$

Die Upwind-Idee besteht darin, die Lösung $u(x)$ auf Γ_{lk} durch einen festen Wert u^{upw} , der einen benachbarten u -Wert in Richtung stromaufwärts (entgegen der Strömungsrichtung; englisch: “upstream“ oder “upwind“) in Bezug auf das Konvektionsfeld b repräsentiert, zu ersetzen. u^{upw} wird als Linearkombination

$$u \approx u^{upw} := \lambda_{lk}(b)u(B_l) + (1 - \lambda_{lk}(b))u(B_k). \quad (2.19)$$

angesetzt. Das Kurvenintegral

$$\langle b \cdot n_{lk}, 1 \rangle_{\Gamma_{lk}} = \int_{\Gamma_{lk}} b \cdot n_{lk} \, d\gamma$$

beschreibt den konvektiven Fluß durch die Kurve Γ_{lk} . Die Richtung des Flusses ist durch das Vorzeichen von $\langle b \cdot n_{lk}, 1 \rangle_{\Gamma_{lk}}$ bestimmt. Ist dieser Term kleiner als Null, so ist der konvektive Fluß in $S_{K,l}$ hineingerichtet. Der konvektive Transport, der bei singular gestörten Problemen dominiert, erfolgt somit von Knoten B_k zum Knoten B_l . Deshalb wählt man $\lambda_{lk} \in [0, 1/2)$ in (2.19), so daß bei der Diskretisierung des konvektiven Terms im Knoten B_l der Wert $u(B_k)$ einen stärkeren Einfluß als $u(B_l)$ besitzt. Analoge Überlegungen führen im Fall $\langle b \cdot n_{lk}, 1 \rangle_{\Gamma_{lk}} > 0$ auf die Wahl $\lambda_{lk} \in (1/2, 1]$.

Durch Einsetzen von (2.19) in (2.18) erhalten wir die Diskretisierung von $(b \cdot \nabla u, v)$ mit

$$\tilde{b}(u_h, v_h) = \sum_l \sum_{k \in \Lambda_l} \langle b \cdot n_{lk}, (1 - \lambda_{lk}(b))(u_h(B_k) - u_h(B_l)) \rangle_{\Gamma_{lk}} v_h(B_l).$$

In theoretischen Untersuchungen der Upwind-Methoden werden an die Koeffizienten λ_{lk} noch einige Bedingungen gestellt. Dazu definieren wir

$$\lambda_{lk}(b) = \Phi(t) \quad \text{mit} \quad t = \frac{1}{2\nu} \langle b \cdot n_{lk}, 1 \rangle_{\Gamma_{lk}}. \quad (2.20)$$

Die Funktion $\Phi(t)$ muß die Bedingungen

$$\left. \begin{array}{l} (B1) \quad \Phi(t) = 1 - \Phi(-t) \quad \forall t > 0, \quad 0 \leq \Phi(t) \leq 1 \quad \forall t \in \mathbb{R}, \\ (B2) \quad \Phi(t) \geq 1/2 \quad \forall t > 0, \\ (B3) \quad g(t) = t \cdot \Phi(t) \text{ ist Lipschitz-stetig auf } \mathbb{R}, \end{array} \right\} \quad (2.21)$$

erfüllen, siehe Thiele und Tobiska [TT89]. Mögliche Varianten für die Wahl sind:

$$\Phi_1(t) = \begin{cases} 1, & \text{für } t \geq 0 \\ 0, & \text{für } t < 0 \end{cases} \quad \text{oder} \quad \Phi_2(t) = \begin{cases} \frac{\frac{1}{2} + t}{1 + t}, & \text{für } t \geq 0 \\ \frac{1}{2 - 2t}, & \text{für } t < 0 \end{cases} \quad (2.22)$$

$\Phi_1(\cdot)$ wird *einfaches* oder *scharfes* und $\Phi_2(\cdot)$ *Samariskij Upwind* genannt. Beide Funktionen erfüllen die geforderten Bedingungen (B1), (B2) und (B3).

Nutzt man eine Upwind-Diskretisierung, so hat das zu lösende diskrete Gleichungssystem die Gestalt

$$\begin{aligned} a(u_h, v_h) + \tilde{b}(u_h, v_h) + c(u_h, v_h) &= (f, v_h) \quad \forall v \in V_{h0} \\ u_h &= g \quad i \in N_{\partial\Omega}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

$N_{\partial\Omega}$ bezeichnet die Menge der Indizes k mit $B_k \in \partial\Omega$. Bei Schieweck und Tobiska [ST96] findet man mit Satz 2.7 eine Aussage über die Lösbarkeit der schwachen Formulierung für mehrdimensionale Navier-Stokes-Gleichungen unter Nutzung der Upwind-Diskretisierung.

Satz 2.7 *Wir nehmen an, daß die Bedingungen (B1), (B2), (B3) erfüllt sind, und $f \in (L^2(\Omega))^d$ gilt. Desweiteren sei $\nu > \nu_0$ mit einem hinreichend großen $\nu_0 = \nu_0(\Omega, f) > 0$. Dann besitzen sowohl das stetige als auch das diskrete Problem eine eindeutige Lösung (u, p) und (u_h, p_h) . Unter der zusätzlichen Regularitätsannahme $(u, p) \in (H^2(\Omega))^d \times H^1(\Omega)$ gilt die Fehlerabschätzung*

$$\| u - u_h \|_h + \| p - p_h \|_0 \leq C(\nu, \| u \|_{2,2} \| p \|_{1,2})h \quad (2.24)$$

für Raumdimensionen $d \leq 3$.

Für die Verwendung der Upwind-Diskretisierung auf Vierecks- bzw. Hexaedergittern läßt sich ein analoges Vorgehen herleiten. Im Falle der von Rannacher und Turek [RT92] eingeführten nichtkonformen Q_1^{rot} -Elemente findet man nähere Erläuterungen in der Arbeit [Sch97] von Schieweck. Die Konstruktion der dualen Gebiete erfolgt hierbei gemäß Abbildung 2.3.

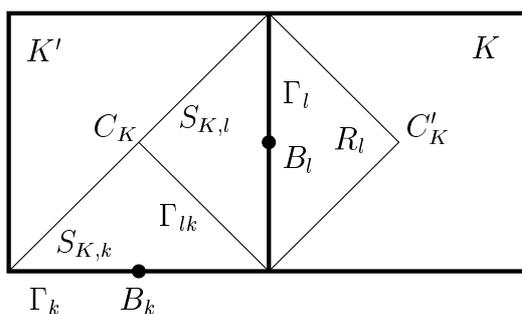


Abbildung 2.3: Konstruktion der dualen Gebiete auf Vierecksgittern

3 Methode der Finiten Elemente im Dreidimensionalen

3.1 Assemblierung des Gleichungssystems

Wie in den Betrachtungen zur Diskretisierung gezeigt, erhalten wir aus der schwachen Formulierung des Konvektions-Diffusions-Problems das lineare Gleichungssystem (2.7) der Form

$$\begin{pmatrix} A \\ \mathbf{1}_N \end{pmatrix} u = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix},$$

welches die Koeffizienten u_i zur Bestimmung der diskreten Lösung u_h liefert, vgl. Basisdarstellung (2.5). Dabei ist

$$A = ((a_{ij}))_{N \times N}, a_{ij} = \int_{\Omega} \nu \nabla v_h^j \cdot \nabla v_h^i + (b \cdot \nabla v_h^j + c v_h^j) v_h^i \, dx$$

$$f = (f_i)_N, f_i = \int_{\Omega} f v_h^i \, dx.$$

Unsere Aufgabe soll nun die Assemblierung dieses Gleichungssystems sein. Bezeichnet \mathcal{T}_h die Zerlegung von Ω in Gitterzellen K , so läßt sich die Berechnung der Matrixeinträge, also die Berechnung der Integrale über das Gebiet Ω , auf die Summe von Integralen über die Zellen K vereinfachen.

$$\begin{aligned} a_{ij} &= (\nu \nabla v_h^j, \nabla v_h^i) + (b \cdot \nabla v_h^j, v_h^i) + (c \cdot v_h^j, v_h^i) \\ &= \int_{\Omega} \nu \nabla v_h^j \cdot \nabla v_h^i + (b \cdot \nabla v_h^j + c v_h^j) v_h^i \, dx \\ &= \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \nu \nabla v_h^j \cdot \nabla v_h^i + (b \cdot \nabla v_h^j + c v_h^j) v_h^i \, dx \\ &= \sum_{K \in \mathcal{T}_h} [(\nu \nabla v_h^j, \nabla v_h^i)_K + (b \cdot \nabla v_h^j, v_h^i)_K + (c \cdot v_h^j, v_h^i)_K] \end{aligned} \tag{3.1}$$

Im allgemeinen sind in diesem Fall nur wenige Gitterzellen zu betrachten, da sich der Durchschnitt der Träger von v_h^i und v_h^j auf wenige Gitterzellen beschränkt. Werten wir die Integrale auf diesen Gitterzellen aus und addieren die Ergebnisse, so lassen sich die Matrixeinträge a_{ij} ermitteln. Die Anwendung dieses Vorgehens auf die Einträge f_i liefert eine „reduzierte“ Aufgabenstellung: die Berechnung von Integralen der Form $\int_K h(x)dx$.

3.2 Berechnung der lokalen Integrale

Das allgemeine Vorgehen zur Berechnung eines Integrals auf der Gitterzelle K gliedert sich im Programmpaket `MoONMD` in zwei wesentliche Schritte:

1. Transformation des Integrals auf ein Referenzelement,
2. Berechnung des Integrals auf dem Referenzelement mit Hilfe einer geeigneten Quadraturformel.

Bezeichne \hat{K} das Referenzelement und F_K die Referenztransformation, gegeben durch

$$F_K : \xi \in \hat{K} \longrightarrow x \in K, \quad F_K = \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \end{pmatrix}.$$

Ein Integral über die Zelle K transformiert sich dann durch

$$\int_K h(x)dx = \int_{\hat{K}} \hat{h}(\xi) |\det J_F(\xi)| d\xi, \quad (3.2)$$

wobei J_F die Funktionalmatrix mit der zugehörigen Funktionaldeterminante $\det J_F$ bezeichnet.

$$J_F(\xi) = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial \xi_1} & \frac{\partial F_1}{\partial \xi_2} & \frac{\partial F_1}{\partial \xi_3} \\ \frac{\partial F_2}{\partial \xi_1} & \frac{\partial F_2}{\partial \xi_2} & \frac{\partial F_2}{\partial \xi_3} \\ \frac{\partial F_3}{\partial \xi_1} & \frac{\partial F_3}{\partial \xi_2} & \frac{\partial F_3}{\partial \xi_3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & F_{13} \\ F_{21} & F_{22} & F_{23} \\ F_{31} & F_{32} & F_{33} \end{pmatrix}$$

Nach Bestimmung der Funktionaldeterminante, die im nächsten Abschnitt besprochen wird, bleibt im letzten Schritt die Berechnung der transformierten Integrale auf dem Referenzelement, also von

$$\int_{\hat{K}} \tilde{h}(\xi) d\xi := \int_{\hat{K}} \hat{h}(\xi) |\det J_F(\xi)| d\xi.$$

Hierzu verwenden wir eine Quadraturformel $(p_k, w_k)_{k=1}^n$ mit den Stützstellen p_k und den Gewichten w_k .

$$\int_{\hat{K}} \tilde{h}(\xi) d\xi \approx \sum_{k=1}^n w_k \tilde{h}(p_k)$$

3.3 Transformation von Ableitungen

Zu einer gegebenen Referenztransformation $x = F_K(\xi)$ ergibt sich die Umkehrfunktion mit $\xi = F_K^{-1}(x)$. Für die transformierte Funktion gilt auf dem Referenzelement

$$\hat{h}(\xi) = h(F_K(\xi)) = h(x) = h(x_1, x_2, x_3) = h(F_1, F_2, F_3).$$

Diese Beziehung wollen wir uns bei der Transformation der Ableitungen unter Verwendung der Kettenregel der Differentiation zu Nutze machen.

$$\begin{aligned} \nabla_{\xi} \hat{h}(\xi) = \nabla_{\xi} h(x_1, x_2, x_3) &= \begin{pmatrix} \frac{\partial h(x_1, x_2, x_3)}{\partial \xi_1} \\ \frac{\partial h(x_1, x_2, x_3)}{\partial \xi_2} \\ \frac{\partial h(x_1, x_2, x_3)}{\partial \xi_3} \end{pmatrix} \\ &\stackrel{\text{Kettenregel}}{=} \begin{pmatrix} \frac{\partial h}{\partial x_1} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_1} + \frac{\partial h}{\partial x_2} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_1} + \frac{\partial h}{\partial x_3} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_1} \\ \frac{\partial h}{\partial x_1} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_2} + \frac{\partial h}{\partial x_2} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_2} + \frac{\partial h}{\partial x_3} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_2} \\ \frac{\partial h}{\partial x_1} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_3} + \frac{\partial h}{\partial x_2} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_3} + \frac{\partial h}{\partial x_3} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_3} \end{pmatrix} \\ &\stackrel{\frac{\partial x_i}{\partial \xi_j} = \frac{\partial F_i}{\partial \xi_j}}{=} \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial \xi_1} & \frac{\partial F_2}{\partial \xi_1} & \frac{\partial F_3}{\partial \xi_1} \\ \frac{\partial F_1}{\partial \xi_2} & \frac{\partial F_2}{\partial \xi_2} & \frac{\partial F_3}{\partial \xi_2} \\ \frac{\partial F_1}{\partial \xi_3} & \frac{\partial F_2}{\partial \xi_3} & \frac{\partial F_3}{\partial \xi_3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial h}{\partial x_1} \\ \frac{\partial h}{\partial x_2} \\ \frac{\partial h}{\partial x_3} \end{pmatrix} \\ &= (J_F(\xi))^T \nabla_x h(x) \end{aligned}$$

Aus der hergeleiteten Beziehung $\nabla_{\xi} \hat{h}(\xi) = (J_F(\xi))^T \nabla_x h(x)$ erhalten wir sofort

$$\nabla_x h(x) = (J_F(\xi))^{-T} \nabla_{\xi} \hat{h}(\xi). \quad (3.3)$$

Diese Gleichheit benötigen wir zur Transformation der Skalarprodukte $(\nabla v_h^j, \nabla v_h^i)_K$ und $(b \cdot \nabla v_h^j, v_h^i)_K$. Hierzu ist es jedoch nötig, die inverse Matrix von J_F^T zu bestimmen.

Die Adjunktenregel liefert das gewünschte Ergebnis.

$$J_F^T = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{21} & F_{31} \\ F_{12} & F_{22} & F_{32} \\ F_{13} & F_{23} & F_{33} \end{pmatrix}$$

$$J_F^{-T} = \frac{1}{\det J_F} \underbrace{\begin{pmatrix} F_{22}F_{33} - F_{23}F_{32} & -(F_{21}F_{33} - F_{23}F_{31}) & F_{21}F_{32} - F_{21}F_{31} \\ -(F_{12}F_{33} - F_{13}F_{32}) & F_{11}F_{33} - F_{13}F_{31} & -(F_{11}F_{32} - F_{11}F_{31}) \\ F_{12}F_{23} - F_{13}F_{22} & -(F_{11}F_{23} - F_{13}F_{21}) & F_{11}F_{22} - F_{12}F_{21} \end{pmatrix}}_{=:B_0}$$

Die für das Systems (2.7) notwendigen Integrale ergeben sich folglich mit

$$\int_K f(x)v_h^i(x) dx = \int_{\hat{K}} \hat{f}(\xi)\hat{v}_h^i(\xi) |\det J_F(\xi)| d\xi,$$

$$\int_K \nabla v_h^j(x) \cdot \nabla v_h^i(x) dx = \int_{\hat{K}} (B_0(\xi)\nabla\hat{v}_h^j(\xi)) \cdot (B_0(\xi)\nabla\hat{v}_h^i(\xi)) \frac{1}{|\det J_F(\xi)|} d\xi,$$

$$\int_K b(x) \cdot \nabla v_h^j(x)v_h^i(x) dx = \int_{\hat{K}} \hat{b}(\xi) \cdot B_0(\xi)\nabla\hat{v}_h^j(\xi)\hat{v}_h^i(\xi) \operatorname{sgn}(\det J_F(\xi)) d\xi,$$

$$\int_K c(x)v_h^j(x)v_h^i(x) dx = \int_{\hat{K}} \hat{c}(\xi)\hat{v}_h^j(\xi)\hat{v}_h^i(\xi) |\det J_F(\xi)| d\xi.$$

Die ermittelten Integrale wollen wir für drei in MooNMD implementierte Spezialfälle genauer untersuchen - für die Referenztransformation bei regulären Tetraedern, flächenparallelen und beliebigen Hexaedern.

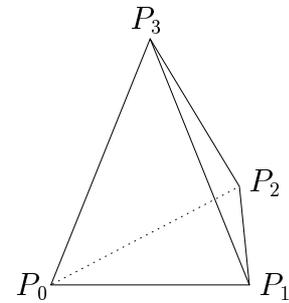
3.3.1 Triangulierung mittels Tetraeder

Das Referenztetraeder \hat{K} sei gegeben durch die Eckpunkte

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

und K ein beliebiges nichtentartetes Tetraeder mit Eckpunkten

$$P_0 = \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \\ z_0 \end{pmatrix}, P_1 = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix}, P_2 = \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix}, P_3 = \begin{pmatrix} x_3 \\ y_3 \\ z_3 \end{pmatrix}.$$



Die Referenzabbildung $F_K : \hat{K} \rightarrow K$, $(x, y, z) = F_K(\xi, \eta, \zeta)$ setzen wir mit

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 - x_0 & x_2 - x_0 & x_3 - x_0 \\ y_1 - y_0 & y_2 - y_0 & y_3 - y_0 \\ z_1 - z_0 & z_2 - z_0 & z_3 - z_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \\ \zeta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \\ z_0 \end{pmatrix}$$

an, so daß insbesondere gilt:

$$\begin{aligned} F_1 &= (x_1 - x_0)\xi + (x_2 - x_0)\eta + (x_3 - x_0)\zeta + x_0 \\ &:= \bar{x}_1\xi + \bar{x}_2\eta + \bar{x}_3\zeta + x_0 \\ F_2 &= (y_1 - y_0)\xi + (y_2 - y_0)\eta + (y_3 - y_0)\zeta + y_0 \\ &:= \bar{y}_1\xi + \bar{y}_2\eta + \bar{y}_3\zeta + y_0 \\ F_3 &= (z_1 - z_0)\xi + (z_2 - z_0)\eta + (z_3 - z_0)\zeta + z_0 \\ &:= \bar{z}_1\xi + \bar{z}_2\eta + \bar{z}_3\zeta + z_0. \end{aligned}$$

Somit lassen sich auch die Determinante

$$\det J_F = \det J_F^T = \bar{x}_1\bar{y}_2\bar{z}_3 + \bar{x}_2\bar{y}_3\bar{z}_1 + \bar{x}_3\bar{y}_1\bar{z}_2 - \bar{x}_3\bar{y}_2\bar{z}_1 - \bar{x}_2\bar{y}_1\bar{z}_3 - \bar{x}_1\bar{y}_3\bar{z}_2$$

und die Matrix

$$B_0 = \begin{pmatrix} \bar{y}_2\bar{z}_3 - \bar{y}_3\bar{z}_2 & \bar{y}_3\bar{z}_1 - \bar{y}_1\bar{z}_3 & \bar{y}_1\bar{z}_2 - \bar{y}_2\bar{z}_1 \\ \bar{x}_3\bar{z}_2 - \bar{x}_2\bar{z}_3 & \bar{x}_1\bar{z}_3 - \bar{x}_3\bar{z}_1 & \bar{x}_2\bar{z}_1 - \bar{x}_1\bar{z}_2 \\ \bar{x}_2\bar{y}_3 - \bar{x}_3\bar{y}_2 & \bar{x}_3\bar{y}_1 - \bar{x}_1\bar{y}_3 & \bar{x}_1\bar{y}_2 - \bar{x}_2\bar{y}_1 \end{pmatrix}$$

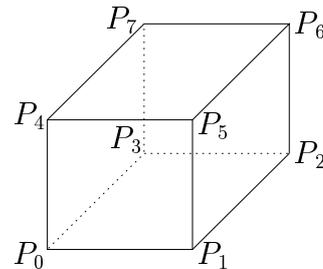
einfach berechnen. F_K ist eine affine Abbildung und B_0 eine von den Referenzkoordinaten ξ, η, ζ unabhängige, konstante Matrix.

3.3.2 Triangulierung mittels Parallelepipiped

Zwischen dem Referenzhexaeder $\hat{K} := (-1, 1)^3$ und einem beliebigem Parallelepipiped K mit Eckpunkten $P_i = (x_i, y_i, z_i)$, $i = 0, \dots, 7$ existiert eine affine Abbildung $F_K : \hat{K} \rightarrow K$, welche die Referenzkoordinaten (ξ, η, ζ) auf die Koordinaten (x, y, z) des Hexaeders abbildet.

F genügt dabei den Bedingungen

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} &\rightarrow \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \\ z_0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} &\rightarrow \begin{pmatrix} x_3 \\ y_3 \\ z_3 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x_4 \\ y_4 \\ z_4 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$



Unter dem Ansatz einer affinen Transformation

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{11} & f_{12} & f_{13} \\ f_{21} & f_{22} & f_{23} \\ f_{31} & f_{32} & f_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \\ \zeta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \\ g_3 \end{pmatrix}$$

erhalten wir durch Einsetzen der obigen Bedingungen

$$\begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_{11} \\ f_{12} \\ f_{13} \\ g_1 \end{pmatrix}$$

und anschließendem Auflösen des entstehenden Systems die unbekannt Daten der Referenztransformation.

$$\begin{pmatrix} f_{11} \\ f_{12} \\ f_{13} \\ g_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{x_1 - x_0}{2} \\ \frac{x_3 - x_0}{2} \\ \frac{x_4 - x_0}{2} \\ \frac{x_1 + x_3 + x_4 - x_0}{2} \end{pmatrix}$$

Bei analogem Vorgehen für die y - und z -Komponenten transformiert die Abbildung

$$F_K(\xi, \eta, \zeta) = \begin{pmatrix} \frac{x_1 - x_0}{2} & \frac{x_3 - x_0}{2} & \frac{x_4 - x_0}{2} \\ \frac{y_1 - y_0}{2} & \frac{y_3 - y_0}{2} & \frac{y_4 - y_0}{2} \\ \frac{z_1 - z_0}{2} & \frac{z_3 - z_0}{2} & \frac{z_4 - z_0}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \\ \zeta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{x_1 + x_3 + x_4 - x_0}{2} \\ \frac{y_1 + y_3 + y_4 - y_0}{2} \\ \frac{z_1 + z_3 + z_4 - z_0}{2} \end{pmatrix}.$$

die Referenzkoordinaten auf die Koordinaten eines flächenparallelen Hexaeders. Hieraus lassen sich wiederum

$$\begin{aligned} F_1 &= \frac{x_1 - x_0}{2}\xi + \frac{x_3 - x_0}{2}\eta + \frac{x_4 - x_0}{2}\zeta + \frac{x_1 + x_3 + x_4 - x_0}{2} \\ F_2 &= \frac{y_1 - y_0}{2}\xi + \frac{y_3 - y_0}{2}\eta + \frac{y_4 - y_0}{2}\zeta + \frac{y_1 + y_3 + y_4 - y_0}{2} \\ F_3 &= \frac{z_1 - z_0}{2}\xi + \frac{z_3 - z_0}{2}\eta + \frac{z_4 - z_0}{2}\zeta + \frac{z_1 + z_3 + z_4 - z_0}{2} \end{aligned}$$

und somit unter Verwendung der Bezeichnungen

$$\bar{x}_i := x_i - x_0, \quad \bar{y}_i := y_i - y_0, \quad \bar{z}_i := z_i - z_0$$

die Funktionaldeterminante

$$\det J_F = \frac{1}{8} [\bar{x}_1 \bar{y}_3 \bar{z}_4 + \bar{x}_3 \bar{y}_4 \bar{z}_1 + \bar{x}_4 \bar{y}_1 \bar{z}_3 - \bar{x}_4 \bar{y}_3 \bar{z}_1 - \bar{x}_3 \bar{y}_1 \bar{z}_4 - \bar{x}_1 \bar{y}_4 \bar{z}_3],$$

sowie die Matrix

$$B_0 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \bar{y}_3 \bar{z}_4 - \bar{y}_4 \bar{z}_3 & \bar{y}_4 \bar{z}_1 - \bar{y}_1 \bar{z}_4 & \bar{y}_1 \bar{z}_3 - \bar{y}_3 \bar{z}_1 \\ \bar{x}_4 \bar{z}_3 - \bar{x}_3 \bar{z}_4 & \bar{x}_1 \bar{z}_4 - \bar{x}_4 \bar{z}_1 & \bar{x}_3 \bar{z}_1 - \bar{x}_1 \bar{z}_3 \\ \bar{x}_3 \bar{y}_4 - \bar{x}_4 \bar{y}_3 & \bar{x}_4 \bar{y}_1 - \bar{x}_1 \bar{y}_4 & \bar{x}_1 \bar{y}_3 - \bar{x}_3 \bar{y}_1 \end{pmatrix}$$

einfach berechnen. Wie im Fall der Tetraeder-Triangulierung ist die Matrix B_0 auch in diesem Fall konstant und unabhängig von den Referenzkoordinaten.

3.3.3 Triangulierung mittels Hexaeder

Beschränken wir uns bei dem Hexaeder K nicht auf ein Parallelepiped, so existiert keine affine Transformation von \hat{K} auf K . Die Transformation ist trilinear, was die gesamte Herleitung komplizierter werden lässt.

Wir behalten die Bezeichnungen der Ecken des Hexaeders aus dem letzten Abschnitt bei, müssen im Fall von beliebigen Hexaedern jedoch zusätzliche Bedingungen stellen:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} &\rightarrow \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \\ z_0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} &\rightarrow \begin{pmatrix} x_3 \\ y_3 \\ z_3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x_4 \\ y_4 \\ z_4 \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} &\rightarrow \begin{pmatrix} x_5 \\ y_5 \\ z_5 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x_6 \\ y_6 \\ z_6 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x_7 \\ y_7 \\ z_7 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Mit dem Einsetzen dieser Bedingungen erhalten wir unter dem Ansatz einer trilinearen Funktion

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} &= \underbrace{\begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \\ g_3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} f_{11} & f_{12} & f_{13} \\ f_{21} & f_{22} & f_{23} \\ f_{31} & f_{32} & f_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \\ \zeta \end{pmatrix}}_{\text{affiner Anteil}} + \begin{pmatrix} f_{14} & f_{15} & f_{16} & f_{17} \\ f_{24} & f_{25} & f_{26} & f_{27} \\ f_{34} & f_{35} & f_{36} & f_{37} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi\eta \\ \xi\zeta \\ \eta\zeta \\ \xi\eta\zeta \end{pmatrix} \\ &:= g + ((f_{ij}))_{\substack{i=1\dots 3 \\ j=1\dots 7}} \cdot r \end{aligned}$$

und dem Vorgehen der letzten beiden Abschnitte die gesuchten Daten der Referenzfunktion F_K .

$$\begin{pmatrix} f_{11} \\ f_{12} \\ f_{13} \\ f_{14} \\ f_{15} \\ f_{16} \\ f_{17} \\ g_1 \end{pmatrix} = \frac{1}{8} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \\ x_7 \end{pmatrix} \\ := \frac{1}{8} ((w_{ij}))_{i,j=1}^8 \cdot x$$

Vereinfacht gilt

$$\begin{aligned} f_{1j} &= \frac{1}{8} \cdot \sum_{n=0}^7 w_{j,n+1} \cdot x_n && \text{für } j = 1, \dots, 7 \\ g_1 &= \frac{1}{8} \cdot \sum_{n=0}^7 w_{8,n+1} \cdot x_n, \end{aligned}$$

woraus sich die Referenztransformation mit

$$F_i = \frac{1}{8} \cdot \left[\sum_{n=1}^7 f_{in} \cdot r_n + g_i \right] \quad i = 1, \dots, 3$$

definieren läßt. Die zugehörigen ersten Ableitungen dieser Referenzfunktionen, im folgenden zum Beispiel für die Abbildung F_1 der x -Komponenten, sind im Gegensatz zu den bereits erläuterten Fällen nicht mehr unabhängig von den Referenzkoordinaten.

$$\begin{aligned} F_{11} &= \frac{1}{8} \cdot [f_{11} + f_{14}\eta + f_{15}\zeta + f_{17}\eta\zeta] \\ F_{12} &= \frac{1}{8} \cdot [f_{12} + f_{14}\xi + f_{16}\zeta + f_{17}\xi\zeta] \\ F_{13} &= \frac{1}{8} \cdot [f_{13} + f_{15}\xi + f_{16}\eta + f_{17}\xi\eta] \end{aligned}$$

Nutzen wir dieses Vorgehen bei den y - bzw. z -Komponenten, so läßt sich auch die Funktionaldeterminante berechnen.

$$|J_F^T| = F_{11}F_{22}F_{33} + F_{12}F_{23}F_{31} + F_{13}F_{21}F_{32} - F_{13}F_{22}F_{31} - F_{12}F_{21}F_{33} - F_{11}F_{23}F_{32}$$

4 Implementierung in MooNMD

Wesentliches Ziel dieser Arbeit war die Implementierung der Referenztransformation bei Tetraedern und Hexaedern, sowie des Upwind-Verfahrens im 3D-Fall. Um einen Einblick in die einzelnen Programmteile zu geben, sollen im folgenden die zum Verständnis nötigen Routinen genauer beleuchtet werden. Dabei wird jedoch nur ein allgemeiner Überblick über die Programmstruktur aufgezeigt; Details sollen auch in Hinblick auf die Komplexität des Quelltextes unterbunden werden. Auf der dieser Arbeit beiliegenden CD-ROM sind die benannten Dateien und damit der bearbeitete Quelltext im Verzeichnis QUELLETEXT abgelegt.

4.1 Referenztransformationen

Die theoretischen Überlegungen des letzten Kapitels findet man in den Dateien `HexaAffin.C` bzw. `HexaAffin.h`, im Fall des flächenparallelen Hexaeders, und für beliebige Hexaeder in `HexaTrilinear.C` bzw. `HexaTrilinear.h` wieder. Die Implementierung der Referenztransformation für reguläre Tetraeder wurde in den Dateien `TetraAffin.C` bzw. `TetraAffin.h` niedergelegt.

In diesen Programmteilen identifizieren wir die folgenden Variablen:

```
double x0, ..., x7, y0, ..., y7, z0, ..., z7;  
    x, y, z Koordinate der Knoten auf dem Originalelement  
  
double xc0, ..., xc7, yc0, ..., yc7, zc0, ..., zc7;  
    x, y, z Koordinate der Knoten auf dem Referenzelement  
  
double detjk;  
    Determinante der Funktionalmatrix  $J_F$ 
```

Die Routinen zur Transformation der Basisfunktionen und ihrer Ableitungen unterscheiden sich in den drei Klassen nur in einem Detail – der Quadraturformel. Am Ende jeder der `*.C`-Dateien sind die in Kapitel 3 hergeleiteten Daten zur Referenztransformation in der Routine `SetCell` niedergelegt.

- `GetOrigFromRef(double eta, double xi, double zeta,
double &x, double &y, double &z);`
Transformation der Referenzkoordinaten (η, ξ, ζ) auf die Koordinaten des Originalelementes (x, y, z)
- `GetOrigFromRef(int N_Points, double *eta, double *xi, double *zeta,
double *x, double *y, double *z);`
Transformation eines Satzes von N_Points Koordinaten (η, ξ, ζ) des Referenzelementes auf die Koordinaten (x, y, z) des Originalelementes
- `GetOrigFromRef(double *ref, *orig);`
Transformation eines Vektors $ref=(\xi, \eta, \zeta)$ von Referenzkoordinaten auf einen Vektor $orig=(x, y, z)$ mit Koordinaten des Originalelementes
- `GetRefFromOrig(double x, double y, double z,
double &eta, double &xi, double &zeta);`
Transformation der Koordinaten (x, y, z) des Originalelementes auf die Referenzkoordinaten (η, ξ, ζ)
- `GetRefFromOrig(double *orig, double *ref);`
Transformation eines Vektors $orig=(x, y, z)$ von Koordinaten des Originalelementes auf einen Vektor $ref=(\xi, \eta, \zeta)$ mit Referenzkoordinaten
- `GetOrigValues(BaseFunct3D BaseFunct,
int N_Points, double *eta, double *xi, double *zeta,
int N_Functs, QuadFormula_3D HexaFormula);`
Transformation der Basisfunktionen und Ableitungen vom Referenz- auf das Originalelement in N_Points Knoten mit Koordinaten (η, ξ, ζ) und unter Verwendung der Quadraturformel für Hexaeder $HexaFormula$ mit N_Functs Stützstellen
- `GetOrigValues(BaseFunct3D BaseFunct,
int N_Points, double *eta, double *xi, double *zeta,
int N_Functs, QuadFormula_3D QuadFormula);`
Transformation der Basisfunktionen und Ableitungen vom Referenz- auf das Originalelement in N_Points Knoten mit Koordinaten (η, ξ, ζ) und unter Verwendung der Quadraturformel für Tetraeder $QuadFormula$ mit N_Functs Stützstellen
- `GetOrigValues(int N_Sets, BaseFunct3D *BaseFunct,
int N_Points, double *eta, double *xi, double *zeta,
int N_Functs, QuadFormula_3D HexaFormula,
boolean *Needs2ndDer;)`
Transformation eines Satzes von N_Sets Basisfunktionen und Ableitungen vom Referenz- auf das Originalelement in N_Points Knoten mit Koordinaten (η, ξ, ζ) und unter Verwendung der Quadraturformel für Hexaeder $HexaFormula$ mit N_Functs Stützstellen

```
GetOrigValues(int N_Sets, BaseFunct3D *BaseFunct,
              int N_Points, double *eta, double *xi, double *zeta,
              int N_Functs, QuadFormula_3D QuadFormula,
              boolean *Needs2ndDer);
```

Transformation eines Satzes von N_Sets Basisfunktionen und Ableitungen vom Referenz- auf das Originalelement in N_Points Knoten mit Koordinaten (η, ξ, ζ) und unter Verwendung der Quadraturformel für Tetraeder $QuadFormula$ mit N_Functs Stützstellen

```
GetOrigValues(double xi, double eta, double zeta, int N_BaseFunct,
              double *uref, double *uxiref, double *uetaref,
              double *uzetaref, double *uorig, double *uxorig,
              double *uyorig, double *uzorig);
```

Transformation des Vektors $uref$ der Koordinaten von $N_BaseFuncts$ Basisfunktionen und der Vektoren $uxiref$, $uetaref$, $uzetaref$ der zugehörigen Ableitungen nach ξ , η und ζ vom Referenzelement auf die Vektoren $uorig$, $uxorig$, $uyorig$ und $uzorig$ des Originalelementes

```
SetCell(TBaseCell *cell);
```

Ermittelt aus den Koordinaten einer Zelle $cell$ der Klasse $TBaseCell$ die Daten der Referenztransformation (siehe Kapitel 3 und das folgende Beispiel)

Beispiel:

Anhand der Datei `TetraAffin.C` wollen wir am Beispiel der Triangulierung mittels regulärer Tetraeder den Zusammenhang zwischen der Routine `SetCell` und der Herleitung im Kapitel zur Referenztransformation im 3D-Fall erläutern. Der Quelltext dieser Routine hat die folgende Form:

```
void TTetraAffin::SetCell(TBaseCell *cell)
{
    Cell = cell;

    Cell->GetVertex(0)->GetCoords(x0, y0, z0);
    Cell->GetVertex(1)->GetCoords(x1, y1, z1);
    Cell->GetVertex(2)->GetCoords(x2, y2, z2);
    Cell->GetVertex(3)->GetCoords(x3, y3, z3);

    xc0=x0;
    xc1=x1-x0;
    xc2=x2-x0;
    xc3=x3-x0;
```

```
yc0=y0;
yc1=y1-y0;
yc2=y2-y0;
yc3=y3-y0;

zc0=z0;
zc1=z1-z0;
zc2=z2-z0;
zc3=z3-z0;

detjk=xc1*yc2*zc3+xc2*yc3*zc1+xc3*yc1*zc2
      -xc3*yc2*zc1-xc2*yc1*zc3-xc1*yc3*zc2;
}
```

Der erste Programmteil ermittelt zu einer gegebenen Zelle die Koordinaten der Eckpunkte $P_i := (x_i, y_i, z_i)$ – in diesem Fall für $i = 0, \dots, 3$. Anschließend werden diese Koordinaten genutzt, um die im Kapitel 3 hergeleiteten Daten für die Referenztransformation F_K zu ermitteln. In der Notation zu diesem Kapitel ergeben sich die Beziehungen

$$x_0 \sim \mathbf{xc0}, \bar{x}_1 \sim \mathbf{xc1}, \bar{x}_2 \sim \mathbf{xc2}, \bar{x}_3 \sim \mathbf{xc3}$$

für die die x -Komponenten und analog die Bezeichnungen $\mathbf{yc0}$ bis $\mathbf{zc3}$. Im letzten Schritt wird die Funktionaldeterminante $\det J_F$ mit \mathbf{detjk} bestimmt.

Diese Definition der Transformationsdaten findet dann in allen anderen angesprochenen Routinen ihre Anwendung, z.B. zur Transformation der Referenzkoordinaten ($\mathbf{xi}, \mathbf{eta}, \mathbf{zeta}$) auf die Koordinaten ($\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z}$) des Originalelementes.

```
void TTetraAffin::GetOrigFromRef(double xi, double eta,
                                double zeta, double &X,
                                double &Y, double &Z)
{
  X = xc0 + xc1*xi + xc2*eta + xc3*zeta;
  Y = yc0 + yc1*xi + yc2*eta + yc3*zeta;
  Z = zc0 + zc1*xi + zc2*eta + zc3*zeta;
}
```

4.2 Upwind-Verfahren

Die Implementierung des Upwind-Verfahrens für den 3D-Fall ist in den Dateien `Upwind3D.C` und `Upwind3D.h` hinterlegt. Um auch hier den Bezug zu den theore-

tischen Aussagen herzustellen, wollen wir zuerst die verwendeten Variablen definieren. Es gelten folgende Bezeichnungen:

```
double xcoords[8], ycoords[8], zcoords[8];
    Vektor der  $x$ -,  $y$ - und  $z$ -Koordinaten der Eckpunkte der Zelle

double x, y, z;
    Koordinaten des Mittelpunktes der Flächen der dualen Gebiete

double sx, sy, sz;
    Koordinaten des Schwerpunktes der Zelle

double nx, ny, nz;
    Koordinaten des Normalenvektors  $n_{lk}$  auf der gemeinsamen  $(d-1)$ -dimensionalen Fläche  $\Gamma_{l,k}$  von Fläche  $S_{K,l}$  und  $S_{K,k}$ 

int N_Edges, N_Faces, N_Vertices;
    Anzahl der Ecken, Flächen und Kanten einer Zelle
    Die Belegung dieser Werte erfolgt mittels der Befehle

    N_Edges = cell->GetN_Edges();
    N_Faces = cell->GetN_Faces();
    N_Vertices = cell->GetN_Vertices();
```

und zusätzlich liefert die Befehlszeile

```
cell->GetVertex(k)->GetCoords(xcoords[k], ycoords[k], zcoords[k]);
```

die Koordinaten, der an eine Kante angrenzenden Knoten.

```
double flux;
    konvektiver Fluß durch die Fläche  $\Gamma_{l,k}$ 
```

Die Routine zum Aufruf der Upwind-Diskretisierung für Gleichungen vom Konvektions-Diffusions-Typ stellt sich im Quelltext dar mit

```
UpwindForConvDiff(TSquareMatrix3D *sqmatrix, double *RHS
    TFEspace3D *fespace, TDiscreteForm3D *DiscreteForm);
```

Aufruf der Upwind-Diskretisierung für ein Gleichungssystem mit der quadratischen Matrix `sqmatrix` und der rechten Seite `RHS` über einem Finite-Elemente-Raum `fespace` mit der Diskretisierung `DiscreteForm`

5 Numerische Tests

5.1 Vorbetrachtungen

Zu Beginn dieses Kapitels sollen im folgenden Abschnitt einige einführende Bemerkungen getätigt werden, die für die Durchführung und das Verständnis der Testrechnungen von Bedeutung sind. Dabei soll näher auf die verwendeten Finite-Elemente-Räume, die Erzeugung des Grobgitters, die Anzahl der Freiheitsgrade und die zur Fehlermessung verwendeten Normen eingegangen werden. Um technische Details, die für das Verständnis dieser einleitenden Bemerkungen nicht von Bedeutung sind, zu vermeiden, beschränken wir uns auf die in den vorangegangenen Kapiteln erläuterten Voraussetzungen und Bezeichnungen.

Die Grundlage bildet das Konvektions-Diffusions-Problem (2.1), bei welchem wir uns in den numerischen Berechnungen auf das Gebiet $\Omega = (0, 1)^3$, also den Einheitswürfel, beziehen. Mit \mathcal{T}_h bezeichnen wir die Zerlegung von Ω in Tetraeder bzw. Hexaeder. Die Gitterzellen von \mathcal{T}_h identifizieren wir durch K und die Referenzabbildung von \hat{K} auf K mit F_K . Ein Finites Element definieren wir durch das Tripel (K, P_K, Σ_K) mit dem endlichdimensionalen Raum $P_K \subset C^l(\bar{K})$ von Ansatzfunktionen ($\dim P_K = N_K$) und der Menge von linearen Knotenfunktionalen

$$\Sigma_K := \{l_{K,i} : C^l(\bar{K}) \longrightarrow \mathbb{R}, i = 1, \dots, N_K\}.$$

Wir betrachten zunächst Finite Elemente auf Tetraedergittern. Die Referenzzelle ist das Tetraeder mit den Ecken $(0, 0, 0)$, $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$, $(0, 0, 1)$ und F_K eine affine Abbildung. Der Raum $P(\hat{K})$ besteht aus Polynomen bis zu einem gegebenen Grad m . Wir definieren

$$P_m(\hat{K}) := \left\{ \sum_{0 \leq i+j+l \leq m} a_{ijl} x_1^i x_2^j x_3^l \right\}, \quad (5.1)$$

$$P_m(K) := \{p = \hat{p} \circ F_K^{-1} : \hat{p} \in P_m(\hat{K})\}.$$

Die globalen Finite-Elemente-Räume ergeben sich durch

$$P_m := \{v \in H^1(\Omega) : v|_K \in P_m(K)\}, m \geq 1,$$

$$P_1^{nc} := \{v \in L^2(\Omega) : v|_K \in P_1(K), v \text{ erfüllt (5.2)}\}$$

unter Nutzung der Bedingung

$$v \text{ ist stetig auf den Schwerpunkten der Seitenflächen von } K. \quad (5.2)$$

Der Raum P_1^{nc} ist der bekannte nichtkonforme, lineare oder Crouzeix/Raviart Finite-Elemente-Raum, [CR73].

Die Referenzzelle bei Triangulierung mittels Hexaeder ist der große Einheitswürfel $(-1, 1)^3$. Die Abbildung F_K ist im allgemeinen trilinear (beachte: $\Omega \subset \mathbb{R}^3$); Ausnahme bildet der Fall des Parallelepipeds bzw. des flächenparallelen Hexaeders. Man beachte, daß im Dreidimensionalen die Flächen des Hexaeders K im allgemeinen nicht eben sind. Eine Fläche von K ist gegeben durch das Bild von vier Ecken des Würfels $(-1, 1)^3$, die eine Fläche der Referenzzelle festlegen. Die Bilder dieser vier Punkte ergeben vier Punkte im \mathbb{R}^3 , für die nicht zwingend eine Ebene durch diese Punkte existieren muß. Zusätzlich zum Raum $P_m(\hat{K})$ in (5.1) definieren wir für den Fall der Hexaeder-Triangulierung

$$\begin{aligned} Q_m(\hat{K}) &:= \left\{ \sum_{i,j,l=0}^m a_{ijl} x_1^i x_2^j x_3^l \right\}, \\ Q_m(K) &:= \left\{ p = \hat{p} \circ F_K^{-1} : \hat{p} \in Q_m(\hat{K}) \right\}. \end{aligned}$$

Der globale Finite-Elemente-Raum ergibt sich unter Nutzung von Hexaeder-Gittern mit

$$Q_m := \left\{ v \in H^1(\Omega) : v|_K \in Q_m(K) \right\}, m \geq 1.$$

Wir nehmen zusätzlich den Raum Q_1^{rot} auf, welcher den Raum der nichtkonformen, mittelwertorientierten, stückweise trilinearen Funktionen beschreibt. Eingeführt wurde Q_1^{rot} von Rannacher und Turek [RT92], nähere Untersuchungen findet man bei Schieweck [Sch97]. Dieser Finite-Elemente-Raum wird definiert durch

$$\begin{aligned} Q_1^{rot}(\hat{K}) &:= \left\{ \hat{p}, \hat{p} \in \text{span}\{1, \hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3, \hat{x}_1^2 - \hat{x}_2^2, \hat{x}_2^2 - \hat{x}_3^2\} \right\}, \\ Q_1^{rot}(K) &:= \left\{ p = \hat{p} \circ F_K^{-1} : \hat{p} \in Q_1^{rot}(\hat{K}) \right\}. \end{aligned}$$

Zur Erläuterung der Konstruktion des globalen Raumes Q_1^{rot} identifizieren wir mit $\mathcal{E}(\mathcal{K})$ die Menge aller $(d-1)$ -dimensionalen Flächen von K . Dann wird der Finite-Elemente-Raum Q_1^{rot} gegeben durch

$$Q_1^{rot} := \left\{ p \in L^2(\Omega), p|_K \in Q_1^{rot}(K), \int_E p|_K ds = \int_E p|_{K'} ds \quad \forall E \in \mathcal{E}(K) \cap \mathcal{E}(K') \right\}.$$

Die Gleichheit der Integrale über die Einschränkung von p auf E von zwei benachbarten Zellen ist das Gegenstück zur Stetigkeit der Crouzeix/Raviart Finite Elemente in den Mittelpunkten der Flächen.

Im zweiten Teil dieser Vorbetrachtungen wollen wir uns kurz mit der Erzeugung des Grobgitters befassen. Für die zwei gegebenen Zerlegungen – in Tetraeder und Hexaeder – wird die Frage beantwortet, wie wir das Gebiet $\Omega = (0, 1)^3$ mit einem einfachen Gitter zerlegen. Hierzu setzen wir mit V_1 bis V_8 die Ecken des Würfels Ω an, wobei wir insbesondere $V_1 = (0, 0, 0)$ und $V_8 = (1, 1, 1)$ fordern. Betrachten wir zuerst den Fall der Tetraeder-Triangulierung, so definiert sich eine Gitterzelle $K = (K_V, K_E)$ durch die Knotenmenge

$$K_V := \{V_1, V_8\} \cup \{V_i, V_j : i, j \notin \{1, 8\} \text{ und } \exists \text{ Kante } \overline{V_i V_j}\}$$

und der zugehörigen Kantenmenge

$$K_E := \{\overline{V_1 V_8}, \overline{V_1 V_i}, \overline{V_1 V_j}, \overline{V_i V_j}, \overline{V_i V_8}, \overline{V_j V_8}\}.$$

Durch diese Konstruktion entsteht ein Grobgitter mit genau 6 Tetraedern. Der Fall unter Verwendung von Hexaedern stellt sich hingegen einfach dar. Der Einheitswürfel wird in 8 Hexaeder der Kantenlänge 0.5 zerlegt. Die weitere Verfeinerung erfolgt im Fall der Hexaeder in 8 gleichgroße Würfel und im Fall der Tetraeder-Zerlegung in 8 Tetraeder gemäß Bey [Bey97], Kapitel 3.

Da sich diese Arbeit auf Konvektions-Diffusions-Gleichungen im Dreidimensionalen beschränkt, sollen die Vorbetrachtungen mit einem Blick auf Komplexität der entstehenden Gleichungssysteme fortgeführt werden. Dazu sind in der Tabelle 5.1 die Anzahl der Freiheitsgrade angegeben, die unter Verwendung der oben beschriebenen Finite-Elemente-Räume auftreten.

FE-Raum	Level i der Verfeinerung						
	0	1	2	3	4	5	6
P_1^{nc}	120	864	6528	50688	399360	3170304	25264128
Q_1^{rot}	36	240	1728	13056	101376	798720	6340608
P_1, Q_1	27	125	729	4913	35937	274625	2146689
P_2, Q_2	125	729	4913	35937	274625	2146689	—
P_3, Q_3	343	2179	15625	117649	912673	—	—

Tabelle 5.1: Anzahl der Freiheitsgrade

Zum Abschluß dieser Vorbetrachtungen führen wir die Normen ein, welche zur Messung des Fehlers in den weiteren Abschnitten des Kapitels verwendet werden. Wir definieren für ein $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ die L^2 -Norm auf Ω mit

$$\| u \|_{0,\Omega} = \left(\int_{\Omega} |u|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}},$$

die H^1 -Seminorm

$$|u|_{1,2,\Omega} = \left(\int_{\Omega} |\nabla u|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}}$$

und die diskrete H^1 -Seminorm

$$|u|_{1,2,h} = \left(\sum_{K \in \mathcal{T}_h} |u|_{1,2,K}^2 \right)^{\frac{1}{2}} = \left(\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K |\nabla u|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}}.$$

5.2 Parameter der Testrechnungen

Die folgenden Parameter wurden für alle Testrechnungen konstant gewählt:

- Die Iteration bricht ab, wenn für die euklidische Norm des Residuums des aus der Diskretisierung entstehenden Gleichungssystems (2.7), siehe Kapitel 3.1, folgende Ungleichung gilt:

$$\left\| \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} A \\ \mathbf{1}_N \end{pmatrix} \cdot u \right\|_2 \leq 1e - 10.$$

- Als Löser wurde das geometrische Mehrgitterverfahren verwendet.
- Als Glätter (insbesondere für die Grobgitterlösung) wurde das symmetrische SOR-Verfahren genutzt.

Zur genaueren Erläuterung der angesprochenen Verfahren zur numerischen Lösung von großen, schwachbesetzten Gleichungssystemen, die aus der Diskretisierung von Differentialgleichungen entstehen, sei auf das Buch von Saad [Saa96] verwiesen.

5.3 Die Poisson-Gleichung

5.3.1 Problemstellung

Den Start unserer Testrechnungen bildet der Spezialfall einer Konvektions-Diffusions-Gleichung, die Poisson-Gleichung – im Programmpaket `MoonMD` sind die Daten dieser Aufgabenstellung in der Datei `Laplace.h` niedergelegt.

Das zu lösende Problem lautet

$$\begin{aligned} -\Delta u &= f & \text{in } \Omega = (0, 1)^3 \\ u &= g & \text{auf } \partial\Omega \end{aligned} \tag{5.3}$$

mit vorgegebenem stetigem $f \in C^0(\Omega)$. In der physikalischen Interpretation ist f der Quellterm, z.B. die Ladungsdichte im Falle eines elektrischen Potentials u . Als Spezialfall in diesem Beispiel enthalten ist bei $f \equiv 0$ die Laplace-Gleichung. Die Randbedingungen und die rechte Seite seien so gewählt, daß die Lösung dieses Problems von der Gestalt

$$u(x, y, z) = \sin(\pi x) \sin(\pi y) \sin(\pi z) \quad (5.4)$$

ist. Für die Koordinate $z = 0.5$ hat die Lösung (5.4) des Problems (5.3) auf dem Einheitsquadrat $[0, 1]^2$ die in Abbildung 5.1 dargestellte Form.

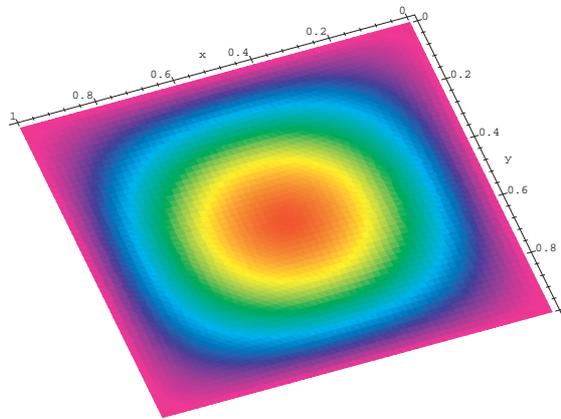


Abbildung 5.1: Lösung des Problems (5.3) für $z = 0.5$.

5.3.2 Auswertung der Testrechnungen

Die vorgegebene Lösung (5.4) des Problems (5.3) ist beliebig glatt, d.h. es gilt $u \in C^\infty(\bar{\Omega})$. Deshalb sind für alle Diskretisierungen die optimalen Konvergenzraten zu erwarten, vgl. Satz 2.3 und Satz 2.4. Die Tabellen 5.2 und 5.4 zeigen, daß bei Verfeinerung mittels Tetraeder und Parallelepipede die numerischen Ergebnisse diesen Erwartungen entsprechen.

In Anbetracht des Ziels dieser Arbeit und den getätigten Erweiterungen des Programmpakets `moonMD`, werden die Rechnungen mit Tests auf beliebigen Hexaedergittern abgerundet. Hierbei wurde bei der Erzeugung des Grobgitters der Mittelpunkt des Gebietes $\Omega = (0, 1)^3$, also $M = (0.5, 0.5, 0.5)$, auf den Punkt $M' = (0.6, 0.55, 0.4)$ verschoben, siehe Abbildung 5.2. Bei Betrachtung der Tabellen 5.3 und 5.5 ist jedoch nur ein marginaler Unterschied zu den Ergebnissen

bei Verwendung von Gittern mit kantenparallelen Hexaedern zu erkennen. Auch in diesen Tabellen findet man die optimalen Konvergenzraten wieder - die Fehler sind jedoch im Vergleich etwas größer.

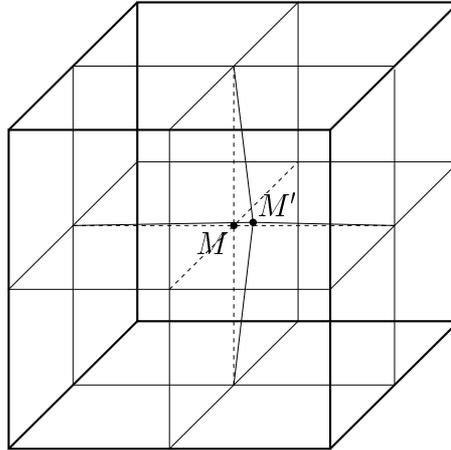


Abbildung 5.2: Erzeugung des schiefen Gitters

5.4 Three-Boundary-Layer Problem

5.4.1 Problemstellung

Bei diesem Beispiel seien die Randbedingungen und die rechte Seite so gewählt, daß

$$u(x, y, z, \nu) = \left(x - \exp\left(2\frac{x-1}{\nu}\right) \right) \left(y^2 - \exp\left(3\frac{y-1}{\nu}\right) \right) \left(z^3 - \exp\left(4\frac{z-1}{\nu}\right) \right) \quad (5.5)$$

die Lösung von

$$\begin{aligned} -\nu\Delta u + \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix} \cdot \nabla u + u &= f \quad \text{in } \Omega = (0, 1)^3 \\ u &= g \quad \text{auf } \partial\Omega \end{aligned} \quad (5.6)$$

ist – die Daten dieses Problems findet man im Programmpaket `MoONMD` unter `ThreeBoundaryLayers.h`. Die Lösung für die Wahl des Parameters ν mit 10^{-6} hat auf dem Einheitswürfel typische Grenzschichten an den Ebenen $x = 1$, $y = 1$, $z = 1$, siehe Abbildung 5.3. Bei den nichtkonformen Diskretisierungen, also bei Verwendung der Finite-Elemente-Räume P_1^{nc} und Q_1^{rot} , wurde die in Abschnitt

FE-Raum	Fehler und Konvergenzordnung auf Level i				
	2	3	4	5	6
P_1^{nc}	$8.99e-3$ 1.94	$2.25e-3$ 2.00	$5.59e-4$ 2.01	$1.39e-4$ 2.01	$3.48e-5$ 2.00
P_1	$3.59e-2$ 1.46	$1.06e-2$ 1.77	$2.79e-3$ 1.92	$7.08e-4$ 1.98	$1.78e-4$ 1.99
P_2	$1.18e-3$ 3.17	$1.30e-4$ 3.18	$1.53e-5$ 3.08	$1.88e-6$ 3.03	— —
P_3	$9.62e-5$ 4.00	$5.70e-6$ 4.08	$3.44e-7$ 4.05	— —	— —
Q_1^{rot}	$9.70e-3$ 1.98	$2.43e-3$ 2.00	$6.10e-4$ 2.00	$1.52e-4$ 2.00	$3.80e-5$ 2.00
Q_1	$4.55e-3$ 2.01	$1.14e-3$ 2.00	$2.84e-4$ 2.00	$7.10e-5$ 2.00	$1.77e-5$ 2.00
Q_2	$1.77e-4$ 2.97	$2.23e-5$ 2.99	$2.79e-6$ 3.00	$3.48e-7$ 3.00	— —
Q_3	$3.85e-6$ 3.97	$2.42e-7$ 3.99	$1.51e-8$ 4.00	— —	— —

Tabelle 5.2: Fehler/Konvergenzordnung in der L^2 -Norm

FE-Raum	Fehler und Konvergenzordnung auf Level i				
	2	3	4	5	6
Q_1^{rot}	$9.84e-3$ 1.97	$2.47e-3$ 1.99	$6.19e-4$ 2.00	$1.55e-4$ 2.00	$3.87e-5$ 2.00
Q_1	$6.59e-3$ 2.01	$1.64e-3$ 2.00	$4.11e-4$ 2.00	$1.03e-4$ 2.00	$2.57e-5$ 2.00
Q_2	$2.38e-4$ 2.96	$3.00e-5$ 2.99	$3.75e-6$ 3.00	$4.69e-7$ 3.00	— —
Q_3	$6.47e-6$ 3.98	$4.06e-7$ 4.00	$2.54e-8$ 4.00	— —	— —

Tabelle 5.3: Fehler/Konvergenzordnung in der L^2 -Norm (bel. Hexaeder)

FE-Raum	Fehler und Konvergenzordnung auf Level i				
	2	3	4	5	6
P_1^{nc}	$3.24e-1$ 0.97	$1.62e-1$ 0.95	$8.12e-2$ 1.00	$4.06e-2$ 1.00	$2.03e-2$ 1.00
P_1	$5.77e-1$ 0.76	$3.08e-1$ 0.91	$1.57e-1$ 0.97	$7.89e-2$ 0.99	$3.95e-2$ 1.00
P_2	$7.59e-2$ 1.84	$1.99e-2$ 1.93	$5.07e-3$ 1.97	$1.28e-3$ 1.99	— —
P_3	$5.81e-3$ 2.86	$7.41e-4$ 2.97	$9.30e-5$ 3.00	— —	— —
Q_1^{rot}	$3.78e-1$ 0.99	$1.89e-1$ 1.00	$9.44e-2$ 1.00	$4.72e-2$ 1.00	$2.36e-2$ 1.00
Q_1	$2.17e-1$ 0.99	$1.09e-1$ 1.00	$5.45e-2$ 1.00	$2.73e-2$ 1.00	$1.36e-2$ 1.00
Q_2	$1.11e-2$ 2.00	$2.76e-3$ 2.00	$6.91e-4$ 2.00	$1.73e-4$ 2.00	— —
Q_3	$3.68e-4$ 3.00	$4.57e-5$ 3.00	$5.73e-6$ 3.00	— —	— —

Tabelle 5.4: Fehler/Konvergenzordnung in der disk. H^1 -Seminorm

FE-Raum	Fehler und Konvergenzordnung auf Level i				
	2	3	4	5	6
Q_1^{rot}	$3.84e-1$ 0.99	$1.92e-1$ 0.99	$9.81e-2$ 1.00	$4.81e-2$ 1.00	$2.41e-2$ 1.00
Q_1	$2.31e-1$ 1.00	$1.16e-1$ 1.00	$5.78e-2$ 1.00	$2.89e-2$ 1.00	$1.45e-2$ 1.00
Q_2	$1.21e-2$ 2.00	$3.01e-3$ 2.00	$7.53e-4$ 2.00	$1.88e-4$ 2.00	— —
Q_3	$4.69e-4$ 3.00	$5.86e-5$ 3.00	$7.32e-6$ 3.00	— —	— —

Tabelle 5.5: Fehler/Konv.ordnung in der disk. H^1 -Seminorm (bel. Hexaeder)

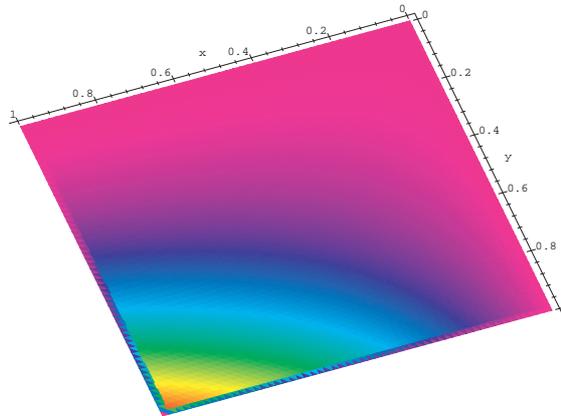


Abbildung 5.3: Lösung (5.5) für $\nu = 10^{-6}$ und $z = 0.5$.

2.2.4 beschriebene Upwind-Stabilisierung mit den Upwind-Funktionen Φ_1 für die scharfe und Φ_2 für die Samarskij Upwind-Methode verwendet. Die konformen Diskretisierungen werden mit der Stromlinien-Diffusions-Methode stabilisiert. Der Stromlinien-Diffusions-Parameter δ_K wurde gemäß (2.16) mit $\delta_0 = 0.125$ und $\delta_1 = 0$ gewählt.

5.4.2 Auswertung der Testrechnungen

Für die numerischen Berechnungen des Problems (5.6) geben wir sowohl den Fehler in der $L^2(\Omega)$ -Norm und in der diskreten H^1 -Seminorm, als auch die Fehlerentwicklung in dem Teilgebiet $[0, 0.75]^3$, in dem die Lösung keine Grenzschichten besitzt, an. Die folgenden Tabellen geben insbesondere für jeden Finite-Elemente-Raum in der ersten Zeile den Fehler und in der zweiten Zeile die Konvergenzordnung auf dem entsprechenden Level der Verfeinerung wieder.

Wir erkennen, daß der $L^2(\Omega)$ -Fehler für alle Diskretisierungen nur die Konvergenzordnung 0.5 besitzt, siehe Tabelle 5.6. In der diskreten H^1 -Seminorm divergiert die Lösung sogar mit der Ordnung 0.5, siehe Tabelle 5.8. Da für alle Verfeinerungen die Breite der Grenzschichten kleiner als die Gitterweite h ist, kann man auf Grund des Interpolationsfehlers kein besseres Verhalten in Ω erwarten. Außerhalb der Grenzschichten erkennt man deutliche verbesserte Konvergenzraten, die für Elemente höherer Ordnung sogar optimal sind, vgl. Tabelle 5.9. Unter Nutzung der nichtkonformen Upwind-Diskretisierung erkennen wir bei beiden Upwind-Varianten die gleichen Ergebnisse, da mit kleinem Diffusionsparameter ν die Funktionen Φ_1 , Φ_2 gemäß (2.20), (2.22) nahezu gleich sind.

FE-Raum	$\Phi_i(\cdot)$	Fehler und Konvergenzordnung auf Level i				
		2	3	4	5	6
P_1^{nc}	1	$5.31e-2$ 0.51	$3.65e-2$ 0.54	$2.52e-2$ 0.53	$1.76e-2$ 0.52	$1.23e-2$ 0.51
	2	$5.31e-2$ 0.51	$3.65e-2$ 0.54	$2.52e-2$ 0.53	$1.76e-2$ 0.52	$1.23e-2$ 0.51
P_1	—	$8.63e-2$ 0.37	$6.27e-2$ 0.46	$4.49e-2$ 0.48	$3.19e-2$ 0.49	$2.26e-2$ 0.50
P_2	—	$8.40e-2$ 0.45	$5.99e-2$ 0.49	$4.24e-2$ 0.50	$3.00e-2$ 0.50	— —
P_3	—	$8.37e-2$ 0.45	$5.95e-2$ 0.49	$4.22e-2$ 0.50	— —	— —
Q_1^{rot}	1	$5.10e-2$ 0.50	$3.58e-2$ 0.50	$2.53e-2$ 0.50	$1.80e-2$ 0.49	$1.27e-2$ 0.50
	2	$5.06e-2$ 0.50	$3.58e-2$ 0.50	$2.54e-2$ 0.50	$1.80e-2$ 0.49	$1.27e-2$ 0.50
Q_1	—	$8.35e-2$ 0.36	$6.03e-2$ 0.47	$4.29e-2$ 0.49	$3.04e-2$ 0.50	$2.15e-2$ 0.50
Q_2	—	$8.00e-2$ 0.46	$5.66e-2$ 0.50	$4.00e-2$ 0.50	$2.82e-2$ 0.50	— —
Q_3	—	$7.95e-2$ 0.48	$5.63e-2$ 0.50	$3.98e-2$ 0.50	— —	— —

Tabelle 5.6: Fehler/Konvergenzordnung in der L^2 -Norm

FE-Raum	$\Phi_i(\cdot)$	Fehler und Konvergenzordnung auf Level i				
		2	3	4	5	6
P_1^{nc}	1	$2.66e-3$ 0.80	$1.43e-3$ 0.90	$7.43e-4$ 0.94	$3.80e-4$ 0.97	$1.92e-4$ 0.98
	2	$2.66e-3$ 0.80	$1.43e-3$ 0.90	$7.43e-4$ 0.94	$3.80e-4$ 0.97	$1.92e-4$ 0.98
P_1	—	$6.49e-3$ 2.23	$6.37e-4$ 3.35	$3.71e-5$ 4.10	$7.41e-6$ 2.38	$1.64e-6$ 2.13
	P_2	—	$7.71e-3$ 1.87	$7.96e-4$ 3.28	$1.41e-5$ 5.82	$9.54e-8$ 7.20
P_3	—	$7.48e-3$ 1.91	$7.31e-4$ 3.35	$1.21e-5$ 5.90	— —	— —
	Q_1^{rot}	1	$2.15e-3$ 1.05	$1.04e-3$ 1.04	$5.16e-4$ 1.02	$2.57e-4$ 1.01
2		$2.15e-3$ 1.05	$1.04e-3$ 1.04	$5.16e-4$ 1.02	$2.57e-4$ 1.01	$1.27e-4$ 1.00
Q_1	—	$4.68e-3$ 2.37	$2.32e-4$ 4.34	$2.18e-6$ 6.73	$5.10e-7$ 2.11	$1.27e-7$ 2.02
	Q_2	—	$5.01e-3$ 2.24	$3.21e-4$ 3.96	$2.15e-6$ 7.23	$7.96e-9$ 8.07
Q_3		—	$5.01e-3$ 2.23	$3.20e-4$ 3.97	$2.11e-6$ 7.24	— —

 Tabelle 5.7: Fehler/Konvergenzordnung in der L^2 -Norm auf $[0, 0.75]^3$

FE-Raum	$\Phi_i(\cdot)$	Fehler und Konvergenzordnung auf Level i				
		2	3	4	5	6
P_1^{nc}	1	$2.15e + 0$ -0.38	$2.86e + 0$ -0.41	$3.89e + 0$ -0.44	$5.37e + 0$ -0.47	$7.50e + 0$ -0.48
	2	$2.15e + 0$ -0.38	$2.86e + 0$ -0.41	$3.89e + 0$ -0.44	$5.37e + 0$ -0.47	$7.50e + 0$ -0.48
P_1	—	$5.57e - 1$ -0.26	$9.53e - 1$ -0.77	$1.54e + 0$ -0.69	$2.32e + 0$ -0.60	$3.40e + 0$ -0.55
P_2	—	$5.94e - 1$ -0.32	$9.91e - 1$ -0.74	$1.60e + 0$ -0.66	$2.35e + 0$ -0.55	— —
P_3	—	$6.30e - 1$ -0.36	$1.03e + 0$ -0.72	$1.62e + 0$ -0.65	— —	— —
Q_1^{rot}	1	$1.35e + 0$ -0.53	$1.93e + 0$ -0.51	$2.73e + 0$ -0.51	$3.87e + 0$ -0.50	$5.49e + 0$ -0.50
	2	$1.35e + 0$ -0.53	$1.93e + 0$ -0.51	$2.73e + 0$ -0.51	$3.87e + 0$ -0.50	$5.49e + 0$ -0.50
Q_1	—	$5.64e - 1$ -0.33	$9.81e - 1$ -0.80	$1.60e + 0$ -0.71	$2.44e + 0$ -0.61	$3.59e + 0$ -0.55
Q_2	—	$5.92e - 1$ -0.41	$1.02e + 0$ -0.78	$1.63e + 0$ -0.68	$2.47e + 0$ -0.60	— —
Q_3	—	$6.00e - 1$ -0.42	$1.03e + 0$ -0.78	$1.65e + 0$ -0.67	— —	— —

Tabelle 5.8: Fehler/Konvergenzordnung in der diskreten H^1 -Seminorm

FE-Raum	$\Phi_i(\cdot)$	Fehler und Konvergenzordnung auf Level i				
		2	3	4	5	6
P_1^{nc}	1	$8.86e-2$ 0.00	$9.41e-2$ -0.09	$9.82e-2$ -0.06	$1.00e-1$ -0.03	$1.02e-1$ -0.02
	2	$8.86e-2$ 0.00	$9.41e-2$ -0.09	$9.82e-2$ -0.06	$1.00e-1$ -0.03	$1.02e-1$ -0.02
P_1	—	$6.02e-2$ 1.20	$2.25e-2$ 1.42	$1.00e-2$ 1.71	$4.97e-3$ 1.01	$2.48e-3$ 1.00
P_2	—	$7.94e-2$ 0.98	$1.53e-2$ 2.29	$5.47e-4$ 4.81	$6.47e-5$ 3.01	— —
P_3	—	$7.63e-2$ 1.05	$1.30e-2$ 2.55	$4.13e-4$ 4.98	— —	— —
Q_1^{rot}	1	$2.04e-2$ 0.72	$1.48e-2$ -0.47	$1.30e-2$ -0.18	$1.26e-2$ -0.05	$1.25e-2$ -0.01
	2	$2.04e-2$ 0.72	$1.48e-2$ -0.47	$1.30e-2$ -0.18	$1.26e-2$ -0.05	$1.25e-2$ -0.01
Q_1	—	$3.53e-2$ 1.67	$5.55e-3$ 2.67	$1.85e-3$ 1.59	$9.23e-4$ 1.00	$4.61e-4$ 1.00
Q_2	—	$3.78e-2$ 1.47	$5.23e-3$ 2.85	$7.52e-5$ 6.12	$3.90e-6$ 4.27	— —
Q_3	—	$3.78e-2$ 1.47	$5.19e-3$ 2.86	$7.27e-5$ 6.16	— —	— —

Tabelle 5.9: Fehler/Konv.ordnung in der disk. H^1 -Seminorm auf $[0, 0.75]^3$

5.5 Ein praktisches Beispiel

Den Abschnitt der numerischen Tests wollen wir mit einem Beispiel aus der Praxis abrunden und beenden. Wir betrachten hierzu einen Spezialfall der Chromatographie – die Annulare Chromatographie (annular, engl.: ringförmig).

Chromatographische Separationsprozesse finden für die Trennung und Reinigung von Mehrkomponentenprodukten in der biochemischen und pharmazeutischen Industrie eine immer stärkere Beachtung (Ganetsos und Baker, 1993, [GB93]). Oftmals lassen sich nur anhand solcher Verfahren die erforderlichen Reinheiten von Stoffen sicherstellen. Jedoch bedarf es dazu einer gezielten Betrachtung der Betriebsparameter, wobei Simulationen einen wichtigen Beitrag leisten können. Neben der konventionellen, nichtkontinuierlichen Methode trifft heute ein gestiegenes Interesse insbesondere auf die kontinuierlichen Separationsprozesse, zu denen auch die Annulare Chromatographie zählt. Obwohl verschiedene Vorteile eine solche Vorgehensweise attraktiv machen (z.B. ist es gegenüber anderen Verfahren möglich, mehr als 2 Komponenten aus einem Stoffgemisch herauszufiltern), wartet diese Technik immer noch auf den industriellen Durchbruch. Erstmals erwähnt wurde dieses chromatographische Prinzip von Martin im Jahre 1949, [Mar49].

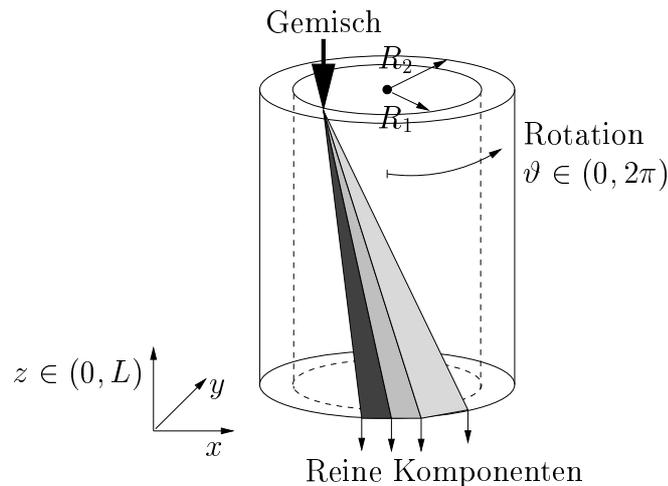


Abbildung 5.4: Schema der Annularen Chromatographie

Die grundsätzliche Vorgehensweise der Annularen Chromatographie ist in der Abbildung 5.4 dargestellt. Die stationäre Phase, ein poröser Feststoff, befindet sich in einem Ringspalt zwischen zwei konzentrischen und (langsam) drehenden Zylindern. Die mobile Phase, zum Beispiel ein Lösungsmittel, wird kontinuierlich über den gesamten Querschnitt in die Oberseite des Apparates gepumpt; mit Ausnahme des (relativ kleinen) Gebietes, in dem das Mehrkomponentengemisch kontinuierlich durch einen festen Zufuhrkanal hinzugegeben wird. Da die einzelnen Komponenten mit unterschiedlicher Geschwindigkeit wandern, werden sie bei der Rotation des Ringspalts verschieden weit ausgelenkt und auf dem Weg

abwärts voneinander getrennt. Es kommt zur Ausbildung schraubenförmiger, helicaler Konzentrationsbänder, welche charakteristisch für jede Substanz sind. Am unteren Auslauf können in fixierten Kreisregionen die reinen Stoffe gewonnen und somit gesammelt werden.

Um eine Trennung der aufgelösten Komponenten quantifizieren zu können, ist es notwendig einige Bedingungen zu treffen, vergleiche [TFTSM01].

- Temperatureffekte sind gewöhnlich klein, so daß der Prozeß in der flüssigen Chromatographie als isothermisch betrachtet werden kann.
- Da in der Praxis die fixierten Betten am Boden aus kleinen Partikeln von festem Zustand sind, ist der Widerstand zwischen den 2 Phasen gering und es kann ein lokales Gleichgewicht zwischen mobiler und stationärer Phase angenommen werden.

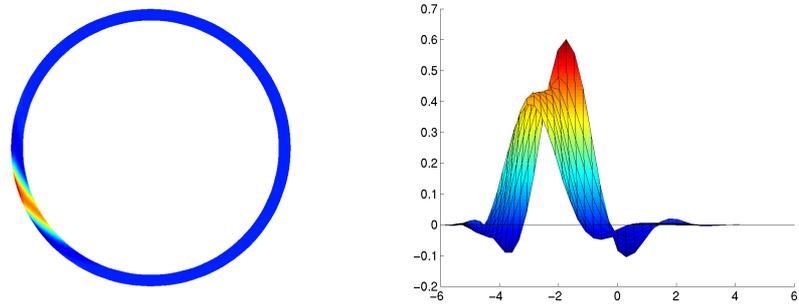
Auf Grundlage dieser Annahmen ergibt sich das mathematische Modell dieses Prozesses mit einem System von N_C nichtlinearen Konvektions-Diffusions-Gleichungen in drei Dimensionen. N_C entspricht der Anzahl der Einzelkomponenten des zu reinigenden Stoffgemisches. Schwierigkeiten bei der numerischen Lösung dieses Problems entstehen vor allem aus der nichtlinearen Kopplung der Lösungskomponenten. Die entstehenden hochdimensionalen Gleichungssysteme und singular gestörte Probleme bei bestimmten Parameterkonstellationen geben zusätzliche Schwierigkeiten auf.

In Anbetracht der Komplexität dieses Systems und der damit verbundenen Probleme bei der Implementierung und Berechnung, beschränken wir uns in dieser Arbeit auf eine einleitende Modellgleichung im Fall der Konzentration c einer Einzelkomponente. Wir betrachten eine lineare Konvektions-Diffusions-Gleichung mit Dirichlet- und Neumann-Randbedingungen.

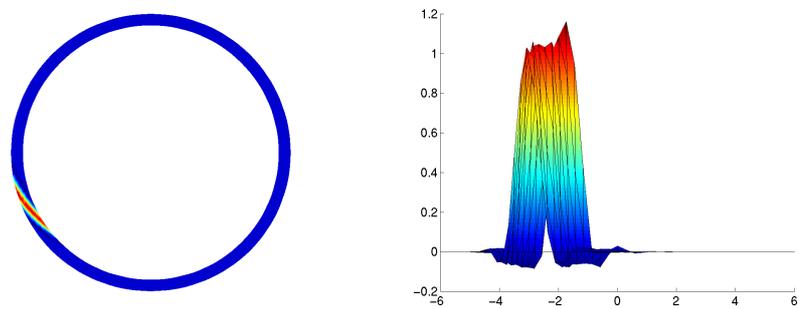
$$\begin{aligned}
 -\nu \Delta c + \left(-\frac{y}{r}, \frac{x}{r}, -u \right)^T \cdot \nabla c &= 0 \\
 c &= 1 \quad \text{in } \Omega_D^0 \\
 c &= 0 \quad \text{in } \Omega_D \setminus \Omega_D^0 \\
 \partial c / \partial n &= 0 \quad \text{in } \partial \Omega \setminus \Omega_D
 \end{aligned} \tag{5.7}$$

Das Gebiet Ω_D bezeichnet die Menge aller (x, y) -Paare für ein konstantes $z = L$, also den oberen Rand des Apparates. $\Omega_D^0 \subset \Omega_D$ definiert das Gebiet, in dem die Komponente dem System zugeführt wird – dieser Bereich entspricht in unserem Fall einem 10° breiten Teilstück des Kreisringes Ω_D . Der Diffusionsparameter ν wird in unseren Berechnungen 10^{-8} gesetzt, die vertikale Geschwindigkeit vereinbaren wir mit $u = 2$. $r := \sqrt{x^2 + y^2}$ definiert bei festem z den Abstand zur Mittelachse des Zylinders, dessen Parameter wir mit $R_1 = 5.5$ cm, $R_2 = 6$ cm und $L = 40$ cm festlegen.

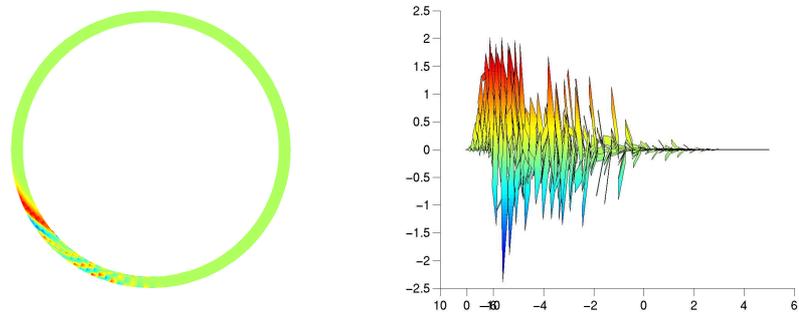
Q_1 -Elemente, SDFEM



Q_2 -Elemente, SDFEM



Q_1^{rot} -Elemente, SDFEM



Q_1^{rot} -Elemente, Upwind

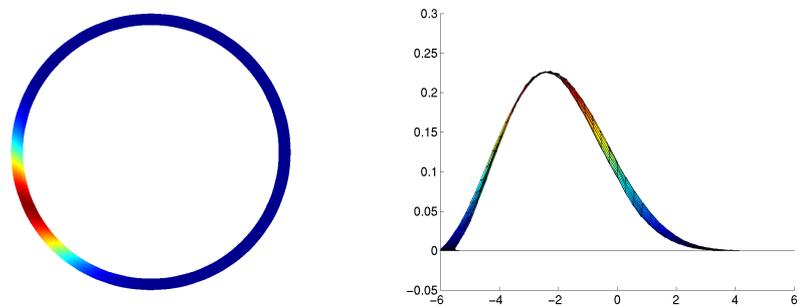


Abbildung 5.5: Ergebnisse der Testrechnungen für das Problem (5.7)

Die Ergebnisse der ersten Serie von Testrechnungen werden durch die Abbildung 5.5 wiedergegeben. In diesen Graphiken ist die Konzentration der Einzelkomponente am Boden des Zylinders dargestellt, also genau der Bereich Ω_b , in dem die Entnahme des Stoffes erfolgt. In der linken Spalte wird der Querschnitt vom Boden des Apparates für alle vier Testrechnungen gezeigt; zur Verdeutlichung der Effekte einzelner Verfahren, gibt die rechte Spalte die Darstellung der Lösung c in Abhängigkeit von der x -Koordinate wieder. In diesen Rechnungen wurde der SD-Parameter mit $\delta_0 = 0.5$, $\delta_1 = 0$ gewählt, sowie die Samarskij Upwind-Methode angewandt. Wir erkennen unter Verwendung von Q_1 -, Q_2 -Elementen ähnliche Ergebnisse, dennoch lassen sich zwei Besonderheiten deuten:

1. In beiden Rechnungen zeigen sich Spitzen in der Lösung, die sowohl einen Ausbruch am maximalen Wert der Amplitude, wie auch Ausschläge in den negativen Bereich beinhalten. Hierbei fällt vor allem auf, daß die Differenz zwischen dem maximalen Funktionswert der Spitze und dem maximalen Funktionswert im Bereich ohne diese „Ausreißer“ in beiden Rechnungen konstant ist – trotz der Argumentation im nächsten Punkt.
2. Die höhere Genauigkeit der Q_2 -Elemente spiegelt sich in der Graphik durch einen kleineren Winkelbereich für den gewonnen „reinen“ Stoff wieder – im Gegensatz hierzu ist der maximale Funktionswert ca. doppelt so groß wie in den Ergebnissen der Rechnungen mit Q_1 -Elementen, vergleiche Tabelle 5.10. Diese Tabelle unterstreicht ebenfalls, daß wir für die genaueren Ergebnisse einen enormen Anstieg der Rechenzeiten in Kauf nehmen müssen.

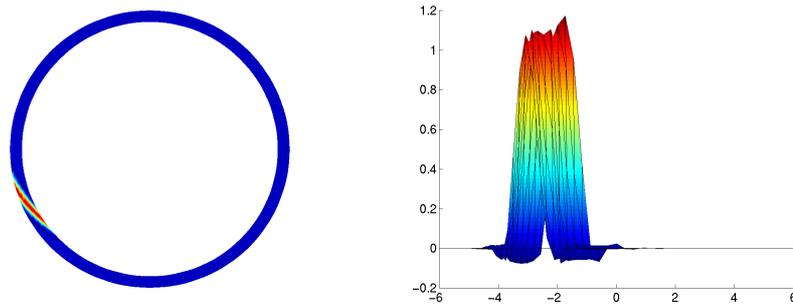
Eine große Differenz zu diesen Berechnungen zeigen hingegen die Ergebnisse unter Nutzung der nichtkonformen Q_1^{rot} -Elemente. Trotz Stabilisierung mittels der Stromlinie-Diffusions-Methode zeigt die Lösung starke Oszillationen und liefert inakzeptable Ergebnisse, siehe auch Tabelle 5.10. Bei John, Matthies, Schieweck und Tobiska [JMST98] wurde diese Problematik im zweidimensionalen Fall genauer behandelt. Das Fazit dieser Arbeit: Die Nutzung des Finite-Elemente-Raumes Q_1^{rot} in Verbindung mit der SDFEM macht die Anwendung von Sprungtermen zwingend notwendig. Diese Argumentation wird durch die Arbeit [ST01] von Stynes und Tobiska noch stärker fokussiert. Für eine Konvektions-Diffusions-Gleichung (2.1) mit hinreichend glatten Koeffizienten gemäß (2.11), wird gezeigt, daß Sprungterme unter der Bedingung

$$c_0 \geq 24C_1|b|_{1,\infty} \quad (5.8)$$

nicht erforderlich sind (C_1 konstant). Im unserem Beispiel (5.7) ist jedoch sowohl der Reaktionsterm, als auch die Divergenz des Vektors b im Konvektionsterm gleich Null, so daß die hinreichenden Bedingungen (2.11), (5.8) nicht erfüllt sind. Dennoch zeigen die Testrechnungen, daß die in den beiden angesprochenen Arbeiten erläuterten Effekte auch im Dreidimensionalen auftreten können und das

in diesem Bereich durchaus die Notwendigkeit für weitere Betrachtungen besteht. Der Stabilisierungseffekt der Upwind-Diskretisierung zeigt sich in der letzten Zeile der Abbildung 5.5. Die Oszillationen der Lösung sind hierbei gegenüber dem Fall der SDFEM zwar behoben, jedoch verschmiert die Lösung im Vergleich zu den Berechnungen mit konformen Finite-Elemente-Räumen stark und die „reine“ Komponente verteilt sich fast über ein Viertel des Kreisringes. Nehmen wir erneut die Tabelle 5.10 zu Hilfe, ist die Folge ein extrem gefallener maximaler Funktionswert. Dieser beträgt nur ein Sechstel gegenüber dem Fall von Q_2 -Elementen. Jedoch ist dieser Fall der Einzige, in dem der minimale Funktionswert nicht unter Null fällt; auch die Rechenzeiten sind im Vergleich auffallend gering. Trotz dieser positiven Argumente sind die gewonnenen Ergebnisse als unbefriedigend einzuordnen. Die erläuterten Effekte sind typische Eigenschaften des Upwind-Verfahrens, wie sie in [RST96] näher behandelt werden.

Q_2 -Elemente, SDFEM mit $\delta_0 = 0.25$



Q_2 -Elemente, SDFEM mit $\delta_0 = 1$

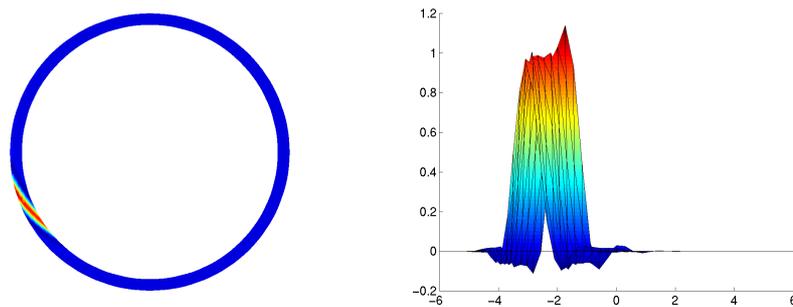


Abbildung 5.6: Einfluß des SD-Parameters auf die Lösung des Problems (5.7)

Ergänzend wurde in einer zweiten Serie von Testrechnungen der Einfluß des SD-Parameters δ_0 untersucht. Im Gegensatz zur ersten Testserie wurde dieser Parameter in Berechnungen mit Q_2 -Elementen halbiert bzw. verdoppelt. Die Ergebnisse der Abbildung 5.6 zeigen durch die veränderte Viskosität eine mit steigendem SD-Parameter leicht verschmierende Lösung. Desweiteren erkennen wir im

Fall des kleineren SD-Parameters eine glattere Lösung im Bereich des maximalen Wertes der Amplitude. Die bereits beschriebenen Ausschläge nach oben, sind hier nahezu geglättet.

FE-Raum	Diskr.	δ_0	max. Fkt.wert	min. Fkt.wert	Rechenzeit in s	Ω_b mit $c \neq 0$
Q_1	SDFEM	0.5	0.6024	-0.1047	366	45°
Q_2	SDFEM	0.25	1.1736	-0.0763	14618	28°
	SDFEM	0.5	1.1624	-0.0853	16635	30°
	SDFEM	1.0	1.1398	-0.1120	23147	32°
Q_1^{rot}	SDFEM	0.5	2.0140	-2.3834	5569	85°
	UPWIND	–	0.2276	0	126	72°

Tabelle 5.10: Vergleich der Testrechnungen zum Problem (5.7)

Als Anhang liegt dieser Arbeit eine CD-ROM bei, auf der drei MPEG-Dateien im Verzeichnis **ANIMATIONEN** abgelegt sind, sowie die hier ausgewerteten graphischen Ergebnisse (im Verzeichnis **GRAPHIKEN**). Die Datei **Chroma3D_1.mpg** gibt für den stationären Fall des Problems (5.7) mit $u = 2$ das ausgewertete 3D-Modell wieder. In der Datei **Chroma3D_2.mpg** ist für den gleichen Fall der Parameter u , also die vertikale Geschwindigkeit, auf 0.6 herabgesetzt wurden – hierdurch bildet sich eine stärker gewundene Schraubenlinie aus. Für diesen Fall findet man in der Datei **Chroma3D_quer.mpg** noch eine Wanderung durch den Querschnitt des Zylinders vom Einfluß bis zum Boden. Man erkennt hier gut, wie sich am inneren Rand des Ringspalts, die Lösung aufgrund des kürzeren Weges schneller als an den Außenrändern fortbewegt. Für diese drei Animationen wurde jeweils eine Berechnung mittels Q_2 -Elementen und der SDFEM mit $\delta_0 = 0.5$ zugrunde gelegt.

6 Abschließende Bemerkungen

In dieser Arbeit haben wir uns auf Konvektions-Diffusions-Gleichungen im Dreidimensionalen beschränkt. Vor dem praktischen Hintergrund dieser Arbeit, der Implementierung der Referenztransformationen und der Upwind-Diskretisierung im Dreidimensionalen, wurden im ersten Teil in einer Zusammenfassung die benötigten theoretischen Grundlagen ausführlich erläutert und auf Besonderheiten hingewiesen. Konvergenzaussagen und Fehlerabschätzungen aus der Fachliteratur runden diese Betrachtungen ab und bilden die Basis für die Testrechnungen.

Die numerischen Ergebnisse spiegeln die erläuterten Aussagen wieder; anhand zweier theoretischer Beispiele konnten die Vorbetrachtungen durch die numerischen Tests untermauert werden. Ebenfalls beeindruckend gezeigt, haben sich die Auswirkungen von Grenzschichten auf die Qualität der Ergebnisse. Das abschließende (reduzierte) praktische Beispiel aus der Chromatographie zeigt erste Möglichkeiten, die ein Schritt vom Zwei- ins Dreidimensionale mit sich bringen. Beispielsweise kann in dieser Arbeit auf eine Reihe von Annahmen bzw. Beschränkungen im Vergleich zur Arbeit [TFTSM01] verzichtet werden. Die Probleme lassen sich hierdurch effizienter angehen und die Ergebnisse sind für die Industrie damit entscheidend relevanter und hilfreicher als zuvor. Dieses Beispiel unterstreicht jedoch auch in der Literatur beschriebene, negative bzw. positive Effekte von bestimmten Diskretisierungen.

Aufgrund der gewonnenen Ergebnisse können wir zum Schluß kommen, daß Fehler bei der Implementierung im weitesten Sinne ausgeschlossen werden können. Die Testrechnungen decken sich in nahezu allen Punkten mit der Theorie.

Wir mussten jedoch auch erkennen, daß die Komplexität der dreidimensionalen Probleme (siehe zum Beispiel Tabelle 5.1) nach diesem ersten Schritt Grenzen setzt; Rechnungen mit Elementen höherer Ordnung brachen teilweise nach wenigen Verfeinerungen ab. Probleme wirft auch die Beschreibung der im Dreidimensionalen komplexeren Gebiete auf. Desweiteren haben wir in unseren Berechnungen Verhalten der Lösung erkannt, die bisher nur in Arbeiten für zweidimensionale Probleme behandelt wurden – Aussagen für Gleichungen in drei Dimensionen sind in der Literatur kaum zu finden. Auf diesem Gebiet sind für die Zukunft nähere Untersuchungen zu treffen, um auch vor dem praktischen

Hintergrund bestmögliche Ergebnisse zu erhalten. Ein weiteres Ziel bleibt die Lösung der Annularen Chromatographie (im Dreidimensionalen) für ein Gemisch mit mindestens zwei Komponenten. Da die Nichtlinearität hierbei von entscheidender Bedeutung ist, wird die Implementierung eines nichtlinearen Iterationszyklusses in das Programmpaket `MOONMD` unumgänglich. Entsprechende Projekte laufen bereits am Institut für Analysis und Numerik an der Otto-von-Guericke-Universität in der Arbeitsgruppe von Prof. Tobiska in Zusammenarbeit mit dem Institut für Verfahrenstechnik.

7 Notation

Sätze, Lemmata usw. werden innerhalb eines Kapitels numeriert (z.B. Satz 2.3).

Gleichungen werden innerhalb eines Kapitels fortlaufend numeriert.

Quelltexte, Dateinamen usw. werden durch **angepaßte Schriftart** entsprechend kenntlich gemacht.

Feste Bezeichnungen:

—	Abbruch der Testrechnungen (in Bezug auf Tabellen 5.1–5.9)
$\mathbf{1}_N$	Vektor der Länge N mit 1-Einträgen
$a(., .)$	Bilinearform
P_k	Menge aller Polynome vom Höchstgrad k
Q_k	Menge aller Polynome, die das Produkt von Polynomen vom Höchstgrad k in jeder Variablen sind
J_F	Funktionalmatrix zum Funktional F
\mathbb{R}	Menge der reellen Zahlen
\mathbb{R}^n	Menge aller n -Tupel (x_1, \dots, x_n) mit $x_i \in \mathbb{R}$
V	Banachraum
$\dim V$	Dimension von V
V^*	zu V gehörender Dualraum
V_h	endlichdimensionaler Finite-Elemente-Raum
$\ \cdot\ _V$	Norm in V
$f(v)$	Wert des Funktionals $f \in V^*$ bei Anwendung auf $v \in V$
$U \hookrightarrow V$	stetige Einbettung von U in V
Ω	Grundgebiet der räumlichen Veränderlichen
$\partial\Omega$	Rand von Ω
\underline{n}	äußere Normale bzgl. Ω
$\frac{\partial}{\partial n}$	Ableitung in Richtung n
h	Diskretisierungsparameter bzgl. der räumlichen Veränderlichen
\mathcal{T}_h	Zerlegung des Gebiets Ω

K	Gitterzelle der Zerlegung \mathcal{T}_h
$\text{diam}(K)$	Durchmesser der Zelle K
\hat{K}	Referenzelement
F_K	Referenzabbildung von \hat{K} auf K
ξ, η, ζ	Referenzkoordinaten
$C^l(\Omega)$	Räume differenzierbarer Funktionen
$C^l(\bar{\Omega})$	Menge aller Funktionen aus $C^l(\Omega)$, die sich zusammen mit ihren partiellen Ableitungen bis zur Ordnung l stetig auf den Abschluß $\bar{\Omega}$ fortsetzen lassen
$L^p(\cdot)$	Räume zur p -ten Potenz integrierbarer Funktionen ($1 \leq p \leq \infty$)
$\ \cdot\ _\infty$	Norm im $L^\infty(\Omega)$
$H^l(\cdot), H_0^l(\cdot)$	Sobolev-Räume
$\ \cdot\ _{l,K}, \ \cdot\ _{l,\Omega}$	Norm in H^l über K bzw. Ω
$ \cdot _{l,K}, \cdot _{l,\Omega}$	Seminorm in H^l über K bzw. Ω
(\cdot, \cdot)	Skalarprodukt im Hilbertraum
Δ	Laplace-Operator
∇	Gradient
$\text{div}(\cdot)$	Divergenz
$u _{\partial\Omega}$	u eingeschränkt auf das Gebiet $\partial\Omega$
$\det A, A $	Determinante der Matrix A
$\inf_{v \in V}, \sup_{v \in V}$	Infimum bzw. Supremum über alle v aus V
$\min_{v \in V}, \max_{v \in V}$	Minimum bzw. Maximum über alle v aus V
$\text{sgn}(a)$	Vorzeichen der Zahl a

8 Literaturverzeichnis

- [Bey97] BEY, J.: *Finite-Volumen- und Mehrgitterverfahren für elliptische Randwertprobleme*, Eberhard-Karls-Universität Tübingen, Dissertation, 1997
- [CL93] CIARLET, P.G.; LIONS, J.L.: *Handbook of Numerical Analysis II - Finite Element Methods (Part 1)*. Elsevier Science Publisher B.V., 1993
- [CR73] CROUZEIX, M.; RAVIART, P.A.: Conforming and nonconforming finite element methods for solving the stationary Stokes equations. *R.A.I.R.O. Numerical Analysis* 3 (1973), S. 33–76
- [GB93] GANETSOS, G.; BARKER, P.: *Preparative and production scale chromatography*. New York : Marcel Dekker, 1993
- [GR94] GROSSMANN, Ch.; ROOS, H.-G.: *Numerik partieller Differentialgleichungen*. Stuttgart : Teubner-Verlag, 1994
- [Hac86] HACKBUSCH, W.: *Theorie und Numerik elliptischer Differentialgleichungen*. Stuttgart : Teubner-Verlag, 1986
- [HB79] HUGHES, T.J.R.; BROOKS, A.: A multi-dimensional upwind scheme with no crosswind diffusion. *AMD* 34 (1979), S. 19–35
- [JMST98] JOHN, V.; MATTHIES, G.; SCHIEWECK, F.; TOBISKA, L.: A streamline-diffusion method for nonconforming finite element approximation applied to convection-diffusion problems. *Computer methods in applied mechanics and engineering* 166 (1998), S. 85–97
- [Mar49] MARTIN, A.V.P.: Summarizing paper. *Discussions of Faraday Society* 7 (1949), S. 332–336
- [OU84] OHMORI, K.; USHIJIMA, T.: A technique of upstream type applied to a linear nonconforming finite element approximation of convective diffusion equation. *R.A.I.R.O. Numerical Analysis* 18 (1984), S. 309–322

- [RST96] ROOS, H.-G.; STYNES, M.; TOBISKA, L.: *Numerical Methods for Singularly Perturbed Differential Equations. Convection-Diffusion and Flow Problems*. Springer-Verlag, 1996
- [RT92] RANNACHER, R.; TUREK, S.: Simple nonconforming quadrilateral Stokes elements. *Numerical Methods for Partial Differential Equations* 8 (1992), S. 97–111
- [Saa96] SAAD, Y.: *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. PWS Publishing Company, 1996
- [Sch97] SCHIEWECK, F.: *Parallele Lösung der stationären inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen*, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Habilitationsschrift, 1997
- [ST96] SCHIEWECK, F.; TOBISKA, L.: An optimal order error estimate for an upwind discretization of the Navier-Stokes equations. *Numerical Methods for Partial Differential Equations* 12 (1996), S. 407–421
- [ST01] STYNES, M.; TOBISKA, L.: The streamline-diffusion method for nonconforming Q_1^{rot} elements on rectangular tensor-product meshes. *IMA Journal of Numerical Analysis* 21 (2001), S. 123–142
- [TFTSM01] THIELE, A.; FALK, T.; TOBISKA, L.; SEIDEL-MORGENSTERN, A.: Prediction of elution profiles in annular chromatography. *Computers and Chemical Engineering* (2001)
- [TT89] THIELE, A.; TOBISKA, L.: A weighted upwind finite element method for solving the stationary Navier-Stokes equations. *Wissenschaftliche Zeitung Technische Universität Magdeburg* 33 (1989), S. 13

Ehrenwörtliche Erklärung

Ich erkläre hiermit ehrenwörtlich, daß ich die vorliegende Arbeit selbstständig angefertigt habe: die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Gedanken sind als solche kenntlich gemacht.

Die Arbeit wurde bisher keiner anderen Prüfungsbehörde vorgelegt und auch noch nicht veröffentlicht.

Magdeburg, den 29.06.2001
(*Prüfungsort, Abgabedatum*)

.....
(*Unterschrift*)