

1 Potentialströmungen

Eine Potentialströmung in $\Omega \subset \mathbb{R}^D$, $D = 2, 3$, wird durch den (hydrostatischen) Druck

$$p: \Omega \longrightarrow \mathbb{R},$$

den Fluss

$$q: \Omega \longrightarrow \mathbb{R}^D$$

und das Materialgesetz (Darcy)

$$q = -\kappa \nabla(p + G)$$

beschrieben. Dabei ist κ der Permeabilitätstensor und G das Gravitationspotential.

Im Folgenden verwenden wir die Hilfsgröße $u = p + G$, d.h., $q = -\kappa \nabla(p + G) = -\kappa \nabla u$.

Auf dem Rand $\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ werden Randdaten

$$u_D: \Gamma_D \longrightarrow \mathbb{R},$$

$$g_N: \Gamma_N \longrightarrow \mathbb{R},$$

für die Randbedingungen $u = u_D$ auf Γ_D und $q \cdot n = g_N$ auf Γ_N vorgegeben.

Aus der Bilanzgleichung

$$\int_{\partial Y} q \cdot n \, da = 0 \quad \text{für jedes Teilvolumen } Y \subset \Omega \quad \iff \quad \operatorname{div} q = 0$$

ergibt sich für jede Testfunktion $\phi: \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$ mit $\phi = 0$ auf Γ_D die Variationsgleichung für u

$$\int_{\Omega} \kappa \nabla u \cdot \nabla \phi \, dx = \int_{\partial\Omega} g_N \phi \, da.$$

2 Lineare und bilineare Finite Elemente in 2D

Sei $\bar{\Omega} = \bigcup_{K \in \mathcal{K}} \bar{K}$ eine Zerlegung in Drei- und Vierecke $\bar{K} = \text{conv } \mathcal{V}_K$.

(2.1) Eine Zerlegung heißt *zulässig*, wenn

$$\text{conv}(\mathcal{V}_K \cap \text{conv } \mathcal{V}_{K'}) = \text{conv } \mathcal{V}_K \cap \text{conv } \mathcal{V}_{K'} \text{ für } K, K' \in \mathcal{K}.$$

Zu jedem Drei- oder Viereck $K \in \mathcal{K}$ sei $\hat{K} = \text{conv } \hat{\mathcal{V}}$ das Referenzdreieck oder -viereck. In \hat{K} bestimme eine Knotenbasis $\hat{\lambda}_j$ mit $\hat{\lambda}_j(\hat{z}_k) = \delta_{jk}$ für $\hat{z}_k \in \hat{\mathcal{V}}$. Setze $\hat{V} = \text{span}\{\hat{\lambda}_j\}$. Sei $\varphi_K: \hat{K} \rightarrow \bar{K}$ und $V_K = \{\hat{\lambda} \circ \varphi_K^{-1} : \hat{\lambda} \in \hat{V}\}$. Setze $\mathcal{V}_{\mathcal{K}} = \bigcup_{K \in \mathcal{K}} \mathcal{V}_K = \{z_1, \dots, z_N\}$.

Definiere $V_h = \{\phi_h : \phi_h|_K \in V_K\}$ und $V_h(u) = \{\phi_h \in V_h : \phi_h(z) = u(z) \text{ für } z \in \mathcal{V}_{\mathcal{K}} \cap \Gamma_D\}$. Die Finite-Elemente-Lösung $u_h \in V_h(u_D)$ ist durch die Variationsgleichung

$$\int_{\Omega} \kappa \nabla u_h \cdot \nabla \phi_h \, dx = \int_{\Gamma_N} g_N \phi_h \, da, \quad \phi_h \in V_h(0)$$

definiert. Sei $\lambda_1, \dots, \lambda_N \in V_h$ eine Knotenbasis mit $\lambda_n(z_k) = \delta_{nk}$ und $u_h = \sum \underline{u}[n] \lambda_n$. Dann gilt $\underline{A} \underline{u} = \underline{b}$ mit

$$\underline{A}[n, k] = \int_{\Omega} \kappa \nabla \lambda_k \cdot \nabla \lambda_n \, dx, \quad \underline{b}[n] = \int_{\partial\Omega} g_N \lambda_n \, da$$

für $n \notin \mathcal{I}_D = \{n : z_n \in \Gamma_D\}$. Für $n \in \mathcal{I}_D$ setze $\underline{A}[n, k] = \delta_{nk}$ und $\underline{b}[n] = u_D(z_n)$.

(2.2) Sei κ symmetrisch und uniform positiv definit (d.h. $\kappa y \cdot y \geq \kappa_0 |y|^2$ mit $\kappa_0 > 0$). Sei $\mathcal{I}_D \neq \emptyset$. Dann ist \underline{A} regulär und auf $\underline{V}(0) = \{\underline{v} \in \mathbb{R}^N : \underline{v}_n = 0 \text{ für } n \in \mathcal{I}_D\}$ symmetrisch positiv definit.

3 Lösung dünn besetzter Gleichungssysteme

Sei $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ und $b \in \mathbb{R}^N$ gegeben. Bestimme eine Lösung $u \in \mathbb{R}^N$ von $Au = b$.

Sei $I = \{1, \dots, N\}$ die Indexmenge und $G_A = \{(n, k) \in I \times I: A[n, k] \neq 0\}$ der Matrixgraph.

(3.1) Matrizen A heißt *dünn besetzt*, wenn $|G_A| \leq CN$ (mit $C > 0$ unabhängig von N).

(3.2) Sei $I_K = \{n \in I: z_n \in \mathcal{V}_K\}$ und $\max_n |\{K: n \in \mathcal{V}_K\}| \leq C$. Dann gilt:

- $G_A \subset \bigcup I_K \times I_K$ und $|G_A| \leq C(N+1)$.
- Matrix-Vektor-Multiplikation und Assemblieren benötigen $\mathcal{O}(N)$ Operationen.
- Das *compressed row storage format* benötigt $\mathcal{O}(N)$ Arbeitsspeicher.

Sei $I = I_1 \cup \dots \cup I_p \cup I_\Gamma$ eine disjunkte Zerlegung mit Blockmatrizen A_{pq} , und $A_{p\Gamma}$, $A_{\Gamma p}$, $A_{\Gamma\Gamma}$. Eine solche Zerlegung ergibt sich durch eine nichtüberlappende Gebietszerlegung $\Omega = \Omega^1 \cup \Omega^2 \cup \dots \cup \Omega^p \cup \Gamma$ mit Interface Γ .

(3.3) Sei $A_{pq} = 0$ für $p \neq q$.

Wenn A symmetrisch positiv definit ist, dann ist auch das *Schurkomplement*

$$S = A_{\Gamma\Gamma} - \sum A_{\Gamma p} A_{pp}^{-1} A_{p\Gamma}$$

symmetrisch positiv definit, und für $u = A^{-1}b$ gilt

$$u_\Gamma = S^{-1} \left(b_\Gamma - \sum A_{\Gamma p} A_{pp}^{-1} b_p \right),$$

$$u_p = A_{pp}^{-1} (b_p - A_{p\Gamma} u_\Gamma).$$

3 Subspace Correction Methods

Seien $R_p \in \mathbb{R}^{N_0 \times N}$ Restriktionsmatrizen mit $N_p < N$ ($p = 1, \dots, P$) und $A_p = R_p A R_p^T$.

Wähle Vorkonditionierer $B_p \in \mathbb{R}^{N_p \times N_p}$

$B_p = A_p^{-1}$, $B_p = \text{diag}(A_p)^{-1}$ (Jacobi), oder $B_p = (\text{diag}(A_p) + \text{lower}(A_p))^{-1}$ (Gauss-Seidel).

P0) wähle u^0 , berechne $r^0 = b - Au^0$, wähle $\varepsilon > 0$ und $\theta > 0$, setze $k = 0$

P1) falls $|r^k| \leq \varepsilon$ STOP

P2) berechne $c_p = B_p R_p r^k$ für alle p und $c^k = \sum R_p^T c_p$ (additiv)

P3) berechne $u^{k+1} = u^k + \theta c^k$ und $r^{k+1} = r^k - \theta A c^k$

P4) setze $k := k + 1$ und gehe zu **P1**).

In der multiplikativen Variante von **P2**) berechne $c_p = B_p R_p (r^k - A \sum_{q=1}^{p-1} R_q^T c_q)$.

(3.4) Sei $B \in \mathbb{R}^{N \times N}$ mit $u^{k+1} = u^k + \theta B r^k$.

Dann gilt $B = \sum R_p^T B_p R_p$ (additiv) bzw. $(I_N - BA) = \prod (I_N - R_p^T B_p R_p A)$ (multiplikativ).

Wenn A und B_p symmetrisch positiv definit sind, dann existiert $\theta_0 > 0$, so dass

$\rho = \rho(I_N - \theta BA) < 1$ für alle $\theta \in (0, \theta_0)$ und $|u - u^k|_A \leq \rho^k |u - u^0|_A$ für $|y|_A = \sqrt{y^T A y}$.

(3.5) a) Seien A, B sym. pos. def. mit $\alpha y^T A y \leq y^T A B A y \leq C y^T A y$.

Dann gilt für das CG-Verfahren $|u - u^k|_A \leq 2 \left(\frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^k |u - u^0|_A$ mit $\kappa = \frac{C}{\alpha}$.

b) Es gelte $\alpha y^T y < y^T A B y$ und $\|AB\|_2 \leq C$.

Dann gilt für das GMRES-Verfahren $|u - u^k|_2 \leq \kappa_2(AB) \left(1 - \frac{\alpha^2}{C^2} \right)^{k/2} |u - u^0|_2$.

3 Multilevel Methods

Sei $R_0 \in \mathbb{R}^{N_0 \times N}$ die Restriktion auf einen Unterraum.

(3.6) Sei $A_0 = R_0 A R_0^T$ das Galerkin-Produkt, und sei A symmetrisch positiv definit.

Dann ist $P_0 = R_0^T A_0^{-1} R_0 A$ eine Orthogonalprojektion bzgl. $\langle y, z \rangle_A = y^T A z$.

Z0) wähle u^0 , berechne $r^0 = b - A u^0$, wähle $\varepsilon > 0$ und $\theta > 0$, setze $k = 0$

Z1) falls $|r^k| \leq \varepsilon$ STOP

Z2) berechne $c_0^k = A_0^{-1} R_0 r^k$

Z3) berechne $c^k = R_0^T c_0^k + B(r^k - A R_0^T c_0^k)$

Z3) berechne $u^{k+1} = u^k + c^k$ und $r^{k+1} = r^k - A c^k$

Z4) setze $k := k + 1$ und gehe zu Z1).

(3.7) a) Es gilt $u - u^{k+1} = (I_N - BA)(I_N - P_0)(u - u^k)$.

b) A und B seien symmetrisch positiv definit mit $\|BA\|_A \leq 1$ and $v^T A v \leq C v^T A B A v$.
 Dann gilt

$$\|(I_N - BA)(I_N - P_0)(u - u^k)\|_A \leq \sqrt{1 - 1/C}.$$

3 Multilevel Methods

Seien $V_0 \subset V_1 \subset \dots \subset V_L$ Finite-Elemente-Räume mit $h_l = h_0^{-l}$, $l = 0, \dots, L$.
 Seien $A_l \in \mathbb{R}^{N_l \times N_l}$ die Finite-Elemente-Matrizen und $B_l \in \mathbb{R}^{N_l \times N_l}$ Vorkonditionierer.
 Seien $R_l \in \mathbb{R}^{N_l \times N_{l+1}}$ die Restriktionen mit $A_l = R_l A_{l+1} R_l^T$.

- M0)** wähle u_L^0 , berechne $r_L^0 = b_L - A_L u_L^0$, wähle $\varepsilon > 0$ und $\theta > 0$, setze $k = 0$
- M1)** falls $|r_L^k| \leq \varepsilon$ STOP
- M2)** setze $l = L$ und $r_l = r_L^k$
- M3)** für $\nu = 1, \dots, \nu_1$ berechne $w_l = B_l r_l$, $c_l := c_l + w_l$, $r_l := r_l - A_l w_l$
- M4)** setze $l := l - 1$
- M5)** restringiere $r_l = R_l r_{l+1}$
- M6)** falls $l > 0$, gehe zu **M3)**.
- M7)** berechne $c_0 = A_0^{-1} r_0$
- M8)** setze $l := l + 1$
- M9)** interpoliere $c_l := c_l + R_l^T c_{l-1}$
- M10)** für $\nu = 1, \dots, \nu_2$ berechne $w_l = B_l r_l$, $c_l := c_l + w_l$, $r_l := r_l - A_l w_l$
- M11)** falls $l < L$, gehe zu **M8)**.
- M12)** berechne $u^{k+1} = u^k + c_L$ und $r^{k+1} = r^k - A c_L$
- M13)** setze $k := k + 1$ und gehe zu **M1)**.

4 Gemischte Finite Elemente

Betrachte das System

$$\operatorname{div} q = 0, \quad q = -\kappa \nabla u \quad \text{in } \Omega$$

mit den Randbedingungen

$$u = u_D \text{ auf } \Gamma_D, \quad q \cdot n = -g_N \text{ auf } \Gamma_N.$$

Sei \mathcal{K} eine zulässige Triangulierung und \mathcal{F} die Seiten $\bar{F} = \partial K \cap \partial K'$ bzw. $F \subset \partial K \cap \partial \Omega$.

Im Referenzdreieck oder -viereck definiere $\hat{W} = \operatorname{span}\{\hat{\psi}_j\}$ mit Vektorfeldern $\hat{\psi}_j$ zu jeder Elementseite \hat{F}_j mit $\int_{\hat{F}_k} \hat{\psi}_j \cdot n \, da = \delta_{jk}$. Sei $\varphi_K: \hat{K} \rightarrow K$ und $W_K = \{D\varphi_K \hat{\phi} \circ \varphi_K^{-1} : \hat{\phi} \in \hat{W}\}$.

Zu jeder Seite $F_n \in \mathcal{F}$ sei ψ_n das Vektorfeld mit $\int_{F_k} \hat{\psi}_n \cdot n_{F_k} \, da = \delta_{kn}$ und $\psi_n|_K \in W_K$.

Definiere $W_h = \{\psi_n : F_n \in \mathcal{F}\}$ und $W_h(g) = \{\psi_h \in W_h : \int_F \psi_h \cdot n \, da = \int_F g \, da \text{ für } F \subset \Gamma_N\}$.

(4.1) Definiere $Q_h = \prod_{\tau} \mathbb{P}_0$. Die gemischte Finite-Elemente-Lösung $(q_h, u_h) \in W_h(-g_N) \times Q_h$ ist durch das Sattelpunkt-Problem

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \kappa^{-1} q_h \cdot \psi_h \, dx - \int_{\Omega} u_h \operatorname{div} \psi_h \, dx &= - \int_{\Gamma_D} u_D \psi_h \cdot n \, da, \\ \int_{\Omega} \operatorname{div} q_h \phi_h \, dx &= 0, \quad (\psi_h, \phi_h) \in W_h(0) \times Q_h \end{aligned}$$

definiert. Für die analytische Lösung q und für Finite-Elemente-Lösungen $q_h \in W_h$ und $u_h \in V_h$ mit $u_h = u_D$ auf Γ_D und $q_h \cdot n = g_N$ auf Γ_N gilt die Fehlerabschätzung

$$\|q - q_h\|_{\kappa^{-1}} \leq \|\kappa \nabla u_h - q_h\|_{\kappa^{-1}} \quad \text{mit } \|\psi\|_{\kappa^{-1}}^2 = \int_{\Omega} \kappa^{-1} \psi \cdot \psi \, dx.$$

4 Gemischte und hybride Finite Elemente

(4.2) Sei $W_K = \prod_K W_K$, $M_h = \prod_F \mathbb{P}_0$, $M_h(u_D) = \{\mu_h \in M_h: \int_F \mu_h \, da = \int_F u_D \, da, F \subset \Gamma_D\}$.

a) Es gilt für $\psi_h \in W_K$:

$$\psi_h \in W_h \iff \int_{\Omega} \operatorname{div} \psi_h \phi_h \, dx = - \int_{\Omega} \psi_h \cdot \nabla \phi_h \, dx \text{ für alle } \phi_h \in V_h(0).$$

b) Für $q_h \in W_h$ sei $\int_{\Omega} \operatorname{div} \psi_h \phi_h \, dx = 0$ für alle $\phi_h \in Q_h$. Dann gilt

$$\int_{\Gamma_{\text{in}}} q_h \cdot n \, da = - \int_{\Gamma_{\text{out}}} q_h \cdot n \, da$$

mit $\Gamma_{\text{in}} = \overline{\{x \in \partial\Omega: q_h(x) \cdot n(x) \leq 0\}}$ und $\Gamma_{\text{out}} = \overline{\{x \in \partial\Omega: q_h(x) \cdot n(x) \geq 0\}}$.

c) Für $u_h \in V_h$ und $\lambda_h \in M_h$ sei

$$\int_K \operatorname{div} \psi_K u_h \, dx + \int_K \psi_K \nabla u_h \, dx = \int_{\partial K} \lambda_h \phi_h \cdot n \, da \text{ für alle } \psi_K \in W_K.$$

Dann gilt $\int_F \lambda_h \, da = \int_F u_h \, da$ für $F \in \mathcal{F}_K$.

(4.3) Es ist äquivalent:

(1) $(q_h, u_h) \in W_h(-g_N) \times Q_h$ löst das Sattelpunkt-Problem (4.1).

(2) $(q_h, u_h, \lambda_h) \in W_K \times Q_h \times M_h(u_D)$ löst das Sattelpunkt-Problem

$$\int_K \kappa^{-1} q_h \cdot \psi_h \, dx - \int_K u_h \operatorname{div} \psi_h \, dx = \int_{\partial K} \lambda_h \psi_K \cdot n \, da \text{ für alle } \psi_K \in W_K$$

$$\int_K \operatorname{div} q_h \, dx = 0$$

für alle $K \in \mathcal{K}$ und $\sum_K \int_{\partial K} q_h \cdot n \, da = - \int_{\Gamma_N} g_N \, da$ für alle $\mu_h \in M_h(0)$.

5 Finite Volumen für die lineare Transportgleichung

Zu gegebenem Fluss $q: \Omega \rightarrow \mathbb{R}^D$ mit $\operatorname{div} q = 0$ bestimme die Dichte $\rho: \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho q) = 0 \text{ in } [0, T], \quad \rho(0) = \rho_0,$$

und mit der Einfluss-Randbedingung

$$\rho = \rho_{\text{in}} \text{ auf } \Gamma_{\text{in}} = \{x \in \partial\Omega: q \cdot n < 0\}.$$

Sei $\Psi(\rho) = \rho q$ der Fluss und definiere M, A, b durch

$$(M\rho, \phi)_\Omega = \int_\Omega \rho \phi dx, \quad (A\rho, \phi)_\Omega = -(\operatorname{div} \Psi(\rho), \phi)_\Omega + (\Psi(\rho) \cdot n, \phi)_{\Gamma_{\text{in}}}, \quad (b, \phi)_\Omega = -(\Psi(\rho_{\text{in}}) \cdot n, \phi)_{\Gamma_{\text{in}}}.$$

Dann gilt $(M\partial_t \rho, \phi)_\Omega = (A\rho + b, \phi)_\Omega$ für alle $\phi \in L_2(\Omega)$ und $t \in (0, T)$.

Definiere $Q_h = \prod_K \mathbb{P}_0$ (finite Volumen) bzw. $Q_h = \prod_K \mathbb{P}_p$ (discontinuous Galerkin).

Definiere M_h, A_h, b_h durch $(M_h \rho_h, \phi_h)_\Omega = (M\rho_h, \phi_h)_\Omega$, $(b_h, \phi_h)_\Omega = (b, \phi_h)_\Omega$, und

$$(A_h \rho_h, \phi_h)_\Omega = \left(\sum_K -(\operatorname{div} \Psi(\rho_h), \phi_h)_K + \sum_{F \subset \partial K \setminus \Gamma_{\text{in}}} ((\Psi(\rho_K) - \Psi_{K,F}^*(\rho_h)) \cdot n, \phi_h)_F \right) + (\Psi(\rho_h) \cdot n, \phi_h)_{\Gamma_{\text{in}}}$$

mit dem numerischen Fluss auf $F = \partial K \cap \partial K_F$

$$\Psi_{K,F}^*(\rho_h) = \Psi(\rho_K) \text{ falls } q \cdot n > 0, \quad \Psi_{K,F}^*(\rho_h) = \Psi(\rho_{K_F}) \text{ falls } q \cdot n < 0$$

und $\Psi_{K,F}^*(\rho_h) = 0$ für $F \subset \partial\Omega \setminus \Gamma_{\text{in}}$.

5 Lineare Transportgleichung: Zeitintegration

Die $M_h \partial_t \rho_h = A_h \rho_h$ wird von $\rho_h(t_{n+1}) = \exp(\Delta t M_h^{-1} A_h) \rho_h(t_n)$ gelöst ($t_n = n \Delta t$).

Klassisches explizites Runge-Kutta-Verfahren

$$\rho_h^{n+1} = \rho_h^n + \Delta t M_h^{-1} A_h (\rho_h^n + \frac{1}{2} \Delta t M_h^{-1} A_h (\rho_h^n + \frac{1}{3} \Delta t M_h^{-1} A_h (\rho_h^n + \frac{1}{4} \Delta t M_h^{-1} A_h \rho_h^n)))$$

Implizite Mittelpunktsregel

$$\rho_h^{n+1} = \rho_h^n + \Delta t (M_h - \frac{\Delta t}{2} A_h)^{-1} A_h \rho_h^n$$

Polynomiale Krylov-Raum-Methode

$$\rho_h^{n+1} = V_m \exp(\Delta t H_m) V_m^\top M_h \rho_h^n \text{ mit } H_m = V_m^\top A_h V_m \in \mathbb{R}^{m \times m}, m \ll N$$

Dazu berechne eine M -orthogonale Basis \mathbf{v}_j des Krylov-Raums

$$\text{span}\{\rho_h^n, M_h^{-1} A_h \rho_h^n, \dots, (M_h^{-1} A_h)^{m-1} \rho_h^n\},$$

d.h. für die Matrix $V_m = [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_m]$ gilt $V_m M_h V_m^\top = I_m$.

Die Galerkin-Approximation $H_m = V_m^\top A_h V_m$ von A_h ist eine Hessenbergmatrix.

5 Die lineare Transportgleichung

(5.1) Für die lineare Transportgleichung gilt die Massenbilanz

$$\int_{\Omega} \rho(t) \, dx = \int_{\Omega} \rho_0 \, dx + \int_0^t \int_{\Gamma_{\text{in}}} \rho_{\text{in}} |\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}| \, d\mathbf{a} \, dt - \int_0^t \int_{\Gamma_{\text{out}}} \rho |\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}| \, d\mathbf{a} \, dt.$$

(5.2) Für die finite-Volumen-Approximation $\rho_h \in \prod \mathbb{P}_0(K)$ mit upwind-flux gilt die Massenbilanz

$$\int_{\Omega} \rho_h(t) \, dx = \int_{\Omega} \rho_0 \, dx + \int_0^t \int_{\Gamma_{\text{in}}} \rho_{\text{in}} |\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}| \, d\mathbf{a} \, dt - \int_0^t \int_{\Gamma_{\text{out}}} \rho_h |\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}| \, d\mathbf{a} \, dt.$$

(5.3) Sei $\rho_0 \geq 0$ und $\rho_{\text{in}} \geq 0$. Dann gilt für die die FV-Approximation mit upwind-flux $\rho_h \geq 0$.

(5.4) Für die lineare Transportgleichung gilt die Energiebilanz

$$\int_{\Omega} |\rho(t)|^2 \, dx = \int_{\Omega} |\rho_0|^2 \, dx + \int_0^t \int_{\Gamma_{\text{in}}} |\rho_{\text{in}}|^2 |\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}| \, d\mathbf{a} \, dt - \int_0^t \int_{\Gamma_{\text{out}}} |\rho|^2 |\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}| \, d\mathbf{a} \, dt.$$

(5.5) Für die dG-Approximation $\rho_h \in \prod \mathbb{P}_{\rho}(K)$ mit upwind-flux gilt

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} |\rho_h(t)|^2 \, dx &= \int_{\Omega} |\rho_0|^2 \, dx + \int_0^t \int_{\Gamma_{\text{in}}} |\rho_{\text{in}}|^2 |\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}| \, d\mathbf{a} \, dt - \int_0^t \int_{\Gamma_{\text{out}}} |\rho_h|^2 |\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}| \, d\mathbf{a} \, dt \\ &\quad - \sum_{F \in \mathcal{F}_h \cap \Omega} \int_0^t \int_F |\rho_K - \rho_{K_F}|^2 |\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}| \, d\mathbf{a} \, dt - \int_0^t \int_F |\rho_{\text{in}} - \rho_h|^2 |\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}| \, d\mathbf{a} \, dt. \end{aligned}$$

6 Die Konvektions-Diffusions-Reaktionsgleichung

Zu gegebenem Fluss $q: \Omega \rightarrow \mathbb{R}^D$ mit $\operatorname{div} q = 0$, Diffusionstensor $\kappa_c: \Omega \rightarrow \mathbb{R}^{D \times D}$ und Reaktionsrate $r: \Omega \times [0, t] \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ bestimme die Konzentration $c: \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$\partial_t c - \operatorname{div}(\kappa_c \nabla c - cq) = r(c) \text{ in } [0, T], \quad c(0) = c_0,$$

mit den Randbedingungen

$$c = c_D \text{ auf } \Gamma_D \times [0, T], \quad \kappa_c \nabla c \cdot n = g_N \text{ auf } \Gamma_N \times [0, T], \quad \kappa_c \nabla c \cdot n + \alpha c = g_R \text{ auf } \Gamma_R \times [0, T].$$

Definiere A und R durch

$$(Ac, \phi)_\Omega = \int_\Omega (\kappa_c \nabla c \cdot \nabla \phi + q \cdot \nabla c \phi) dx + \int_{\Gamma_R} \alpha c \phi da,$$

$$(R(c), \phi)_\Omega = \int_\Omega r(c) \phi dx + \int_{\Gamma_N} g_N \phi da + \int_{\Gamma_R} g_R \phi da.$$

(6.1) Dann gilt $(\partial_t c, \phi)_\Omega + (Ac, \phi)_\Omega = (R(c), \phi)_\Omega$ für alle ϕ mit $\phi|_{\Gamma_D} = 0$ und $t \in (0, T)$.

(6.2) Sei $q \cdot n \geq 0$ auf Γ_N , $\alpha + \frac{1}{2} q \cdot n \geq 0$ auf Γ_R , $\partial_3 r \leq 0$, und κ_c uniform positiv definit. Dann ist für alle $\Delta t_h > 0$ das diskrete Problem

$$c_h^n \in V_h(c_D(t_n)): \quad \left(\frac{1}{\Delta t} (c_h^n - c_h^{n-1}) + Ac_h^n - R(c_h^n), \phi_h \right)_\Omega = 0, \quad \phi_h \in V_h(0)$$

eindeutig lösbar und $(J_h^n(c_h) v_h, \phi_h)_\Omega = \left(\frac{1}{\Delta t} v_h + Av_h - R'(t_n, c_h) v_h, \phi_h \right)_\Omega$ positiv definit.

6 Die Konvektions-Diffusions-Reaktionsgleichung

Zu gegebenem $c_h \in V_h$ definiere $g_h^n(c_h) \in V_h(0)$ und $J_h^n(c_h): V_h(0) \rightarrow V_h(0)$ mit

$$(g_h^n(c_h), \phi_h)_\Omega = \left(\frac{1}{\Delta t} (c_h - c_h^{n-1}) + A c_h - R(t_n, c_h), \phi_h \right)_\Omega,$$

$$(J_h^n(c_h) v_h, \phi_h)_\Omega = \left(\frac{1}{\Delta t} v_h + A v_h - R'(t_n, c_h) v_h, \phi_h \right)_\Omega, \quad v_h, \phi_h \in V_h(0).$$

S0) Wähle $\Delta t > 0$, $\varepsilon, \theta > 0$, $k_{\max}, l_{\max} \in \mathbb{N}$, setze $c_h^0(z) = c_0(z)$, $t_0 = 0$ und $n = 1$

S1) setze $t_n = \min\{T, t_{n-1} + \Delta t\}$, $k = 0$ und wähle $c_h^{n,0} \in V_h(c_D(t_n))$

S2) berechne $g_h^{n,0} = g_h^n(c_h^{n,k})$ und $\varepsilon_n = \max\{\varepsilon, \theta \|g_h^{n,0}\|\}$

S3) falls $k = k_{\max}$, setze $\Delta t := 0.5\Delta t$ und gehe zu **S1)**

falls $\|g_h^{n,k}\| \leq \varepsilon_n$, setze $c_h^n = c_h^{n,k}$

falls $t_n < T$, wähle $\Delta t > 0$, setze $n := n + 1$, gehe zu **S1)**

S4) berechne $J_h^{n,k} = J_h^n(c_h^{n,k})$ und löse $J_h^{n,k} d_h^{n,k} = -g_h^{n,k}$

S5) setze $l = 0$ und $s_{n,k} = 1$

S6) setze $c_h = c_h^{n,k} + s_{n,k} d_h^{n,k}$ und berechne $g_h = g_h^n(c_h)$

S7) falls $\|g_h\| < \|g_h^{n,k}\|$, setze $c_h^{n,k+1} = c_h$, $g_h^{n,k+1} = g_h$, $k := k + 1$ und gehe zu **S3)**

S8) falls $l = l_{\max}$, setze $\Delta t := 0.5\Delta t$ und gehe zu **S1)**

S9) setze $l := l + 1$, $s_{n,k} := 0.5s_{n,k}$, und gehe zu **S6)**

6 Die stationäre Konvektions-Diffusions-Gleichung

Zu gegebenem Fluss $q: \Omega \rightarrow \mathbb{R}^D$ mit $\operatorname{div} q = 0$, Diffusionstensor $\kappa_c: \Omega \rightarrow \mathbb{R}^{D \times D}$ und Reaktionsrate / Quellterm $r, f: \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ bestimme die Konzentration $c: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$-\operatorname{div}(\kappa_c \nabla c - cq) + rc = f$$

mit den Randbedingungen $c = c_D$ auf $\Gamma_D = \Gamma_{\text{in}}$ und $\kappa_c \nabla c \cdot n + q \cdot nc = 0$ auf $\Gamma_R = \Gamma_{\text{out}}$.
 Definiere a und b durch

$$a(c, \phi) = \int_{\Omega} (\kappa_c \nabla c \cdot \nabla \phi + q \cdot \nabla c \phi + rc\phi) \, dx + \int_{\Gamma_R} q \cdot n c \phi \, da,$$

$$b(\phi) = \int_{\Omega} f \phi \, dx$$

und

$$a_h(c_h, \phi_h) = a(c_h, \phi_h) + \sum_K \delta_K \int_K (-\operatorname{div}(\kappa_c \nabla c) + q \cdot \nabla c + rc) q \cdot \nabla \phi \, dx,$$

$$b_h(\phi_h) = b(\phi_h) + \sum_K \delta_K \int_K f q \cdot \nabla \phi \, dx.$$

(6.3) Sei $\kappa_c y \cdot y \geq \kappa_0 |y|^2$, $\kappa_0 \ll h \|q\|_{\infty}$, $r \equiv r_0 > 0$. Dann gilt für $\phi_h \in V_h(0)$

$$a_h(\phi_h, \phi_h) \geq \|\phi_h\|_{\text{SD}}^2 \quad \text{mit} \quad \|\phi_h\|_{\text{SD}}^2 = \frac{\kappa_0}{2} \|\nabla \phi_h\|_{\Omega}^2 + \frac{r_0}{2} \|\phi_h\|_{\Omega}^2 + \sum_K \frac{\delta_K}{2} \|q \cdot \nabla \phi\|_K^2$$

bei geeigneter Wahl $\delta_K = O(h)$.

7 DG-Verfahren für die Diffusionsgleichung

Betrachte eine Potentialströmung in $\Omega \subset \mathbb{R}^D$, $D = 2, 3$ mit $\operatorname{div} q = 0$ und $q = -\kappa \nabla u$ in Ω , $u = u_D$ auf Γ_D und $-q \cdot n = g_N$ auf Γ_N . Für unstetige Testfunktionen $\phi_h \in Q_h = \prod \mathbb{P}_\rho(K)$ gilt

$$\sum_K \int_K \kappa \nabla u \cdot \nabla \phi_h \, dx - \int_{\partial K \setminus \Gamma_N} \kappa \nabla u \cdot n \phi_h \, da = \int_{\Gamma_N} g_N \phi_h \, da.$$

Setze $\{q\}_F = \frac{1}{2}(q|_K + q|_{K_F})$ und $[\phi_h]_F = n_K \phi_K + n_{K_F} \phi_{K_F}$ auf $F = \partial K \cap \partial K_F$. Es gilt

$$q|_K \cdot n_F = q|_{K_F} \cdot n_F \implies q_K \cdot n_K \phi_K + q_{K_F} \cdot n_{K_F} \phi_{K_F} = \{q\}_F \cdot [\phi_h]_F$$

Auf $F \subset \Gamma_D$ setze $\{q\}_F = q$ und $[\phi_h]_F = \phi_h$. Damit ergibt sich

$$\sum_K \int_K \kappa \nabla u \cdot \nabla \phi_h \, dx - \sum_{F \in \mathcal{F}_h \setminus \Gamma_N} \int_F \{ \kappa \nabla u \}_F \cdot [\phi_h]_F \, da = \int_{\Gamma_N} g_N \phi_h \, da.$$

Die DG-Approximation $u_h \in Q_h$ wird durch $a_h(u_h, \phi_h) = b_h(\phi)$ mit

$$\begin{aligned} a_h(u_h, \phi_h) &= \sum_K \int_K \kappa \nabla u_h \cdot \nabla \phi_h \, dx + \sum_{F \in \mathcal{F}_h \setminus \Gamma_N} \gamma_F \int_F [u_h] \cdot [\phi_h]_F \, da \\ &\quad - \sum_{F \in \mathcal{F}_h \setminus \Gamma_N} \int_F \left(\{ \kappa \nabla u_h \}_F \cdot [\phi_h]_F + [u_h]_F \cdot \{ \kappa \nabla \phi_h \}_F \right) da \\ b_h(\phi) &= \int_{\Gamma_N} g_N \phi_h \, da + \int_{\Gamma_D} u_D \kappa \nabla \phi_h \cdot n \, da + \sum_{F \in \mathcal{F}_h \cap \Gamma_D} \gamma_F \int_F u_D \phi_h \, da \end{aligned}$$

abhängig von $\gamma_F > 0$ definiert. Die kontinuierliche Lösung erfüllt auch $a_h(u, \phi_h) = b_h(\phi)$.