

Modellierung und numerische Simulation geohydrodynamischer Transportprozesse: 2. Finite-Element-Methoden

Hans-Jörg Diersch, Gunnar Nützmann

1. Einleitung

In der vorangegangenen Arbeit [1] wurde eine Darstellung der Modelltheorie für die wesentlichen Transportphänomene in porösen Medien gegeben. Die Lösung der dort abgeleiteten Bilanzgleichungen für Rand- und Anfangsbedingungen geohydrodynamischer Transportprozesse erfordert oftmals den Einsatz geeigneter, leistungsfähiger und zuverlässiger numerischer Verfahren. Dabei orientiert die praktische mathematische Modellierung verstärkt auf die Erfassung komplexer Transporterscheinungen, wobei ebenso die technische Einflußnahme und Prozeßsteuerung in den Fordergrund tritt, die vielfältige Variantenuntersuchungen einschließen können.

Für den ingenieurmäßigen Einsatz besteht bei der Auswahl der numerischen Verfahren die Forderung, daß die Modelle mit einer möglichst einheitlichen Grundkonzeption auf vielfältige, teils recht unterschiedliche Prozesse und Objekte schnell anwendbar und leicht handhabbar sind. Die Finite-Element-Methode (FEM) erwies sich diesbezüglich als ein numerisches Verfahren, welches diesen Anforderungen am besten nachkommen kann. Nachfolgend werden die Aspekte und Besonderheiten der Finite-Element-Lösung von Transportgleichungen für geohydrodynamische Problemstellungen herausgestellt und diskutiert, wobei auf verschiedene Modellformulierungen, Lösungsstrategien und numerische Eigenschaften eingegangen wird.

2. Mathematische Formulierung

2.1. Konvektion-Dispersions-Modellproblem

Um auf die wesentlichen Merkmale und Eigenschaften der numerischen Lösung der zugrunde liegenden Transportgleichungen nach der FEM einzugehen, sei zunächst die typische Form einer Konvektion-Dispersions-Gleichung (entsprechend [1]) näher betrachtet.

Im Strömungsgebiet Ω , umschlossen durch den Rand Γ , ist folgende partielle Differentialgleichung gegeben in ihrer „konvektiven“ Form

$$LC = R_d \frac{\partial C}{\partial t} + n u_k C_{,k} - (n D_{kl} C_{,l})_{,k} + R_d \lambda C = n f_o \quad (1a)$$

oder in ihrer „Divergenz“-Form

$$LC = R_d \frac{\partial C}{\partial t} + (n u_k C)_{,k} - (n D_{kl} C_{,l})_{,k} + R_d \lambda C = n f_o^* \quad (1b)$$

wobei L den Differentialoperator, $C = C(x_k, t)$ die gesuchte Funktion (z. B. Stoffkonzentration einer chemischen Spezies), D_{kl} den Tensor der hydrodynamischen Dispersion, R_d, λ sowie f_o, f_o^* bekannte Parameter bzw. Funktionen, n die Porosität und u_k den Vektor der Porengeschwindigkeit darstellen.

Der Unterschied zwischen beiden Formen kommt dadurch zustande, daß in (1a) bereits die Massenerhaltungs-(Kontinuitäts-) Gleichung berücksichtigt wurde, während die Divergenz-Form (1b) unmittelbar aus den physikalischen Erhaltungsprinzipien hervorgeht. Die konvektiven und Divergenz-Formen sind äquivalent als Kontinuumsgleichungen, jedoch sind sie im allgemeinen unterschiedlich in ihren diskretisierten Versionen, wie weiter unten diskutiert werden wird.

Die Gleichungen (1) sind verbunden mit den Anfangs- und Randbedingungen:

$$A. B. \quad C(x_k, 0) = C_o(x_k, 0) \quad (2a)$$

$$R. B. \quad C(x_k, t) = C_1^R \quad \text{auf } \Gamma_1 \times t [0, \infty) \quad (2b)$$

(1. Art oder Dirichlet-Randbedingung)

$$q_c = -n D_{kl} C_{,l} n_k = q_c^R \quad \text{auf } \Gamma_2 \times t [0, \infty) \quad (2c)$$

$$(2. \text{ Art oder Neumann-Randbedingung})$$

$$q_c = -n D_{kl} C_{,l} n_k = -\Lambda_c (C_2^R - C) \quad \text{auf } \Gamma_3 \times t [0, \infty) \quad (2d)$$

(3. Art oder Cauchy-Randbedingung).

Dabei ist $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 = \Gamma$ und $\Gamma_2 \cup \Gamma_3 = \Gamma_N$; die mit R identifizierten Größen bezeichnen vorzuziehende Randwerte, Λ_c entspricht einem bekannten Transferkoeffizienten (er ist positiv, falls durch ihn eine Speisung erfolgt) und n_k repräsentiert die Richtungskosinus (positiv nach außen gerichtet, d. h. der Randstrom q_c ist positiv, falls eine Entnahme entlang des Randes erfolgt).

2.2. Methode der gewichteten Residuen (MWR)

Zur Näherungslösung der herrschenden Gleichung, z. B. (1), wird ein Reihenansatz in der Form (Summenkonvention!)

$$\hat{C} = N_I C_I \quad I = 1, \dots, K \quad (3)$$

eingeführt, wobei C_I die Knotenwerte der gesuchten Funktion C , N_I die linear unabhängigen Basisfunktionen und K die vorzuziehende Knotenanzahl bezeichnen. Nach Anwendung von (3) in (1) verbleibt der Approximationsfehler oder das Residuum R

$$L \hat{C} - n f_o = R \quad (4)$$

Es ist das Skalarprodukt zweier in Ω integrierbarer Funktionen u und w wie folgt gegeben:

$$\langle u, w \rangle = \int_{\Omega} u w \, d\Omega \quad (5)$$

Die Funktionen u und w sind orthogonal, wenn gilt: $\langle u, w \rangle = 0$. Wählt man K linear unabhängige, sog. Wichtungsfunktionen $w_I (I=1, \dots, K)$ aus, mit deren Hilfe Orthogonalität des Residuums R zu allen Funktionen w_I gefordert werden kann

$$\langle R, w_I \rangle = 0, \quad I = 1, \dots, K \quad (6)$$

wird der Fehler der Näherungslösung der Differentialgleichung gezwungen, im integralen Mittel den Wert Null anzunehmen, soweit R stetig ist. Die Wahl der Wichtungsfunktionen w_I führt auf verschiedene Näherungsansätze. Für die FEM kommen dabei die Galerkin- bzw. Petrov-Galerkin-Methoden, Kollokationsmethoden und Methode der kleinsten Quadrate in die nähere Auswahl.

Beim *Galerkin-Verfahren* stimmen die Wichtungsfunktionen mit den Basisfunktionen überein

$$w_I(x_k) = N_I(x_k) \quad (7a)$$

oder

$$\langle R, N_I \rangle = 0 \quad I = 1, \dots, K \quad (7b)$$

Die *Petrov-Galerkin-Methode* stellt eine Verallgemeinerung des Wichtungsansatzes dar

$$w_I(x_k) = N_I(x_k) \pm \tilde{F}(x_k) \quad (8)$$

wobei mit $\tilde{F}(x_k)$ sog. modifizierende Funktionen eingeführt werden. Sie erlaubt die Konstruktion von Upwind-Schemata, die für Konvektion-Dispersions-Prozesse von Bedeutung sind, wie im Abschn. 5 näher erläutert wird.

Kollokationsmethoden am Beispiel der Punktkollokation mit der Wahl

$$w_I(x_k) = \delta(x_k - x_k^I) \quad (9)$$

können unter bestimmten Bedingungen (z. B. wenn derivative Größen wesentlich sind) rechenstechnisch vorteilhaft sein, wobei $\delta(\)$ die Dirac-Deltafunktion und x_k^I die Koordinaten des Kollokationspunktes I (nicht notwendigerweise identisch mit den Knotenpunkten) bezeichnen. Jedoch ist dabei zu beachten, daß höhere (Hermite-) Interpolationsansätze notwendig sind, die im Vergleich zur Galerkin-Näherung eine Vervielfachung der Unbekannten nach sich ziehen, wenngleich der Aufbau der Gleichungssysteme einen geringeren Aufwand erfordert.

Bei der *Methode der kleinsten Quadrate* wird für die Wichtungsfunktion das Residuum selbst eingesetzt und das Skalarprodukt (Fehlerquadrat) für jeden Knotenpunkt C_I minimiert:

$$\frac{\partial}{\partial C_I} \langle R, R \rangle = 0 \quad (10)$$

Das führt im allgemeinen zu besseren Konvergenzeigenschaften im Vergleich zum Galerkin-Verfahren. Ein Nachteil besteht darin, daß auch Interpolationsfunktionen höherer Ordnung erforderlich sind.

Die nachfolgenden Betrachtungen konzentrieren sich auf die Galerkin- bzw. Petrov-Galerkin-Methode, welche sich als besonders geeignet erwiesen haben.

2.3. Variationsprinzip

Neben der Anwendung der MWR können auch Variationsmethoden benutzt werden. Jedoch setzt das die Existenz von Variationsfunktionalen voraus. Ein Funktional, welches sich unmittelbar aus der beschreibenden Differentialgleichung entwickeln läßt, führt auf ein sog. natürliches Variationsprinzip auf der Grundlage der Euler-Gleichungen [2]. Eine wesentliche, einschränkende Bedingung, die natürlichen Variationsprinzipien innewohnt, ist die Forderung nach Selbstadjungiertheit (Symmetrie) des Operators L der Differentialgleichung, welche sich ausdrücken läßt durch

$$\langle u, Lw \rangle = \langle w, Lu \rangle + O.T. \quad (11)$$

wobei u und w irgendwelche Funktionen sowie $O.T.$ Oberflächenterme bezeichnen. Es kann leicht gezeigt werden, daß Transportgleichungen vom Typ (1) auf Grund der konvektiven Glieder nicht selbstadjungiert sind und demzufolge kein natürliches Variationsfunktional existiert. Jedoch ist eine Korrektur der Selbstadjungiertheit durch Einführung eines neuen Operators \bar{L} in der Form

$$\bar{L} = \varphi \cdot L \quad (12)$$

möglich, wobei $\varphi = \varphi(x_k)$ eine Funktion darstellt, welche sich nach der Forderung (11) bestimmen läßt (vgl. auch [3]):

$$\varphi = \exp(y) \quad (13a)$$

mit

$$y = - \frac{u_k x_k}{D_{kk}} \quad (13b)$$

für den Fall $D_{kl} = 0$ für $k \neq l$. Das Variationsfunktional für (1a) ist dann

$$I = \int_{\Omega} \left[\frac{n D_{kl}}{2} C_{,l} C_{,k} + (R_d \frac{\partial C}{\partial t} - n f_0 + \frac{R_d \lambda}{2} C) C \right] \exp(y) \, d\Omega - \int_{\Gamma_N} n D_{kl} C_{,l} n_k C \exp(y) \, d\Gamma. \quad (14)$$

Die Problemlösung erfolgt näherungsweise durch das bekannte Rayleigh-Ritz-Verfahren, indem die Funktion C durch \hat{C} (3) mit den freien, zu bestimmenden Knotenwerten $C_I (I=1, \dots, K)$ ersetzt wird. Dabei erfolgt die Variation δ des Funktionals I nach den freien Parametern (Knotenunbekannten) C_I :

$$\delta I = \frac{\partial I}{\partial C_I} = 0 \quad I = 1, \dots, K \quad (15)$$

Ein wesentliches Merkmal der Variationsprinzipie ist, daß gemäß der natürlichen (für $y=0$) oder modifizierten Differentialoperatoren als Ergebnis ebenso symmetrische Gleichungssysteme entstehen. Dies ist numerisch sehr vorteilhaft. Jedoch sind der numerischen Realisierung von Gleichungen aus nicht-natürlichen Prinzipien Grenzen gesetzt, wenngleich spezifische praktische Anwen-

dungsgebiete damit vorteilhaft bearbeitet werden können, z. B. [6].

Variationsfunktionale in Form von Gleichung (14) führen bei wachsendem y (13b) auf Grund der Zahlendarstellung im Rechner zu zunehmenden Trunkationen, bis hin zum arithmetischen Überlauf bei entsprechend großen y -Werten. Die meisten praktisch interessanten Transporterscheinungen bedingen solche y -Werte, die außerhalb der digitalen Zahlendarstellung an den verfügbaren Rechnern liegen. Aus diesem Grund wird die MWR-Näherung herangezogen, für welche keinerlei derartige Einschränkungen vorliegen. Jedoch müssen für Transportgleichungen bei der Approximation konvektiver Terme unsymmetrische Gleichungssysteme in Kauf genommen werden. Gleichzeitig führen natürliche Variationsprinzipie und äquivalente Galerkin-Wichtungsnäherungen zu identischen Modellgleichungen von symmetrischer Struktur.

3. Ortsdiskretisierung

Es seien hier lediglich die für das Verständnis der Arbeit notwendigen und für die Transportprozesse charakteristischen Merkmale der FE-Approximation aufgeführt. Ansonsten kann auf Standardliteratur (z. B. [4], [5]) verwiesen werden.

Im Sinne der FEM wird das Gebiet Ω , einschließlich des Randes Γ , in E finite Elemente Ω^e ($e = 1, \dots, E$), mit den Rändern Γ^e , unterteilt. Bei Auswahl geeigneter Ω^e , Γ^e und Ansatzfunktionen (3) folgt für die Integration über Ω und Γ

$$\int_{\Omega} \{ \dots \} d\Omega = \sum_{e=1}^E \int_{\Omega^e} \{ \dots \} d\Omega \quad (16a)$$

$$\int_{\Gamma} \{ \dots \} d\Gamma = \sum_{e=1}^E \int_{\Gamma^e} \{ \dots \} d\Gamma \quad (16b)$$

Wird die Näherungslösung, z. B. \hat{C} , in Ω^e (einschließlich Γ^e) durch \hat{C}^e definiert, so ist demgemäß \hat{C} für das Gesamtgebiet Ω (und Γ) einfach die Vereinigung der Teillösungen \hat{C}^e ($e = 1, \dots, E$), d. h.

$$\hat{C} = \bigcup_{e=1}^E \hat{C}^e \quad (17)$$

Die Gültigkeit der Diskretisierungsvorschrift (16) erfordert gewisse Stetigkeitsanforderungen an \hat{C} , sog. C_{n-1} Stetigkeit, d. h., falls Ableitungen der Ordnung n vorkommen, so ist zu fordern, daß sich \hat{C} selbst und deren Ableitungen der Ordnung $n-1$ stetig, im Elementübergangsbereich stückweise stetig verhalten müssen. Funktionen \hat{C} , die diese Forderung erfüllen, werden als konform bezeichnet. Die im Regelfall in der FEM angewendeten Elementtypen sind C_0 -stetig. Ihre Anwendbarkeit für Gleichungen vom Typ (1) erfordert bei Wahrung der Konformitätsforderung eine entsprechende Herabsetzung der Ordnung der Differentialgleichung, welche jedoch leicht durch partielle Integration und Anwendung des Greenschen Integralsatzes erhalten werden kann. Am Beispiel der Transportgleichung (1a) ergibt sich auf der Grundlage einer MWR-Formulierung (6) damit

$$\langle R_d \frac{\partial \hat{C}}{\partial t}, w_I \rangle + \langle n u_k \hat{C}_{,k}, w_I \rangle + \langle n D_{kl} \hat{C}_{,l}, w_{I,k} \rangle + \langle R_d \lambda \hat{C}, w_I \rangle = \langle n f_o, w_I \rangle - \int_{\Gamma_N} w_I q_c d\Gamma \quad (18)$$

wobei

$$q_c = -n D_{kl} C_{,l} n_k \quad (19)$$

den dispersiven Normal-Randstrom, positiv auf Γ nach außen gerichtet, bezeichnet, wodurch Randbedingungen 2. (und 3.) Art (2c, d) einfach formuliert werden können. Die Form (18) erfordert die Differenzierbarkeit der Wichtungsfunktionen w_I , welche im Rahmen der Galerkin-Näherung (7) bzw. (8) gegeben ist. Dagegen sind für die Kollokations-FEM (9) Hermite-Elemente vom C_1 -Typ in Anwendung zu bringen, da die zweiten Ableitungen im Dispersionsterm bestehen bleiben und somit Randintegrale – gemäß (18) – nicht auftreten. Die Anzahl der Unbekannten pro Knoten erhöht sich dabei für zweidimensionale Probleme auf vier [7].

Für instationäre Prozesse wird mit dem Interpolationsansatz (3) eine *partielle Diskretisierung* für die Orts- und Zeitabhängigkeit in der Form

$$\hat{C}^e = \hat{C}^e(x_k, t) = N_I^e(x_k) \cdot C_I^e(t), \quad (20)$$

vorgenommen, wobei nach der Diskretisierungsvorschrift (16) und (17) die Interpolationen auf einen Ansatz innerhalb der finiten Elemente Ω^e mit ihren Rändern Γ^e beschränkt werden können. Hierbei stellen $N_I^e(x_k)$ die Elementinterpolationsfunktionen, sog. Formfunktionen, vom C_0 -Typ dar, welche die bekannten Eigenschaften besitzen [5]. Bevorzugt werden isoparametrische Elemente, insbesondere für zweidimensionale Probleme das bilineare 4-Knoten-Element und die biquadratischen 8-Knoten- und 9-Knoten-Elemente.

Als Ergebnis der Ortsapproximation erhält man am Beispiel der FE-Formulierung (18) ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen, welches in Matrixschreibweise lautet:

$$S \cdot C(t) + O \cdot \frac{dC(t)}{dt} = F(t) \quad (21)$$

zur Lösung des Unbekanntenvektors $C(t)$, wobei die Elemente der Matrizen S , O und des Vektors der rechten Seite $F(t)$ gegeben sind durch:

$$S_{IJ} = \sum_e \iint_{\Omega^e} [n D_{kl} w_{I,k}^e N_{J,l}^e + w_I^e n \sum_L (N_L^e U_k^{eL}) N_{J,k}^e + w_I^e R_d \lambda N_J^e] d\Omega \quad (22a)$$

$$O_{IJ} = \sum_e \iint_{\Omega^e} R_d w_I^e N_J^e d\Omega \quad (22b)$$

$$F_I(t) = \sum_e \left\{ \iint_{\Omega^e} w_I^e f_o n d\Omega - \int_{\Gamma_N^e} w_I^e q_c d\Gamma \right\} \quad (22c)$$

wobei U_k^{eL} die Geschwindigkeitskomponenten am Knoten L des Elementes e bezeichnen. Die Auswertung der Elementintegrale in (22) erfolgt im Rahmen des isoparametrischen Elementkonzeptes mittels numerischer Integration, im Regelfall Gauß-Quadratur [5].

4. Zeitdiskretisierung

Die Lösung des Systems gewöhnlicher Differentialgleichungen, am Beispiel (21) von erster Ordnung, ist praktisch nur näherungsweise möglich.

Unter den verschiedenen Varianten seien nachfolgend die für praktische Berechnungen zweckmäßigen Verfahren dargestellt, die auf 1-Schritt-Strategien aufbauen. Hierbei müssen für (21) unter allgemeinen Bedingungen ebenso Nichtlinearitäten in S, beispielsweise durch Konzentrationsabhängigkeiten der Geschwindigkeiten, und/oder in O, z. B. durch nichtlineare Adsorptionsbeziehungen, berücksichtigt werden [1].

Betrachtet sei C(t) im endlichen Zeitintervall $(t_n, t_n + \Delta t_n)$, wobei Δt_n die variable Zeitschrittlänge bezeichnet. Die gesuchte Funktion C(t) ist definiert als

$$C^n = C(t_n) \quad (23a)$$

zum alten Zeitniveau und als

$$C^{n+1} = C(t_n + \Delta t_n) \quad (23b)$$

bezüglich des neuen Zeitpunktes. Gleichung (21) soll in vereinfachter Schreibweise geschrieben werden:

$$\dot{C} = f(C) \quad (24)$$

4.1. Implizites Schema

Prädiktor-Schritt:

Ein Vorwärtsdifferenzenansatz (Euler-Schema) in Anwendung auf (24) ergibt den expliziten Ausdruck

$$C_p^{n+1} = C^n + \Delta t_n f(C^n) = C^n + \Delta t_n \dot{C}^n \quad (25)$$

Korrektor-Schritt:

Die Rückwärtsdifferenz liefert folgendes Schema

$$C^{n+1} = C^n + \Delta t_n f(C^{n+1}) \quad (26)$$

In Vorbereitung des nächsten Prädiktor-Schrittes kann (26) invertiert werden, und man erhält

$$\dot{C}^{n+1} = (C^{n+1} - C^n) / \Delta t_n \quad (27)$$

für die neue rechte Seite von (25).

Das Schema besitzt eine Genauigkeit von $O(\Delta t_n)$. Eine Taylorreihenentwicklung für $C(t_{n+1})$ liefert folgende lokalen Trunkationsfehler:

für den Prädiktor

$$C_p^{n+1} - C(t_{n+1}) = -\frac{\Delta t_n^2}{2} \ddot{C}^n + O(\Delta t_n^3) \quad (28)$$

und für den Korrektor

$$C^{n+1} - C(t_{n+1}) \equiv d_{n+1} = \frac{\Delta t_n^2}{2} \ddot{C}^n + O(\Delta t_n^3), \quad (29)$$

wenn vorausgesetzt wird, daß die exakte Lösung zu Beginn des Zeitschrittes vorliegt: $C^n = C(t_n)$. In (29) bezeichnet d_{n+1} die Abschätzung des lokalen Zeitrunkationsfehlers zur aktuellen Korrektor-Lösung. Aus (28) und (29) folgt unmittelbar

$$d_{n+1} = \frac{1}{2} (C^{n+1} - C_p^{n+1}) + O(\Delta t_n^3). \quad (30)$$

Dieses Ergebnis kann zur Abschätzung der folgenden Zeitschrittgröße benutzt werden, indem die Fehlernorm des nächsten Zeitschrittes als Vorgabegröße ϵ benutzt wird. Aus Gleichung (29) ergibt sich

$$\frac{|d_{n+2}|}{|d_{n+1}|} = \left(\frac{\Delta t_{n+1}}{\Delta t_n} \right)^2 \frac{|C^{n+1}|}{|C^n|} \quad (31)$$

wobei d_{n+1} aus (30) bekannt ist. Da $C^{n+1} = C^n + O(\Delta t_n)$ folgt aus (31) die Lösung für Δt_{n+1}

$$\Delta t_{n+1} = \Delta t_n (\epsilon / |d_{n+1}|)^{1/2} \quad (32)$$

nach Vorgabe von $d_{n+2} = \epsilon$ und der Vernachlässigung von Termen höherer Ordnung.

Die Beziehung (32) kann zur Zeitschrittweitensteuerung bei vorgegebenem ϵ und den aus (30) berechneten d_{n+1} benutzt werden.

Das implizite Schema besitzt „dissipative“ Eigenschaften infolge der globalen Fehlernorm von nur $O(\Delta t_n)$, vgl. auch Abschnitt 6.2. Dieser Mangel besteht für das nachfolgende 1-Schritt-Verfahren nicht.

4.2. Trapezregel und explizites Adams-Bashforth-Schema

Prädiktor-Schritt:

Das Adams-Bashforth-Schema [8] liefert folgenden expliziten Prädiktor von $O(\Delta t_n^2)$ in Anwendung auf (24)

$$C_p^{n+1} = C^n + \frac{\Delta t_n}{2} \left[\left(2 + \frac{\Delta t_n}{\Delta t_{n-1}} \right) \dot{C}^n - \frac{\Delta t_n}{\Delta t_{n-1}} \dot{C}^{n-1} \right] \quad (33)$$

wobei jetzt zwei Vektoren \dot{C}^n und \dot{C}^{n-1} benötigt werden, die aus der Trapezregel (Korrektor) gewinnbar sind.

Korrektor-Schritt:

Die „nicht-dissipative“ Trapezregel von $O(\Delta t_n^2)$ ergibt für (24) den Ausdruck

$$C^{n+1} = C^n + \frac{\Delta t_n}{2} [f(C^n) + f(C^{n+1})] \quad (34)$$

Für den nachfolgenden Prädiktor-Schritt kann mit Hilfe der Trapezregel berechnet werden

$$\dot{C}^{n+1} = \frac{2}{\Delta t_n} (C^{n+1} - C^n) - \dot{C}^n \quad (35)$$

wobei \dot{C}^n aus der vorangegangenen Anwendung der selben Gleichung bekannt ist.

In Analogie zum impliziten Schema ist eine Zeitschrittweitensteuerung über den Trunkationsfehler möglich. Man erhält die Fehlerabschätzungen für den Prädiktor

$$C_p^{n+1} - C(t_{n+1}) = -\frac{1}{12} \left(2 + 3 \frac{\Delta t_{n-1}}{\Delta t_n} \right) \Delta t_n^3 \ddot{C}^n + O(\Delta t_n^4) \quad (36)$$

und für den Korrektor

$$C^{n+1} - C(t_{n+1}) \equiv d_{n+1} = \frac{\Delta t_n^3}{12} \ddot{C}^n + O(\Delta t_n^4), \quad (37)$$

woraus folgt

$$d_{n+1} = \frac{C_p^{n+1} - C_p^{n+1}}{3(1 + \frac{\Delta t_{n-1}}{\Delta t_n})} + 0(\Delta t_n^4) \quad (38)$$

Danach ist

$$\frac{|d_{n+2}|}{|d_{n+1}|} = \left(\frac{\Delta t_{n+1}}{\Delta t_n} \right)^3 \frac{|\ddot{C}^{n+1}|}{|\ddot{C}^n|} \quad (39)$$

Mit $\ddot{C}^{n+1} = \ddot{C}^n + 0(\Delta t_n)$ kann folgende Gleichung zur Bestimmung der folgenden Zeitschrittweite Δt_{n+1} abgeleitet werden

$$\Delta t_{n+1} = \Delta t_n (\epsilon / |d_{n+1}|)^{1/3} \quad (40)$$

wenn durch $\epsilon = d_{n+2}$ die Vorgabe des erlaubten Fehlers erfolgt.

4.3. Θ -Verfahren

Für eine Reihe von Problemstellungen (21) ist es möglich, die Approximation abzukürzen. Man führt einen Wichtungskoeffizienten ($0 \leq \Theta \leq 1$) dergestalt ein, daß

$$C(t_n + \Theta \Delta t_n) = \Theta C(t_n + \Delta t_n) + (1 - \Theta) C(t_n) \quad (41)$$

und analog für F und \dot{C} .

Mit einem Rückwärtsdifferenzenansatz für $\dot{C}(t_n + \Delta t_n)$ und einem Vorwärtsdifferenzenansatz für $\dot{C}(t_n)$ ergibt sich

$$\dot{C}(t_n + \Theta \Delta t_n) = \frac{C^{n+1} - C^n}{\Delta t_n} \quad (42)$$

Mit der Wahl von Θ erhält man differenzierte Schemata:

- $\Theta = 0$ explizites Schema
- $\Theta = 1/2$ Trapezregel (Crank-Nicolson-Schema)
- $\Theta = 1$ implizites Schema

Nach Einsetzen von (41) und (42) in (21) folgt die Arbeitsgleichung:

$$\left(\frac{0}{\Delta t_n} + S \Theta \right) C^{n+1} = \left(\frac{0}{\Delta t_n} - S(1 - \Theta) \right) C^n + (F^{n+1} \Theta + F^n (1 - \Theta)) \quad (43)$$

welche für $\Theta = 1$ und $1/2$ den Korrektur-Schritten (26) bzw. (34) entspricht und unter linearen Bedingungen einfach realisiert werden kann.

Sind Nichtlinearitäten beispielsweise in S vorhanden, ist mit der Wahl eines impliziten Verfahrens ($\Theta = 1$) auch das Schema (43) gut anwendbar. Jedoch ist die Genauigkeit mit $0(\Delta t_n)$ weniger gut. Für die bessere Trapezregel ($\Theta = 1/2$) mit $0(\Delta t_n^2)$ ist es dann jedoch zweckmäßig, auf das Prädiktor-Korrektor-Schema (Abschnitt 4.2) zurückzugreifen. Die Trapezregel (Korrektor-Schritt) ist gegenüber (43) dann anzuwenden gemäß

$$\left(\frac{2}{\Delta t_n} + S \right) C^{n+1} = 0 \left(\frac{2}{\Delta t_n} C^n + \dot{C}^n \right) + F^{n+1} \quad (44)$$

wobei \dot{C}^n durch die rekursive Anwendung der Trapezregel (35) bekannt ist.

5. Upwind-FEM

Das Wesen der Upwind-Näherung besteht darin, eine entsprechend der Richtung und Größe des konvektiven Transportes angemessene Approximation der Differentialgleichung vorzunehmen, um numerische Oszillationen und Instabilitäten unter gewissen Bedingungen auszuschließen. Im Rahmen der MWR kann dies durch Einführung asymmetrischer Wichtungsfunktionen (8) erreicht werden, eine Näherung, die als *Petrov-Galerkin-Methode* in die Literatur eingegangen ist, z. B. [9].

Betrachtet man den Transportprozeß in Stromlinienrichtung – es sei zur Verdeutlichung die x -Richtung als solche betrachtet –, so sind folgende Wichtungsansätze (8) zunächst im Eindimensionalen einzuführen:

lineares 2-Knoten-Element:

$$w_1(\xi) = N_1(\xi) + \alpha F(\xi) \quad (45 a)$$

$$w_2(\xi) = N_2(\xi) - \alpha F(\xi) \quad (45 b)$$

mit den Formfunktionen

$$N_1(\xi) = \frac{1}{2}(1 - \xi) \quad (46 a)$$

$$N_2(\xi) = \frac{1}{2}(1 + \xi) \quad (46 b)$$

wobei $-1 \leq \xi \leq 1$ eine lokale Koordinate und α den sog. Upwind-Parameter kennzeichnen. Letzterer besitzt mit der Geschwindigkeit u ein identisches Vorzeichen:

$$\alpha > 0 \quad \text{für} \quad u > 0$$

$$\alpha < 0 \quad \text{für} \quad u < 0.$$

Die modifizierende Funktion $F(\xi)$ in (45) läßt sich bestimmen zu

$$F(\xi) = -\frac{3}{4}(1 - \xi)(1 + \xi). \quad (47)$$

quadratisches 3-Knoten-Element:

$$w_1(\xi) = N_1(\xi) - \alpha_1 F(\xi) \quad (48 a)$$

$$w_2(\xi) = N_2(\xi) + 4\beta F(\xi) \quad (48 b)$$

$$w_3(\xi) = N_3(\xi) - \alpha_2 F(\xi) \quad (48 c)$$

mit den Formfunktionen

$$N_1(\xi) = \frac{1}{2}\xi(\xi - 1) \quad (49 a)$$

$$N_2(\xi) = 1 - \xi^2 \quad (49 b)$$

$$N_3(\xi) = \frac{1}{2}\xi(\xi + 1) \quad (49 c)$$

und der modifizierenden Funktion

$$F(\xi) = \frac{5}{8}\xi(\xi - 1)(\xi + 1) \quad (50)$$

wobei α_1 , α_2 und β einen Satz von Upwind-Parametern repräsentieren.

Für die Behandlung zweidimensionaler Transportgleichungen wird die Strömungsgeschwindigkeit u_k auf die entsprechenden Elementseiten projiziert. Damit sind mit jeder Elementseite Upwind-Parameter einzuführen. Man erhält Sätze von Upwind-Parametern $\alpha_{I(j)}$, β_I , welche

entlang der jeweiligen Elementseiten und Richtungen festgelegt sind [10], z. B. für das 4-Knoten-Element 4 Parameter $\alpha_I, I = 1, \dots, 4$; für das 9-Knoten-Element 18 Upwind-Parameter $\alpha_{I(j)}, \beta_I, I = 1, \dots, 6, j = 1, 2$ (j identifiziert hierbei die differenzierten α -Parameter gemäß Gleichung (48)). Die Wichtungsfunktionen im zwei-dimensionalen Fall stellen Verallgemeinerungen der ein-dimensionalen Ansätze dar. Soweit sie Lagrangesche Interpolationen umfassen, sind sie direkt durch Produktbildung der Funktionen (45) bzw. (48) in jeder Richtung ableitbar [9].

Die Petrov-Galerkin-Wichtung hat auf den konvektiven Anteil der Differentialgleichung zu wirken, d. h. alle anderen Terme müssen beim Upwind-Prozess unbeeinflusst bleiben. Legt man Gleichung (18) zugrunde, so sind folgende Bedingungen einzuhalten:

$$\langle n D_{kl} \hat{C}_{,l}, w_{I,k} \rangle = \langle n D_{kl} \hat{C}_{,l}, N_{I,k} \rangle \quad (51 a)$$

$$\langle R_d \frac{\partial \hat{C}}{\partial t}, w_I \rangle = \langle R_d \frac{\partial \hat{C}}{\partial t}, N_I \rangle \quad (51 b)$$

$$\langle n f_o, w_I \rangle = \langle n f_o, N_I \rangle \quad (51 c)$$

und analog für die übrigen nicht-konvektiven Terme. Man kann leicht zeigen, daß (51 a) automatisch erfüllt wird, während (51 b, c) u. ä. dann erfüllt werden, falls die Quell-Senken-Größen konstant sind, d. h. Lumping in den Skalarprodukten zur Anwendung kommt. Um sich darauf von vorn herein nicht einschränken zu müssen, ist es zweckmäßig, solche Terme mit einem Galerkin-Ansatz zu behandeln:

$$\langle R_d \frac{\partial \hat{C}}{\partial t}, N_I \rangle + \langle n u_k \hat{C}_{,k}, w_I \rangle + \langle n D_{kl} \hat{C}_{,l}, w_{I,k} \rangle + \langle R_d \lambda \hat{C}, N_I \rangle = \langle n f_o, N_I \rangle - \int_{\Gamma_N} N_I q_c d\Gamma \quad (52)$$

6. Numerische Eigenschaften

6.1. Stabilität

Zeit:

Zur Abschätzung der numerischen Stabilitätseigenschaften der aus der Zeitapproximation resultierenden Gleichungen sei (43) vereinfacht geschrieben zu

$$C_I^{n+1} = \Lambda C_I^n \quad (53)$$

mit dem Amplifikationsfaktor

$$\Lambda = \frac{1 - \omega_I (1 - \Theta) \Delta t_n}{1 + \omega_I \Theta \Delta t_n} \quad (54)$$

wobei $\omega_I = S_I/O_I$ die modalen Eigenwerte (Frequenzen) bezeichnen. Die exakte Lösung von (24) ergibt sich zu

$$\Lambda_{ex} = \exp(-\omega_I \Delta t_n) \quad (55)$$

Es ist zu ersehen, daß sich, falls $|\Lambda| > 1$ ist, das Problem instabil verhält. Fernerhin ist offensichtlich, daß mit $\Lambda < 0$ Oszillationen einhergehen müssen. Mit der Forderung $|\Lambda| < 1$ (Maximumprinzip) muß der Ausdruck (54) größer als -1 sein, und man erhält die Bedingung

$$\omega_I \Delta t_n (2\Theta - 1) > -2 \quad (56)$$

welche bei $\Theta \geq 1/2$ für alle ω_I und beliebige Δt_n erfüllt wird, sog. A_0 -Stabilität für Crank-Nicolson- oder implizites Verfahren. Die Forderung nach Oszillationsfreiheit mit $\Lambda > 0$ führt auf die Bedingung

$$(1 - \Theta) \omega_I \Delta t_n < 1, \quad (57)$$

welche für alle ω_I und beliebige Δt_n allein für $\Theta = 1$ (implizites Schema) erfüllt wird. Für das Crank-Nicolson-Verfahren bestehen demgegenüber Restriktionen für die Zeitschrittweiten mit

$$\Delta t_n < \frac{2}{\omega_I} \quad (58)$$

Ort:

Die numerischen Eigenschaften der aus der Ortsdiskretisierung resultierenden Gleichungen sollen unter idealisierten und vereinfachten Bedingungen (Eindimensionalität und Stationarität) quantifiziert werden.

Das lineare Element führt hierbei auf die Differenzengleichung [10] für den Knoten I

$$\begin{aligned} & [1 + \frac{Pg}{2} (\alpha - 1)] C_{I+1} - [2 + \alpha Pg] C_I \\ & + [1 + \frac{Pg}{2} (\alpha + 1)] C_{I-1} = 0 \end{aligned} \quad (59)$$

wobei $Pg = \frac{u h}{D}$ (u = Geschwindigkeit, h = charakteristische Elementlänge, D = Dispersionskoeffizient) die sog. Element-Peclet-Zahl kennzeichnet.

Dementsprechend ergibt das quadratische Element für den Mittenseitenknoten $I - 1/2$

$$\begin{aligned} & [1 + \frac{Pg}{4} (\beta - 1)] C_I - [2 + \frac{Pg}{2} \beta] C_{I-1/2} \\ & + [1 + \frac{Pg}{4} (\beta + 1)] C_{I-1} = 0 \end{aligned} \quad (60 a)$$

$$\begin{aligned} & [1 + \frac{Pg}{2} (\frac{\beta}{2} - 1) - \frac{Pg^2}{12} (\frac{\alpha_1}{2} + \frac{\beta}{2} - 1)] C_{I+1} \\ & - [2 + \frac{Pg}{2} \beta + \frac{Pg^2}{12} (\frac{\alpha_1 - \alpha_2}{2} + 2)] C_I \\ & + [1 + \frac{Pg}{2} (\frac{\beta}{2} + 1) + \frac{Pg^2}{12} (\frac{\alpha_2}{2} + \frac{\beta}{2} + 1)] C_{I-1} = 0 \end{aligned} \quad (60 b)$$

und für den zentralen Eckknoten I

$$\begin{aligned} & [1 + \frac{Pg}{2} (\frac{\beta}{2} - 1) - \frac{Pg^2}{12} (\frac{\alpha_1}{2} + \frac{\beta}{2} - 1)] C_{I+1} \\ & - [2 + \frac{Pg}{2} \beta + \frac{Pg^2}{12} (\frac{\alpha_1 - \alpha_2}{2} + 2)] C_I \\ & + [1 + \frac{Pg}{2} (\frac{\beta}{2} + 1) + \frac{Pg^2}{12} (\frac{\alpha_2}{2} + \frac{\beta}{2} + 1)] C_{I-1} = 0 \end{aligned} \quad (60 b)$$

Demgegenüber bestehen lokal-exakte Differenzenschemata

$$C_{I+1} - (1 + a) C_I + a C_{I-1} = 0 \quad (61 a)$$

$$C_I - (1 + b) C_{I-1/2} + b C_{I-1} = 0 \quad (61 b)$$

mit

$$a = \exp(Pg) \quad (61 c)$$

$$b = \exp(\frac{Pg}{2}) \quad (61 d)$$

wenn folgendes lokales Randwertproblem zugrunde gelegt wird:

$$x^{I-1} \leq x \leq x^{I+J} \quad I = 2, 3, \dots$$

$$C(x^{I-1}) = C_{I-1}$$

$$C(x^{I+J}) = C_{I+J}$$

mit

$J = 1$ für Eckknoten

$J = 0$ für Mittenseitenknoten.

Ein Koeffizientenvergleich der Schemata (59), (60) mit (61) liefert Aussagen über die Rolle der Upwind-Parameter:

Am Beispiel linearer Elemente ist (bei $u > 0$)

$$a = \frac{1 + \frac{P_g}{2}(\alpha + 1)}{1 + \frac{P_g}{2}(\alpha - 1)} > 0 \quad (62)$$

und demzufolge

$$\alpha \geq \alpha_{\text{krit}} = 1 - \frac{2}{P_g} \quad \text{für } P_g > 2 \quad (63 \text{ a})$$

$$\alpha = 0 \quad \text{für } P_g \leq 2 \quad (63 \text{ b})$$

Das heißt, das Standard-Galerkin-Schema ($\alpha = 0$) wird (oder besser kann) Oszillationen verursachen, sobald die P_g -Zahl den Wert 2 überschreitet. Um Oszillationen zu vermeiden, muß dann der Upwind-Parameter α größer dem kritischen Wert α_{krit} (63 a) sein. Im Falle $\alpha = 1$ ist das Schema bedingungslos stabil und entspricht dem „Full-Upwind“-Typ.

Analog erhält man für quadratische Elemente die Bedingungen:

$$\beta \geq \beta_{\text{krit}} = 1 - \frac{4}{P_g} \quad \text{für } P_g > 4 \quad (64 \text{ a})$$

$$\beta = 0 \quad \text{für } P_g \leq 4 \quad (64 \text{ b})$$

an den Mittenseitenknoten und

$$\alpha_1 \leq \alpha_{1\text{krit}} = 1 - \frac{2}{P_g} \quad \text{für } P_g > 2 \quad (65 \text{ a})$$

$$\alpha_1 = 0 \quad \text{für } P_g \leq 2 \quad (65 \text{ b})$$

an den Eckknoten.

Im Standard-Galerkin-Fall ($\alpha_1 = \alpha_2 = \beta = 0$) werden (oder können) Oszillationen vorkommen, sobald $P_g > 4$ ist. Diese Restriktion resultiert aus den Mittenseitenknoten (64), da für die Eckknoten keine Beschränkungen für alle P_g bestehen (vgl. (65 a)). Ein „Full-Upwind“-Typ mit $\alpha_1 = \alpha_2 = \beta = 1$ ist für quadratische Elemente nicht oszillationsfrei, da $P_g < 4$ gefordert werden muß. Um diesen Nachteil zu überwinden, kann folgendes Upwind-Parameter-Tripel gewählt werden

$$(\alpha_1, \alpha_2, \beta) = (0, 8, 2) \quad (66)$$

welches als (0,2)-Pade-Upwind-Approximation bekannt ist [10].

Die angeführten Konditionen sind nicht in jedem Fall als notwendige Restriktionen aufzufassen. Sie kommen oftmals nur dann zum Tragen, falls am unterstromigen Rand (Ausströmung) Randbedingungen 1. Art spezifiziert werden müssen, diese dann Randgrenzschichten ver-

ursachen können. Demgegenüber ist es oftmals möglich und notwendig, natürliche Randbedingungen am Ausströmungsrand vorzuschreiben: $q_c = 0$. Dann existiert dort keine Grenzschicht, und auf die Anwendung von Upwind-Schemata kann aus Genauigkeitsgründen, wie nachfolgend beschrieben, verzichtet werden.

6.2. Numerische Dispersion

Für die eindimensionale Transportgleichung kann explizit mit Hilfe von Taylorreihenentwicklungen folgende Abschätzung des Trunktationsfehlers aus der Zeit- und Ortsapproximation gewonnen werden. Man erhält für die x -Richtung (bei konstanten R_d , D und ohne Quell-Senken):

$$\begin{aligned} R_d \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} - D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \\ = D_{\text{num}}^{n+1} \Theta \frac{\partial^2 C^{n+1}}{\partial x^2} + D_{\text{num}}^n (1 - \Theta) \frac{\partial^2 C^n}{\partial x^2} + \text{HOT} \end{aligned} \quad (67)$$

wobei

$$D_{\text{num}}^{n+1} = D_{\text{Zeit}}^{n+1} + D_{\text{Ort}} \quad (68 \text{ a})$$

$$D_{\text{num}}^n = D_{\text{Zeit}}^n + D_{\text{Ort}} \quad (68 \text{ b})$$

(HOT = Terme höherer Ordnung)

den Anteil der sog. numerischen Dispersion als Approximationsfehler aus der Zeitnäherung D_{Zeit} und der Ortsapproximation D_{Ort} bezeichnen. Numerische Dispersion äußert sich in einem unnatürlichen Verschmieren und Ausweiten (Vorausseilen) von Fronten und Stoßwellen.

Aus der Zeitnäherung erhält man

$$D_{\text{Zeit}}^{n+1} = \frac{\Delta t_n}{2R_d} u^2 + O(\Delta t_n^2) \quad (69)$$

$$D_{\text{Zeit}}^n = -\frac{\Delta t_n}{2R_d} u^2 + O(\Delta t_n^2). \quad (70)$$

Die Ortsapproximation verursacht folgende numerische Dispersionen für lineare Elemente

$$D_{\text{Ort}} = \alpha \frac{u h}{2} + O(h^2) \quad (71)$$

und für quadratische Elemente

$$D_{\text{Ort}} = \frac{u h}{6} \left(\beta - \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{4} \right) + O(h^4) \quad \text{ohne Upwind} \quad (72)$$

am Eckknoten und

$$D_{\text{Ort}} = \beta \frac{u h}{4} + O(h^2) \quad (73)$$

am Mittenseitenknoten.

Es wird ersichtlich, daß Upwind- und implizite Schemata ein großes Maß an falscher, numerischer Dispersion D_{num} verursachen können.

Definiert man die globale Peclet-Zahl

$$Pe = \frac{u L}{D}, \quad (L = \text{Gebietslänge})$$

durch welche der eigentliche physikalische Prozeß charakterisiert wird, so ergeben sich folgende effektive Peclet-Zahlen Pe in Abhängigkeit von der Wahl der Schemata:

$$\overline{Pe} = \frac{Pe}{1 + \frac{\alpha}{2} Pg + \frac{Cr}{2} Pg} \quad (74)$$

für lineare Elemente und implizites Schema ($\Theta = 1$) oder entsprechend für quadratische Elemente

$$\overline{Pe} = \frac{Pe}{1 + \frac{1}{6} (\beta - \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{4}) Pg + \frac{Cr}{2} Pg} \quad (75)$$

$$\overline{Pe} = \frac{Pe}{1 + \frac{\beta}{4} Pg + \frac{Cr}{2} Pg} \quad (76)$$

an den Eck- bzw. Mittenseitenknoten bei jeweils impliziter Zeitnäherung, wobei

$$Cr = \frac{\Delta t_n u}{h R_d} \quad (77)$$

die sog. Courant-Zahl definiert.

Für große Pg und/oder Cr sowie $\alpha \rightarrow 1$, $\beta \rightarrow 1$, (α_1, α_2) = 0 oder $\neq 0$ wird die Dispersion in hohem Maße numerisch verursacht. Die effektive Peclet-Zahl \overline{Pe} ist dann nur noch abhängig von der gewählten Netzgröße und der Zeitschrittweite, jedoch weitestgehend unabhängig von der wahren Peclet-Zahl Pe . Upwind-Schemata werden demzufolge oftmals abgelehnt [11], da sie zwar numerisch „schöne“ und glatte aber falsche Lösungen hervorbringen können.

Die Führungsterme der numerischen Dispersion $\frac{\Delta t_n}{2R_d} u^2$, $\alpha \frac{u h}{2}$, $\frac{u h}{6} (\beta - \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{4})$, $\beta \frac{u h}{4}$ können vermieden

werden, falls anstelle des impliziten Schemas das Crank-Nicolson-Verfahren bevorzugt und Standard-Galerkin-Wichtungen (ohne Upwind) benutzt werden. Für lineare Elemente ist dann der Fehler von $O(\Delta t_n^2, h^2)$.

Für die instationären Transportprozesse sind die entsprechenden Stabilitätsbedingungen einzuhalten, wobei die Upwind-Parameter $0 \leq \alpha, \dots \leq 1$ und der Wichtungskoeffizient $\frac{1}{2} \leq \Theta \leq 1$ wieder als Stabilisierungsfaktoren benutzt werden können. Es ist möglich, einen Faktor (aus Genauigkeitsgründen) festzulegen und mit dem anderen zu stabilisieren. Dabei ist eine möglichst optimale Genauigkeit zu erzielen. Hierzu wurden von Ramakrishnan [12] optimale Upwind-Parameter α_{opt} in Abhängigkeit von Pg und Cr auf numerischem Wege bestimmt. Fourier-analytische Untersuchungen zur Bestimmung der Upwind-Parameter unter instationären Bedingungen wurden von Dick [13] vorgenommen.

Unter stationären Bedingungen können optimale Upwind-Parameter explizit formuliert werden [10]. Setzt man hierzu am Beispiel linearer Elemente die Koeffizienten (61 c) und (62) gleich, so ergibt sich

Unter stationären Bedingungen können optimale Upwind-Parameter explizit formuliert werden [10]. Setzt man hierzu am Beispiel linearer Elemente die Koeffizienten (61 c) und (62) gleich, so ergibt sich

$$\alpha_{opt} = \coth\left(\frac{Pg}{2}\right) - \frac{2}{Pg} \quad (78)$$

Analog für quadratische Elemente:

$$\beta_{opt} = \coth\left(\frac{Pg}{4}\right) - \frac{4}{Pg} \quad (79a)$$

$$\alpha_{opt} = 2 \tan\left(\frac{Pg}{2}\right) \left(1 + \frac{3}{Pg} \beta_{opt} + \frac{12}{Pg^2}\right) - \frac{12}{Pg} - \beta_{opt} \quad (79b)$$

(bei $\alpha_1 = \alpha_2$).

Die einfachste Möglichkeit, numerische Stabilität zu erreichen, besteht darin, die Größe der numerischen Dispersion in eine Galerkin-Approximation explizit einzuführen. Beispielsweise ist die formale Vergrößerung von D auf $D + uh/2$ einem „Full-Upwind“-Schema ($\alpha = 1$ für lineare Elemente) äquivalent. Solche Techniken werden oftmals praktiziert. Ein Upwind-Äquivalent im Zweidimensionalen erfordert, daß sich die Dämpfungsmaßnahmen nur auf die Strömungsrichtung beschränken, sog. „Streamline-Upwind“-Verfahren [14]. Numerische Dispersion in Strömungsquerrichtung ist dagegen auszuschließen, da unnötig und fehlerverursachend. Es ist offensichtlich, daß dies leicht über den Tensor der hydrodynamischen Dispersion D_{kl} ([1] Gl. (88)) zu realisieren ist

$$D_{kl} = (D_d + \beta_T U) \delta_{kl} + (\beta_L + \beta_L^{num} - \beta_T) \frac{u_k u_l}{U} \quad (80)$$

($U = (u_k u_k)^{1/2}$), indem nur die longitudinale Dispersivität β_L um das entsprechende Dämpfungsmaß β_T^{num} vergrößert wird. Ein „Full-Upwind“ bedeutet dabei, β_L^{num} mit $\frac{h}{2}$ für lineare und mit $\frac{h}{4}$ für quadratische Elemente zu veranschlagen.

6.3. Konservativitätsbetrachtungen

Zur Erreichung numerischer Stabilität bestehen zwei Möglichkeiten nebeneinander:

1. Glättungs- und Dämpfungsmaßnahmen, wie zuvor beschrieben, und
2. Wahl von Diskretisierungsformen, die bestimmte Erhaltungssätze einhalten.

Es ist bereits für Differenzenverfahren gut bekannt, daß Schemata, die für verschiedene Momente der Funktion (oder Funktionen) am Beispiel für C

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \int_{\Omega} C \, d\Omega \\ \frac{D}{Dt} \int_{\Omega} C^2 \, d\Omega \\ \vdots \end{aligned} \quad (81)$$

konservativ sind, höhere Stabilität bedingen [15].

Zur Problemstellung sei folgendes Transportproblem als Prototyp untersucht:

$$u_{k,k} = 0 \quad (82)$$

$$u_k = - \frac{K_{kl}}{n} (p_{,l} + \rho g e_l) \quad (83)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (u_k C)_{,k} = 0 \quad (84)$$

(u_k = Porengeschwindigkeit, K_{kl} = Durchlässigkeits-tensor, p = Druck, ρ = Dichte, g = Erdbeschleunigung, e_l = Gravitationseinheitsvektor), wobei Inkompressibilität (82) und ausschließlich konvektiver Transport (84) vorausgesetzt wird; als Bewegungsgleichung gilt das Darcy-Gesetz (83). Die natürlichen Variablen p , u_k und C werden im Rahmen der Galerkin-FEM mit unterschiedlichen Interpolationsansätzen angenähert, wobei für den Druck p ein um eine Ordnung geringeres Polynom $M_I(x_k)$ gegenüber $N_I(x_k)$ für u_k und C zu benutzen ist (Abschnitt 7.1.1). Die Inkompressibilitätsbedingung (82) erhält dabei einen Wichtungsansatz mit der mit der Druckvariablen verknüpften Basisfunktion $M_I(x_k)$

$$\langle M_I, \hat{u}_{k,k} \rangle = 0 \quad (85)$$

wobei \hat{u}_k die Näherungsfunktion für u_k repräsentiert. Die Beziehung (85) befriedigt Inkompressibilität nur in einem gewichteten integralen Maße. Die Auswirkung dieser mittleren Inkompressibilität auf die Transportgleichung (84) zeigt sich wie folgt.

Gleichung (84) läßt sich umschreiben zu

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_k C_{,k} + \gamma u_{k,k} C = 0 \quad (86)$$

wobei γ einen konstanten Parameter bezeichnet. Ist γ oder $u_{k,k}$ gleich Null, dann ergibt sich die konvektive Form der Transportgleichung (entsprechend (1a)). Wählt man $\gamma = 1$, entspricht (86) der Divergenz-Form (gemäß (1b)). Mit der Wahl von $\gamma = \frac{1}{2}$ wird ein Ausdruck erhalten, der das Mittel der zwei Formen verkörpert:

$$u_k C_{,k} + \frac{1}{2} u_{k,k} C = \frac{1}{2} [u_k C_{,k} + (u_k C)_{,k}] \quad (87)$$

Diese Formulierung wird als „absolut“ konservativ gekennzeichnet, da damit Momente zweiter Ordnung (81) erhalten bleiben, wie nachfolgend gezeigt wird. Sie wurde bei der FEM von Temam [16] erstmals eingeführt. Die Galerkin-FEM für (86) ergibt

$$\langle N_I, \frac{\partial \hat{C}}{\partial t} \rangle = (1 - \gamma) \langle N_I, \hat{C} \hat{u}_{k,k} \rangle + \langle \hat{C} \hat{u}_k, N_{I,k} \rangle - \int_{\Gamma} N_I (\hat{u}_k n_k) \hat{C} d\Gamma \quad (88)$$

Summiert man über alle Knoten I und berücksichtigt $\sum_I N_I = 1$, ergibt sich für (88)

$$\frac{D}{Dt} \int_{\Omega} \hat{C} d\Omega = (1 - \gamma) \int_{\Omega} \hat{C} \hat{u}_{k,k} d\Omega \quad (89)$$

In analoger Weise, nach Multiplikation von (86) mit $C_I(t)$ und Summation über I , erhält man

$$\frac{D}{Dt} \int_{\Omega} \hat{C}^2 d\Omega = (1 - 2\gamma) \int_{\Omega} \hat{C}^2 \hat{u}_{k,k} d\Omega \quad (90)$$

Die rechten Seiten von (89) und (90) verschwinden, sobald man $\gamma = 1$ (Divergenz-Form) bzw. $\gamma = 1/2$ („absolut“-konservative Form) wählt, unabhängig von der Größe $\hat{u}_{k,k}$ selbst. Die Divergenzform befriedigt die Erhaltung von Momenten erster Ordnung $\int C d\Omega$, während die „absolut“-konservative Form eine Erhaltung quadratischer Quantitäten $\int C^2 d\Omega$ erfüllt. Die konvektive Form ($\gamma = 0$) dagegen befriedigt keines der beiden Erhaltungssätze, d. h. die rechten Seiten von (89) sind im allgemeinen als von Null verschieden zu betrachten.

Eine wichtige Ausnahme besteht dann, falls die Basisfunktionen M_I in (85) und N_I zur Approximation von $C(t)$ gleich sind. Durch derartige Konstruktion verschwindet die rechte Seite von (89) selbständig für jeden γ -Wert („Built-in“-Konservativität). Dies ist insbesondere dann gegeben, wenn das Problem über eine Substitutionsformulierung gelöst wird, siehe Abschn. 7.1.2.

Bei der Verwendung der Divergenz-Form ($\gamma = 1$) können Formulierungen von Vorteil sein, die verallgemeinerte Randstromfunktionen einschließen. Dehnt man die Anwendung des Greenschen Integralsatzes auch auf den konvektiven Term aus, so ergibt sich für (1b) anstelle von (18)

$$\langle R_d \frac{\partial \hat{C}}{\partial t}, w_I \rangle - \langle n u_k \hat{C}, w_{I,k} \rangle + \langle n D_{kl} \hat{C}_{,l}, w_{I,k} \rangle + \langle R_d \lambda \hat{C}, w_I \rangle = \langle n f_o^*, w_I \rangle - \int_{\Gamma} w_I q_c^* d\Gamma \quad (91)$$

wobei

$$q_c^* = q_c + n C u_k n_k \quad (92)$$

einen verallgemeinerten Randstrom beschreibt (q_c entspricht Gleichung (19)). Hierbei ist die Divergenz der Geschwindigkeit nicht mehr explizit enthalten. Ist $q_c^* = 0$, sind die entsprechenden Randabschnitte „vollkommen dicht“. Vorgaben für q_c^* sind an Ein- und Ausströmrändern erforderlich. Soweit C dort unbekannt ist (z. B. Ausströmrand mit unbekanntem Stoffdurchsatz), kann dieser Anteil des Oberflächenintegrals auf die linke Seite überführt und analog zu Randbedingungen 3. Art behandelt werden.

7. Finite-Element-Modelle

7.1. Stofftransport im Grundwasser

7.1.1. Formulierung in natürlichen Variablen

Legt man vertikale Stofftransportprozesse zugrunde, so lauten die zu lösenden Differentialgleichungen zusammengefaßt [1]:

$$u_{k,k} = 0 \quad (93)$$

$$u_k + \frac{K_{kl}}{n} (p_{,l} + g \rho e_l) = 0 \quad (94)$$

$$R_d \frac{\partial C}{\partial t} + (n u_k C)_{,k} - (n D_{kl} C_{,l})_{,k} + R_d \lambda C = n f_o^* \quad (95)$$

mit

$$D_{kl} = (D_d + \beta_T U) \delta_{kl} + (\beta_L - \beta_T) \frac{u_k u_l}{U} \quad (96 a)$$

und

$$\rho = \rho_o (1 + \kappa C/C_1) \quad (96 h)$$

bei

$$\kappa = [\rho(C_1) - \rho_o] / \rho_o \quad (96 c)$$

wobei ρ_o = Referenzdichte, κ = Dichteverhältniszahl und C_1 = Maximalkonzentration, R_d = Retardationsfaktor und λ = Zerfallsrate.

Für die gesuchten Funktionen kommen folgende Interpolationsansätze vom C_o -Typ zur Anwendung:

$$\begin{aligned} p &\approx \hat{p} = M_I P_I \\ u_k &\approx \hat{u}_k = N_I U_k^I \quad I = 1, \dots, K \\ C &\approx \hat{C} = N_I C_I \quad k = 1, 2 \end{aligned} \quad (97)$$

wobei zur Genauigkeitsverbesserung und zur Vermeidung oszillierender Erscheinungen bei den diskreten Druckwerten (sog. „Schachbrett-Syndrom“ [17]) das Polynom der Formfunktion $M_I(x_k)$ um eine Ordnung geringer als für $N_I(x_k)$ ausgewählt wird, z. B. quadratische Interpolation durch N_I und linearer Ansatz durch M_I .

Die MWR liefert für das Ausgangssystem (93), (94) und (95) bei (97) letztlich folgende FE-Gleichungen:

$$H \cdot \Pi^{n+1} + G^{n+1} = 0 \quad (98 a)$$

$$D(U^{n+1}) \cdot C^{n+1} = E(U^{n+1}) \cdot C^n + X^{n+1} \quad (99 a)$$

mit

$$H_{IJ} = \sum_e \iint_{\Omega^e} \begin{bmatrix} 0 & M_I^e N_{J,1}^e & M_I^e N_{J,2}^e \\ \frac{K_{11}}{n} N_I^e M_{J,1}^e & N_I^e N_J^e & 0 \\ \frac{K_{22}}{n} N_I^e M_{J,2}^e & 0 & N_I^e N_J^e \end{bmatrix} d\Omega \quad (98 b)$$

unter der Annahme, daß $K_{kl} = 0$ für $k \neq l$ ist,

$$\Pi_I = \begin{Bmatrix} P_I \\ U_1^I \\ U_2^I \end{Bmatrix} \quad (98 c)$$

$$G_I = \sum_e \iint_{\Omega^e} \begin{Bmatrix} 0 \\ \frac{K_{11}}{n} \rho_o g e_1 N_I^e [1 + \frac{\kappa}{C_1} \sum_L (N_L^e \cdot C_L^e(t))] \\ \frac{K_{22}}{n} \rho_o g e_2 N_I^e [1 + \frac{\kappa}{C_1} \sum_L (N_L^e \cdot C_L^e(t))] \end{Bmatrix} d\Omega \quad (98 d)$$

und bei Anwendung des Θ -Verfahrens

$$D_{IJ}(U^{n+1}) = \frac{O_{IJ}}{\Delta t_n} + \Theta S_{IJ}^*(U^{n+1}) \quad (99 b)$$

$$E_{IJ}(U^{n+1}) = \frac{O_{IJ}}{\Delta t_n} - (1 - \Theta) S_{IJ}^*(U^{n+1}) \quad (99 c)$$

$$X_I^{n+1} = \Theta F_I^{n+1} + (1 - \Theta) F_I^n \quad (99 d)$$

bei

$$\begin{aligned} S_{IJ}^*(U^{n+1}) &= S_{IJ}(U^{n+1}) \\ + \gamma \sum_e \iint_{\Omega^e} n w_I^e N_J^e (\sum_L N_L^e \cdot U_k^e L)_{,k} d\Omega \end{aligned} \quad (99 e)$$

wobei die Matrizen O_{IJ} und S_{IJ} sowie der Vektor F_I den in (22) angegebenen Ausdrücken entsprechen.

Impliziert man in F_I gemäß (22 c) Randbedingungen 3. Art (2d), so modifizieren sich S_{IJ} und F_I dergestalt:

$$S_{IJ} \longrightarrow S_{IJ} + \sum_e \int_{\Gamma_3^e} \Lambda_c N_I^e N_J^e d\Gamma \quad (100)$$

und

$$\begin{aligned} F_I &= \sum_e \left\{ \iint_{\Omega^e} N_I^e f_o n d\Omega - \int_{\Gamma_2^e} N_I^e q_c d\Gamma \right. \\ &\quad \left. + \int_{\Gamma_3^e} \Lambda_c N_I^e C_2^R d\Gamma \right\} \end{aligned} \quad (101)$$

Der Vorteil dieser Formulierung besteht darin, daß stetige Felder für die Unbekannten p , u_1 , u_2 und C auftreten. Dies geht jedoch zu Lasten eines höheren numerischen Rechenaufwandes beim Lösen des gekoppelten Systems (98), wobei bis drei Freiheitsgrade an den Knoten auftreten, d. h. die Bestimmungsgleichungen (98) für p und u_k sind simultan zu lösen. Sehr effektiv dagegen läßt sich mit der Substitutionsformulierung arbeiten.

7.1.2. Substitutionsformulierung

Auf Grund der einfachen Gestalt der Bewegungsgleichung in Form des Darcy-Gesetzes kann die Geschwindigkeit in den Feldgleichungen substituiert werden. Als Beispiel sei das Ausgangsproblem des horizontalebenen Stofftransportes im Grundwasser betrachtet [1]:

$$n \frac{\partial B}{\partial t} + q_{k,k} = -Q + W \quad (102)$$

$$q_k + T_{kl} h_{,l} = 0 \quad (103)$$

$$\begin{aligned} B R_d \frac{\partial C}{\partial t} + n C \frac{\partial B}{\partial t} + (q_k C)_{,k} - (\bar{D}_{kl} C_{,l})_{,k} \\ + B R_d \lambda C + C' Q - C'' W - n f_o^* B = 0 \end{aligned} \quad (104)$$

k, l = 1, 2

mit dem Makrodispersionstensor

$$\bar{D}_{kl} = (n D_d B + \beta_T V_q) \delta_{kl} + (\beta_L - \beta_T) \frac{q_k q_l}{V_q} \quad (105 a)$$

$$(V_q = (q_k q_k)^{1/2})$$

und der Brunnenfunktion [1]

$$Q = \sum_L Q_B(x_k) \delta(x_1 - x_1^L, x_2 - x_2^L) \quad (105 b)$$

wobei B = Mächtigkeit des Grundwasserleiters, q_k = spezifischer Darcy-Volumenstrom, h = Druckhöhe, W = Neubildungsrate, C' und C'' = Ein- bzw. Ausgangskonzentrationen, Q_B = Förderstrom des Einzelbrunnens sowie T_{kl} = Transmissibilität. Folgende Anfangs- und Randbedingungen sind gestellt:

$$\begin{aligned} \text{A. B.} \quad & h(x_k, 0) = h_0 \\ & C(x_k, 0) = C_0 \\ \text{R. B.} \quad & h = h_1^R \quad 1. \text{ Art auf } \Gamma_1 \\ & q_h = q_h^R = -T_{kl} h_{,l} n_k \quad 2. \text{ Art auf } \Gamma_2 \\ & q_h = -\Lambda_h (h_2^R - h) \quad 3. \text{ Art auf } \Gamma_3 \\ & C = C_1^R \quad 1. \text{ Art auf } \Gamma_4 \\ & q_c = q_c^R = -\bar{D}_{kl} C_{,l} n_k \quad 2. \text{ Art auf } \Gamma_5 \\ & q_c = -\Lambda_c (C_2^R - C) \quad 3. \text{ Art auf } \Gamma_6 \end{aligned}$$

wobei $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 = \Gamma_4 \cup \Gamma_5 \cup \Gamma_6 = \Gamma$, $\Gamma_2 \cup \Gamma_3 = \Gamma_N^h$, $\Gamma_5 \cup \Gamma_6 = \Gamma_N^c$ und Λ_h als sog. Kolmationsparameter bekannt ist. Für die gesuchten Funktionen werden gleichartige Interpolationsansätze gewählt:

$$\begin{aligned} h &\approx \hat{h} = N_I h_I \\ q_k &\approx \hat{q}_k = N_I q_k^I \quad I = 1, \dots, K \\ C &\approx \hat{C} = N_I C_I \end{aligned} \quad (106)$$

Setzt man (103) vom Darcy-Typ in (102) ein, ergeben sich nach Anwendung der MWR und der Ansatzfunktionen (106) folgende FE-Modellgleichungen:

$$A \cdot h^{n+1} = B \cdot h^n + G^{n+1} \quad (107 a)$$

$$D \cdot C^{n+1} = E \cdot C^n + X^{n+1} \quad (108 a)$$

mit

$$A_{IJ} = \frac{P_{IJ}}{\Delta t_n} + \Theta T_{IJ} \quad (107 b)$$

$$B_{IJ} = \frac{P_{IJ}}{\Delta t_n} - (1 - \Theta) T_{IJ} \quad (107 c)$$

$$G_I^{n+1} = \Theta Y_I^{n+1} + (1 - \Theta) Y_I^n \quad (107 d)$$

bei

$$P_{IJ} = \sum_e \iint_{\Omega^e} n N_I^e N_J^e d\Omega \quad (107 e)$$

$$\begin{aligned} T_{IJ} &= \sum_e \left(\iint_{\Omega^e} T_{kl} N_{I,k}^e N_{J,l}^e d\Omega \right. \\ &\quad \left. + \int_{\Gamma_3^e} \Lambda_h N_I^e N_J^e d\Gamma \right) \quad (107 f) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Y_I &= \sum_e \left\{ - \iint_{\Omega^e} N_I^e (Q - W) d\Omega \right. \\ &\quad \left. - \int_{\Gamma_2^e} N_I^e q_h^R d\Gamma + \int_{\Gamma_3^e} \Lambda_h h_2^R N_I^e d\Gamma \right\} \quad (107 g) \end{aligned}$$

sowie

$$D_{IJ} = \frac{O_{IJ}}{\Delta t_n} + \Theta S_{IJ} \quad (108 b)$$

$$E_{IJ} = \frac{O_{IJ}}{\Delta t_n} - (1 - \Theta) S_{IJ} \quad (108 c)$$

$$X_I^{n+1} = \Theta F_I^{n+1} + (1 - \Theta) F_I^n \quad (108 d)$$

bei

$$O_{IJ} = \sum_e \iint_{\Omega^e} B R_d N_I^e N_J^e d\Omega \quad (108 e)$$

$$\begin{aligned} S_{IJ} &= \sum_e \iint_{\Omega^e} \left\{ w_I^e \left[\left(\sum_L N_L^e q_k^{eL} \right) N_{J,k}^e \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + N_J^e \left(\sum_L N_{L,k}^e q_k^{eL} \right) \right] \right. \\ &\quad \left. + \bar{D}_{kl} w_{I,k}^e N_{J,l}^e + (B R_d \lambda \right. \\ &\quad \left. + n \frac{h_I^{n+1} - h_I^n}{\Delta t_n} \right) N_I^e N_J^e \left. \right\} d\Omega \\ &+ \sum_e \int_{\Gamma_6^e} \Lambda_c N_I^e N_J^e d\Gamma \quad (108 f) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} F_I &= \sum_e \left\{ \iint_{\Omega^e} (-C'Q + C''W + n f_o^* B) N_I^e d\Omega \right. \\ &\quad \left. - \int_{\Gamma_5^e} N_I^e q_c^R d\Gamma + \int_{\Gamma_6^e} \Lambda_c C_2^R N_I^e d\Gamma \right\} \quad (108 g) \end{aligned}$$

wobei für einen unbedeckten Grundwasserleiter die Bedingung $B = h$ eingearbeitet wurde.

In (107 a) und (108 a) bezeichnen h und C die gesuchten Lösungsvektoren für die Piezometerhöhe h und die Stoffkonzentration C . Die Knotenwerte der Geschwindigkeiten q_k^I können nach bekanntem h -Feld gemäß Darcy-Gleichung (103) leicht als sekundäre Unbekannte ermittelt werden:

$$q_k^I = -T_{kl} [N_L(x_1^I, x_2^I)]_{,l} h_L \quad (109)$$

$$\begin{aligned} I, L &= 1, \dots, K \\ k, l &= 1, 2 \end{aligned}$$

Mit dieser Derivativauswertung ist jedoch keine Stetigkeit der diskreten Geschwindigkeitsfelder mathematisch mehr gesichert, was unter bestimmten Umständen (in Bereichen hoher Geschwindigkeitsgradienten) zu Bilanzfehlern führen kann. Aus Genauigkeitsgründen ist eine Gauß-Quadraturpunktbezogene Derivativauswertung zu bevorzugen.

Zur Verbesserung der Genauigkeit des Geschwindigkeitsfeldes und zur Minderung von Bilanzfehlern erweist sich eine direkte Galerkin-FE-Formulierung der Bewegungsgleichung (103) als zweckmäßig [19]:

$$a_{IJ} \cdot q_k^J = b_{kI} \quad k = 1 \text{ oder } 2 \quad (110 a)$$

wobei

$$a_{IJ} = \sum_e \iint_{\Omega^e} N_I^e N_J^e d\Omega \quad (110b)$$

und

$$b_{kI} = - \sum_e \iint_{\Omega^e} N_I^e T_{kl} (N_{J,l}^e h_J) d\Omega \quad (110c)$$

Dabei können die Gleichungen (107) und (110) nacheinander und separat gelöst werden. Das Gleichungssystem (110) braucht im Regelfall nur einmal triangularisiert zu werden.

Das System (107), (108) kann sehr effektiv gelöst werden, wobei Symmetrie für die Matrix A vorliegt und die Bestimmung der Funktionen h, q_k und C sukzessive erfolgen kann.

7.2. Zweiphasenströmungen nichtmischbarer Fluide

7.2.1. Öl-Wasser-Verdrängungsmodell

Betrachtet man die Strömung zweier nichtmischbarer Fluide (Öl - nichtnetzende Phase, Index nw; Wasser = netzende Phase, Index w) in einem Reservoir als horizontales Problem, so lautet die maßgebende Differentialgleichung für jede Phase $f = nw, w$ [1]:

$$n \frac{\partial s_f}{\partial t} - (\hat{K}_{lk}^f p_{,k}^f)_{,l} - Q^f = 0 \quad (111a)$$

mit

$$\hat{K}_{lk}^f = \hat{K}_{lk}^f(s_f) \quad (111b)$$

wobei s_f = Phasensättigung, p^f = Phasendruck, n = Porosität, \hat{K}_{lk}^f = Phasenmobilität und Q^f = Quell-Senkenterm. Das nichtlineare System (111) wird durch die Zustandsgleichung

$$p_c = p^{nw} - p^w = f(s_w) \quad (111c)$$

komplettiert, welche die Beziehung zwischen der Phasendruckdifferenz, dem Kapillardruck p_c und der Wassersättigung beschreibt. Mittels der Funktion (111c) läßt sich die zeitliche Ableitung der Sättigung in (111a) in einen Ausdruck umformen, der das Produkt einer weiteren nichtlinearen Funktion (spezifische Kapazität) und der zeitlichen Ableitung des Phasendruckes darstellt, so daß in (111a) durchgängig der Druck als Unbekannte auftritt. Dieses Vorgehen hat den Vorteil, daß nur der Druck als Unbekannte approximiert zu werden braucht, birgt aber eine Reihe von Nachteilen in sich, wie z. B. Schwierigkeiten bei der Vorgabe der Randbedingungen, Instabilität und numerische Diffusion (Dispersion) bei geringem Kapillardruck usw. [24], [26]. Deshalb wird für die Strömungsgleichungen ein Ansatz in natürlichen Variablen gewählt, d. h. die gesuchten Funktionen p^f und s^f werden mit Hilfe von C_0 -Interpolationsfunktionen dargestellt:

$$\begin{aligned} p^f &\approx \hat{p}^f = N_I P_I^f \\ s_f &\approx \hat{s}_f = N_I S_I^f \end{aligned} \quad \begin{aligned} I &= 1, \dots, K \\ f &= nw, w \end{aligned} \quad (112)$$

Berücksichtigt man ferner, daß $s_{nw} + s_w = 1$, so läßt sich die Ölsättigung s_{nw} fortan durch die Wassersättigung s_w ausdrücken, $s_{nw} = 1 - s_w$, und man erhält aus (111) mit (112) ein System mit drei unbekanntem Größen p^{nw} , p^w , s_w .

Die von der Wassersättigung abhängenden Mobilitäten werden durch einen um eine Ordnung niedrigeren Ansatz

$$\hat{K}_{lk}^f \approx \tilde{K}_{lk}^f = M_I K_{lkI}^f, \quad I = 1, \dots, K^* \quad (113)$$

interpoliert. Die Anwendung der MWR und die Einführung der Relationen (112) und (113) lassen aus den Gleichungen (111a) folgende FE-Gleichungen entstehen:

$$\begin{aligned} H^w \cdot p^w + C \frac{\partial S_w}{\partial t} + F^w &= 0 \\ H^{nw} \cdot p^{nw} - C \frac{\partial S_w}{\partial t} + F^{nw} &= 0 \end{aligned} \quad (114a)$$

mit den Matrizen

$$\begin{aligned} H_{IJ}^f &= \sum_e \iint_{\Omega^e} \left\{ N_{I,1}^e \left(\sum_L M_L^e K_{11L}^f \right) N_{J,1}^e \right. \\ &\quad \left. + N_{I,2}^e \left(\sum_L M_L^e K_{22L}^f \right) N_{J,2}^e \right\} d\Omega \end{aligned} \quad (114b)$$

$$C_{IJ} = \sum_e \iint_{\Omega^e} N_I^e n N_J^e d\Omega \quad (114c)$$

$$F_I^f = \sum_e \left\{ \iint_{\Omega^e} N_I^e Q^f d\Omega + \int_{\Gamma_2^e} N_I^e q_2^{ef} d\Gamma \right\} \quad (114d)$$

unter der Annahme, daß $K_{lk}^f = 0$ für $k \neq l$ ist.

In (114d) repräsentiert der Randintegralterm die Approximation zweiter Randbedingungen, d. h. die anzulegenden Injektions- bzw. Förderströme bei der Reservoirsimulation. Eine günstigere Form des Systems (114), bei der man die simultane Lösung des gesamten Systems vermeidet, wird erhalten, wenn man die Summe beider Gleichungen bildet und sie an die erste Stelle setzt, nämlich

$$\begin{aligned} H^s \cdot p^{nw} + F^s &= H^w \cdot p_c \\ H^{nw} \cdot p^{nw} - C \frac{\partial S_w}{\partial t} + F^{nw} &= 0 \end{aligned} \quad (115a)$$

wobei

$$\begin{aligned} H^s &= H^w + H^{nw} \\ F^s &= F^w + F^{nw} \end{aligned} \quad (115b)$$

In (115a) sind nur noch zwei Unbekannte enthalten, die Gleichungen können sukzessive gelöst werden, und das System ist unempfindlich gegenüber kleinen bzw. verschwindenden Kapillardrücken [23], [27].

Die Zeitdiskretisierung der instationären Gleichung erfolgt mit Hilfe des Θ -Verfahrens und führt auf

$$H^{s,n+1} \cdot p^{nw,n+1} + F^{s,n+1} = H^{w,n+1} \cdot p_c^{n+1} \quad (116a)$$

$$\begin{aligned} C \Delta S_w^{n+1} &= \Theta \Delta t_n \left\{ H^{nw,n+1} \cdot p^{nw,n+1} + F^{nw,n+1} \right\} \\ &\quad + (1 - \Theta) \Delta t_n \left\{ H^{nw,n} \cdot p^{nw,n} + F^{nw,n} \right\} \end{aligned} \quad (116b)$$

wobei zusätzlich noch ein Prädiktor-Korrektor-Schema, vgl. Abschnitt 4.1, zur Anwendung gelangt, um die Startwerte des $n+1$ -ten Zeitschrittes zu schätzen und zu korrigieren. Das System (115 a) besteht aus einer elliptischen und aus einer hyperbolischen Gleichung, die die Bewegung einer mehr oder weniger scharfen Front – entstehend durch die Verdrängung von Öl durch Wasser – beschreiben. Um numerische Instabilitäten auszuschließen, ist auch hier der Einsatz von Upwind-Schemata sinnvoll [22], [23]. Da jedoch explizit keine konvektiven Terme in den Gleichungen auftreten, auf die eine Petrov-Galerkin-Wichtung, vgl. Abschnitt 5, wirken kann, wird hier ein modifiziertes und ebenso wirkungsvolles „Upstream-Weighting“ bei der Interpolation der nichtlinearen Mobilitäten angewendet. Dabei werden die Mobilitäten nicht wie in (113) interpoliert, sondern es ist

$$K_{IJ}^f = \left(\frac{1}{2} + \frac{\alpha}{2}\right) K_I^f + \left(\frac{1}{2} - \frac{\alpha}{2}\right) K_J^f \quad (I \neq J) \quad (117)$$

wobei K_I^f und K_J^f die relativen Mobilitätswerte an den Elementknoten I und J sind, K_{IJ}^f stellt den gewichteten Wert dar und α , $0 \leq \alpha \leq 1$, ist der Upwind-Parameter für die Elementseite mit den Knoten I und J, vgl. [27].

Der Vorteil dieser Zweiphasenmodellformulierung besteht darin, daß die Matrizen H^s und C symmetrisch und positiv definit sind (C ist außerdem konstant und braucht nur einmal aufgebaut zu werden), was eine schnelle sukzessive Lösung der Gleichungen ermöglicht. Für den Spezialfall $p_c = 0$, auch als Buckley-Leverett-Problem bekannt [24], [27], vereinfacht sich die Gleichung (116 a), da die rechte Seite verschwindet. Es wird damit ein reines Verdrängungsproblem modelliert, bei dem sich eine extrem scharfe Front ausbildet und eine Upwind-Formulierung nach (117) in einigen Fällen notwendig ist. Eine alternative Formulierung der maßgeblichen Differentialgleichung speziell für das Buckley-Leverett-Problem kann in der folgenden Form gegeben werden [23] [25]:

$$n \frac{\partial s_w}{\partial t} + q r'(s_w) \frac{\partial s_w}{\partial x} = 0 \quad (118)$$

mit

$$r'(s_w) = \frac{d r(s_w)}{d s_w} \quad (119 a)$$

$$r(s_w) = \frac{\hat{K}_{lk}^w}{\hat{K}_{lk}^{nw} + \hat{K}_{lk}^w} \quad (119 b)$$

und q = Injektions/Produktionsstrom. Gleichung (118) ist von hyperbolischem Charakter und weist einen konvektiven Term auf, so daß das übliche Petrov-Galerkin-Schema mit den Wichtungen w_I , z. B. (45), (48), zur Anwendung gelangen kann. Die FE-Approximation von (118) liefert dann folgendes diskrete System bezüglich x

$$B \cdot S_w + C \cdot \frac{\partial S_w}{\partial t} = 0 \quad (120)$$

mit

$$B_{IJ} = \sum_e \iint_{\Omega^e} q w_I^e \left(\sum_L N_L^e r'_L \right) N_{J,1}^e d\Omega$$

und C entsprechend (114 c). Die Zeitdiskretisierung mittels des Θ -Verfahrens führt auf das nichtlineare Gleichungssystem

$$\begin{aligned} & [\Theta \Delta t_n B^{n+1} + C^{n+1}] \cdot S_w^{n+1} \\ & = - [(1 - \Theta) \Delta t_n B^n - C^n] \cdot S_w^n \end{aligned} \quad (121)$$

mit nun allerdings asymmetrischer Systemmatrix. Dieser Nachteil gegenüber dem obigen Modell (115) bzw. (116) wird durch einen weiteren ergänzt: man erhält keine Aussagen über den Druckverlauf im Reservoir. Aus numerischer Sicht jedoch ist das System (120), (121) von Interesse, insbesondere bezüglich der Untersuchung von Upwind-Schemata und der Approximation der nichtlinearen Koeffizienten [25].

7.2.2. Ungesättigt-gesättigte Grundwasserströmungen

Aus den allgemeinen Differentialgleichungen (111) für ein Zweiphasenproblem nichtmischbarer Fluide für Wasser und Gas (Bodenluft) läßt sich das reduzierte Modell der ungesättigten Strömung als Sonderfall ableiten [1] und zur Simulation von vertikalen Wasserströmungen im Boden verwenden [20], [21]. Man erhält für die Piezometerhöhe h^w , die sich aus dem Phasendruck ergibt

$$h^w = \frac{p^w}{\rho_w g} + x_3 \quad (122)$$

die nichtlineare Differentialgleichung

$$c \frac{\partial h^w}{\partial t} - (K_{lk} \hat{K}_r^w h_{,k}^w)_{,l} - Q^w = 0 \quad (123 a)$$

mit

$$c = -n \frac{d s_w}{d p^w} \rho_o^w g = c(s_w) \quad (123 b)$$

als Funktion der spezifischen hydraulischen Speicherkapazität, K_{lk} ist der Tensor der gesättigten hydraulischen Leitfähigkeit. Gemäß der Zustandsgleichung (111 c) ist auch hier der Phasendruck p^w und somit die Piezometerhöhe h^w von der Wassersättigung abhängig und die Gleichung (123 a) wird stark nichtlinear wegen der lösungsabhängigen Koeffizienten $c(s_w)$ und $K^w(s_w)$. Der Gleichungstyp wechselt von parabolisch ($p^w < 0$) auf elliptisch ($p^w \geq 0$) mit verschwindender Funktion c . Zur numerischen Lösung von (123) wird h^w mittels C_0 -Ansatzfunktionen interpoliert

$$h^w \approx \hat{h}^w = N_I h_I^w, \quad I = 1, \dots, K \quad (124)$$

wobei im allgemeinen quadratische Funktionen N_I benutzt werden. Die Interpolation der Koeffizienten erfolgt eine Ordnung niedriger mit linearen Funktionen M_I

$$\begin{aligned} c & \approx \hat{c} = M_I C_I & I = 1, \dots, K^* \\ \hat{K}_r^w & \approx \tilde{K}_r^w = M_I K_{rI}^w \end{aligned} \quad (125)$$

Durch Anwendung der MWR und die Einführung von (124) und (125) läßt sich aus (123) die folgende FE-Gleichung herleiten

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{h}^w + \mathbf{C} \frac{\partial \mathbf{h}^w}{\partial t} = \mathbf{F} \quad (126)$$

mit

$$\mathbf{A}_{IJ} = \sum_e \iint_{\Omega^e} \left\{ \mathbf{N}_{I,1}^e \left(\sum_L \mathbf{M}_L^e \mathbf{K}_{rL}^w \right) \mathbf{K}_{11} \mathbf{N}_{J,1}^e + \mathbf{N}_{I,3}^e \left(\sum_L \mathbf{M}_L^e \mathbf{K}_{rL}^w \right) \mathbf{K}_{33} \mathbf{N}_{J,3}^e \right\} d\Omega \quad (127 a)$$

$$\mathbf{C}_{IJ} = \sum_e \iint_{\Omega^e} \mathbf{N}_I^e n \left(\sum_L \mathbf{M}_L^e \mathbf{C}_L^e \right) \mathbf{N}_J^e d\Omega \quad (127 b)$$

$$\mathbf{F}_I = \sum_e \left\{ - \iint_{\Omega^e} \mathbf{N}_I^e \mathbf{Q}^w d\Omega + \int_{\Gamma_2^e} \mathbf{N}_I^e q_2 d\Gamma \right\} \quad (127 c)$$

unter der Annahme, daß $\mathbf{K}_{kk} = 0$ für $k \neq 1$ ist.

Zieht man noch dritte Randbedingungen der Gestalt

$$q_3^R = -\Lambda (h_3^R - h) \quad (128)$$

ins Kalkül, wobei Λ der sog. Kolmationsparameter und h_3^R die Referenzpiezometerhöhe sind, dann erweitern sich (127 a) und (127 c) folgendermaßen

$$\mathbf{A}_{IJ} \longrightarrow \mathbf{A}_{IJ} + \sum_e \int_{\Gamma_3^e} \Lambda \mathbf{N}_I^e \mathbf{N}_J^e d\Gamma \quad (129 a)$$

$$\mathbf{F}_I \longrightarrow \mathbf{F}_I + \sum_e \int_{\Gamma_3^e} \Lambda \mathbf{N}_I^e h_3^R d\Gamma \quad (129 b)$$

Das System nichtlinearer gewöhnlicher Differentialgleichungen bezüglich t (126) wird mit dem Θ -Verfahren (41) vollständig diskretisiert und man erhält

$$(\Theta \Delta t_n \mathbf{A} + \mathbf{C}) \cdot \mathbf{h}^{w,n+1} = ((1 - \Theta) \Delta t_n \mathbf{A} - \mathbf{C}) \cdot \mathbf{h}^{w,n} + \Delta t_n (\Theta \mathbf{F}^{n+1} + (1 - \Theta) \mathbf{F}^n) \quad (130)$$

mit $0 \leq \Theta \leq 1$. Zur Stabilität und Oszillationsfreiheit der Lösung gelten die Bedingungen (56) und (57). Analog zum vorherigen Modell wird mit Hilfe eines Prädiktor-Korrektor-Schemas (Abschnitt 4.1.) das System (130) linearisiert. Die je Zeitschritt auszuführenden Iterationen werden dann abgebrochen, wenn ein vorgegebenes Fehlerkriterium Δ erfüllt ist [20].

Wie aus (130) ersichtlich, ist das System symmetrisch, was einer effektiven Lösung entgegen kommt. Auf Grund der Nichtlinearität der Matrizen \mathbf{A} und \mathbf{C} ist (130) je Zeitschritt und Iterationsschritt neu zu assemblieren. Die Knotenwerte der Geschwindigkeit können aus den Piezometerhöhen \mathbf{h}^w nach dem Darcy-Gesetz ermittelt werden, analog (109), bzw. es wird die direkte Galerkin-FE-Formulierung (110) zur Minderung von Bilanzfehlern angewandt.

8. Gekoppelte Probleme und Iterationsverfahren

Eine Reihe von Problemen (z. B. dichtegekoppelte Transportprozesse, diverse Reaktionsvorgänge, Mehrphasen- und ungesättigte Strömungen) implizieren Nichtlinearitäten in den FE-Gleichungen. Ihre erfolgreiche Lösung erfordert die Anwendung geeigneter Iterationstechniken. Aus der Vielzahl möglicher Verfahren seien nachfolgend zwei gebräuchliche Lösungswege dargestellt, die am Beispiel des Systems (98), (99) erläutert werden.

Als einfachste Möglichkeit bietet sich eine *sukzessive Iterationsmethode* an, bei der innerhalb der Zeitschicht die Lösung in einem einfachen Zyklus korrigiert wird:

$$\mathbf{H} \cdot \Pi_{\tau}^{n+1} + \mathbf{G} (\mathbf{C}_{\tau}^{n+1}) = 0$$

$$\mathbf{D} (\mathbf{U}_{\tau}^{n+1}) \cdot \mathbf{C}_{\tau+1}^{n+1} = \mathbf{E} (\mathbf{U}_{\tau}^{n+1}) \cdot \mathbf{C}^n + \mathbf{X}^{n+1} \quad (131)$$

$$\mathbf{H} \cdot \Pi_{\tau+1}^{n+1} + \mathbf{G} (\mathbf{C}_{\tau+1}^{n+1}) = 0$$

etc.

wobei τ die Iterationslaufzahl bezeichnet.

Die alternierenden Iterationen werden dann abgebrochen, falls

$$\max \left| \mathbf{C}_{\tau+1}^{n+1} - \mathbf{C}_{\tau}^{n+1} \right| \leq \Delta \quad (132)$$

wobei Δ ein Fehlerabbruchkriterium darstellt.

Um die Konvergenz zu verbessern, können unter bestimmten Bedingungen Korrekturschritte in Verbindung mit Überrelaxation von Vorteil sein. Dazu ersetzt man die aus der Transportgleichung im $\tau + 1$ -Schritt erhaltene Lösung $\mathbf{C}_{\tau+1}^{n+1}$ durch

$$\mathbf{R} \mathbf{C}_{\tau+1}^{n+1} = \mathbf{C}_{\tau}^{n+1} + \omega (\mathbf{C}_{\tau+1}^{n+1} - \mathbf{C}_{\tau}^{n+1}) \quad (133)$$

in $\mathbf{G}(\mathbf{R} \mathbf{C}_{\tau+1}^{n+1})$ anstelle $\mathbf{G}(\mathbf{C}_{\tau+1}^{n+1})$. Hierbei bezeichnet $\omega = 1,0 \dots 2,0$ einen Überrelaxationsfaktor.

Gute Konvergenzeigenschaften weist das *Newton-Raphson-Verfahren* auf, falls die Anfangsnäherungen ausreichend nahe an der Lösung liegen. Insbesondere für instationäre Prozesse ist im allgemeinen eine solche geforderte gute Anfangsnäherung verfügbar. Am Beispiel des Systems (98), (99) begründet sich die Nichtlinearität auf die \mathbf{C} -Abhängigkeit im Geschwindigkeitsfeld \mathbf{U} . In verallgemeinerter Schreibweise ist dabei folgendes System zu lösen

$$\mathbf{A} (\mathbf{C}^{n+1}) \mathbf{C}^{n+1} = \mathbf{B}^{n+1,n} \quad (134)$$

Nach dem Newton-Raphson-Verfahren (im Zeitschritt $n + 1$) ergibt sich folgender Iterationszyklus

$$\mathbf{J}_{\tau}^{n+1} (\mathbf{C}_{\tau+1}^{n+1} - \mathbf{C}_{\tau}^{n+1}) = \mathbf{B}^{n+1,n} - \mathbf{A} (\mathbf{C}_{\tau}^{n+1}) \mathbf{C}_{\tau}^{n+1} \quad (135 a)$$

oder

$$\mathbf{J}_{IJ(\tau)} (\mathbf{C}_{J,\tau+1} - \mathbf{C}_{J,\tau}) = \mathbf{B}_I - \mathbf{A}_{IJ} (\mathbf{C}_{\tau}) \mathbf{C}_{J,\tau} \quad (135 b)$$

wobei die Jacobi-Matrix J_r^{n+1} im Iterationsschritt r des Vektors $A(C^{n+1})$ gegeben ist durch

$$J_{IJ} = \frac{\partial}{\partial C_J} [A_{IL}(C) C_L] = A_{IJ}(C) + \left[\frac{\partial A_{IL}(C)}{\partial C_J} \right] C_L \quad (136)$$

Die Indexbezeichnungen $n+1$ und r wurden dabei in (135 b) und (136) zur Vereinfachung weggelassen. Die Konvergenzgeschwindigkeit des Newton-Raphson-Verfahrens ist von zweiter Ordnung, falls die Jacobi-Matrix $J_{IJ}(r)$ in jedem Iterationsschritt τ aktualisiert wird, d. h. es ist $r = \tau$ zu verwenden („Full“-Newton-Iteration). Es ist möglich, die anfängliche Jacobi-Matrix $J_{IJ}(r)$ für $r = 0$ auf Kosten einer reduzierten Konvergenzgeschwindigkeit (asymptotisch linear) beizubehalten, sog. modifiziertes Newton-Raphson-Verfahren [4].

Somit ergibt sich für das untersuchte Transportproblem

$$J_{IJ} = \frac{O_{IJ}}{\Delta t_n} + \Theta [S_{IJ}(U^{n+1}) + J'_{IJ}] \quad (137)$$

im Zeitschritt $n+1$ und Iterationsschritt τ mit

$$J'_{IJ} = \frac{\partial K_{IL}(C)}{\partial C_J} C_L \quad (138 a)$$

wobei

$$K_{IL}(C) = \sum_e \iint_{\Omega^e} w_I n u_k(C) N_{L,k} d\Omega \quad (138 b)$$

die C -abhängige Konvektionsmatrix von S_{IJ} gemäß (22 a) repräsentiert. Nach Einsetzen von (94) bei (96 b) ergibt sich schließlich

$$J'_{IJ} = - \sum_c \iint_{\Omega^e} g \rho_o \frac{K}{C_1} K_{kk} e_k w_I^e N_J^e \sum_L N_{L,k}^e C_L^e d\Omega \quad (139)$$

$k = 1, 2$

Eine weitere Vereinfachung bietet sich in Verbindung mit einer Prädiktor-Korrektor-Lösungsstrategie (Abschnitt 4.1 und 4.2) an, indem das Gleichungssystem (135) nur einmal pro Zeitschritt gelöst wird, sog. *1-Schritt-Newton-Verfahren* [8]:

$$J_p^{n+1} (C^{n+1} - C_p^{n+1}) = B^{n+1,n} - A(C_p^{n+1}) C_p^{n+1} \quad (140)$$

wobei C_p^{n+1} die Prädiktor-Werte von C^{n+1} gemäß (25) bzw. (33) bezeichnen. Die Auswertung der Jacobi-Matrix J_p^{n+1} mit

$$J_{IJ(P)}^{n+1} = \frac{O_{IJ}}{\Delta t_n} + S_{IJ}(U^{n+1}(C_p^{n+1})) + J'_{IJ}(C_p^{n+1}) \quad (141)$$

für das implizite Schema und

$$J_{IJ(P)}^{n+1} = \frac{2 O_{IJ}}{\Delta t_n} + S_{IJ}(U^{n+1}(C_p^{n+1})) + J'_{IJ}(C_p^{n+1}) \quad (142)$$

für die Trapezregel erfolgt auf Grundlage der Prädiktoren (25) bzw. (33). Der Vektor C^{n+1} in (140) wird als „korrekte“ Lösung betrachtet, wenn über das Kriterium des Zeittrunktionsfehlers, wie er in den Relationen zwi-

schen den Zeitschritten Δt_{n+1} der nachfolgenden und Δt_n zur gegenwärtigen Rechnung gemäß (32) bzw. (40) seinen Ausdruck findet, folgende Bedingungen eingehalten sind:

- Falls $\Delta t_{n+1} \geq \Delta t_n$: Die Lösung ist genau genug und die Vergrößerung des Zeitschrittes kann akzeptiert werden.
- Falls $\sigma \Delta t_n \leq \Delta t_{n+1} < \Delta t_n$ mit $\sigma \approx 0,8$: Die Lösung wird akzeptiert, jedoch erfolgt keine Veränderung der Zeitschrittweite.
- Falls $\Delta t_{n+1} < \sigma \Delta t_n$: Der Zeitschritt Δt_n ist zu reduzieren und die Lösung muß wiederholt werden.

9. Finite-Element-Programme

9.1. FEFLOW

Zur Lösung diverser Stoff- und Wärmetransportprozesse im Grundwasser nach der FEM wurde das FORTRAN-Programmsystem FEFLOW entwickelt [18]. Seine modulare Grundkonzeption gewährt eine, für den ingenieurmäßigen Einsatz notwendige Anwendungsbreite, Variabilität und Ausbaufähigkeit. FEFLOW erlaubt die Berechnung

instationärer oder stationärer
zweidimensionaler, horizontalebener oder rotations-
symmetrischer linearer oder nichtlinearer (dichtege-
koppelter)

Transportmodelle gemäß Abschnitt 7.1. Sowohl Formulierungen in natürlichen Variablen als auch Substitutionsformulierungen können wahlweise realisiert werden. Weitere aktuelle Charakteristika des Systems FEFLOW sind:

- Zeitapproximation nach dem Θ -Verfahren und Prädiktor-Korrektor-Schemata (1-Schritt-Newton),
- Elementbibliothek (isoparametrisches Elementkonzept), bestehend aus
 - bilinearem 4-Knoten-Element
 - biquadratischem 8-Knoten-Element
 - biquadratischem 9-Knoten-Element,
- wahlweise Anwendungsmöglichkeit von Galerkin-FEM und Upwind-FEM,
- Generation des FE-Netztes und Profilmimierung,
- Lösung der algebraischen symmetrischen und un-symmetrischen Gleichungssysteme auf der Grundlage effektiver Profil-Techniken und – im Bedarfs-falle – nach Front-Eliminationsverfahren,
- Ergebnisdatei zur Sekundärauswertung und zur computergrafischen Datenverarbeitung.

Weitere Einzelheiten zu FEFLOW sind in [18] enthalten.

9.2. IFESUF

Zur Lösung vertikalebener Grundwasser- und Bodenfeuchteströmungsprobleme für wasser- und landwirtschaftliche Aufgabenstellungen wurde das FE-Programmsystem IFESUF entwickelt [28]. Seine ingenieurmäßige Anwendung zur Simulation

stationärer oder instationärer
ein- oder zweidimensionaler vertikalebener
linearer oder nichtlinearer

Wasserströmungen in heterogenen und anisotropen Böden ist auf Grund des gewählten Modellkonzepts [1] gewährleistet. Das implizierte FE-Modell bietet u. a. folgende Charakteristika:

- Isoparametrische Elementbibliothek, bestehend aus
 - bilinearem 4-Knoten-Element
 - biquadratischem 8-Knoten-Element
 - biquadratischem 9-Knoten-Element
 - bikubischem 12-Knoten-Element,
- Zeitapproximation nach dem Θ -Verfahren,
- topologisch regelmäßige und unregelmäßige FE-Netze,
- Lösung der algebraischen Gleichungssysteme mittels Profil-Technik,
- Restart-Charakteristik,
- Massenbilanzkontrolle u. a.

9.3. FEBUCK

Als ein Teilproblem bei der Lösung horizontalebener Zweiphasenströmungsprozesse wurde das FE-Programm FEBUCK zur numerischen Lösung des Buckley-Leverett-Problems entwickelt. Es stützt sich auf das im Abschnitt 7.2.1. vorgestellte FE-Modell in seinen beiden Varianten (115), (116) und (120), (121). Zusätzlich zu der im Abschnitt 9.2. angegebenen Elementbibliothek der Galerkin-FEM können noch Upwind-Formulierungen gewählt werden. Die Lösung symmetrischer und unsymmetrischer Systeme mittels Profiltechnik ist möglich.

LITERATUR

- [1] Diersch, H.-J., Nitzmann, G., Scholz, H.: Modellierung und numerische Simulation geohydrodynamischer Transportprozesse 1. Theorie. Technische Mechanik 5 (1984) 3, 44 – 58.
- [2] Michlin, S. G.: Variationsmethoden der mathematischen Physik. Akademie-Verlag, Berlin, 1962.
- [3] Diersch, H.-J.: Finite-element-Galerkin-Modell zur Simulation zweidimensionaler konvektiver und dispersiver Stofftransportprozesse im Boden. Acta Hydrophysica 26 (1981) 1, 5 – 44.
- [4] Chung, T. J.: Finite Elemente in der Strömungsmechanik. VEB Fachbuchverlag, Leipzig, 1982.
- [5] Zienkiewicz, O. C.: Methode der finiten Elemente. VEB Fachbuchverlag, Leipzig, 1983.
- [6] Prakash, A.: Rayleigh-Ritz formulation of problems in sedimentology, Finite Elements in Water Resources (ed. C. A. Brebbia et al.). Proc. 2nd Int. Conf. Imperial College London, July 1978, Pentech Press, London: Plymouth, pp. 2.119 – 2.130.
- [7] Frind, E. O., Pinder, G. F.: A collocation finite element method for potential problems in irregular domains. Int. J. Num. Meths. Engng. 14 (1979), 681 – 701.
- [8] Gresho, P. M., Lee, R. L., Sani, R. L.: On the time-dependent solution of the incompressible Navier-Stokes equations in two and three dimensions, Lawrence Livermore Laboratory. Preprint UCRL-83282, 1979, 53 S.
- [9] Zienkiewicz, O. C., Heinrich, J. C.: The finite element method and convection problems in fluid mechanics. In: Finite Elements in Fluids – Vol. 3 (ed. R. H. Callagher et al.). J. Wiley & Sons, London, 1978, pp. 1 – 22.
- [10] Diersch, H.-J.: On finite element upwinding and its numerical performance in simulating coupled convective transport processes. Zschr. Angew. Math. Mech. (ZAMM) 63 (1983), 479 – 488.
- [11] Gresho, P. M., Lee, R. L.: Don't suppress the wiggles – they're telling you something! Computer & Fluids 9 (1981) 2, 223 – 253.

- [12] Ramakrishnan, C. V.: An upwind finite element scheme for the unsteady convective diffusive transport equation. Applied Math. Modelling 3 (1979), 280 – 284.
- [13] Dick, E.: Accurate Petrov-Galerkin methods for transient convective diffusion problems. Int. J. Num. Meths. Engng. 19 (1983) 10, 1425 – 1433.
- [14] Brooks, A. N., Hughes, T. J. R.: Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. Comp. Meths. Appl. Mech. Engng. 32 (1982), 199 – 259.
- [15] Roache, P. J.: Computational fluid dynamics. Hermosa Press, Albuquerque, 1976.
- [16] Temam, R.: Navier-Stokes equations, North-Holland Publ. Comp. 1977.
- [17] Sani, R. L., Gresho, P. M.; Lee, R. L.; Griffiths, D. F.: The cause and cure (?) of the spurious pressures generated by certain FEM solutions of the incompressible Navier-Stokes equations: Part 1, Int. J. Num. Meths. in Fluids, 1 (1981), 17 – 43.
- [18] Diersch, H.-J.: Finite Element Simulator FEFLOW-Computer Program to solve areal groundwater flow and mass transport, Programmdokumentation. Institut für Mechanik der AdW der DDR. Version 1980, überarb. Version 1985.
- [19] Yeh, G.-T.: On the computation of Darcian velocity and mass balance in the finite element modeling of groundwater flow. Water Resources Research 17 (1981) 5, 1529 – 1534.
- [20] Nitzmann, G.: Isoparametric finite element method of transient unsaturated-saturated water table flow problems, Preprint P-MECH-01/84. Institut für Mechanik der AdW der DDR, Berlin, 1984, 35 S.
- [21] Nitzmann, G.: Eine Galerkin-finite-element-Methode zur Simulation instationärer zweidimensionaler ungesättigter und gesättigter Wasserströmungen im Boden. Acta Hydrophysica 28 (1983) 1/2, 37 – 107.
- [22] Mercer, J. W., Faust, C. R.: Application of finite-element techniques to immiscible flow in porous media, Finite Elements in Water Resources (ed. W. G. Gray et al.). Proc. 1st Int. Conf. Princeton Univ., July 1976, Pentech Press, London: Plymouth, pp. 1.21 – 1.57.
- [23] Huyakorn, P. S.; Pinder, G. F.: A new finite element technique for the solution of two-phase flow through porous media. Advances in Water Resources 1 (1978) 5, 285 – 297.
- [24] Peaceman, D. W.: Numerical solution of the nonlinear equations for two-phase flow through porous media. In: Nonlinear Partial Differential Equations (ed. W. F. Ames), Academic Press, New York, London, 1967, pp. 171 – 191.
- [25] Allen, M. B., Pinder, G. F.: The convergence of upstream collocation in the Buckley-Leverett problem. Proc. 57th Annual Fall Techn. Conf., New Orleans, Sept. 1982, SPE 10978, 10 S.
- [26] White, I. R., Lewis, R. W.; Wood, W. L.: The numerical simulation of multiphase flow through a porous medium and its application to reservoir engineering. Applied Math. Modelling 5 (1981) 6, 165 – 172.
- [27] Dalen, V.: Two-phase incompressible flow. SINTEF-Report STF71 A74038, Trondheim, 1974, 54 S.
- [28] Nitzmann, G.: Dokumentation und Anwenderinstruktion für das Programmsystem IFESUF. Institut für Mechanik der AdW der DDR, 1983/84.

Anschrift der Verfasser:

Dr. Hans-Jörg Diersch
 Dr. Gunnar Nitzmann
 Akademie der Wissenschaften der DDR
 Institut für Mechanik
 9010 Karl-Marx-Stadt
 PSF 408