Inaugural-Dissertation

zur

Erlangung der Doktorwürde

der

Fakultät für Mathematik und Informatik

der

Ruprecht-Karls-Universität

Heidelberg

vorgelegt von

Diplom-Informatiker (FH) Dirk Feuchter

aus Stuttgart - Bad Cannstatt

Tag der mündlichen Prüfung: 14. 07. 2008

Geometrie- und Gittererzeugung

für

anisotrope Schichtengebiete

Gutachter: **Prof. Dr. Gabriel Wittum**

Prof. Dr. Gerhard Reinelt

Danksagung

Es ist mir ein besonderes Bedürfnis, zuallererst Herrn Professor Dr. Gabriel Wittum meinen ergebensten Dank für seine Betreuung auszusprechen. Er hat mir diese Arbeit an seinem Lehrstuhl ermöglicht und die Durchführung unablässig unterstützt und gefördert.

Herrn Prof. Dr. Gerhard Reinelt danke ich für die Übernahme des Korreferates und das meiner Arbeit entgegengebrachte Interesse.

Für die vielen hilfreichen Diskussionen in wissenschaftlichen Belangen und die freundschaftliche Zusammenarbeit bin ich meinen langjährigen Kollegen Herrn Dr. Michael Heisig und Herrn Dipl.-Phys. Ingo Heppner dankbar verbunden.

Den Kollegen Dr. Dmitrij Logashenko, Dipl.-Math. Arne Nägel und Dr. Peter Frolkovic danke ich für ihre wertvollen Anregungen aus ihrem reichhaltigen Erfahrungsschatz der Numerischen Mathematik. Den Kollegen Dr. Michael Lampe und Dipl.-Phys. Alexander Heusel gilt mein Dank für ihre Unterstützung bei tiefergehenden Fragen zu Linux bzw. MacOSX.

Außerdem danke ich allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des Lehrstuhls Technische Simulation für die offene und hilfsbereite Atmosphäre.

Meinem ehemaligen Kollegen Herrn Dr. Achim Gordner gilt ein besonderer Dank für seinen herausragenden Einsatz bei Hardwareproblemen aller Art.

Herrn Prof. Dr. Jonathan R. Shewchuk von der UC Berkeley gilt mein ausdrücklicher Dank für sein zur Verfügung gestelltes Preprint und die hilfreiche Diskussion am WIAS in Berlin.

Herrn Dr. René Brandenberg von der TU München möchte ich für die kompetente Beratung bei der Radienberechnung und den wissenschaftlichen Austausch danken.

Vielen Dank auch an unsere Gastwissenschaftlerin Frau Yuhong Liu von der Universität Peking für die intensive und früchtetragende Kooperation bei der Erstellung des *Tkd_Modeler*.

Danken möchte ich auch allen Diplomanden und Praktikanten für ihre engagierte Unterstützung bei verschiedenen Projekten im Zusammenhang mit dieser Arbeit. Insbesondere danke ich Herrn Dipl.-Math. Ralf Wahner für die Realisierung des Schichtenmodellierers *CLDM*. Sein tatkräftiger Einsatz war sehr wertvoll und ging weit über den üblichen Rahmen einer Diplomarbeit hinaus. Herrn M.Sc. Stefan Handel danke ich für sein Engagement sowie seine zielstrebige und freundschaftliche Mitarbeit über mehrere Jahre seines Informatikstudiums hinweg.

Eine tiefe Dankbarkeit gilt meinen Eltern Rainer und Gerhild Feuchter, die mir das Informatikstudium ermöglichten und mir bei dieser Arbeit den Rücken stärkten.

Ganz besonders herzlich bedanke ich mich bei meiner Frau Ulrike, die mich liebevoll und tatkräftig unterstützte und mir in der Familie den Freiraum geschaffen hat, in dem diese Arbeit gedeihen konnte.

Heidelberg, im Januar 2008 Dirk Feuchter

Zusammenfassung

Für die numerische Simulation partieller Differentialgleichungen sind geeignete Geometrien und Gitter eine wichtige Voraussetzung. Viele Problemstellungen wie bspw. dichtegetriebene Grundwasserströmung über Salzstöcken oder Arzneimitteldiffusion durch die Hornhaut (Stratum corneum) betreffen geschichtete Gebiete mit extremer Horizontalausdehnung. Für solche anisotropen Schichtengebiete stellt diese Arbeit Konzepte zur Erzeugung von Geometriemodellen und geeigneten Gitterelementen in 3D vor.

Bei der Geometriemodellierung für geologische Schichten werden unerwünschte Schnitte von Trennflächen durch Verwendung von Mächtigkeiten anstelle von absoluten Höhenwerten vermieden. Eine Vernetzungsmethode mit vertikalen Elementkanten führt zu hybriden Gittern, bestehend aus Tetraedern, Pyramiden, Prismen und vorzugsweise Hexaedern ohne extreme Winkel.

Für das Stratum corneum wird ein neues Geometriemodell mit geschachtelten Tetrakaidekaedern vorgestellt. Damit ist es möglich, realitätsnahe Modellmembranen mit beliebigen Abmessungen, Anordnungen und Überlappungen zu erzeugen. Auch hier erfolgt eine Zerlegung mit hybriden Gitterelementen.

Mit dem Ziel, möglichst grobe Gitter für anisotrope Schichtengebiete zu erstellen, entstehen zwangsläufig auch anisotrope Elemente. Es werden verschiedene Methoden zur Beschreibung der Anisotropie und Qualität von Gitterelementen vorgestellt und diskutiert.

Mehrere Experimente zu ganz unterschiedlichen anisotropen Schichtengebieten, wie Grundwasserbecken, Nordseeinseln, Deckgebirge über Salzstöcken, Horizontalsilos, Seen und dem Stratum corneum belegen die Eignung der erzeugten *lgm*-Geometrien und *ng*-Gitter zur Nutzung für numerische Simulationen mit dem Softwaresystem *UG*.

Abstract

Suitable geometries and grids are an important assumption of the numerical simulation of partial differential equations. Many problems, such as density driven flow upon saltdomes or drug diffusion through horny skin (stratum corneum) involve geometries with exhibiting extensions in horizontal direction. For such ansiotropic layered domains this thesis enables to create geometry models and well-shaped grid elements in 3D.

Using thicknesses instead of height values avoids unwanted intersections of parting surfaces during the process of geometry modeling for stratigraphic sequences. A certain grid generation approach with vertical element edges results in hybrid grids consisting of tetrahedra, pyramids, prisms and preferably many hexahedra with no extreme angles.

Presenting a new geometry model with nested tetrakaidecahedra for the stratum corneum, it is possible to create realisitc model membranes with arbitrary arrangements, measurements and shifts. A decomposition with hybrid grid elements takes place as well.

Intending coarse grids, the elements of anisotropic layered domains are anisotropic as well. In order to describe the anisotropy and quality of such elements, several methods are shown and discussed.

Several experiments for a wide range of anisotropic domains such as groundwater bassins, North Sea Islands, overburdens upon saltdomes, horizontal silos, lakes and the stratum corneum show the applicability of the created *lgm*-geometries and *ng*-grids for the use in numerical simulations with the software system *UG*.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung **1**

2 Problemstellungen mit anisotropen Schichtengebieten **7**

2.1 Der Begriff „Anisotropie“ 8
2.2 Salzwassertransport in der Waste Isolation Pilot Plant (WIPP) 10
2.3 Radionuklidtransport im Gebiet *komplex* 11
2.4 Dichtegetriebene Grundwasserströmungen über dem Salzstock Höfer 12
2.5 Veränderung von Süßwasserlinsen bei Nordseeinseln 13
2.6 Salzwasserintrusion und künstliche Grundwasserneubildung in Orange County . 15
2.7 Verdichtung von Horizontalsilos 17
2.8 Hydrodynamische Phänomene im Willersinnweiher 18
2.9 Arzneimitteldiffusion durch das Stratum corneum 18

3 Geometrien und Gitter für *UG* **21**

3.1 *UG*-Geometrien im *lgm*-Format 22
3.2 *UG*-Gitter im *ng*-Format 25
3.3 Flächenbasierte anstatt voxelbasierte Geometrie 30
3.4 Gitter mit günstigen Winkeln und möglichst vielen Hexaedern 31

4 Methoden zur Erfassung von anisotropen Geoschichtungen **33**

4.1 *lgm2ng* - günstige Winkel mit vertikalen Kanten 34
4.2 Trennflächen zwischen Geoschichten in 3D 36
4.2.1 *Inverse Distance to a Power* 38
4.2.2 *Kriging* 39
4.3 Erzeugung von *N*x*M* Viereckgittern 43
4.4 Schichtenmodellierung mit Mächtigkeiten 45
4.5 Behandlung von Schichten mit variierenden Mächtigkeiten 46
4.6 Gittererzeugung zwischen Trennflächen 48
4.7 Zusammenfassung von Randflächen bei der Geometrieerzeugung 50

5 Methoden zur Erfassung des Stratum corneum **53**

5.1 Motivation für ein Geometriemodell mit Tetrakaidekaedern 54
5.2 Ein Geometriekonzept mit geschachtelten Tetrakaidekaedern für die Stratum corneum Modellmembran Ω_{SC} 59
5.3 Geometrieeigenschaften des vorgestellten Konzepts 61
5.3.1 Überlappung, Breite, Durchmesser und Winkel - allgemein für einen Tetrakaidekaeder K_i 61
5.3.2 Überlappung, Breite, Durchmesser und Winkel - speziell für Einheitstetrakaidekaeder und Tetrakaidekaeder mit korneozytenähnlichen Größenverhältnissen 63
5.3.3 Lipidkanaldicke 66
5.3.4 Anordnung in Reihen, Spalten und Schichten 66
5.3.5 Weglänge durch die Tetrakaidekaederpackung 67
5.4 Gittererzeugung für Ω_{SC} 69
5.4.1 Vernetzung von K_i 69
5.4.2 Vernetzung von l_i 72
5.4.3 Vernetzung von $(K_i \cup l_i)$ und $\bigcup_{i=1}^{n}(K_i \cup l_i)$ 73
5.4.4 Anisotrope Verfeinerung 74

6 Anisotropie und Qualität von Gitterelementen **76**
6.1 Kantenverhältnis . . . 78
6.2 Oberflächen-Volumen-Verhältnis . . . 79
6.2.1 Berechnung der Volumina von Gitterelementen . . . 81
6.2.2 Berechnung der Oberflächen von Gitterelementen . . . 81
6.3 Radienverhältnis . . . 82
6.3.1 Unterschiedliche Radien . . . 82
6.3.2 Ein Iterationsverfahren zur Berechnung des Umkugelradius R . . . 85
6.3.3 Ein Iterationsverfahren zur Berechnung des Inkugelradius r . . . 87
6.3.4 Validierung von Ergebnissen anhand herleitbarer Beispielelemente . . . 90
6.3.5 Validierung von Ergebnissen mit einer anderen Vorgehensweise . . . 92
6.4 Berechnung der Winkel von Gitterelementen . . . 94
6.5 Qualität von Gitterelementen . . . 95
6.5.1 ...im Hinblick auf den Interpolationsfehler . . . 96
6.5.2 ...im Hinblick auf die Kondition . . . 98
6.5.3 ...im Hinblick auf den Diskretisierungsfehler . . . 98
6.5.4 Allgemeine Anmerkungen . . . 99
6.5.5 Qualitätsmaße . . . 100

7 Experimente mit Gittern für anisotrope Geoschichtungen **103**
7.1 WIPP (Waste Isolation Pilot Plant) . . . 104
7.2 *komplex* . . . 106
7.3 *Layered* . . . 109
7.4 Höfer . . . 110
7.5 Norderney . . . 113
7.6 Langeoog . . . 116
7.7 Orange County . . . 118
7.8 Horizontalsilos . . . 122
7.9 Willersinnweiher . . . 125

8 Experimente mit Gittern für das Stratum corneum **127**
8.1 Vergleich mit mikroskopischen Ergebnissen . . . 128
8.2 Anisotropiewerte und dihedrale Winkel einiger Gitterbeispiele für $T_i = K_i \cup l_i$ . . . 130
8.3 Modellgleichungen und numerische Verfahren . . . 132
8.4 Erste Simulationsrechnungen mit der Modellmembran Ω_{sSC} . . . 134
8.5 Erste Simulationsrechnungen mit der Modellmembran Ω_{rSC} . . . 136

9 Schlussbetrachtung und Ausblick **139**

10 Literaturverzeichnis **141**

Kapitel 1

Einleitung

Der Lehrstuhl Technische Simulation an der Universität Heidelberg beschäftigt sich mit der numerischen Simulation partieller Differentialgleichungen (PDGen) aus den Bereichen Pharmazie, Neurowissenschaften, Finanzmathematik, Verfahrenstechnik, Umweltwissenschaften, Numerische Strömungsmechanik (*CFD)*, Elektromagnetik, Verbrennung und Strukturmechanik. Für die numerischen Berechnungen wird das Simulationssystem *UG* (Unstrukturierte Gitter) [9, 10] eingesetzt. Die Hauptmerkmale von *UG* sind Parallelität zur schnellen Berechnung umfangreicher Probleme auf Parallelrechnern, Adaptivität zur Anpassung der Rechengitter an lokale Erfordernisse und Mehrgitterverfahren zur schnellen Lösung der entstehenden Gleichungssysteme [84, 86, 216, 221].

Für numerische Simulationen sind geeignete Geometrie- und Gitterbeschreibungen eine entscheidende Voraussetzung.* Die Geometrie- und Gittergenerierung ist kein einseitiger Präprozess sondern ein facettenreiches Forschungsgebiet mit unterschiedlichen Konzepten und Methoden für die verschiedensten Aufgabenstellungen und Anwendungen [43, 45, 65, 66, 111, 147, 148, 156, 157, 165, 181]. Eine schöne Übersicht findet man in [156] von S. Owen.

Für viele Geometrien werden in 3D unstrukturierte, tetraederbasierte Ansätze wie *Octree*-Verfahren [186, 226], *Delaunay*-Verfahren [6, 37, 62, 68, 122, 210, 214] oder *Advancing-Front*-Methoden [43, 134, 135, 136, 137] herangezogen.

Auch unstrukturierte, hexaederbasierte Methoden wie die *Grid-based*-Methode [179, 180, 215], die *Medial-Surface*-Methode [127, 168, 169], das *Plastering* [15, 23] oder das *Whisker Weaving* [147, 148, 149, 197] werden erforscht. Allerdings entstehen mit Hexaedern bei komplexen Gebieten oft Schwierigkeiten bei den Abschlüssen an Rändern oder im Inneren des Gebiets. Einige Autoren favorisieren daher hybride Gitter mit gemischten Elementtypen und möglichst vielen Hexaedern (*Hex-dominant-methods* [144, 156, 202]). Dieses Ziel wird auch in dieser Arbeit verfolgt.

Viele der am Lehrstuhl Technische Simulation bearbeiteten Problemstellungen betreffen Gebiete die aus dünnen, versetzt übereinanderliegenden und horizontal ausgerichten Schichten bestehen. Abb. 1.1 zeigt links ein Geoschichtengebiet für das Grundwasserströmungen simuliert werden sollen. Rechts sieht man flach zusammengedrückte Hornhautzellen (Korneozyten) des Stratum corneum, einem Schichtengebiet der menschlichen Haut, durch das die Diffusion von Arzneistoffen simuliert werden soll.

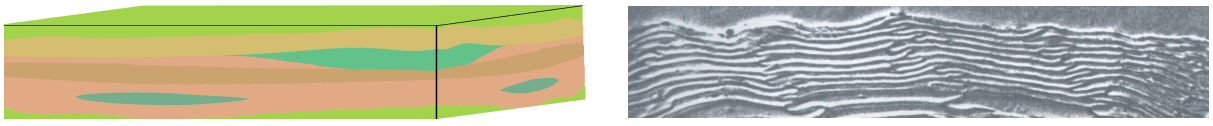


Abb. 1.1 Zwei anisotrope Schichtengebiete: Geoschichtengebiet (links), Stratum corneum (rechts)

* „Meshing can be defined as the process of breaking up a physical domain into smaller sub-domains (elements) in order to facilitate the numerical solution of partial differential equations.“ Steven J. Owen [156]

Für beide Gebiete und auch ihre einzelnen Schichten gilt Gl. (1.1). Die geometrische Ausdehnung in horizontaler Richtung ist deutlich größer als in vertikaler Richtung. Geometrien mit dieser Eigenschaft, werden in dieser Arbeit als **anisotrope Schichtengebiete** bezeichnet. Eine Übersicht aller Problemstellungen mit anisotropen Schichtengebieten, die am Lehrstuhl Technische Simulation bearbeitet werden, erfolgt in **Kapitel 2**.

$$\Delta x \cong \Delta y >> \Delta z \tag{1.1}$$

Im numerischen Simulationsprozess mit Mehrgitterverfahren ist ein möglichst grobes Netz mit wenigen Elementen als Startgitter gewünscht. Da man mit einer isotropen Vernetzung viel zu viele Elemente benötigen würde, erzeugt man bei anisotropen Schichtengebieten zwangsläufig **anisotrope Gitterelemente**. Dabei entstehen mit unstrukturierten Gittergenerierungsmethoden häufig Elemente mit sehr stumpfen und sehr spitzen Winkeln, die die numerischen Berechnungen beeinträchtigen.

In vielfältigen Erfahrungen stellte sich am Lehrstuhl Technische Simulation in den vergangenen Jahren heraus, dass es für anisotrope Schichtengebiete im Hinblick auf die entwickelten numerischen Verfahren und zu lösenden partiellen Differentialgleichungen sinnvoll ist, anstelle einer unstrukturierten Gittergenerierungsmethode, einen eher strukturierten Ansatz zu verfolgen. Es werden Gitter benötigt, die die Richtungsabhängigkeit der jeweiligen Geometrie und auch die Richtung des Gradienten der Lösung mit orthogonalen Elementkanten berücksichtigen können und keine extremen Winkel besitzen.

Die Winkelproblematik und die Grundidee, vertikale Kanten zu verwenden, werden am folgenden 2D-Beispiel veranschaulicht. Das Gebiet besteht aus 9 horizontal ausgerichteten anisotropen Schichten (Abb. 1.2 oben). Das erste Gitter besitzt 36 Dreiecke, die alle extreme Winkel nahe 180° bzw. 0° besitzen. Verwendet man bei der Gittererzeugung mit Dreiecken dagegen **vertikale Kanten**, so kann man zumindest die extrem großen Winkel vermeiden (zweites Gitter in Abb. 1.2). Dann werden wiederum nur 36 Elemente benötigt, die alle 2 Winkel nahe 90° und einen spitzen Winkel nahe 0° besitzen. Verwendet man anstatt Dreiecken ausschließlich Vierecke, so kann man auch noch die extrem spitzen Winkel vermeiden und kommt sogar mit der Hälfte der Elemente aus (drittes Gitter in Abb. 1.2).

In dieser Arbeit sollen größtenteils dreidimensionale Gebiete betrachtet werden. Die grundlegende Idee des 2D-Beispiels aus Abb. 1.2 lässt sich auf den 3D-Fall übertragen. Auch in 3D gilt, dass für horizontal ausgerichtete Schichtengebiete bei Verwendung vertikaler Kanten bzw. vertikaler Elementseiten günstige Elementwinkel entstehen.* Entsprechend den Vierecken im 2D-Fall erhält man im 3D-Fall Hexaeder mit guten Winkeleigenschaften. Im Gegensatz dazu treten bspw. bei unstrukturierten Tetraedergittergeneratoren Elemente mit extremen Winkeln nahe 0° und 180° auf.

* Anstelle planarer Winkel betrachtet man in 3D meist die dihedralen Winkel (siehe Kap. 6.4).

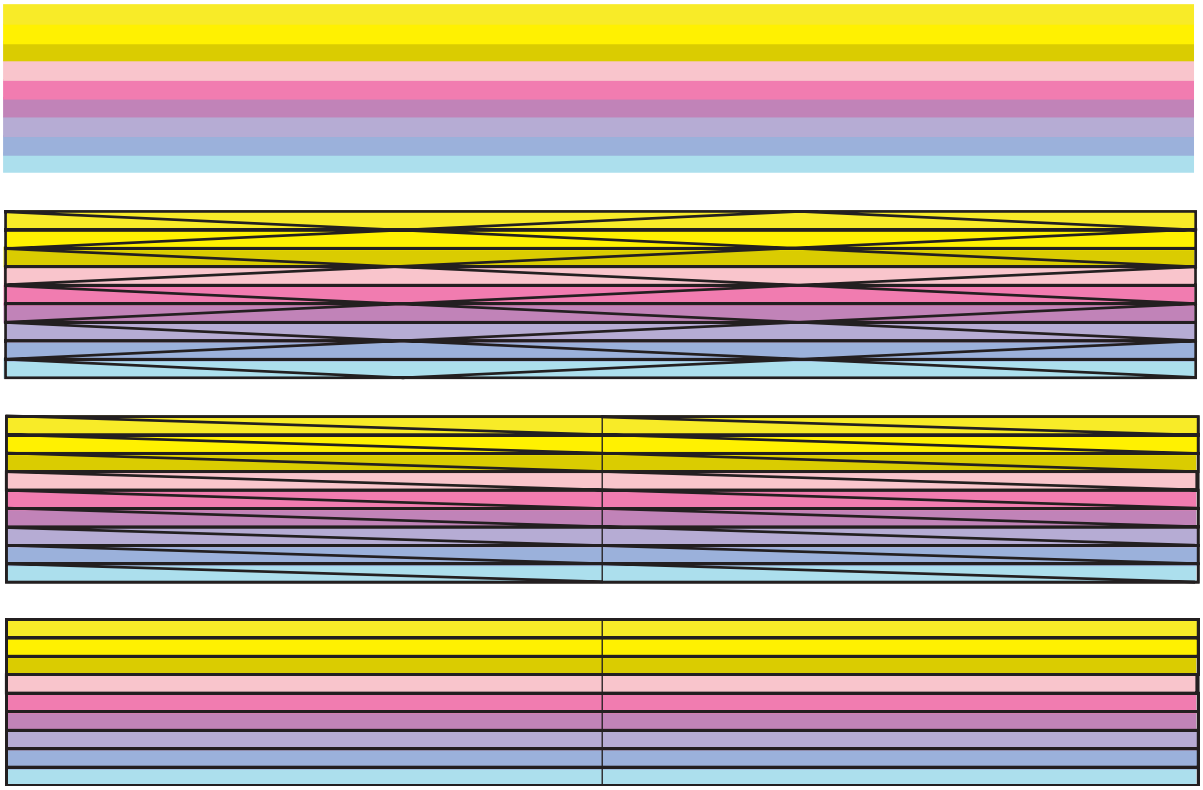


Abb. 1.2 Drei verschiedene Gitter für ein anisotropes Schichtengebiet in 2D

Die Geometrie- und Gitterzeugung für anisotrope Schichtengebiete stellt eine große Herausforderung dar. Typischerweise existieren Einschlüsse (Linsen), Ausstreichungen und Verwerfungen von Schichten und nur im Idealfall erstrecken sich die einzelnen Schichten über das gesamte Gebiet.

Für die komplexen anisotropen Schichtengebiete sind dreidimensionale Geometriebeschreibungen und Gitter für *UG* gesucht. Deshalb werden in **Kapitel 3** das oberflächenbasierte *UG*-Geometrieformat *lgm* und das *UG*-Gitterformat *ng* vorgestellt, Dateiformate die es in 3D ermöglichen, hybride Gitter aus Hexaedern, Prismen, Pyramiden und Tetraedern in *UG* einzulesen. Dabei wird auch das Ziel diskutiert, extreme Elementwinkel nahe 0° und 180° zu vermeiden und möglichst viele Hexaeder zu erzeugen.

Insbesondere bei Problemstellungen mit einer bestimmten Flussrichtung (z.B. Navier-Stokes) können Hexaeder viel besser ausgerichtet werden als Tetraeder. Hexaeder bieten bessere Approximationseigenschaften als Tetraeder und ermöglichen bilineare Ansatzfunktionen. Zudem werden mit Hexaedernetzen vergleichsweise weniger Elemente benötigt um die selbe Genauigkeit zu erreichen. Während bei einem idealen Hexaedernetz jeder innere Knoten typischerweise zu 8 Hexaedern gehört, grenzen an einen inneren Knoten eines idealen Tetraedernetzes ungefähr 20 Tetraeder an. Weniger Hexaeder bedeuten weniger Knoten und damit weniger Freiheitsgrade. Das führt zu kürzeren Laufzeiten bei der Finiten Elemente Methode sowie beim Postprozess und bei der Visualisierung. Andererseits muss bei Hexaedergittergeneratoren beachtet werden, dass sich die Seitenflächen nicht übermäßig verziehen [156].

In **Kapitel 4** wird zunächst gezeigt, wie man mit statistischen Methoden Trennflächen zwischen Schichten auf einem zugrundeliegenden *NxM*-Basisgitter bestimmen kann. Anschliessend wird ein Verfahren vorgestellt, das konsistente Geometriemodelle erzeugt. Dazu verwendet man Mächtigkeiten anstelle realer Höhenwerte zur Beschreibung der einzelnen Schichten.

Im Algorithmus müssen viele Sonderfälle berücksichtigt werden, um ausstreichende Schichten zu erfassen. Wie im 2D-Fall gezeigt (Abb. 1.2), werden bei der 3D-Gittergenerierung ebenfalls vertikale Kanten verwendet. Die hybriden Gitter die dabei entstehen, bestehen aus Tetraedern, Pyramiden, Prismen und größtenteils aus Hexaedern (siehe z.B. Abb. 1.3). Extreme Winkel nahe 0° und 180° werden vermieden.

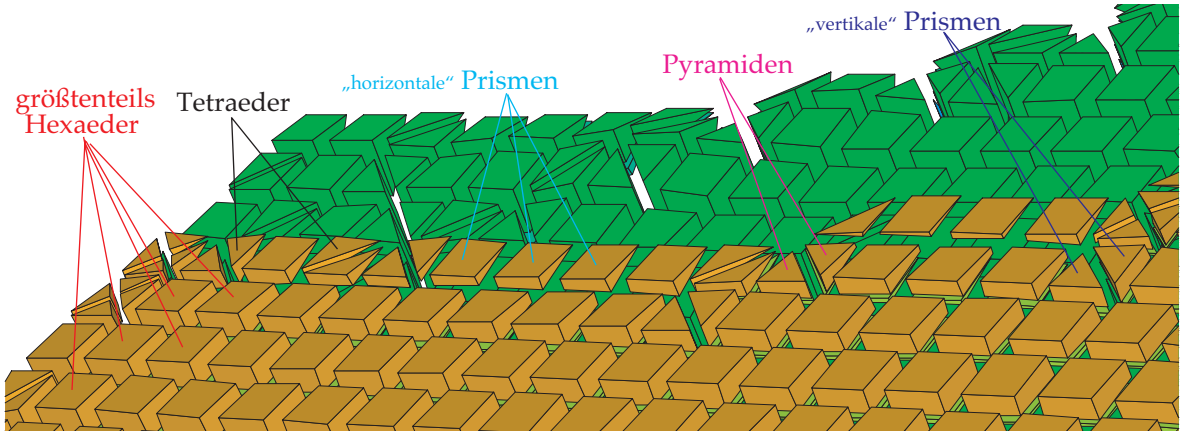


Abb. 1.3 Gittergenerierung für anisotrope Schichtengebiete in 3D mit hybriden Netzen aus Tetraedern, Pyramiden, Prismen und möglichst vielen Hexaedern

Die Methode, vertikale Kanten und möglichst viele Hexaedern zu verwenden, wurde ursprünglich für Schichtungen oberhalb eines Salzstocks entwickelt, um Grundwasserströmungen und Transportvorgänge simulieren zu können. Insbesondere das d^3f-Projekt [41] und das r^3t-Projekt [42] waren maßgeblich für dieses Konzept. Später stellte sich jedoch heraus, dass sich die Vorgehensweise auch für andere Geoschichtungen (Nordseeinseln) sowie anisotrope Schichtengebiete im landwirtschaftlichen Bereich (Horizontalsilos) und limnologischen Bereich (Willersinnweiher) bewährt.

Im Gegensatz zu all diesen Gebieten stellt das Stratum corneum eine erhöhte Anforderung dar, da die anisotropen Korneozyten in eine komplexe Lipidmatrix eingebettet sind, die man nur mit großem Aufwand durch Trennflächen unterteilen könnte. Außerdem liegt dem Stratum corneum ein eigener Entstehungsprozess zugrunde: Im Zuge der Differenzierung werden Hautzellen nach außen verdrängt und nehmen aufgrund ihrer Oberflächenspannung und des gegenseitigen Drucks eine oberflächensparende, überlappende und zwischenraumlose Anordnung ein. Diese dichte Packung mit minimaler Oberfläche muss im Geometriemodell berücksichtigt werden.

Daher wird in **Kapitel 5** ein weiteres Geometriemodell vorgestellt, das die geometrischen Eigenschaften des Stratum corneum realitätsnah abbildet. Das Konzept basiert auf einer Zerlegung mit Tetrakaidekaedern (→Abb. 1.4). Durch eine spezielle Schachtelung werden sowohl Korneozyten als auch die Lipidmatrix modelliert. Bei der anschließenden Vernetzung werden analog zu den Geoschichtengittern auch beim Stratum corneum Elementkanten verwendet, die senkrecht zur Ausdehnungsrichtung des Gebiets verlaufen.

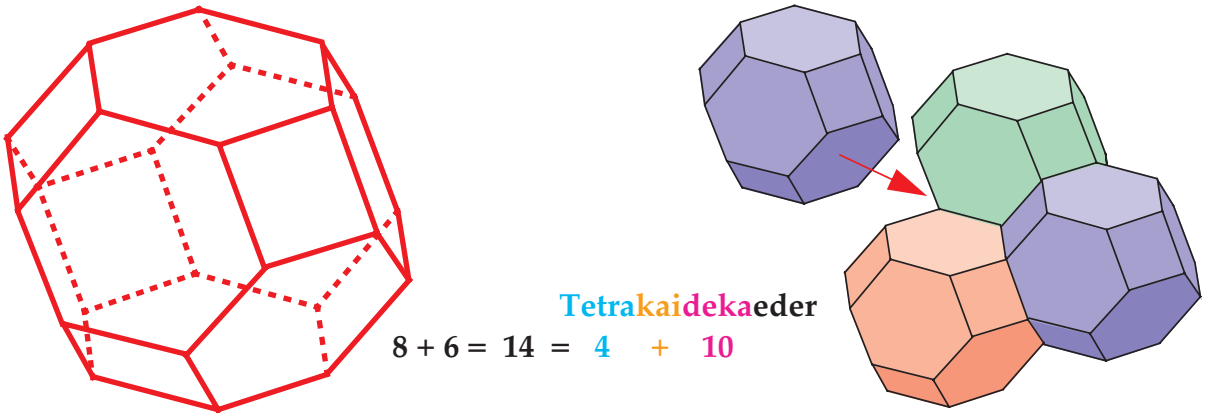


Abb. 1.4 Vierzehnflächner mit 8 hexagonalen and 6 rechteckigen Seiten - Dichte Packung

Mit dem neuen Geometriemodell besteht die Möglichkeit, die Anordnung, die Abmessungen und die gegenseitige Überlappung der Korneozyten sowie die Lipidkanaldicke für verschiedene SC-Modellmembranen einzustellen.

Bei der Erzeugung grober Gitter für anisotrope Schichtengebiete entstehen zwangsläufig anisotrope Gitterelemente. Das muss jedoch kein Nachteil sein. Bei einer numerischen Simulation ist es je nach Richtung des Gradienten der Lösung sogar wünschenswert, dass die Gitterelemente eine ganz bestimmte Ausdehnung besitzen. Deshalb ist es von Interesse die Anisotropie von Gitterelementen beschreiben zu können.

In **Kapitel 6** werden mit einem Oberflächen-Volumen-Verhältnis und einem Radienverhältnis zwei neue Anisotropiemaße für die hybriden *UG*-Gitter eingeführt und diskutiert. Hinzu kommt eine Betrachtung der Qualität von Gitterelementen unter Berücksichtigung der Anisotropie.

In **Kapitel 7** werden für alle projektrelevanten anisotropen Schichtengbiete des Lehrstuhls Geometrien und Gitter erzeugt, die auf dem Grundsatz der vertikalen Kanten basieren. Alle erzeugten *lgm*- und *ng*-Dateien lassen sich gut handhaben, in das Softwaresystem *UG* einlesen und für numerische Simulationen nutzen.

Die Experimente bestätigen den gewünschten hohen Hexaederanteil und zeigen, dass mit der vorgestellten Methode im Gegensatz zu tetraederbasierten Gittergeneratoren extreme Elementwinkel nahe 0° oder 180° tatsächlich vermieden werden können. Die Gitter werden mit den Anisotropiemaßen ausführlich beschrieben und verglichen.

In **Kapitel 8** werden mit dem Tetrakaidekaeder-Ansatz Geometrien und Gitter für das Stratum corneum erzeugt und mit mikroskopischen Untersuchungen verglichen.

Für die beiden Modellmembranen Ω_{sSC} und Ω_{rSC} werden *lgm*-Geometrien und *ng*-Gitter erzeugt und erfolgreich in das Softwaresystem *UG* eingelesen. Mehrere Simulationen der Arzneimitteldiffusion auf diesen Gebieten bzw. Gittern bestätigen den vorgestellten Geometrieansatz mit Tetrakaidekaedern.

Kapitel 2

Problemstellungen mit anisotropen Schichtengebieten

Zunächst wird der Begriff „anisotrop“ allgemein erläutert und dann geklärt, was in dieser Arbeit mit „anisotropen Schichtengebieten“ bzw. geometrischer Anisotropie gemeint ist. Außerdem wird auf den Zusammenhang mit anisotropen partiellen Differentialgleichungen hingewiesen (→Kap. 2.1).

Danach werden verschiedene Problemstellungen mit anisotropen Schichtengebieten vorgestellt, die am Lehrstuhl Technische Simulation bearbeitet werden:

- Ein Arbeitsgebiet des Lehrstuhls ist die Simulation dichteabhängiger Strömungen in Grundwasserleitern. Dichteunterschiede entstehen bspw. in der Nachbarschaft von Salzstöcken (→Kap. 2.2 u. 2.4), durch Eindringen von kontaminiertem Wasser (→Kap. 2.3), bei Upconing (→Kap. 2.5) oder durch Meerwasserintrusion (→Kap. 2.6). Es geht darum, das Strömungsverhalten eines oder mehrerer Fluide in einem porösen Medium sowie den Transport darin gelöster Stoffe zu simulieren [103]. Die zugehörigen Geometrien in den Kapiteln 2.2 bis 2.6 weisen jeweils eine starke geometrische Ausdehnung in horizontaler Richtung auf und sind somit anisotrope Schichtengebiete.
- Im Rahmen eines Biogas-Projekts sollen Einlagerungs- und Verdichtungsprozesse in einem Horizontalsilo simuliert werden. Die Schichtenfolge im Horizontalsilo ist ein weiteres anisotropes Schichtengebiet (→Kap. 2.7).
- Für ein tieferes Verständnis von hydrodynamischen Phänomenen in Seen werden auch numerische Simulationen hinzugezogen. Die einzelnen Wasserschichten im See, die sich insbesondere in den Sommermonaten ausprägen, sind ebenfalls anisotrop (→Kap. 2.8).
- Die Simulation der Diffusion von Arzneistoffen durch die Haut ist ein weiterer Forschungsschwerpunkt am Lehrstuhl. Die Hauptbarriere bei der transdermalen Applikation ist das Stratum corneum, ein anisotropes Schichtengebiet, bestehend aus langgestreckten und abgeflachten Korneozyten, die in eine Lipidmatrix eingebettet sind (→Kap. 2.9).

2.1 Der Begriff „Anisotropie“

Der Begriff „Anisotropie“ entstammt dem Griechischen ("an(ti)” = gegen, nicht; "isos” = gleich; "tropos” = Drehung, Richtung) und bezeichnet die Richtungsabhängigkeit einer Eigenschaft. Das Wort „Anisotropie“ wird in verschiedenen Wissenschaften verwendet. Im Folgenden werden einige Beispiele aufgeführt:

- In der Kristallographie bezeichnet man Kristalle als anisotrop, die in verschiedene Richtungen verschiedene physikalische Eigenschaften besitzen.
- In der Kosmologie spricht man von isotroper und anisotroper Hintergrundstrahlung.
- In den Geowissenschaften verwendet man den Begriff „Anisotropie“ bei der Ausbreitungsgeschwindigkeit von Erdbebenwellen.
- In der Botanik bezeichnet der Ausdruck „Anisotropie“ die Fähigkeit von Pflanzenteilen unter gleichen Bedingungen verschiedene Wachstumsrichtungen anzunehmen.
- In der Optik bezeichnet man die Strahlung eines Lasers als anisotrop im Gegensatz zur isotropen Sonnenstrahlung.
- In den Materialwissenschaften ist die Elastizität von Werkstoffen im Allgemeinen anisotrop. Dies wird mit den Elastizitätsgesetzen beschrieben (z.B. das triklin anisotrope Elastizitätsgesetz). Beispielsweise gilt für glas- und kohlefaserverstärkte Kunststoffe ein richtungsabhängiges Elastizitätsgesetz.

Anisotropie partieller Differentialgleichungen

Auch in der Numerik partieller Differentialgleichungen werden Gleichungen als anisotrop bezeichnet.

Betrachtet man z.B. folgende Modifikation der Poisson-Gleichung (→ Gl. (2.1)), die man erhält, wenn man die Poisson-Gleichung auf einem rechteckigen Gebiet lösen will und dieses mit Hilfe einer Koordinatentransformation auf das Einheitsquadrat zurückführt [7].

$$-\nabla(p\nabla u) = f\,, \qquad p = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \varepsilon \end{bmatrix} \tag{2.1}$$

In Gl. (2.1) beschreibt f die Quelle, u den Druck und p den Permeabilitätstensor. Mit einem kleinen ε wird diese Gleichung anisotrop. Man erhält dann eine viel kleinere Permeabilität in Y-Richtung als in X-Richtung. X und Y sind dabei neue Koordinaten nach einer Transformation im Raum.

Im Gegensatz dazu ist die Gleichung zur Simulation der Arzneimitteldiffusion durch das Stratum corneum keine anisotrope Gleichung sondern eine isotrope Gleichung mit springenden Koeffizienten (vgl. Kap. 8.3).

Anisotropie von Geometrien

Im Rahmen dieser Arbeit wird der Begriff „Anisotropie“ in erster Linie bzgl. der geometrischen Abmessungen eines Gebiets verwendet. Wenn ein Gebiet in eine bestimmte Raumrichtung w_i deutlich stärker ausgedehnt ist als in eine andere Raumrichtung w_j, dann wird ein solches Gebiet als anisotrop bezeichnet.

Ein Beispiel für geometrische Anisotropie beschreibt folgendes Zitat von S. Houlding für geologische Schichtungen: „... an inclined thin-seam orebody may be only a few centimeters thick but several kilometers in extent ...“ [96].

Mit verschiedenen stratigraphischen Schichtungen, aber auch Schichtungen in Horizontalsilos und Seen sowie dem Stratum corneum werden in den folgenden Kapiteln insgesamt 8 Beispiele für geometrisch anisotrope Schichtengebiete vorgestellt.

Bei allen betrachteten Gebieten ist die Horizontalausdehnung deutlich größer als die Vertikalausdehnung.

Anmerkung zur Anisotropie von Geometrien und der Anisotropie von PDGen

An dieser Stelle sei bemerkt, dass man es in der numerischen Simulation oft mit anisotropen Gebieten und gleichzeitig mit anisotropen Gleichungen zu tun hat.

Dies ist bspw. bei der Simulation dichteabhängiger Strömungen auf anisotropen Geoschichtengebieten der Fall. In der Massenerhaltungsgleichung setzt sich der Fluß der Salzmasse aus dem konvektiven und dispersiven Fluss zusammen. Der Diffusions-Dispersionskoeffizient besteht aus zwei Teilen: der molekularen Diffusionskonstante D_m und dem Dispersionskoeffizienten D. Während D_m nur vom Ort, aber nicht von den Unbekannten der Differentialgleichungen abhängt, kann der Dispersionskoeffizient D hingegen vom Druck, dem Salzmassenbruch und deren Ableitungen abhängen. Hier wird zum einen die Diffusion und zum anderen der Transport berechnet. Während die Diffusion gleichmäßig in alle Richtungen verläuft, erfolgt der Transport überwiegend in vertikaler Richtung (etwa 10 mal schneller als in horizontaler Richtung). Diese anisotrope Eigenschaft kann man im Dispersionskoeffizienten D erkennen. Verwendet man nun ein Gitter, das aufgrund der Anisotropie der Geometrie Elemente besitzt, die in horizontaler Richtung ca. 1000 mal größer sind als in vertikaler Richtung, dann entsteht insgesamt betrachtet ein „Verhältnis von 100“. Man kann die „Anisotropie des Gitters“ und die „Anisotropie der Transportgleichung“ in diesem Fall quasi „dividieren“. Wenn jeweils dieselbe Richtung betroffen wäre, müsste man die „Anisotropien multiplizieren“. Es ist egal, woher die Anisotropie kommt: aus den Gitterelementen oder aus der Gleichung. Man muss beide berücksichtigen.

Ähnlich diesem Beispiel sieht man bei der modifizierten Poissongleichung (→ Gl (2.1)), dass eine isotrope Gleichung auf einem anisotropen Gitter durch Transformation auf ein isotropes Gitter zu einer anisotropen Gleichung umgeformt werden kann. Ebenso kann man auch eine PDG mit isotroper Diffusion auf einem anisotropen Gitter zu einer PDG mit anisotropem Diffusion-Tensor auf einem isotropen Gitter umschreiben.

2.2 Salzwassertransport in der Waste Isolation Pilot Plant (WIPP)

Die „Waste Isolation Pilot Plant“ (WIPP) [219] ist ein seit 1999 betriebenes Endlager für radioaktive Abfälle in den USA an der texanischen Grenze Neu Mexikos.

Das Endlager liegt in einer Tiefe von ca. 660 m inmitten einer 500 m mächtigen Salzformation. Das Deckgebirge zeichnet sich durch eine sehr flache Lagerung von Schichten geringer Mächtigkeit aus.

Die Schichten weisen stark unterschiedliche hydrogeologische Eigenschaften auf. Im Grundwasser sind Salzkonzentrationen bis hin zur Sättigung (26%) nachgewiesen.

Für das überlagerte und unterschiedlich permeable anisotrope Schichtengebiet soll der Transport salinen Wassers bzw. die Konzentrationsverteilung zeitabhängig simuliert werden und Ergebnisse mit Messwerten aus der Praxis verglichen werden [175, 177, 178]. Die Berechnungen des Strömungsfelds sind im Kontext der Sicherheitsanalyse des Endlagers von Interesse.

Eine wichtige Voraussetzung für ein solches Vorhaben sind geeignete Gitter und Geometriebeschreibungen.

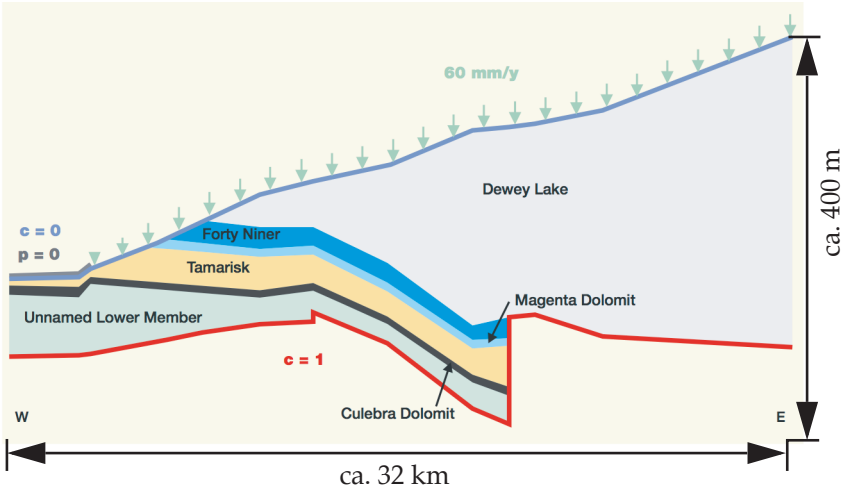


Abb. 2.1 WIPP-Gebiet, 40fach überhöht dargestellt (aus [177], S. 36, ergänzt)

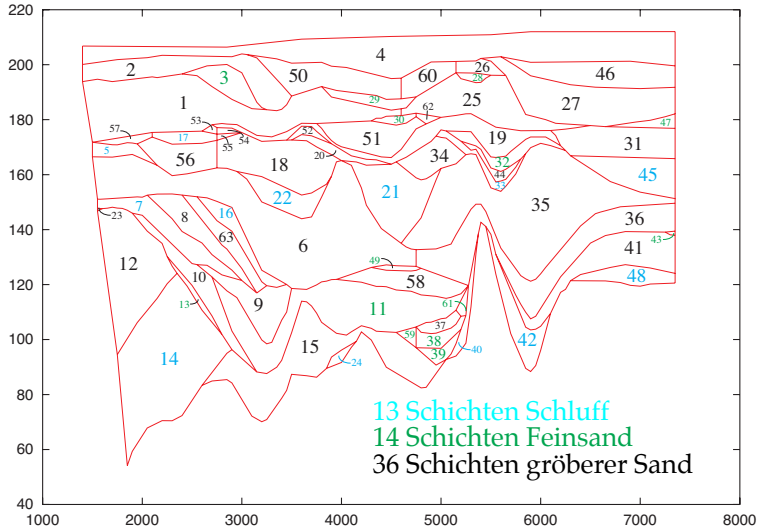
Abb. 2.1 zeigt die Schichtenfolge des Deckgebirges oberhalb der WIPP. Die Schichten erstrekken sich über 32 km in Ost-Westrichtung. Die Schichten sind flach gelagert und besitzen in vertikaler Richtung geringe Mächtigkeiten. Die 5 unteren Schichten („Rustler-Formation“) sind zusammen nur ca. 100 m mächtig und insbesondere die beiden Hauptaquifere *Culebra Dolomit* und *Magenta Dolomit* sind mit weniger als 8 m sehr geringmächtig. Die oberen drei Schichten beißen nach Westen hin aus [177, 178, 219].

Für dieses anisotrope Schichtengebiet sind Geometrien und Gitter für das Simulationswerkzeug *UG* gesucht (→ Kapitel 7.1).

2.3 Radionuklidtransport im Gebiet *komplex*

Auch in Deutschland ist die Frage nach einem Endlager für radioaktive Abfälle aktuell und Gegenstand zahlreicher Forschungsprojekte. Im Gespräch ist der Salzstock Gorleben [13]. Oberhalb von ihm befindet sich ein mächtiges Grundwasserspeichersystem, in dem zwischen wasserleitenden Schichten auch Grundwassernichtleiter und Grundwasserhemmer enthalten sind. Von besonderem Interesse ist die „Gorlebener Rinne“ mit dem tiefsten Grundwasserstockwerk über dem Salzstock. Je nach Tiefe einer Schicht trifft man Süßwasser, Brackwasser, Salzwasser oder Sole an.

Unter anderem besteht der Wunsch Laufzeiten und Fließwege dichteabhängiger Grundwasserströmungen [101, 103] sowie Transport und Reaktion von radionukliden Schadstoffen [61] in einem solchen dreidimensionalen hydrogeologisch komplexen Modellgebiet für lange Zeiträume zu simulieren [41, 42].



komplex_2D.lgm

- 2D Gebiet aus 63 Schichten
- ca. 6 km Ausdehnung in horizontaler Richtung
- ca. 150 m Ausdehnung in vertikaler Richtung

Abb. 2.2 *gnuplot*-Abbildung einer 2D-*lgm*-Datei für das Gebiet *komplex*; Darstellung 30fach überhöht

Abb. 2.2 zeigt das Gebiet *komplex*. Die Geometrie ist einem Längsschnitt der Gorlebener Rinne nachempfunden (vgl. Abb. 28a in [13]).

Das Gebiet *komplex* besteht aus 63 Schichten (*Subdomains*), die mehr oder weniger durchlässig sind. Die Schichten werden drei unterschiedlichen Klassen (*Units*) zugeordnet: Schluff (0.002 bis 0.063 mm *), Feinsand (0.063 bis 0.2 mm) und gröberer Sand (0.2 bis 2 mm).

In horizontaler Richtung erstreckt sich das Gebiet *komplex* über ungefähr 6 km. In vertikaler Richtung beträgt die Gesamtmächtigkeit aller Schichten ca. 150 m. Einzelne Schichten weisen sehr kleine Mächtigkeiten von nur wenigen Metern auf (z.B: Schicht 43: nur 1.50 m !). Man beachte die 30-fach überhöhte Darstellung in Abb. 2.2 zur besseren Erkennung der flachen Schichten.

Für das anisotrope Schichtengebiet *komplex* sollen in 2D und 3D *lgm*-Geometrien und *ng*-Gitter erstellt werden (→ Kap. 7.2).

* Korngröße

2.4 Dichtegetriebene Grundwasserströmungen über dem Salzstock Höfer

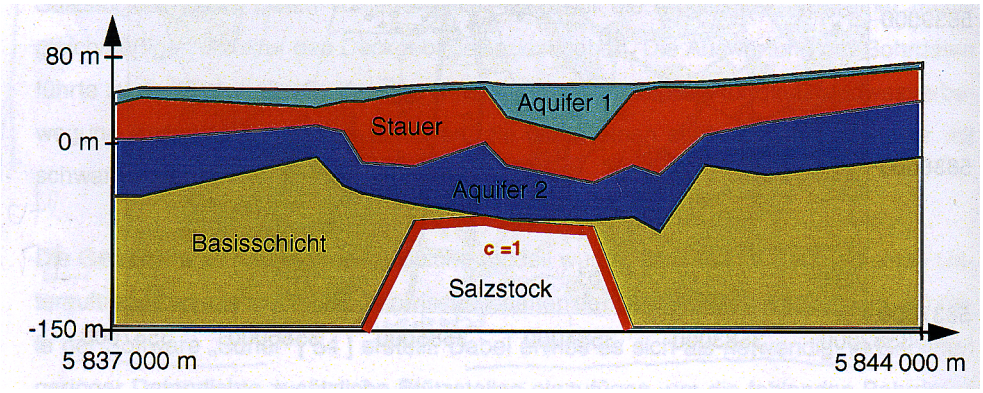


Abb. 2.3 Deckgebirge des Salzstocks bei Höfer, Vertikalschnitt in Nord-Süd-Richtung [→177]

Nach der Historischen Geologie geht die Entstehung der Salzstöcke in der Norddeutschen Tiefebene auf die Zeit vor ca. 250 Mio. Jahren (Zechstein) zurück, als während einer ausgedehnten Periode mit aridem Klima riesige Mengen von Salzmineralien durch Verdunstung von Meerwasser ausgefällt wurden ([166], S. 196) (500 - 1000 m mächtig). Es folgten Überlagerungen des Trias (bis vor 205 Mio. Jahren), des Jura (bis vor 135 Mio. Jahren), der Kreide (bis vor 65 Mio. Jahren), des Tertiärs (bis vor 2,6 Mio. Jahren) sowie des Quartärs (Eiszeitalter).

Da Salz unter Druckeinwirkung plastisch reagiert, kam es unter der Last der überlagerten Schichten zu Verformungen. Dabei begann das Salz aufgrund seiner geringeren Dichte sich in die Deckgebirgsschichten hineinzudrücken; insbesondere dort, wo aufgrund weltweiter Erdmassenbewegungen Schwächezonen vorhanden waren. Es entstanden zunächst flache Salzkissen, die sich örtlich zu Salzstöcken (Salzdiapire) mit pilzförmiger Gestalt aufrichteten [177].

Der Salzstock Höfer liegt 50 Kilometer nordöstlich von Hannover am Rand der Südheide. Der Salzstock erstreckt sich über ca. 2.5 km unterhalb der Gemeinde Höfer und reicht bis auf etwa 120 m an die Geländeoberkante heran. Über den Schacht „Mariaglück“ wurden in Höfer von 1922 bis 1977 mehr als 13 Mio. Tonnen Kali- und Steinsalz gefördert.

Das Gebiet über dem Salzstock Höfer besteht aus abwechselnd sandigen und lehmig-tonigen Schichten, die als Aquifere bzw. Aquiclude wirken [177]. Geometrisch betrachtet haben diese Schichten eine extrem große Ausdehnung in horizontaler Richtung. Abb. 2.3 und Abb. 7.4 zeigen eine horizontale Abmessung von 7 km wohingegen einzelne Schichten des Deckgebirges eine vertikale Abmessung von teilweise nur wenigen Metern aufweisen.

Für das flach geschichtete Deckgebirge über dem Salzstock Höfer sollen die dichtebedingte Strömung und die Konzentrationsverteilung bis zum stationären Zustand berechnet werden. Eine wichtige Voraussetzung ist die Erstellung eines dreidimensionalen Geometrie- und Gittermodells für dieses anisotope Schichtengebiet.

Im Experimentalteil dieser Arbeit wird das „Höfer-*Domain*“ als Beispiel für ein anisotropes Schichtengebiet wieder aufgegriffen (→Kap. 7.4).

2.5 Veränderung von Süßwasserlinsen bei Nordseeinseln

Ein weiterer Arbeitsschwerpunkt im Rahmen dichtegetriebener Grundwasserströmungen ist die Simulation von Süßwasserlinsen bei Nordseeinseln.

Die Grundwasservorkommen ostfriesischer Inseln wie Norderney oder Langeoog sind von festländischen Systemen isoliert und werden allein durch die Versickerung von Niederschlägen gebildet und stabilisiert. Das spezifisch leichtere Süßwasser schwimmt auf dem schwereren Salzwasser und verdrängt es bis zum Erreichen des Tauchgleichgewichtes. Die Grundwasseroberfläche ist uhrglasförmig gewölbt und prägt mit der parabolisch geformten Tiefenausdehnung den Ausdruck Süßwasserlinse. (K. Naumann → [152] → „5 Geometrie der Süßwasserlinsen“)

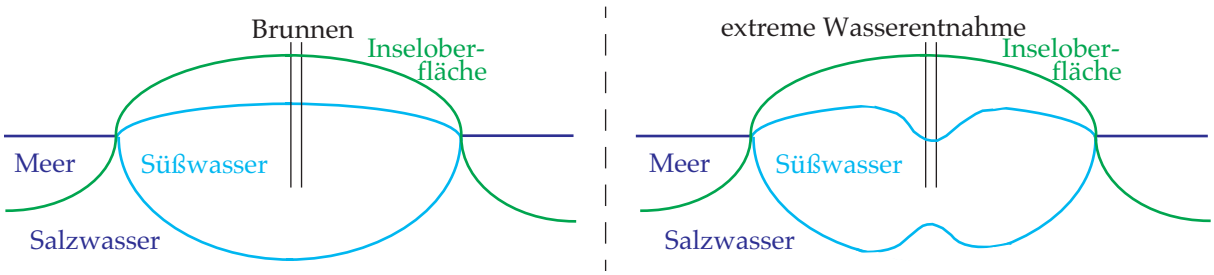


Abb. 2.4 Schematische Darstellung einer Süßwasserlinse (links) und Auswirkungen bei einer extremen Wasserentnahme (rechts)

Bei zu großen Wasserentnahmemengen kann ein Absenkungstrichter entstehen, der eine Schädigung der grundwasserabhängigen Vegetationen in Dünentälern bewirkt. Außerdem kann es zum Upconing* und unter Umständen sogar zu einer Versalzung im Brunnen kommen. Darüber hinaus beeinflussen Tiden, Sturmfluten, Meeresspiegelanstieg sowie Niederschläge die Süßwasserlinse. Für eine gesicherte Trinkwasserversorgung muss (insbesondere in den Sommermonaten) die Entnahme von Grundwasser an die Höhe der Grundwasserneubildung angepasst werden [152, 185, 224].

Im Rahmen der Kooperation mit der GRS [177, 178] soll am Lehrstuhl zunächst die Entstehung der Süßwasserlinse einer Nordseeinsel simuliert werden. Anschließend soll die Modifikation der Süß-/Salzwassergrenze bei erhöhter Brunnenförderung sowie Transportprozesse (z.B. Chlorid u. Kalium) berechnet werden.

Eine wichtige Grundvoraussetzung für solche Simulationen sind geeignete Geometrie- und Gitterbeschreibungen. Sowohl bei der städtischen Insel Norderney als auch der dörflichen Insel Langeoog müssen folglich anisotrope Schichtengebiete modelliert und vernetzt werden.

* Aufstieg der Süßwasser-Salzwasser-Grenzfläche infolge des Abpumpens von Süßwasser oberhalb der Grenzschicht

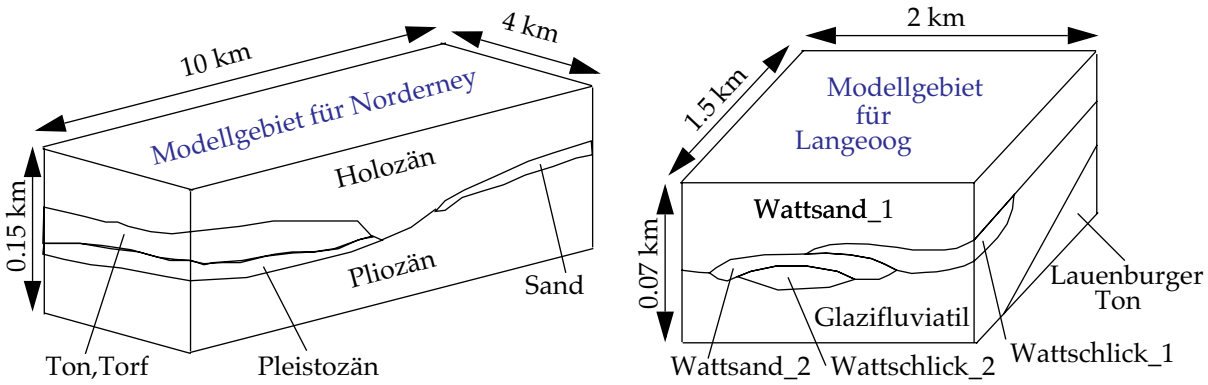


Abb. 2.5 Blockschemata zum geologischen Aufbau der anisotropen Modellgebiete für Norderney (links) und Langeoog (rechts)

Beim Beispiel Norderney wird der westliche Teil der Insel modelliert, unter dem die Süßwasserlinse nachgewiesen ist. Das Modellgebiet besitzt eine Länge von 10 km, eine Breite von 4 km und eine vertikale Ausdehnung von lediglich 150 m (→ Abb. 2.5 links). Das Modellgebiet ist unterteilt in Schichten aus dem Pliozän, Pleistozän und Holozän. Neben diesen grundwasserleitenden Schichten treten grundwasserhemmende und grundwasserstauende Schichten aus Ton, Torf und Sand auf, die teilweise nur ein bis wenige Meter mächtig sind [152, 177, 178].

Beim Beispiel Langeoog wird ein Teilgebiet östlich des Dorfes Langeoog modelliert. Dieses Modellgebiet ist ebenfalls sehr anisotrop. Es umfasst ein Gebiet mit 2 km Länge, 1.5 km Breite und einer vertikalen Ausdehnung von lediglich 70 m. Über dem grundwasserhemmenden Lauenburger Ton liegt das grundwasserleitende Glazifluviatil. Darüber befindet sich das Holozän mit diversen grundwasserleitenden Wattsanden sowie grundwasserstauenden Wattschlickschichten. Insbesondere letztere weisen teilweise extrem geringe Mächtigkeiten von ein bis wenigen Metern auf.

Für die anisotropen Schichtengebiete zu den ostfriesischen Inseln Norderney und Langeoog sind geeignete Geometrie- und Gitterbeschreibungen gesucht. Die beiden Inseln werden in den Experimenten dieser Arbeit wieder aufgegriffen (siehe Kap. 7.5 und Kap. 7.6).

2.6 Salzwasserintrusion und künstliche Grundwasserneubildung in Orange County

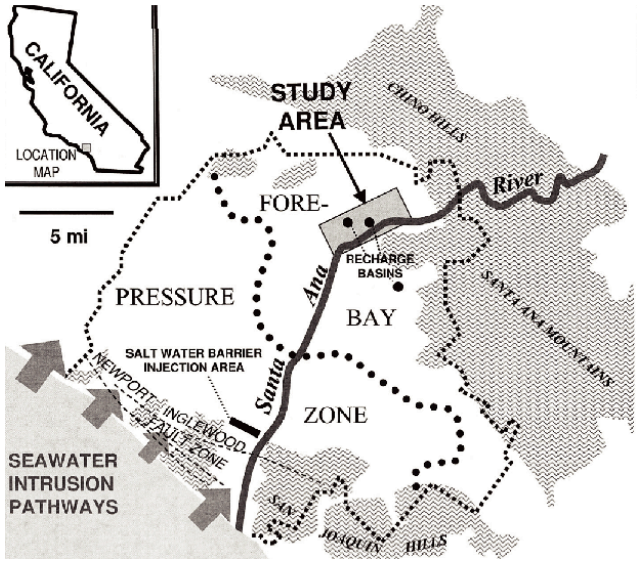


Abb. 2.6 "Orange County Water District", Draufsicht, aus [201] → Fig.1

„Orange County" bezeichnet den Landkreis der Stadt Orange und liegt in Kalifornien südöstlich von Los Angeles (→Abb. 2.6). Das Grundwasserbecken von Orange County liefert 70% des Brauchwasserbedarfs für ca. 2 Millionen Menschen. Für die Zukunft ist angedacht, einen noch größeren Anteil (evtl. sogar 100%) der Wasserversorgung diesem Grundwasserbecken zu entnehmen.

Durch die Nähe zum Pazifik kommt es allerdings zum Salwassereintrag („SEAWATER INTRUSION"). Um die Süß-Salzwassergrenze zu stabilisieren wird wiederaufbereitetes Wasser in der „SALT WATER BARRIER INJECTION AREA" künstlich eingebracht (→Abb. 2.6).

Neben den geringen Niederschlägen in Orange County wird das Grundwasserbecken insbesondere durch Wasser des „Santa Ana River" in der „FORE-BAY" gespeist. Im Untergrund bewegt sich das Wasser in westlicher Richtung durch die 3 Aquifere (→Abb. 2.7). Es besteht die Überlegung, wiederaufbereitetes Wasser in „RECHARGE BASINS" auch in der „FORE-BAY" künstlich einzuspeisen und irgendwann an einem westlich davon gelegenen Brunnen als Brauchwasser wieder zu fördern.

Eine solche Vorgehensweise ist aber nicht unproblematisch, zumal organische und mikrobiologische Verunreinigungen mitgeführt würden. Der Transportpfad durch die Aquifere müsste also lang genug sein, damit die reinigenden Eigenschaften des Bodens ausreichend zum Tragen kämen. Daher wird über Einschränkungen wie die Mindestverweildauer des Wassers im Boden oder die Mindestentfernung vom Einspeisungsbecken bis zum Entnahmebrunnen diskutiert.

Vor diesem Hintergrund gewinnen Abschätzungen der Verweildauer des Wassers mittels Isotopenanalyse und auch insbesondere die Simulation der zeitabhängigen Grundwassermigration durch die heterogenen geologischen Schichtungen zunehmend an Bedeutung.

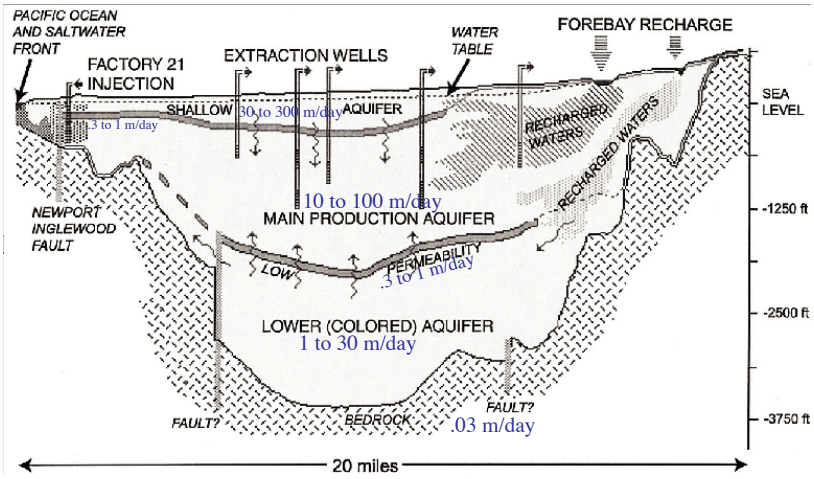


Abb. 2.7 Vertikaler Schnitt durch das Grundwasserbecken von Orange County in Richtung des Santa Ana River, aus [201]→Fig. 2, ergänzt mit Leitfähigkeitsangaben für die Aquifere und Aquiclude

Anhand der „STUDY AREA“ im Nordosten von Orange County wurden bereits interessante Analysen und Simulationsrechnungen von Tompson, Falgout et al. in Livermore durchgeführt [3, 200, 201]. Die verwendeten Gitter für die „STUDY AREA“ sind sehr fein und basieren auf einem voxelbasierten geostatistischen Ansatz von S. Carle [24].

Es besteht der Wunsch, mit dem Simulationswerkzeug *UG* ebenfalls Rechnungen für Orange County durchzuführen. Im Gegensatz zu den Arbeiten von Tompson, Falgout et al. soll nicht nur die „STUDY AREA“ sondern das gesamte Grundwasserbecken von Orange County modelliert werden.

Das Grundwasserbecken besteht im Wesentlichen aus den drei grundwasserleitenden Schichten „SHALLOW AQUIFER“, „MAIN PRODUCTION AQUIFER“ und „LOWER AQUIFER“ sowie zwei geringmächtigen nichtleitenden Toneinschlüssen. Das Grundwasserbecken ist eingebettet in das undurchlässige „BEDROCK“ (→ Abb. 2.7).

Die Gesamtabmessungen des zu realisierenden Modellgebiets sind 160000 ft x 140000 ft in horizontaler Richtung und 4500 ft in vertikaler Richtung.

Die obere Tonschicht hat eine Mächtigkeit von lediglich 50 ft, die untere Tonschicht eine Mächtigkeit von nur 100 ft. Hinzu kommen extrem geringmächtige Stellen im „SHALLOW AQUIFER“ von nur wenigen ft.

Für dieses extrem anisotrope Schichtengebiet in Orange County sind geeignete Geometrie- und Gitterbeschreibungen gesucht (siehe Kap. 7.7).

2.7 Verdichtung von Horizontalsilos

Das "Biogas-Crops-Network" [11, 83, 153] erforscht die Monofermentation von pflanzlicher Biomasse. Es werden grundlegende Fragestellungen der Substratvorbereitung, der Prozessführung und -steuerung, der biochemischen und mikrobiologischen Analytik sowie der Prozessmodellierung behandelt. Innerhalb dieses Netzwerks liegt der Schwerpunkt des Lehrstuhls Technische Simulation auf robusten und effizienten Simulationsmodellen für die Erzeugung von Biogas. Dabei soll zum einen der Fermentierungsprozess und zum anderen der Einlagerungs- und Verdichtungsprozess für Horizontalsilos (auch „Fahrsilos“ genannt) [145, 203] simuliert und optimiert werden [89] (siehe auch [33, 110]).

Die gegebenen Bahndaten des Verdichtungswerkzeugs müssen mit dem Ziel ausgewertet werden, die einzelnen komprimierten Schichten des Silos zu erkennen und deren Volumina bzw. Verdichtungen zu berechnen. Die zu beschreibende Schichtenfolge im Horizontalsilo ist ein weiteres anisotropes Schichtengebiet, für das Geometrie- und Gitterbeschreibungen gesucht sind [54].



Abb. 2.8 Horizontalsilo → Befüllung → Verdichtung → anisotrope Schichten

Beim Einlagerungs- und Verdichtungsprozess in Horizontalsilos kann man ebenfalls von anisotropen Schichtengebieten sprechen. Die im Rahmen des BCN [11] von der LGF [126] betrachteten Fahrsilos haben eine horizontale Ausdehnung von 20 bis 100 m und besitzen eine Höhe von ca. 4m. Die Fahrsilos sind typischerweise an 3 Seiten durch Wände begrenzt (rechts, links und hinten). Im 5-Minutentakt wird gehäckseltes Gras oder Mais abgekippt, durch Radlader auf der „Rampe“ des bereits bestehenden Silos verteilt („progressive Keiltechnik“) und von Traktoren und Walzen zu dünnen Schichten komprimiert (→ Abb. 2.8, Abb. 7.14 u. Abb. 7.16). Diese verdichteten Schichten sollen im Rahmen des BCN [11] erkannt, beschrieben und vernetzt werden [54, 89]. Die Schichten besitzen mit 10 bis 30 cm Dicke eine vergleichsweise geringe Mächtigkeit und haben eine extrem große Ausdehnung in horizontaler Richtung.

Bei der Verdichtung von Horizontalsilos entstehen somit auch anisotrope Schichtengebiete (siehe Kap. 7.8).

2.8 Hydrodynamische Phänomene im Willersinnweiher

Der Willersinnweiher ist ein Baggersee in der Oberrheinischen Tiefebene im Stadtgebiet von Ludwigshafen. Der See ist ca. 800 m lang und ca. 250 m breit und besitzt eine durchschnittliche Tiefe von ca. 9 m. Seine maximale Tiefe beträgt ca. 18 m. Im Sommer kommt es durch die starke Sonnenbestrahlung und den geringen Wind (→ wenig Umwälzung) zur Ausprägung von unterschiedlichen Schichten im See. Diese bilden bei den genannten Abmessungen des Sees ein anisotropes Schichtengebiet (vgl. Abb. 7.17 auf S. 125).

Die sommerliche Schichtung des Sees führt zu Sauerstoffmangel in den tiefen Bereichen (hypolimnische Anoxie) und zur organischen Sedimentation, d.h. zu Bedingungen unter denen man Methanbildung erwarten kann. Zudem hat der See Interaktion mit dem Grundwasser.

Arbeitsgruppen der Geoökologie und der Umweltphysik der Universität Heidelberg führen an dem nährstoffreichen (eutrophen) Baggersee Experimente durch [133]. U.a. werden mit akustischen Strömungsmessgeräten und dem Spurengas SF6 als Tracer hochaufgelöste Leitfähigkeits- und Temperaturprofile in vertikaler Dimension gemessen und durch geeignete Modelle interpretiert. Mit den Messdaten lassen sich vertikale Diffusionskoeffizienten abschätzen.

Für ein tieferes Verständnis der hydrodynamischen Phänomene im See werden neben zahlreichen Messdaten und Experimenten auch numerische Simulationen von Temperatur- und Geschwindigkeitsverteilungen hinzugezogen. Hierfür ist vorab eine geeignete Geometrie- und Gitterbeschreibung für den Willersinnweiher bzw. seine anisotropen Schichten notwendig (→ Kap. 7.9).

2.9 Arzneimitteldiffusion durch das Stratum corneum

In Abb. 2.9 sieht man eine lichtmikroskopische Aufnahme der menschlichen Haut. Diese ist schichtförmig aufgebaut. Sie besteht aus Subkutis (Unterhaut), Dermis (Lederhaut) und Epidermis (Oberhaut). Die Epidermis unterteilt sich in die lebende Epidermis und das Stratum corneum.

Im Rahmen der Differenzierung wandern die kernhaltigen Keratinozyten nach außen und werden zu kernlosen abgestorbenen, dehydrierten Korneozyten (Hornzellen) im Stratum corneum. Sie bestehen überwiegend aus Keratinfilamenten und sind von einer starren Hülle, dem „cornified envelope“ umschlossen.

Das Stratum corneum setzt sich aus ca. 10 - 15 Schichten von Korneozyten zusammen, die in eine aus Lipid-Bilayer-Schichten bestehende kontinuierliche Lipidmatrix eingebettet sind. Ein Korneozyt besitzt eine horizontale Ausdehnung von 30 bis 50 μm und ist weniger als 1 μm dick. Die Lipidkanäle zwischen den Korneozyten sind sogar nur 0.1 μm dick. Das Stratum corneum ist somit auch ein anisotropes Schichtengebiet.*

In der pharmazeutischen Forschung spielen Diffusionsvorgänge von Substanzen eine wichtige Rolle, da die Aufnahme von vielen Arzneistoffen passiv durch Diffusion erfolgt. Neben der oralen Applikation von Arzneistoffen wurde in den letzten Jahren in zunehmenden Maße die Haut als Resorptionsorgan für systemisch wirkende Arzneistoffe interessant und es wurden bereits diverse transdermale therapeutische Applikationssysteme entwickelt. Verschiedene Arzneimittel, die über die Haut appliziert werden, sind bereits auf dem Markt (z.B. Nitroglycerin, Clonidin, Nicotin, hormonale Kontrazeptiva, Morphin, Scopolamin, Clenbuterol).

* „The stratum corneum is a highly orientated layered structure consisiting of alternating cornified cells (the so-called corneocytes) separated by multilamellar lipid layers.“ Tobias Richter, Roland Wiesendanger et al. [171]

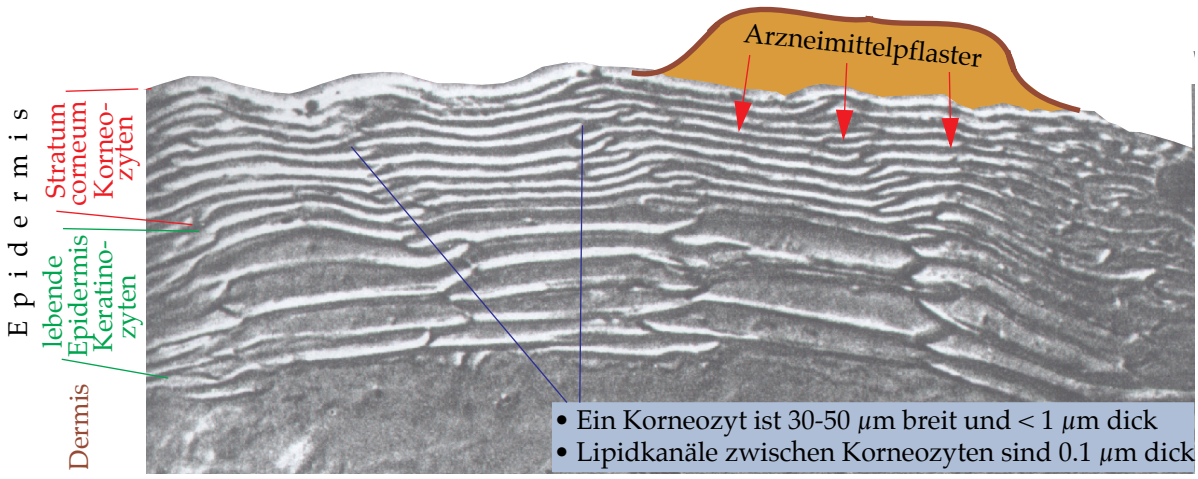


Abb. 2.9 Transdermale Applikation und Größenverhältnisse im Stratum corneum; lichtmikroskopische Aufnahme aus [141], modifiziert

Auch in der Tiermedizin gibt es erste Anwendungen der transdermalen Applikation (z.B. Antihelmintika in der Schweinezucht) [206].

Die transdermale Aufnahme von Arzneimitteln hat gegenüber der oralen Applikation Vorteile: Da der Wirkstoff weder den Magen-Darm-Trakt noch die Leber passieren muss, wird die Verstoffwechselung des Arzneimittels deutlich verringert. Dadurch können die Nebenwirkungen vermindert und die Arzneimitteldosis reduziert werden. Zudem kann durch die gleichmäßige Diffusion des Wirkstoffs der Arzneimittelspiegel im Blut über einen längeren Zeitraum hinweg konstant gehalten werden.

Leider ist die Permeation sehr vieler Arzneimittel durch die Haut sehr schlecht. Das liegt grösstenteils am Stratum corneum, welches die Hauptbarriere darstellt. In der dermatologischen Forschung werden derzeit Verfahren untersucht, welche die Durchlässigkeit der Haut erhöhen wie z.B. Iontophorese oder Elektroporation.

Der Transportweg der Arzneimittel durch das Stratum corneum ist bisher noch nicht vollständig aufgeklärt. Einige Forscher auf diesem Gebiet nehmen an, dass der primäre transdermale Transport via lateraler Diffusion durch die multilamellare Lipidmatrix erfolgt [1, 57, 104]. Die Korneozyten werden hierbei als impermeabel betrachtet. Im Gegensatz dazu wird in [160] für sehr hydrophile Komponenten ein „aqueous pore“-Weg durch die Korneozyten angenommen. In den letzten Jahren wurde die Diffusion durch das Stratum corneum mit Hilfe neuerer mikroskopischer Untersuchungen weiter erforscht [227, 228]. In [229] visualisierten Yu et al. mit Zwei-Photonen-Fluoreszenzmikroskopie das hydrophobe Rhodamin B-Hexylester sowie das hydrophile Sulforhodamin nicht nur in der multilamellaren Lipidregion sondern auch innerhalb der Korneozyten.

Die Simulation der Arzneimitteldiffusion ist am Lehrstuhl Technische Simulation ein Forschungsschwerpunkt der Aufschlüsse geben soll. Es werden zeitabhängige Arzneimittelkonzentrationsprofile für inhomogene Modellmembranen erstellt, um eine möglichst detaillierte Beschreibung des Arzneimittelflusses durch das Stratum corneum zu erhalten. Der intrazelluläre Diffusionsweg wurde in 2D bereits vor einigen Jahren am Lehrstuhl mittels Computersimulation bestätigt. Als Modell wurde damals ein zweidimensionales „Brick-and-Mortar“ Modell verwendet [93]. Nun sollen die bisherigen Ergebnisse auf einem realitätsnahen dreidimensionalen Stratum corneum Modell verifiziert und verfeinert werden. Dazu ist ein geeignetes Geometrie- und Gittermodell für das Stratum Corneum mit seinen anisotropen Schichten gesucht (Kapitel 5, Kapitel 8).

Kapitel 3

Geometrien und Gitter für *UG*

Für die vorgestellten anisotropen Schichtengebiete sind dreidimensionale Geometrie- und Gitterbeschreibungen für das Numeriksimulationssystem *UG* gesucht. Bei dieser Aufgabenstellung müssen das Geometrieformat und das Gitterformat von *UG* berücksichtigt werden.

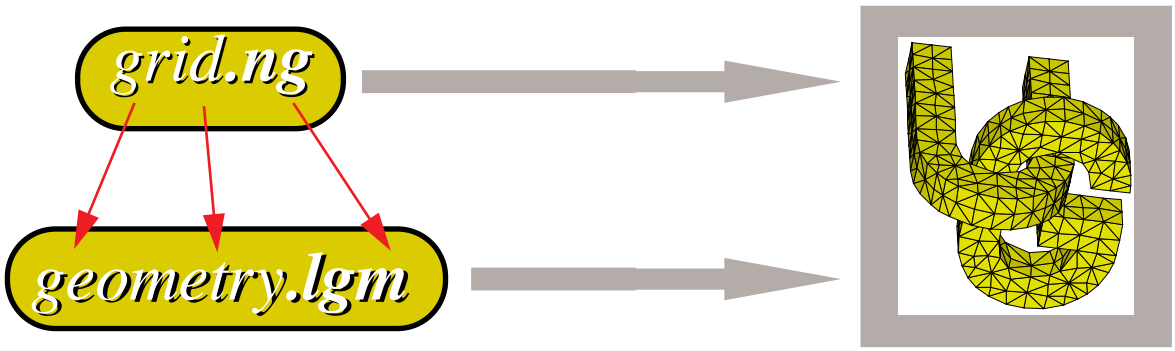


Abb. 3.1 Geometriedatei *geometry.lgm* und Gitterdatei *grid.ng* für das Simulationswerkzeug *UG*

Für die Beschreibung der Geometrie steht in *UG* das *„lgm"-Domain* zur Verfügung, das in Kap. 3.1 vorgestellt wird.

Kap. 3.2 gibt einen Überblick zum *ng*-Format für die Eingabe des Gitters in *UG*. Es wird beschrieben, welche Elementtypen damit möglich sind. Außerdem wird der Zusammenhang der beiden Formate *lgm* und *ng* erläutert: Ein *ng*-Gitter bezieht sich immer auf eine zugehörige *lgm*-Geometrie (rote Pfeile in Abb. 3.1). Dagegen besitzt eine *lgm*-Datei ihrerseits keine Referenzen auf *ng*-Dateien. Für ein und dieselbe *lgm*-Geometrie können beliebig viele *ng*-Gitter erzeugt werden.

Kapitelübergreifend (Kap. 3.1 u. 3.2) dient ein anschauliches Dateibeispiel mit ergänzenden Grafiken dem intuitiven Verständnis der beiden Dateiformate (→Abb. 3.3 u. Abb. 3.10). Für technische und syntaktische Details sei auf [44], [88] und insbesondere [207 → Kap. 7] verwiesen.

Mit den gegebenen *UG* -Formaten stellt sich die Frage, wie die zu erzeugenden Geometrien und Gitter für die in Kapitel 2 vorgestellten anisotropen Schichtengebiete sinnvollerweise aussehen sollen. Unterkapitel 3.3 erläutert den Vorzug eines flächenbasierten Geometrieansatzes gegenüber einem voxelbasierten Verfahren und Kap. 3.4 beschreibt das Ziel, Gitter mit günstigen Winkeleigenschaften und möglichst vielen Hexaedern zu erzeugen.

3.1 *UG*-Geometrien im *lgm*-Format

Im Numeriksimulationssystem *UG* besteht mit dem „*lgm*“-*Domain* die Möglichkeit, komplexe dreidimensionale Gebiete, die aus mehreren Einheiten bestehen, zu beschreiben. Diese Geometrien können als Dateien im „*lgm*-Format“ in *UG* eingelesen werden. Der Name „*lgm*“ steht für „**l**inear **g**rid **m**odel“ und drückt aus, dass die Trennflächen und Ränder des Gebiets mit linearen Flächenstücken, nämlich ausschließlich mit Dreiecken, beschrieben werden.

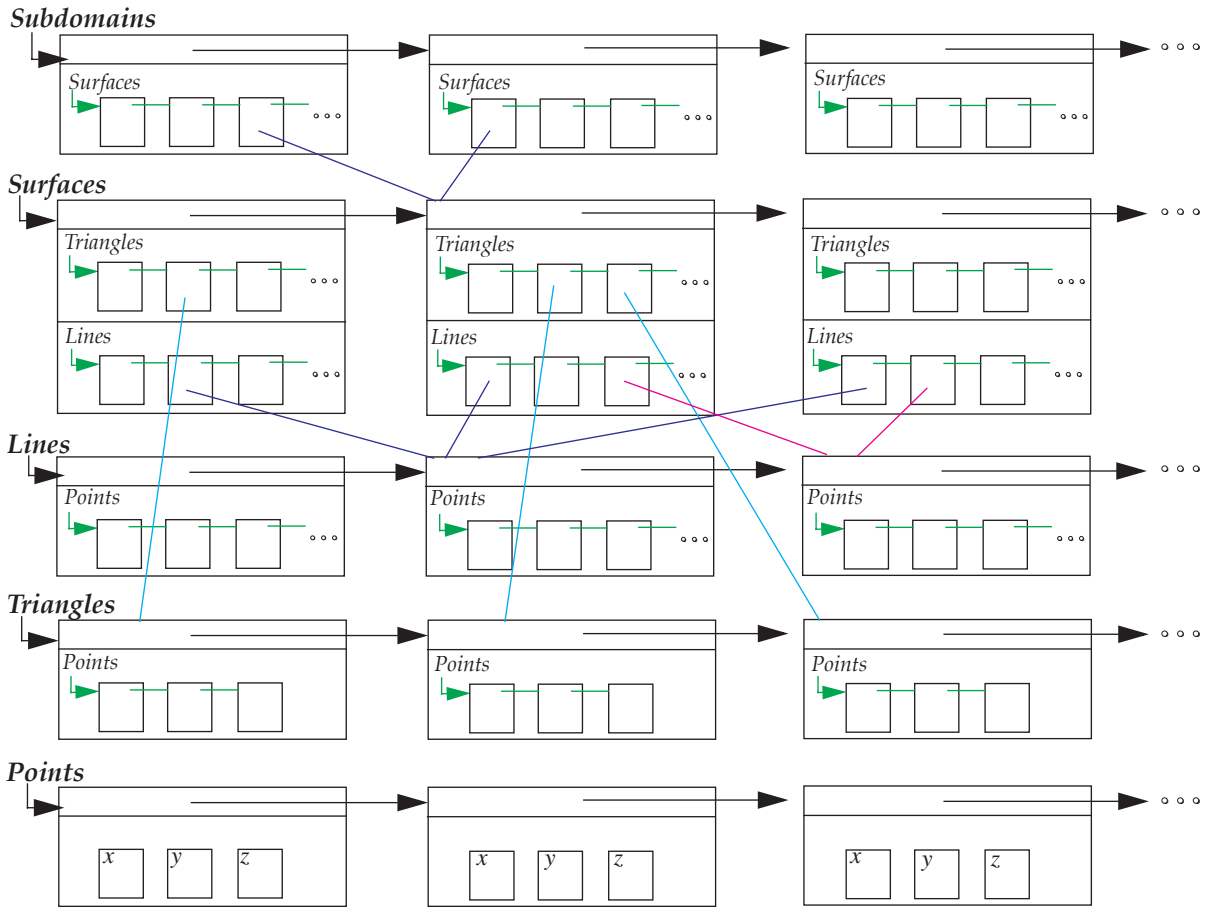


Abb. 3.2 Übersichtsgrafik zum *lgm-Domain*

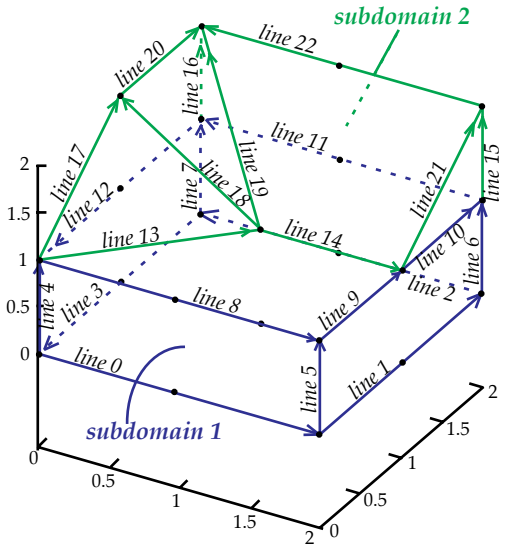
Bei einem *lgm-Domain* ist das Gesamtgebiet in der Regel in mehrere Einheiten (*Subdomains*) unterteilt, die in dieser Arbeit jeweils einer anisotropen Schicht entsprechen. Jede *Subdomain* ist stets abgeschlossen und wird durch beliebig viele, zusammenhängende Oberflächen (*Surfaces*) begrenzt. *Surfaces* werden mit mehreren Polygonzügen (*Lines*) umrandet und mit beliebig vielen Dreiecken (*Triangles*) beschrieben (→Abb. 3.4). *Lines* referenzieren mindestens zwei Punkte (*Points*) und Dreiecke referenzieren genau drei *Points*. Die *Points* werden durch ihre Raumkoordinaten x, y und z beschrieben.

Abb. 3.2 zeigt in einer Übersicht die Hierarchie des *lgm-Domain*. Einige Bezüge zwischen den einzelnen Objekten sind exemplarisch eingezeichnet. Man sieht, dass eine *Line* zu zwei oder mehr *Surfaces* gehören kann und dass jedes Dreieck zu genau einer *Surface* gehört. Eine Trennfläche zweier aneinandergrenzender *Subdomains* wird durch eine gemeinsame *Surface* repräsentiert (z.B. *surface 6* in Abb. 3.3).

```
# Domain-Info
name = lgm_Example
problemname = test
convex = 0

# Unit-Info
unit 1 SUBDOMAINNAME_1
unit 2 SUBDOMAINNAME_2

# Line-Info
line 0: points: 0 1 2;
line 1: points: 2 3 4;
line 2: points: 4 5 6;
line 3: points: 6 7 0;
line 4: points: 0 9;
line 5: points: 2 11;
line 6: points: 4 13;
line 7: points: 6 15;
line 8: points: 9 10 11;
line 9: points: 11 12;
line 10: points: 12 13;
line 11: points: 13 14 15;
line 12: points: 15 16 9;
line 13: points: 9 17;
line 14: points: 17 12;
line 15: points: 13 18;
line 16: points: 15 20;
line 17: points: 9 21;
line 18: points: 17 21;
line 19: points: 17 20;
line 20: points: 21 20;
line 21: points: 12 18;
line 22: points: 18 19 20;
```




```
# Surface-Info
surface 0: left=1; right=0; points: 0 1 2 3 4 5 6 7 8; lines: 0 1 2 3 ; triangles: 0 8 7; 0 1 8; 1 3 8; 1 2 3; 7 8 6; 8 5 6; 8 3 5; 3 4 5;
surface 1: left=1; right=0; points: 0 1 2 9 10 11; lines: 0 5 8 4 ; triangles: 0 9 10; 0 10 1; 1 10 11; 1 11 2;
surface 2: left=1; right=0; points: 2 3 4 13 12 11; lines: 1 6 10 9 5 ; triangles: 2 11 12; 2 12 3; 3 12 13; 3 13 4;
surface 3: left=1; right=0; points: 4 5 6 13 14 15; lines: 2 7 11 6 ; triangles: 6 14 15; 6 5 14; 5 13 14; 5 4 13;
surface 4: left=1; right=0; points: 0 7 6 15 16 9; lines: 3 7 12 4; triangles: 0 16 9; 0 7 16; 7 15 16; 7 6 15;
surface 5: left=1; right=0; points: 9 10 11 12 17; lines: 8 9 14 13; triangles: 9 17 10; 10 17 12; 10 12 11;
surface 6: left=1; right=2; points: 9 16 17 12 15 14 13; lines: 13 14 10 11 12;
                                                    triangles: 9 16 17; 16 15 17; 17 15 14; 17 14 12; 12 14 13;
surface 7: left=2; right=0; points: 12 13 18; lines: 10 15 21; triangles: 12 18 13;
surface 8: left=2; right=0; points: 13 14 15 18 19 20; lines: 11 15 22 16; triangles: 20 15 19; 19 15 14; 18 19 14; 18 14 13;
surface 9: left=2; right=0; points: 9 16 15 20 21; lines: 12 16 20 17; triangles: 21 9 16; 20 21 16; 20 16 15;
surface 10: left=2; right=0; points: 9 17 21; lines: 13 18 17; triangles: 9 21 17;
surface 11: left=2; right=0; points: 20 17 21; lines: 18 19 20; triangles: 21 20 17;
surface 12: left=2; right=0; points: 17 12 18 19 20; lines: 14 21 22 19; triangles: 20 19 17; 17 19 12; 12 19 18;
```

```
# Point-Info
0   0   0
1   0   0
2   0   0
2   1   0
2   2   0
1   2   0
0   2   0
0   1   0
1   1   0
0   0   1
1   0   1
2   0   1
2   1   1
2   2   1
1   2   1
0   2   1
0   1   1
1   1   1
2   2   2
1   2   2
0   2   2
0   1   2
```

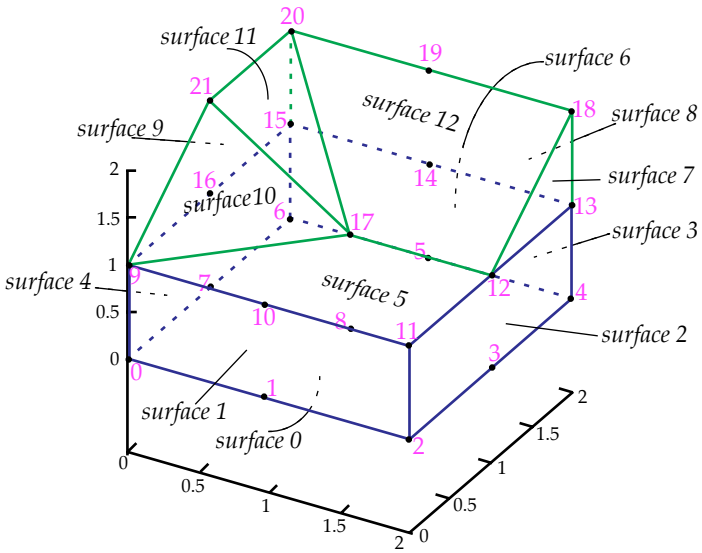


Abb. 3.3 Listing eines *lgm*-Beispiels mit ergänzenden Grafiken zur Veranschaulichung von *Subdomains* und *Lines* (oben) sowie *Surfaces* und *Points* (unten)

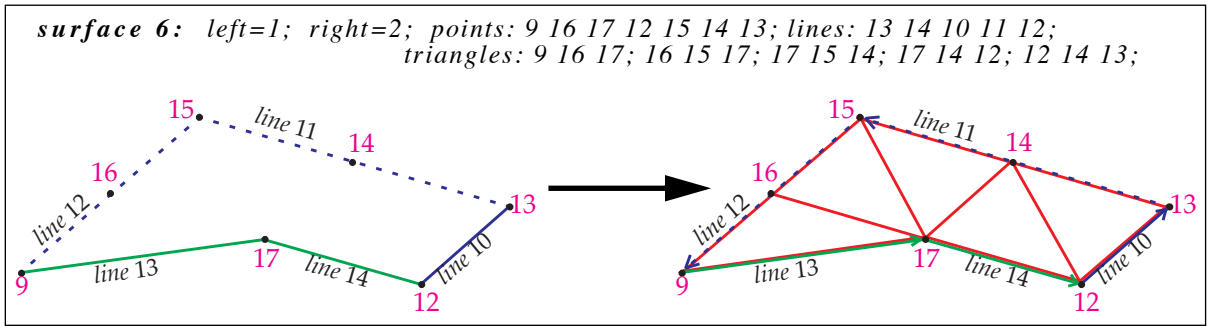


Abb. 3.4 Triangulierung der *lgm-Surface* 6 aus Abb. 3.3

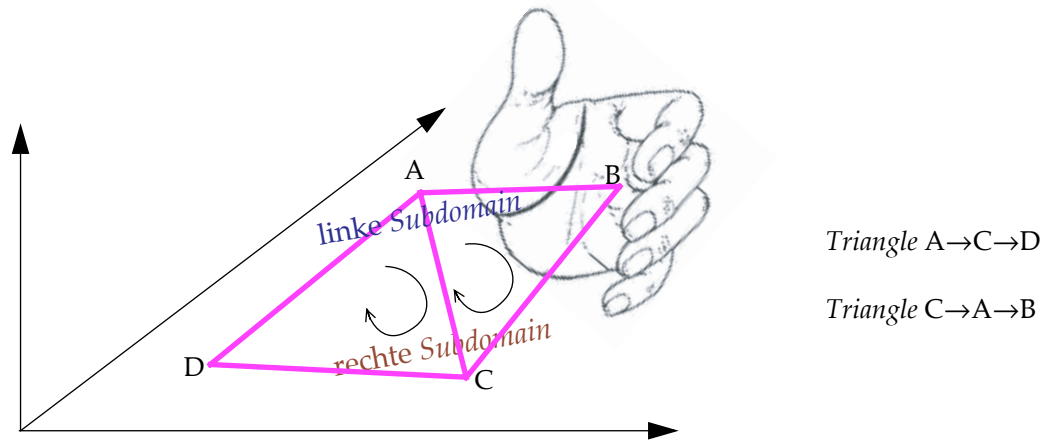


Abb. 3.5 „Links-Rechts-Information“ einer *Surface* durch Orientierung der Dreiecke

Die „Links-Rechts-Information“ einer *Surface* („*left* =..., *right* =...“ in Abb. 3.3) wird durch die einheitliche Orientierung der „*Surface*-Dreiecke“ festgelegt. Zwei benachbarte Dreiecke einer *Surface* sind dann gleich orientiert, wenn ihre beiden gemeinsamen Punkte in umgekehrter Reihenfolge aufgelistet sind (siehe Abb. 3.3, Abb. 3.4 sowie *triangles* „A→C→D“ und „C→A→B“ in Abb. 3.5). Der Daumen der linken Hand zeigt zur „rechten“ *Subdomain* einer *Surface* („*right* =...“), wenn die 4 anderen gekrümmten Finger der linken Hand der Aufzählung der Eckpunkte eines „*Surface*-Dreiecks“ folgen (siehe Abb. 3.5). Die „linke“ *Subdomain* befindet sich dann auf der anderen Seite der betrachteten *Surface* („*left* =...“).

Surfaces trennen entweder benachbarte *Subdomains* voneinander, oder sie trennen *Subdomains* vom Raum außerhalb des Rechengebiets. Dieses Komplement des Rechengebiets wird mit „*Subdomain* 0“ bezeichnet.

Als einfaches Anschauungsbeispiel dient in Abb. 3.3 das Listing einer *lgm*-Datei. Sie beschreibt ein Zweischichtengebiet, d.h. eine *Domain* bestehend aus zwei *Subdomains*. In den ergänzenden Grafiken sind oben die *Subdomains* und *Lines* und unten die *Points* und *Surfaces* beschriftet. Im folgenden Kapitel über das *ng*-Gitterformat wird dasselbe *lgm*-Beispiel verwendet und vernetzt (vgl. Abb. 3.10).

3.2 *UG*-Gitter im *ng*-Format

Gitter werden im Simulationswerkzeug *UG* im sogenannten *ng*-Format eingelesen. Eine *ng*-Datei beschreibt ein Gitter und dessen Zuordnung zu einer *lgm*-Geometrie (siehe Abb. 3.1). Der Name *ng* steht für „*NETGEN* file format“, da das *ng*-Format von K. Johannsen [99] ursprünglich für eine Schnittstelle zu dem Gittergenerator *NETGEN* von J. Schöberl [182] vorgesehen war.

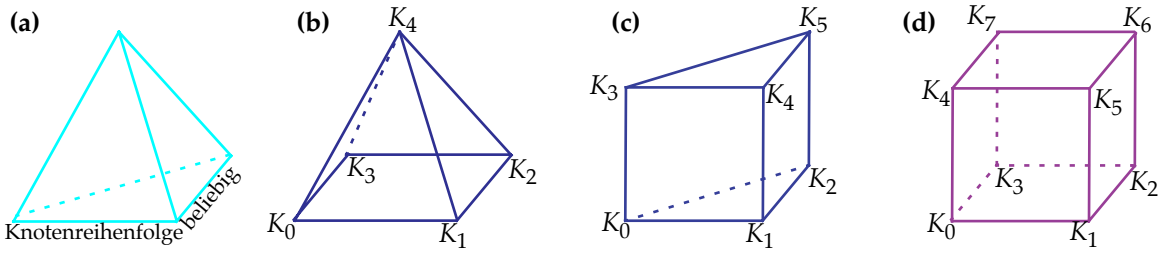


Abb. 3.6 Mögliche 3D Elementtypen in *UG* bzw. im *ng*-Format

Das *ng*-Format bietet in 3D die Möglichkeit, vier verschiedene Elementtypen zu verwenden und miteinander zu kombinieren. Auf diese Weise können hybride Netze erstellt und komplexe Gebiete flexibel vernetzt werden. Die vier möglichen Elementtypen sind in Abb. 3.6 dargestellt. Sie werden im *UG*-Jargon und auch im weiteren Verlauf dieser Arbeit mit „Tetraeder“ (→Abb. 3.6a), „Pyramide“ (→Abb. 3.6b), „Prisma“ (→Abb. 3.6c) und „Hexaeder“ (→Abb. 3.6d) bezeichnet. An dieser Stelle muss allerdings erläutert werden, wie diese Begriffe im Allgemeinen verwendet werden und welche besonderen Eigenschaften für die *UG*-Elementtypen gelten.

Ein Tetraeder (griech.: Vierflächner) ist ein Körper mit vier Seitenflächen. Der Tetraeder ist das einfachste Gitterelement in 3D und wird auch als dreidimensionaler Simplex oder als dreiseitige Pyramide bezeichnet.

Im *UG*-Jargon versteht man unter einer Pyramide ausschließlich Elemente mit viereckiger Grundfläche und einer Spitze. Im Allgemeinen besitzt eine Pyramide ein Polygon (Vieleck) beliebiger Eckenzahl als Grundfläche und mindestens drei Dreiecke als Seitenflächen, die in einem Punkt (der Spitze der Pyramide) zusammentreffen.

Ein Prisma ist ein geometrischer Körper, der durch Parallelverschiebung eines ebenen Vielecks entlang einer Geraden im Raum entsteht. Erfolgt die Parallelverschiebung senkrecht zur gegebenen Vielecksfläche, spricht man von einem geraden Prisma, andernfalls von einem schiefen Prisma. Das gegebene Vieleck wird als Grundfläche bezeichnet, die andere dazu kongruente und parallele Fläche als Deckfläche. Die Gesamtheit aller übrigen Begrenzungsflächen heißt Mantel. Der Mantel besteht folglich aus Parallelogrammen und im Spezialfall des geraden Prismas aus Rechtecken. Das spezielle *UG*-Prisma besitzt immer eine dreieckige Grundfläche. Bei S. Owen [156] werden solche Elemente „wedges“ (Keile) genannt.

„Hexaeder“ ist der allgemeine Name für einen sechsflächigen geometrischen Körper. Bei einem *UG*-Hexaeder besitzt jede Elementseite genau 4 Ecken. Ein *UG*-Prisma (→Abb. 3.6c) mit einer abgeschnittenen Ecke wäre aber zum Beispiel genauso ein Hexaeder, nämlich mit zwei dreieckigen, zwei viereckigen und zwei fünfeckigen Seitenflächen.

Zu den in dieser Arbeit verwendeten *UG*-Elementtypen ist eine weitere Besonderheit anzumerken. *UG*-Hexaeder, *UG*-Prismen und *UG*-Pyramiden besitzen viereckige Elementseiten. Die 4 Ecken einer solchen Elementseite müssen in *UG* bzw. im *ng*-Format nicht zwingend in einer Ebene liegen. Bis zu einem gewissen Grad ist hier eine Abweichung möglich. Auch wenn die Planheit nicht mehr gegeben ist, spricht man im *UG*-Jargon dennoch von Polyedern (Vielflächner, Ebenflächner), da die Elemente *UG*-intern auf Referenzelemente mit planen Seiten abgebildet werden (siehe im *UG*-Code in *fvgeom.c/.h*, *felem.c/.h* und *shapes.c/h* sowie in [120]).

Ferner gilt für *UG*-Prismen die Spezialität, dass ihre beiden Dreiecke weder 100%ig kongruent noch parallel zueinander sein müssen. Auch hier erfolgt eine Abbildung auf ein ideales Prismareferenzelement. Eine Abweichung ist bis zu einem gewissen Grad vertretbar. Diese Eigenschaft und die Möglichkeit der gekrümmten viereckigen Seitenflächen ist bspw. bei der Gittergenerierung für geologische Schichtungen gut brauchbar (siehe Kapitel 6).

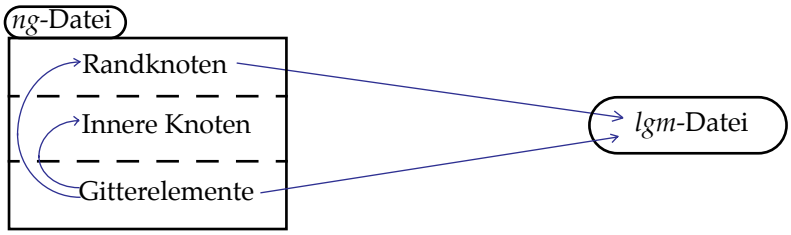


Abb. 3.7 Aufbau einer *ng*-Datei

Abb. 3.7 zeigt den Aufbau einer *ng*-Datei, bestehend aus 3 Teilen. Sie beginnt mit der Auflistung der Randknoten (Schlüsselwort „*B*“). Das sind diejenigen Knoten, die auf dem Rand der zugehörigen *lgm*-Geometrie liegen. Nach den Randknoten folgt, sofern vorhanden, die Liste der inneren Knoten (Schlüsselwort „*I*“), d.h. der Gitterknoten ohne *lgm*-Randbezug. Im dritten und letzten Teil einer *ng*-Datei werden die Gitterelemente (Schlüsselwort „*E*“) aufgeführt.

Zu jedem Randknoten eines *ng*-Gitters muss eine ausführliche Positionsbeschreibung bezüglich der zugehörigen *lgm*-Geometrie erfolgen. Konkret müssen alle *Surfaces* und *Lines* angegeben werden, auf denen der Randknoten liegt. Zur Referenzierung werden die Nummern der *Surfaces* und *Lines* aus der *lgm*-Datei sowie jeweils eine lokale Positionsinformation angegeben.

Innerhalb der *Surface* erfolgt die Positionierung eines Randknotens durch die Lokalisation innerhalb eines *Surface-D*reiecks. Diese Lokalisation wird mit den beiden lokalen Koordinaten x_l und y_l eines Referenzdreiecks beschrieben. Zugrundeliegend ist die Abbildung des *lgm-Surface*-Dreiecks P_0, P_1, P_2 auf ein Referenzdreieck mit den Koordinaten (0,0), (1,0) und (0,1) in der *xy*-Ebene (siehe Abb. 3.8).

Gemäß Gleichung (3.1) beschreiben die beiden lokalen Koordinaten x_l und y_l einen Punkt im *Surface-D*reieck durch konvexe Linearkombination [99]. So kann jede beliebige Dreiecksposition eines 3D *lgm-Surface*-Dreiecks mit dem lokalen Koordinatenpaar (x_l, y_l) im Referenzdreieck beschrieben werden. So gelten z.B. $P_0 \rightarrow (x_l, y_l) = (0, 0)$; $P_1 \rightarrow (x_l, y_l) = (1, 0)$; $P_2 \rightarrow (x_l, y_l) = (0, 1)$; $P_{12} \rightarrow (x_l, y_l) = (0.5, 0.5)$ und $P_{Sp} \rightarrow (x_l, y_l) = P_{Schwerpunkt} \rightarrow (x_l, y_l) = (1/3, 1/3)$;

$$P_i = (1 - x_l - y_l) \cdot P_0 + x_l \cdot P_1 + y_l \cdot P_2 \quad mit \quad 0 \le x_l, y_l, (1 - x_l - y_l) \le 1 \tag{3.1}$$

Neben den lokalen Koordinaten eines Randknotens muss bei der *Surface*-Positionierung auch noch angegeben werden, das wievielte Dreieck der jeweiligen *Surface* verwendet wird.

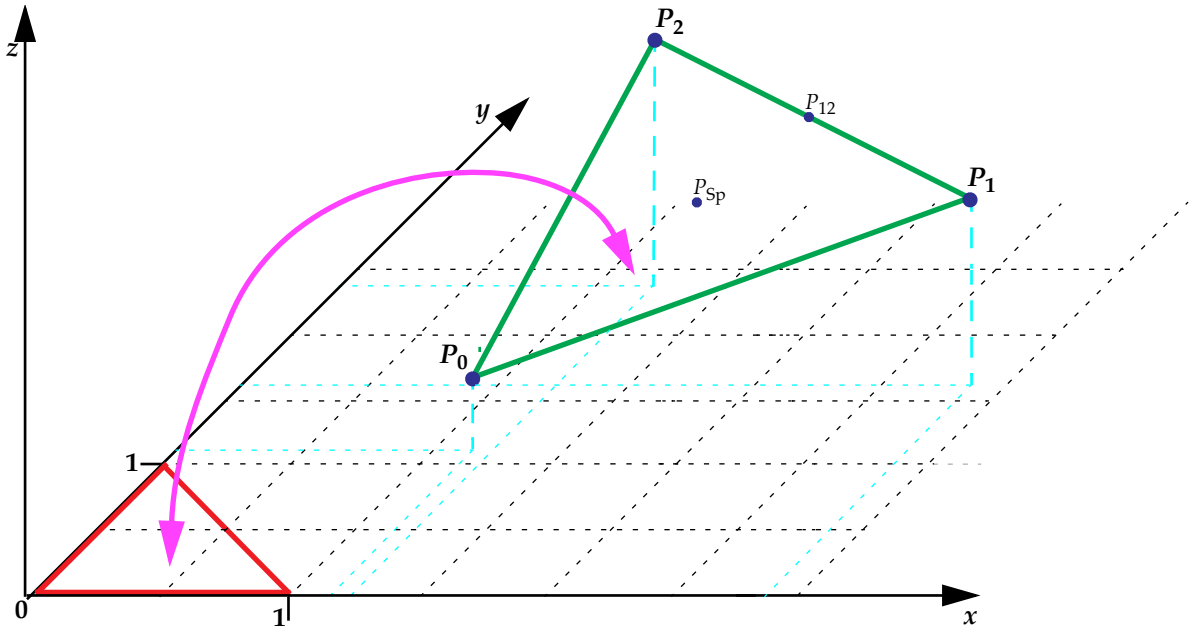


Abb. 3.8 Abbildung eines beliebigen 3D *lgm-Surface*-Dreiecks (grün) auf ein Referenzdreieck (rot) im Koordinatenursprung der *xy*-Ebene

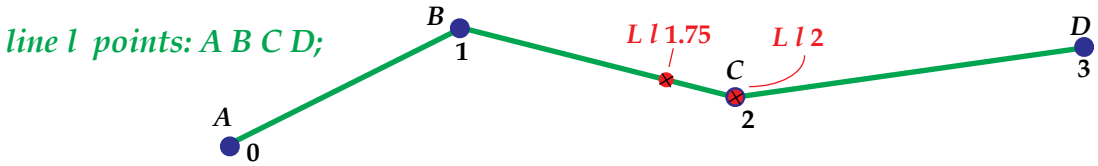


Abb. 3.9 Lokalisierung von Gitterknoten (rot) auf einer *lgm-Line l* (grün) bestehend aus mehreren *Line*-Punkten (blau)

Die *Line*-Positionierung erfolgt mit Hilfe der Indizierung der *Line*-Punkte von 0 bis *n*-1. Liegt ein Randknoten des Gitters genau auf einem *Line*-Punkt wird der entsprechende Index angegeben (siehe Abb. 3.9 → „*L l* 2“) Liegt ein Randknoten dagegen auf einer *Line* zwischen zwei *Line*-Punkten, dann wird mit linearer Interpolation ein dezimaler Zwischenwert berechnet, dessen Größe entsprechend den Abständen zum linken und zum rechten Nachbarpunkt auf der *Line* ist. (z. B. „*L l* 1.75“ in Abb. 3.9).

Bei der *Surface*- und *Line*-Positionierung muss ein *ng*-Randknoten nicht mit einem *lgm*-Punkt übereinstimmen. Ein *ng*-Randknoten kann sich an beliebiger Stelle eines *lgm*-Dreiecks oder einer *lgm-Line* befinden. Beispiele hierfür sind P_{12} und P_{Sp} in Abb. 3.8 sowie „*L l* 1.75“ in Abb.3.9.

Im Gegensatz zu Randknoten berühren **innere Knoten** den *lgm*-Rand nicht und werden ausschließlich mit Koordinateninformationen beschrieben.

Im dritten Abschnitt der *ng*-Datei (siehe Abb. 3.7 u. Abb. 3.10) werden die Gitterelemente mit Hilfe der Indizes ihrer Randknoten und der Indizes ihrer inneren Knoten aufgelistet. Die Elemente referenzieren also die Knoten. Die Knoten-Indizes entsprechen der Reihenfolge, in der sie in der *ng*-Datei angegeben sind: zuerst alle Randknoten von 0 startend durchnummeriert; danach alle inneren Knoten weiter durchnummeriert. Der Typ eines Gitterelements ist durch die Anzahl der angeführten Knotenindizes festgelegt. Bei 4 Indizes liegt ein Tetraeder, bei 5 eine Pyramide, bei 6 ein Prisma und bei 8 ein Hexaeder vor. Mit Ausnahme des Tetraeders ist bei allen Elementtypen eine bestimmte Knotenreihenfolge einzuhalten (siehe Abb. 3.6 und [207]). Alle Elementseiten, die auf dem Rand des *lgm*-Gebiets liegen, müssen mit dem Schlüsselwort „*F* ...“ extra aufgeführt werden.

Neben den Knoten referenziert jedes Element (unmittelbar nach dem Schlüsselwort „E“) auch noch eine ganz bestimmte *Subdomain* aus der zugehörigen *lgm*-Datei. Das ist genau die *Subdomain,* in der sich das Element befindet (siehe Pfeil von Gitterelemente auf *lgm*-Datei in Abbildung 3.7).

Für das *lgm*-Beispiel aus Abb. 3.3 wurde ein *ng*-Gitter erzeugt, bestehend aus zwei Hexaedern, fünf Prismen, zwei Pyramiden und einem Tetraeder.

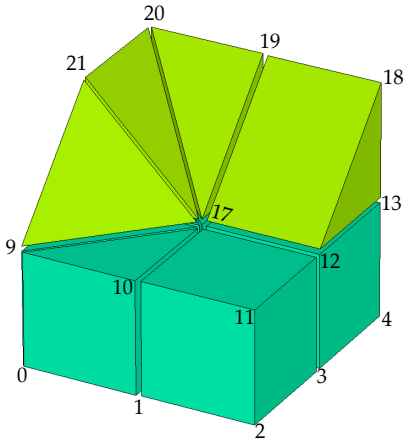
In Abb. 3.10 sieht man ein Listing der *ng*-Datei mit zwei ergänzenden Grafiken, die zur Veranschaulichung das Gitter grafisch mit den Knoten- und Elementindizes darstellen. Die beiden Grafiken entstanden mit dem Simulationswerkzeug *UG* nach Einlesen und Prüfen der *lgm*- und *ng*-Datei.

Innere Knoten kommen in diesem Gitter nicht vor (siehe „*# inner nodes*“ in Abb. 3.10). Sie werden aber zum Beispiel bei den Gittern für das Stratum corneum in Kapitel 5 benötigt.

Für weitere technische und syntaktische Details zum *ng*-Format sei auf [207 → Kap. 7], [44], [88] und auf [99] verwiesen.

```
# boundary nodes

B 0 0 0 # Knoten 0
S 0 0 0 0  S 1 0 0 0  S 4 0 0 0  L 0 0  L 3 2  L 4 0 ;
B 1 0 0 # Knoten 1
S 0 1 1 0  S 1 1 0 1  L 0 1 ;
B 2 0 0 # Knoten 2
S 0 3 1 0  S 1 3 0 1  S 2 0 0 0  L 0 2  L 1 0  L 5 0 ;
B 2 1 0 # Knoten 3
S 0 2 1 0  S 2 1 0 1  L 1 1 ;
B 2 2 0 # Knoten 4
S 0 7 1 0  S 2 3 0 1  S 3 3 1 0  L 1 2  L 2 0  L 6 0 ;
B 1 2 0 # Knoten 5
S 0 5 1 0  S 3 1 1 0  L 2 1;
B 0 2 0 # Knoten 6
S 0 4 0 1  S 3 0 0 0  S 4 3 1 0  L 2 2  L 3 0  L 7 0 ;
B 0 1 0 # Knoten 7
S 0 0 0 1  S 4 1 1 0  L 3 1 ;
B 1 1 0 # Knoten 8
S 0 0 1 0 ;
B 0 0 1 # Knoten 9
S 1 0 1 0  S 4 0 0 1  S 5 0 0 0  S 6 0 0 0  S 9 0 1 0  S 10 0 0 0  L 4 1  L 8 0  L 12 2  L 13 0  L 17 0 ;
B 1 0 1 # Knoten 10
S 1 0 0 1  S 5 0 0 1  L 8 1 ;
B 2 0 1 # Knoten 11
S 1 2 0 1  S 2 0 1 0  S 5 2 0 1  L 5 1  L 8 2  L 9 0 ;
B 2 1 1 # Knoten 12
S 2 0 0 1  S 5 1 0 1  S 6 3 0 1  S 7 0 0 0  S 12 1 0 1  L 9 1  L 10 0  L 14 1  L 21 0 ;
B 2 2 1 # Knoten 13
S 2 2 0 1  S 3 2 1 0  S 6 4 0 1  S 7 0 0 1  S 8 3 0 1  L 6 1  L 10 1  L 11 0  L 15 0 ;
B 1 2 1 # Knoten 14
S 3 0 1 0  S 6 2 0 1  S 8 1 0 1  L 11 1 ;
B 0 2 1 # Knoten 15
S 3 0 0 1  S 4 2 1 0  S 6 1 1 0  S 8 0 1 0  S 9 2 0 1  L 7 1  L 11 2  L 12 0  L 16 0;
B 0 1 1 # Knoten 16
S 4 0 1 0  S 6 0 1 0  S 9 0 0 1  L 12 1 ;
B 1 1 1 # Knoten 17
S 5 0 1 0  S 6 0 0 1  S 10 0 0 1  S 11 0 0 1  S 12 0 0 1  L 13 1  L 14 0  L 18 0  L 19 0 ;
B 2 2 2 # Knoten 18
S 7 0 1 0  S 8 2 0 0  S 12 2 0 1  L 15 1  L 21 1  L 22 0 ;
B 1 2 2 # Knoten 19
S 8 0 0 1  S 12 0 1 0  L 22 1 ;
B 0 2 2 # Knoten 20
S 8 0 0 0  S 9 1 0 0  S 11 0 1 0  S 12 0 0 0  L 16 1  L 19 1  L 20 1  L 22 2 ;
B 0 1 2 # Knoten 21
S 9 0 0 0  S 10 0 1 0  S 11 0 0 0  L 17 1  L 18 1  L 20 0 ;
```




```
# inner nodes

# elements <tetrahedra, pyramids, prisms, hexahedra)
E 1  8 3 4 5 17 12 13 14   F 8 3 4 5  F 3 4 13 12  F 4 5 14 13  F 17 12 13 14 ;  #0
E 2  12 13 18 17 14 19  F 12 13 18  F 17 12 18 19  F 18 19 14 13  F 17 12 13 14 ;  #1
E 1  1 2 3 8 10 11 12 17  F 1 2 3 8  F 1 2 11 10  F 2 3 12 11  F 10 11 12 17 ;  #2
E 1  0 1 8 9 10 17  F 0 1 8  F 9 10 17  F 0 1 10 9 ;  #3
E 1  0 8 7 9 17 16  F 0 8 7  F 9 17 16  F 0 7 16 9 ;  #4
E 2  9 17 21 16  F 9 17 21  F 9 17 16  F 9 16 21 ;  #5
E 1  6 7 8 15 16 17  F 6 7 8  F 15 16 17  F 6 7 16 15 ;  #6
E 1  5 6 8 14 15 17  F 5 6 8  F 14 15 17  F 5 6 15 14 ;  #7
E 2  15 16 21 20 17  F 15 16 21 20  F 20 21 17  F 15 16 17 ;  #8
E 2  14 15 20 19 17  F 14 15 20 19  F 20 19 17  F 14 15 17 ;  #9
```

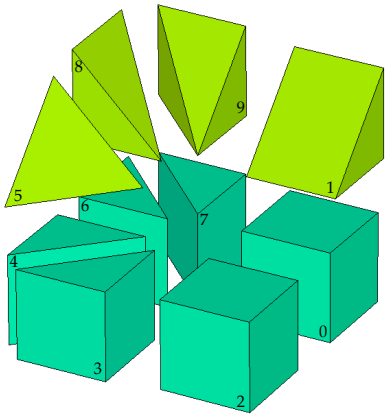


Abb. 3.10 Listing einer *ng*-Datei zum *lgm*-Beispiel aus Abb. 3.3; zur Veranschaulichung: Darstellung des Gitters mit Knotenindizes (rechts oben) und Elementindizes (rechts unten)

3.3 Flächenbasierte anstatt voxelbasierte Geometrie

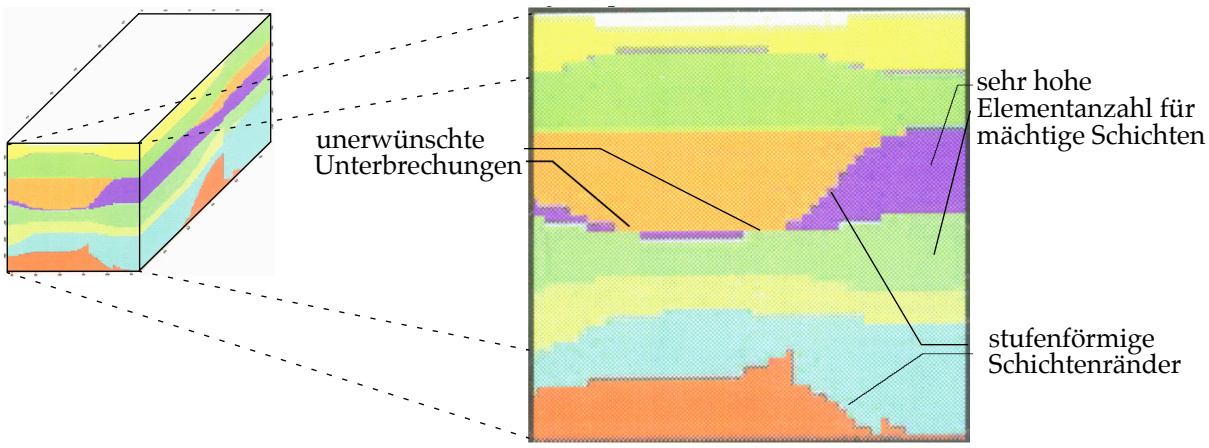


Abb. 3.11 Kritikpunkte am voxelbasierten Ansatz, Grafiken aus [191]

S. Houlding unterscheidet in seinem Buch „3D geoscience modeling“ (→[96]) mit „block based and surface based approaches“ zwei grundlegend verschiedene Konstruktionsprinzipien bei der geologischen Charakterisierung bzw. Modellbildung.

Beim blockbasierten Ansatz wird das Gebiet in quaderförmige Blöcke gleicher Größe aufgeteilt. Diese Blöcke werden „Voxel“ genannt. Jedes Voxel gehört genau einer Schicht an. Die Schichtzugehörigkeit wird mit geostatistischen Verfahren wie z. B. *Kriging* oder *Inverse Distance to a Power* für jedes einzelne Voxel berechnet [24, 35, 36, 140]. Eine sehr mächtige Schicht besteht folglich aus mehreren übereinanderliegenden Voxels. Die dünnste darstellbare Schicht hat als Mächtigkeit die Höhe eines Voxels.

Blockbasierte Methoden besitzen mit ihren quaderförmigen Einzelbausteinen einige Nachteile (siehe Abb. 3.11): Die Voxeltechnologie führt zu unerwünschten Unterbrechungen bei geringmächtigen Schichten. Ausstreichende Schichten haben oftmals außerhalb des zusammenhängenden Gebietes noch einzelne, abgesprengte Voxels, die keinen Kontakt zum Hauptgebiet haben. Bei mächtigen Schichten sind unverhältnismäßig viele Voxels notwenig, was zu einem extremen Speicheraufwand führt. Außerdem entstehen bei der blockbasierten Vorgehensweise stufenförmige Schichtenränder.

Flächenbasierte Ansätze haben dagegen einen kontinuierlichen Schichtenverlauf. Ein entsprechendes Schichtenmodell wird durch seine Randflächen repräsentiert. Dabei betrachtet man Flächen, die einzelne Schichten voneinander trennen. Aus diesen Trennflächen wird ein dreidimensionales Modell des Gesamtgebiets erzeugt, das später mit 3D Elementen vernetzt werden kann. Um eine Trennfläche aus gegebenen Messwerten zu erzeugen, können ebenfalls geostatistische Interpolations- oder Approximationsverfahren wie *Kriging* (→ Kap. 4.2.2) oder *Inverse Distance to a Power* (→ Kap. 4.2.1) verwendet werden, die dann allerdings Trennflächenpunkte anstatt Voxelzugehörigkeiten berechnen.

Es wäre sehr aufwendig, die zahlreichen und teilweise zusammenhangslosen Voxels in das *Subdomain-Surface*-Konzept des *UG-lgm*-Formats umzuwandeln. Wie in Kap. 3.1 vorgestellt, ist das *lgm*-Format von *UG* auch nicht voxel- sondern flächenbasiert. Die schichtentrennenden Flächen sind charakteristisch für die *lgm*-Geometriebeschreibung. Aus den genannten Gründen wird daher die flächenbasierte („surface based approach“) Vorgehensweise in Kapitel 4 verfolgt und dem Voxelansatz vorgezogen.

3.4 Gitter mit günstigen Winkeln und möglichst vielen Hexaedern

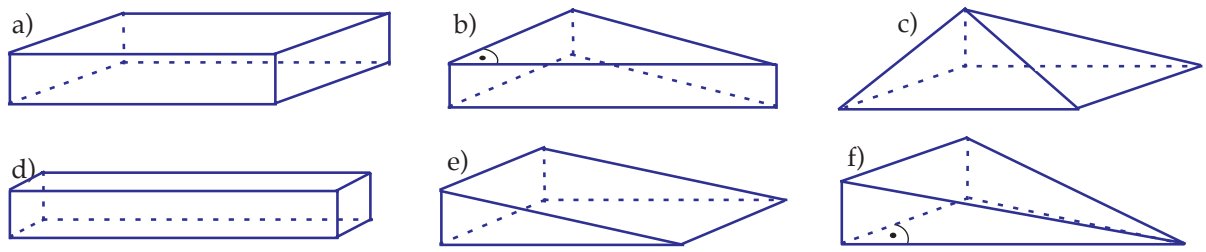


Abb. 3.12 Verschiedene anisotrope Hexaeder, Prismen und Pyramiden; keine stumpfen Winkel bei a), b), d), e), f); keine spitzen Winkel bei a), b), d)

Viele Autoren bezeichnen zu kleine oder zu große Elementwinkel unter gewissen Umständen als qualitätsschädigend [2, 4, 55, 58, 128, 189, 192, 218].

So führt z.B. ein ideales Netz zu einem idealen 5-Punkt-Stern „(0 -1 0), (-1 4 -1), (0 -1 0)“ wohingegen bei Winkeln > 90° ein 5-Punkt-Stern „(ε -1 ε), (-1 4 -1), (ε -1 ε)“ entsteht, bei dem ε für große Winkel nahe 180° gegen ∞ geht.

Die Frage nach guten Gitterelementen wird schon lange behandelt [4] und ist noch immer aktuell [189]; denn bereits ein einziges schlechtes Element kann die Genauigkeit oder Geschwindigkeit von numerischen Berechnungen drastisch verschlechtern.

Jonathan Shewchuk behandelt in seinem 70-seitigen öffentlichen Preprint „What is a good linear finite element“ diese Fragestellung ausführlich und regt zur Diskussion dieser Thematik an [189].

Shewchuks Arbeit (siehe auch Kap. 6.5) basiert auf den Grundlagen des Interpolationsfehlers, der Kondition der Steifigkeitsmatrix und des Diskretisierungsfehlers und berücksichtigt auch den Aspekt der Anisotropie bei PDGen. Denn je nachdem, welche partielle Differentialgleichung betrachtet wird, ist es von Vorteil, wenn die Gitterelemente eine ganz bestimmte Anisotropie und Ausrichtung besitzen. Sinnvollerweise werden Elemente erzeugt, die in Richtung des Gradienten der Lösung einen vergleichsweise kleinen Knotenabstand besitzen. In einer Richtung, in der sich die Lösung kaum ändert, benötigt man dagegen nur wenige Gitterknoten und die Elemente können in dieser Richtung eine große Ausdehnung haben.

In Shewchuks Arbeit spielen die Winkeleigenschaften von Gitterelementen eine wichtige Rolle. Extrem große dihedrale Winkel nahe 180° oder extrem kleine dihedrale Winkel nahe 0° führen unter Umständen zu Schwierigkeiten. So können spitze Winkel nahe 0° für die Konditionierung der Steifigkeitsmatrix schädlich sein und Winkel nahe 180° Nachteile bzgl. des Interpolationsfehlers mit sich bringen [189]. K. Johannsen stellt in [102] fest, dass Winkel > 160 ° die Approximation deutlich verschlechtern.

Bei unstrukturierten Tetraedergittergeneratoren entstehen für anisotrope Schichtengebiete häufig Elemente, die extreme Winkel nahe 180° oder 0° besitzen.

Die spitzen Winkel nahe 0° können bei Tetraedernetzen überhaupt nicht vermieden werden.

Die stumpfen Elementwinkel nahe 180° können bei Tetraedernetzen nur dann vermieden werden, wenn man sich auf ganz spezielle Tetraeder der Art Abb. 3.13d-f beschränkt. Das sind Tetraeder, die beliebig flach werden können, ohne dass dabei ein riesiger dihedraler Winkel entsteht. Eine Verwendung solcher Elemente läuft dann jedoch auf eine große Elementanzahl und einen eher strukturierten Ansatz hinaus.

Bei einem unstrukturierten Tetraedernetzgenerator (wie *ART* [62]) kann man sich lediglich so behelfen, dass extrem dünne Schichten eines Gebiets mit vertikal orientierten Prismen der Art Abb. 3.12b anstatt mit Tetraedern vernetzt werden (→ *ARTE* [63, 64]). Solche Prismen besitzen keine Winkel nahe 180°.

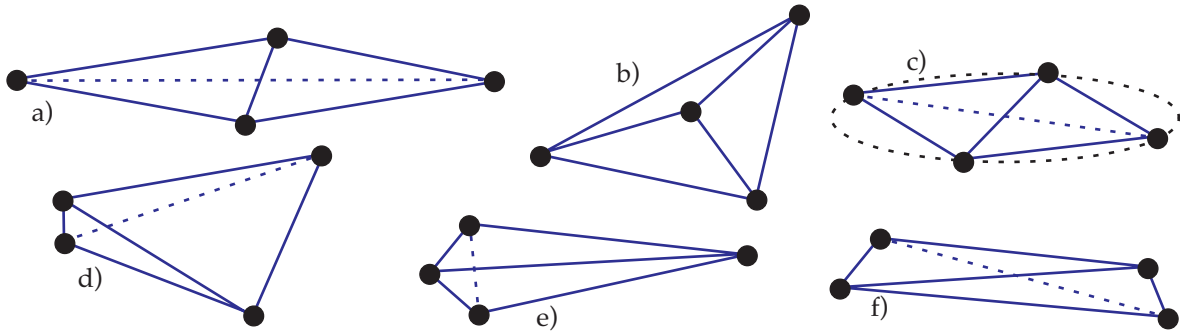


Abb. 3.13 Verschiedene anisotrope Tetraeder: a) spindle, b) cap, c) sliver, d) pancake, e) needle/thorn, f) wedge. → Bezeichnungen nach [189], keine stumpfen Winkel bei d), e), f)

In dieser Arbeit wird eine Vernetzungsmethode mit Hexaedern der Art Abb. 3.12a vorgeschlagen. Damit können große dihedrale Winkel nahe 180° und auch spitze Winkel nahe 0° vermieden werden (siehe Kapitel 4). Falls eine Schicht ausstreicht oder ausbeißt (siehe in Abb. 2.1 oder Abb. 2.2) und extrem spitze Winkel quasi durch die Geometrie des Gebiets vorgegeben sind, können die Winkel nahe 0° natürlich nicht vermieden werden. Dann müssen Prismen der Art Abb. 3.12e anstatt Hexaedern verwendet werden.

Um dieselbe Genauigkeit zu erreichen, werden mit Hexaedernetzen vergleichsweise weniger Elemente benötigt als mit Tetraedern. Mehrere Studien belegen dies [12, 30]. Unter anderem sind die Eigenwerte der Steifigkeitsmatrix bei Tetraedern größer als bei Hexaedern. Bei einer Untersuchung der nichtlinearen Elastoplastizität in [30] schneidet ein Hexaedermodell mit linearen Ansatzfunktionen sogar besser ab als ein Tetraedermodell mit quadratischen Ansatzfunktionen.

Weniger Hexaeder bedeuten weniger Knoten und damit weniger Freiheitsgrade. Das führt zu kürzeren Laufzeiten bei der Finiten Elemente Methode sowie beim Postprozess und bei der Visualisierung [156].

Hexahedrale Elemente können besser als Tetraeder an Lösungen von anisotropen PDGen angepasst werden und entsprechend ausgerichtet werden. So eignen sie sich bspw. sehr gut bei Navier-Stokes Gleichungen, wenn man sie senkrecht zum Fluss ausrichtet [97]. Hexaedernetze bieten bessere Approximationseigenschaften und ermöglichen bilineare Ansatzfunktionen.

Das Ziel dieser Arbeit besteht darin, *ng*-Gitter mit möglichst vielen Hexaedern und Elementen mit guten Winkeleigenschaften für die anisotropen Schichtengebiete zu erzeugen. Außerdem wird nach Möglichkeiten gesucht, die Anisotropie der Gitterelemente beschreiben und berechnen zu können. Das ist wichtig, weil bei der Simulation von PDGen wie eingangs erwähnt neben der Form der Elemente auch die Größe und die Richtung ihrer Ausdehnung eine entscheidende Rolle spielen ([189] → „shape and size“).

Es ist zu beachten, dass bei der Erzeugung von groben Gittern für anisotrope Schichtengebiete typischerweise sehr flache Gitterelemente entstehen bzw. Elemente, die ebenfalls anisotrope Geometrieeigenschaften besitzen.

Die erzeugten Geometrien und Gitter für das Simulationswerkzeug *UG* müssen im *lgm*-Format (Kap. 3.1) bzw. im *ng*-Format (Kap. 3.2) zur Verfügung gestellt werden.

Kapitel 4

Methoden zur Erfassung von anisotropen Geoschichtungen

Für geowissenschaftliche Simulationen von dichtegetriebenen Grundwasserströmungen oder Grundwassermigrationen sollen Geometriemodelle mit möglichst guten Gittern erstellt werden.

Die betrachteten Gebiete sind stark anisotrope Schichtungen und weisen alle extrem große Abmessungen in horizontaler Richtung gegenüber sehr kleinen Abmessungen in vertikaler Richtung auf.

Zunächst wird das Softwarewerkzeug *lgm2ng* vorgestellt, das mit vertikalen Elementkanten und vertikalen Elementseiten für 2D und 2.5D brauchbare *UG*-Geometrien und *UG*-Gitter mit günstigen Winkeleigenschaften erstellen kann (→Kap. 4.1).

Bei der 3D-Geometriemodellierung stellt die Realisierung der Trennflächen zwischen einzelnen Schichten eine besondere Herausforderung dar. Typischerweise stehen nämlich nur einige Bohrlochinformationen zur Verfügung und die realen unterirdischen Schichten können in der Praxis nicht exakt vermessen werden. Deshalb werden geostatistische Verfahren wie *Inverse Distance to a Power* und *Kriging* eingesetzt, mit Hilfe derer die Trennflächen aus den Bohrlochinformationen approximiert werden (→Kap. 4.2).

Die geschätzten Werte werden auf zugrundeliegenden Basisgittern mit *N*x*M*-Struktur erhoben. Die Erstellung solcher Tensorproduktgitter ist für Gebiete mit komplexem Grundriss nicht trivial (→Kap. 4.3).

Bei den extrem langen und dünnen Schichten kann es leicht vorkommen, dass sich die modellierten *N*x*M*-Trennflächen an manchen Stellen schneiden. Um dies zu vermeiden, wird ein Konzept vorgestellt, bei dem Schichten mit Mächtigkeitswerten anstelle von absoluten Höhenwerten beschrieben werden (→Kap. 4.4).

Für spezielle Schichten deren Mächtigkeiten stark variieren, erfolgt eine Aufteilung mit zusätzlichen Trennflächen in homogene Abschnitte (→Kap. 4.5).

Zwischen den Trennflächen werden Gitterelemente erzeugt. Dabei muss eine Vielzahl von Sonderfällen berücksichtigt werden, um die auftretenden Ausstreichungen von Schichten konsistent zu erfassen (→Kap. 4.6).

Um die Geometrien und Gitter gut einlesen zu können und eine übersichtliche Darstellung zu erhalten, müssen Randflächen sinnvoll zusammengefasst werden (→Kap. 4.7).

4.1 *lgm2ng* - günstige Winkel mit vertikalen Kanten

Bisherige Dreiecks- und Tetraedergittergeneratoren erzeugen für horizontal ausgerichtete Geoschichtengebiete häufig große Elementwinkel nahe 180° und spitze Winkel nahe 0°. Dies ist insbesondere bei groben Maschenweiten der Fall (siehe Abb. 4.1 oben). Es besteht der Wunsch, über ein Werkzeug zu verfügen, das brauchbare Gitterelemente erzeugt, deren Winkel möglichst nahe 90° liegen und auf keinen Fall extreme Werte nahe 180° oder 0° aufweisen.

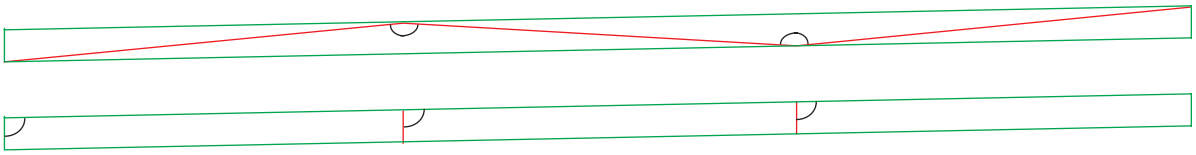


Abb. 4.1 Vermeidung extremer Elementwinkel durch Verwendung vertikaler Kanten

Die Gebiete der verschiedenen Anwendungsprobleme in Kapitel 2 besitzen die Eigenschaft, dass die horizontalen Abmessungen der Schichten deutlich größer sind als die vertikalen Abmessungen. Der Anstieg oder das Gefälle solcher Schichten ist meist sehr gering und sie verlaufen typischerweise in horizontaler Richtung (→ Abb. 4.1).

Verwendet man für derartige Gebiete ausschließlich **vertikale Kanten** bei der Gittererzeugung, so entstehen Gitterelemente, deren größte Elementwinkel meist nur wenig über 90° liegen (→ Abb. 4.1 unten). Auch extrem spitze Winkel können größtenteils* vermieden werden.

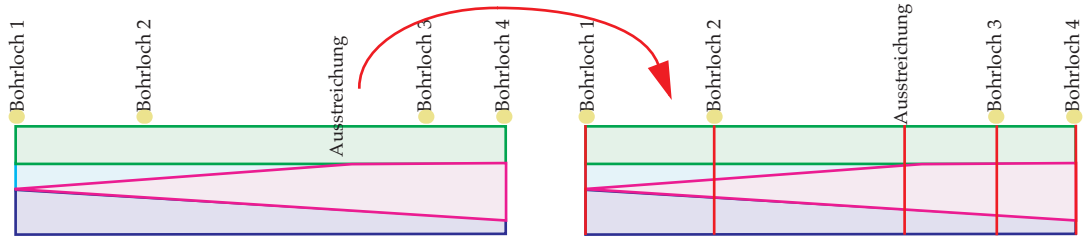


Abb. 4.2 Erzeugung von 12 Vierecken und 2 Dreiecken mit *lgm2ng*

Mit dieser Methode entstehen für Geoschichtengebiete hybride Netze, die größtenteils aus Vierecken bestehen und im Falle von Schichtausstreichungen zusätzlich aus einigen Dreiecken (→ Abb. 4.2).

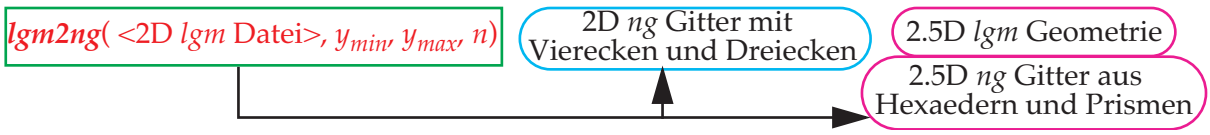


Abb. 4.3 Input und Output der Methode *lgm2ng*

Aus der Idee, vertikale Kanten zu verwenden, entstand das Perl-Programm *lgm2ng* (siehe Abb. 4.3). Es liest als Input eine 2D Geometriebeschreibung im *lgm* Format ein und erzeugt an allen gegebenen Messpunkten (in der Regel Bohrlochmessungen („well logging“)) sowie an allen Ausstreichungen vertikale Kanten (→ Abb. 4.2). Das entstehende hybride Netz aus Dreiecken und Vierecken wird als 2D Gitterdatei im *ng*-Format ausgegeben. Zusammen mit der 2D *lgm*-Geometriedatei kann diese *ng*-Datei für 2D Rechnungen in *UG* genutzt werden.

* Bei Ausstreichungen von Schichten können extrem spitze Winkel nicht vermieden werden, da sie durch die Geometrie vorgegeben sind.

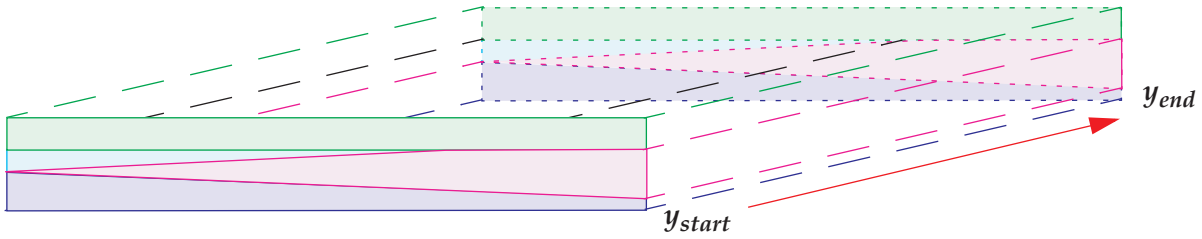


Abb. 4.4 Protrusion der 2D-*lgm*-Geometrie in die dritte Raumdimension

Anschließend wird aus der 2D Geometrie mit einer Protrusion vom Startwert y_{start} bis zum Endwert y_{end} eine 2.5D *lgm*-Geometrie erzeugt (→ Abb. 4.4).

Danach wird ebenfalls durch Protrusion aus dem 2D Gitter ein zugehöriges 2.5D Gitter erzeugt. Zu jedem Dreieck der 2D-Datei werden n Prismen bzw. zu jedem Viereck der 2D-Datei werden n Hexaeder erzeugt (→ Abb. 4.3). Der Parameter n beschreibt die Anzahl der Elemente in die dritte Raumdimension (hier y-Richtung). Die Maschenweite bzgl. der dritten Raumdimension beträgt $(y_{end} - y_{start})/n$ (→ Abb. 4.5). Für das hybride 2.5D Gitter gelten die selben positiven Winkeleigenschaften wie für den 2D-Fall. Das 2.5D Gitter wird ebenfalls als *ng*-Datei ausgegeben.

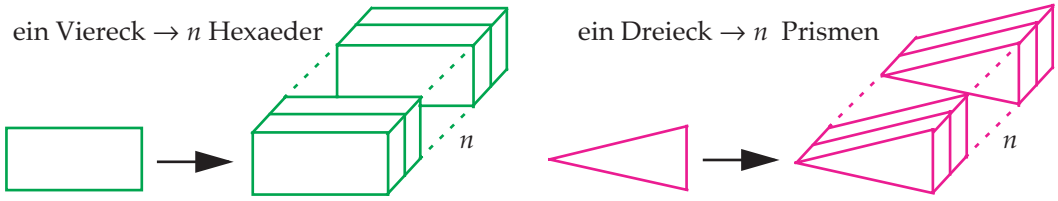


Abb. 4.5 Protrusion des 2D-*ng*-Gitters in die dritte Raumdimension mit n Elementen

Neben dem 2D-*ng*-Gitter erzeugt *lgm2ng* also auch ein erstes einfaches dreidimensionales „*lgm*-*ng*-Paar“, das für Rechnungen mit *UG* genutzt werden kann (→Abb. 4.3).

Mit dem in *lgm2ng* realisierten Verfahren können für zahlreiche Modellgebiete und praxisrelevante Beispiele wie das „WIPP-Domain“ (→Kap. 2.2) oder das Gebiet „*komplex*“ (→Kap. 2.3) brauchbare Geometrien und Gitter mit geeigneten Winkeleigenschaften erzeugt werden [44, 177] (→ Kap. 7.1 und Kap. 7.2).

Die entscheidende Idee, durch Verwendung vertikaler Kanten für horizontal ausgerichtete Schichtengebiete günstige Elementwinkel zu erzeugen, wird auch im weiteren Verlauf dieser Arbeit genutzt (→Kap. 4.6).

4.2 Trennflächen zwischen Geoschichten in 3D

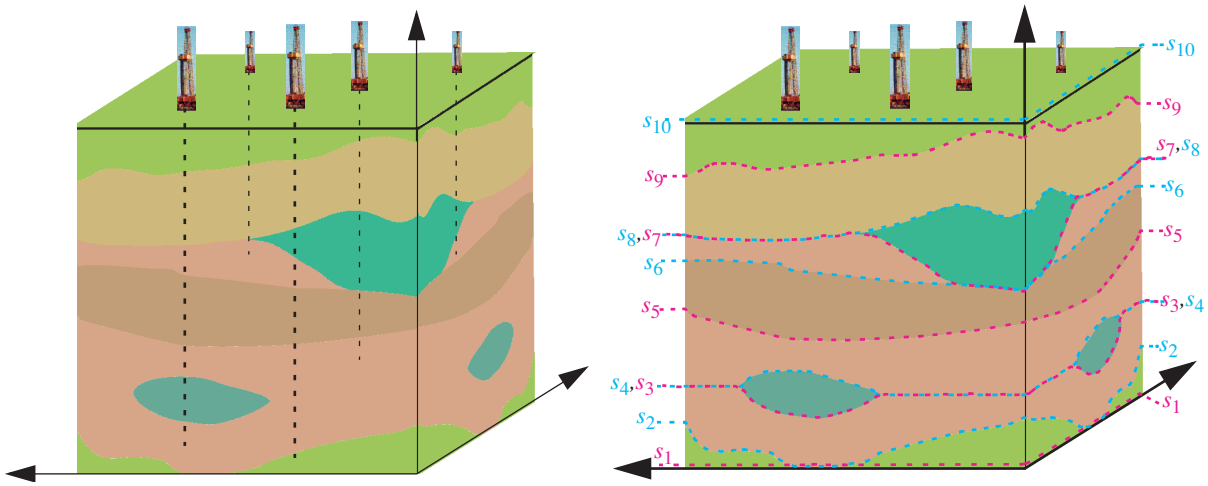


Abb. 4.6 Zerlegung eines Schichtengebiets mit den Trennflächen s_1, s_2, ..., s_{10}

Der unterirdische Verlauf einzelner geologischer Schichten eines dreidimensionalen Gebiets lässt sich nicht exakt bestimmen. Es muss eine möglichst gute Approximation gefunden werden [152, S. 2]. Dazu werden in einem ersten Schritt Trennflächen s_i ermittelt, die die aneinanderangrenzenden Schichten des Gebiets sinnvoll voneinander trennen (siehe Abb. 4.6).

Eine Trennfläche s_i verläuft im Wesentlichen in horizontaler Richtung und erstreckt sich über den gesamten Bereich des Gebiets. Zwischen zwei übereinanderliegenden Trennflächen s_i und s_{i+1} befindet sich die Schicht L_i.

Die betrachteten Gebiete bestehen nur im Idealfall aus Schichten, die überall Mächtigkeiten gleicher Größenordnung aufweisen. Oft variiert die Schichtdicke und kann stellenweise extrem klein werden. Insbesondere an solchen geringmächtigen Stellen ist darauf zu achten, dass sich die erzeugten Trennflächen nicht gegenseitig schneiden (→ Kap. 4.4).

Insbesondere für ausstreichende Schichten, die stellenweise vollständig verschwinden, müssen solche „Überschwinger“ vermieden werden. In diesem Fall unterscheiden sich s_i und s_{i+1} lediglich dort wo die Schicht L_i existiert. Überall sonst müssen s_i und s_{i+1} identisch sein.

Für den Fall, dass Schichten Einschlüsse (auch Linsen genannt) besitzen, muss die umgebende Schicht durch Trennflächen oberhalb und unterhalb der Linse in 2 Schichten getrennt werden.

In Abb. 4.6 wird das Gebiet mit 10 Trennflächen s_1 bis s_{10} unterteilt. Einige Schichten sind durchgängig und können mit zwei vollständig übereinanderliegenden Trennflächen beschrieben werden (s_5 u. s_6, s_8 u. s_9, s_9 u. s_{10}). Es gibt aber auch Ausstreichungen bzw. Schichten, deren Trennflächen teilweise identisch sind (s_1 u. s_2, s_6 u. s_7, s_7 u. s_8). Ferner gibt es den Spezialfall wie z.B. bei der zweituntersten Schicht, die aufgrund von Einschlüssen in zwei Subschichten gesplittet werden muss (s_2 u. s_3, s_4 u. s_5).

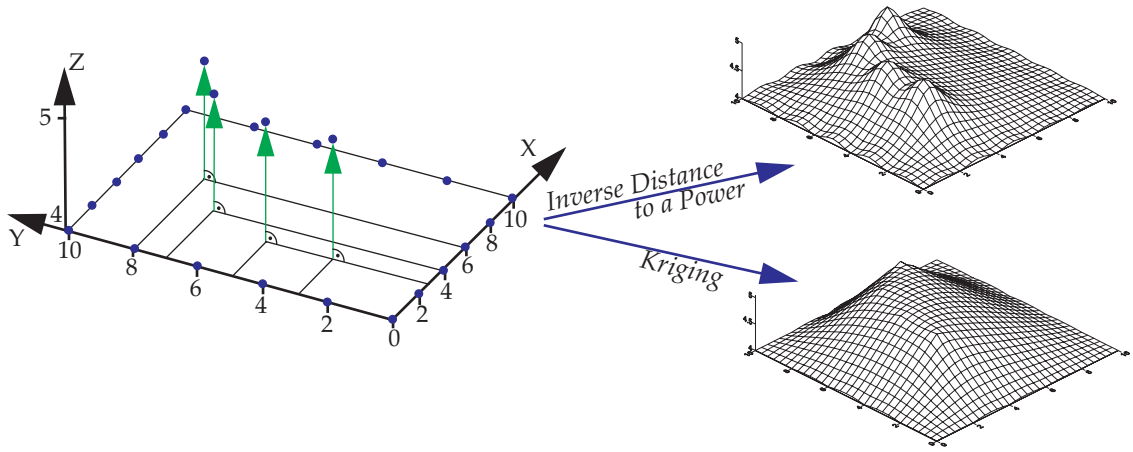


Abb. 4.7 Zwei verschiedene Approximationen regelmäßiger Trennflächen aus unregelmäßig verteilten Eingangsmesswerten; die Inputdaten sind (3,3,5); (3,5,5); (4,7,5); (6,8,5); (0,0,4); (2,0,4); (4,0,4); (6,0,4); (8,0,4); (10,0,4); (0,10,4); (2,10,4); (4,10,4); (6,10,4); (8,10,4); (10,10,4); (0,2,4); (0,4,4); (0,6,4); (0,8,4); (10,2,4); (10,4,4); (10,6,4) und (10,8,4)
→ Datensätze werden auch in Abb. 4.8, 4.9 und 4.10 verwendet

Es stellt sich die Frage, wie eine einzelne Trennfläche verläuft. Oft sind nur wenige und meist unregelmäßig über das Untersuchungsgebiet verstreute Messpunkte (x_i, y_i, z_i) gegeben. Bei Geoschichtungen sind das in der Regel Messwerte aus Bohrkernen wie in Abb. 4.6 angedeutet.

Nun ist eine Oberfläche gesucht, die durch die gegebenen Messpunkte verläuft. Dazu werden Schätzwerte auf einem zugrunde liegenden kartesischen *N*x*M* Rechtecksgitter erhoben. In Spezialfällen kann dieses Gitter auch aus beliebigen konvexen Vierecken bestehen, sofern das Gitter eine *N*x*M* Struktur besitzt (siehe Kap. 4.3).

Bei der Berechnung der Schätzwerte muss man durch eine geeignete Strategie mit den gemessenen Daten, Werte an Stellen vorhersagen, an denen nicht gemessen wurde. Das Ziel besteht darin, eine Interpolation oder Approximation der Trennfläche zu erzielen, die der Realität möglichst nahe kommt.

Man spricht hier auch von „Regionalisierung“ und versteht darunter in der Geostatistik die Übertragung von Punktdaten auf die Fläche. Regionalisierung ist überall dort von großer Wichtigkeit, wo Daten punktuell, also stichprobenartig, aufgenommen werden und anschliessend flächenhaft dargestellt werden sollen.

Verschiedene Verfahren und Einstellungen können dabei allerdings zu ganz unterschiedlichen Ergebnissen führen (siehe z. B. in Abb. 4.7). Deshalb ist es ratsam, bei der Methodenwahl und den Parametereinstellungen Experten aus den Geowissenschaften zu konsultieren, um möglichst realitätsnahe Trennflächen zu erzielen.

Im Rahmen dieser Arbeit kommt die Software *Surfer* [194] von *Goldensoftware* zum Einsatz, in der verschiedene geostatistische Verfahren implementiert sind.

Zwei recht bekannte Verfahren sind *Inverse Distance to a Power* und das *Kriging*-Verfahren. Diese beiden Verfahren sollen nun näher erläutert werden.

4.2.1 *Inverse Distance to a Power*

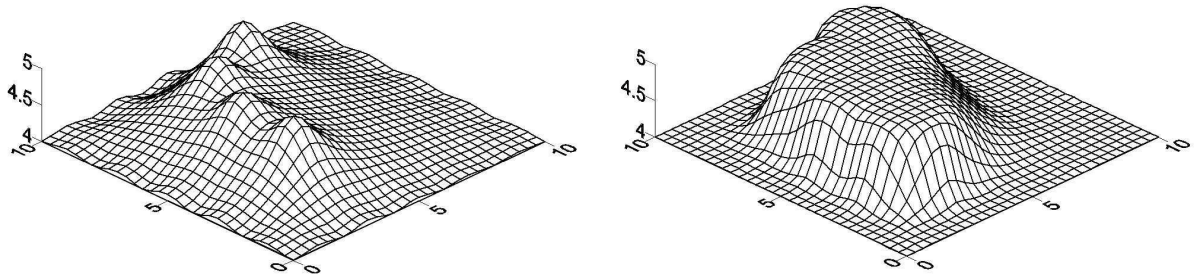


Abb. 4.8 *Inverse Distance to a Power* **mit β=2 (links) und β=5 (rechts) für die Messstellen aus Abb. 4.7; Bullaugeneffekt bei β=5.**

Bei *Inverse Distance to a Power* [194] bekommt ein unbekannter Punkt P ein gewichtetes Mittel gegebener Punktwerte zugewiesen.

Die Methode ist ein gewichtender Interpolator, der exakt oder geglättet ausgeführt werden kann. Die gegebenen Punktinformationen werden so gewichtet, dass der Einfluß eines Punktes mit wachsendem Abstand zu dem gerade zu berechnenden Knoten abnimmt (auch „inverse Distanzwichtung“ genannt). Der wichtigste Parameter ist der Exponent β. Je höher β, desto geringer ist der Einfluss entfernter Messpunkte.

Die Formel für die Berechnung des Funktionswertes $\hat{Z}_P$ an einem Knoten P bei n gegebenen Messstellen M_i mit den Funktionswerten Z_i verwendet die effektiven Abstände h_{iP}. Zur Berechnung des i-ten h_{iP} verwendet man den Glättungsparameter δ sowie den realen Abstand d_{iP} zwischen dem Gitterknoten P und dem i-ten Messpunkt M_i ($\rightarrow$ Gl. (4.1)).

$$\hat{Z}_P = \frac{\sum_{i=1}^{n} \frac{Z_i}{h_{iP}^{\beta}}}{\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{h_{iP}^{\beta}}}, \qquad h_{iP} = \sqrt{d_{iP}^2 + \delta^2} \tag{4.1}$$

Bei *Inverse Distance to a Power* erhält jeder Messpunkt Z_i ein Gewicht zwischen 0 und 1. Die Summe der Gewichte ergibt 1. Falls ein Messpunkt M_P mit einem zu berechnenden Knotenpunkt P bzgl. der xy-Koordinaten zusammenfällt, haben die beiden einen Abstand von 0. In diesem Fall wird für P der selbe Z-Wert wie bei M_P verwendet (aber nur wenn $\delta = 0$ ist). Es kommt zu einer interpolativen Approximation. M_P wird mit 1 gewichtet und alle anderen Messpunkte mit 0.

Setzt man dagegen den Glättungsparameter $\delta \neq 0$, liegt keine Interpolation mehr vor und es gibt kein Gewicht der Größe 1.

Bei *Inverse Distance to a Power* kann es zu einem unerwünschten „Bullaugeneffekt“ kommen (siehe Abb. 4.8 rechts). Außerdem hat *Inverse Distance to a Power* Schwierigkeiten mit unregelmäßig verteilten Daten und es können keine Redundanzen erkannt werden.

4.2.2 *Kriging*

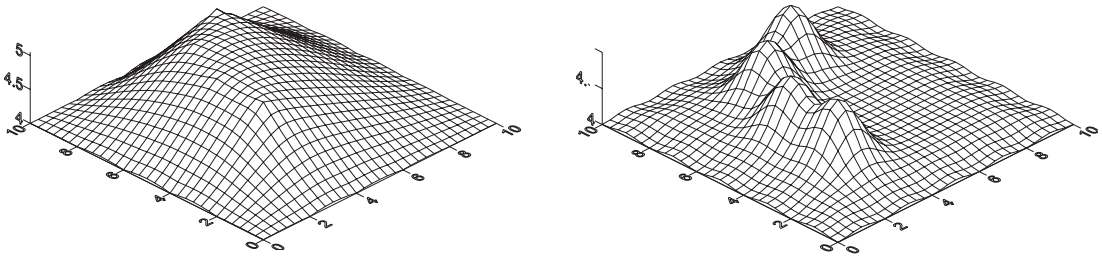


Abb. 4.9 ***Kriging*** **mit linearem Variogramm (links) und Gaußschem Variogramm (rechts); Messstellen gemäß Abb. 4.7**

Kriging hat seine Ursprünge in den 40er und 50er Jahren, als der Goldbergbau am Witwatersrand boomte (Höhenzug im nordöstlichen Südafrika (→Johannesburg)). Dort war das größte Goldvorkommen der Welt zu finden (45 g/t Quarzgestein). Der südafrikanische Bergbauingenieur D. G. Krige leistete in jener Zeit ganz entscheidende Beiträge zur Vorhersage des Goldvorkommens [119].

Die heute unter dem Namen *Kriging* verwendete Methode der Geostatistik wurde erst in den 60er Jahren von dem Franzosen Matheron et al. entwickelt. Wichtige Teile gehen jedoch auf die Arbeiten von Krige zurück und das würdigte Matheron als er 1963 die neuen Verfahren „*Kriging*-Verfahren" nannte [35, 36, 140].

Im Gegensatz zum *Inverse Distance to a Power* Ansatz, bei dem sich die Gewichtungen der einzelnen Stützpunkte mit Hilfe der inversen Abstände zur jeweiligen Schätzstelle ergeben, sind beim *Kriging* die Gewichtungen w_i durch Lösen eines linearen Gleichungssystems zu erhalten. *Kriging* ist somit aufwendiger und rechenintensiver, hat aber keinen „Bullaugeneffekt" und kann Trends in Daten viel besser erkennen. Dies gelingt, weil durch Einsatz eines Semivariogramms (→S. 40, 41) zusätzliche Informationen aus der räumlichen Korrelation der Meßdaten Einfluss haben.

Kriging kann im Gegensatz zu *Inverse Distance to a Power* auch bei einer unregelmäßigen Verteilung der Messpunkte gute Ergebnisse erzielen. Die Gewichte von „geclusterten" * Messpunkten fallen klein aus, wohingegen einzeln auftretende Messpunkte, die von anderen weit entfernt sind, hohe Gewichtungen erhalten.

Dieser Vorteil von *Kriging* gegenüber *Inverse Distance* wird im folgenden Experiment deutlich, bei dem zu den 24 Stützpunkten aus Abb. 4.7 zusätzlich 46 weitere Datensätze hinzukommen, die alle in der Nähe bzw. zwischen den 4 inneren Stützpunkten (grüne Pfeile in Abb. 4.7 links) liegen und nahezu keine neuen Informationen über die zu approximierende Fläche liefern. Ein solcher Fall ist in der Praxis sehr häufig und wird Datenredundanz oder „Messpunkt-Clustering" genannt (siehe Abb. 4.10).

Die zusätzlichen Datensätze sind: (2.9, 2.9, 5); (3.1, 3.1, 5); (3.1, 3.2, 5); (2.9, 3.3, 5); (2.9, 3.4, 5); (3.1, 3.5, 5); (3.1, 3.6, 5); (2.9, 3.7, 5); (2.9, 3.8, 5); (3.1, 3.9, 5); (3.1, 4.1, 5); (3.1, 4.2, 5); (2.9, 4.3, 5); (2.9, 4.4, 5); (3.1, 4.5, 5); (3.1, 4.6, 5); (2.9, 4.7, 5); (2.9, 4.8, 5); (3.1, 4.9, 5); (3.05, 5.1, 5); (3.1, 5.2, 5); (3.1, 5.3, 5); (3.1, 5.4, 5); (3.2, 5.5, 5); (3.3, 5.6, 5); (3.3, 5.7, 5); (3.34, 5.8, 5); (3.4, 5.9, 5); (3.5, 6.1, 5); (3.5, 6.2, 5); (3.6, 6.3, 5); (3.6, 6.4, 5); (3.7, 6.5, 5); (3.7, 6.6, 5); (3.8, 6.7, 5); (3.8, 6.8, 5); (3.9, 6.9, 5); (4.1, 7.1, 5); (4.2, 7.2, 5); (4.4, 7.3, 5); (4.6, 7.4, 5); (4.8, 7.5, 5); (5, 7.6, 5); (5.2, 7.7, 5); (5.4, 7.8, 5) und (5.6, 7.9, 5).

* angehäufte Messpunkte, d.h. unverhältnismäßig viele dicht beieinander

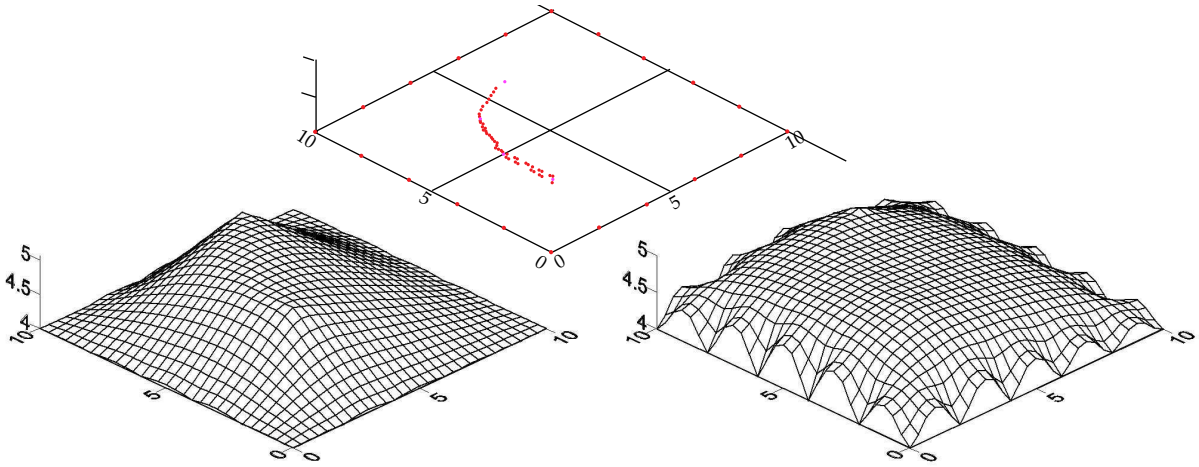


Abb. 4.10 ***Kriging*** **(links) contra** ***Inverse Distance to a Power*** **(rechts) bei „Messpunkt-Clustering“; in der Mitte: Verteilung der Messstellen**

Die unterschiedlichen Auswirkungen des „Messpunkt-Clustering“ auf die beiden Verfahren kann man in Abb. 4.10 sehen. Links erkennt man, dass die zusätzlichen Punkte beim *Kriging* keine negative Auswirkung haben. Die approximierte Fläche unterscheidet sich kaum von der Fläche aus Abb. 4.9 links. Beim *Inverse Distance to a Power* Ansatz (Abb. 4.10, rechts) dagegen führen die neuen Messpunkte zu einem völlig anderen Approximationsergebnis (vgl. mit Abb. 4.8, rechts). Die redundanten Messstellen im Inneren werden bei *Inverse Distance* zu stark gewichtet, während die wenigen Punkte am Rand nicht ausreichend genug berücksichtigt werden.

Als Vorbereitung auf die *Kriging* Interpolation erfolgt im Idealfall eine statistische Analyse der gegebenen Messdaten bzw. die Erstellung eines empirischen Semivariogramms S_{emp}, das die Varianz der Höhenwerte in Abhängigkeit von den Messpunktabständen d_{ij} beschreiben soll.

Zunächst werden die Messpunktabstände d_{ij} in m Klassen (engl.: lags) zusammengefasst. Dabei definiert h die Bandbreite der k-ten Abstandsklasse.

$$k \cdot h \leq d_{ij} < (k+1) \cdot h \,,\; k \in (0,1,2,\ldots,m-1) \tag{4.2}$$

Für jede Abstandsklasse d_k wird dann die Varianz $\gamma(d_k)$ bestimmt. Typischerweise wird sie mit der Summe der quadrierten Z-Abweichungen der n_k Messpunktpaare berechnet. Dabei gibt n_k die Anzahl der Messpunktpaare der k-ten Klasse an.

$$\gamma(d_k) = \frac{1}{2n_k} \sum_{kh < d_{ij} \leq (k+1)h} \{Z(M_i) - Z(M_j)\}^2 \tag{4.3}$$

Mit den Varianzen $\gamma(d_k)$ für alle Abstandsklassen d_k entsteht das empirische Semivariogramm S_{emp}. Der Funktionswert von S_{emp} nimmt normalerweise mit zunehmendem k zu und drückt die „Unähnlichkeit“ der Abstandsklassen aus. Je größer k bzw. die betrachteten Abstände einer Klasse sind, desto unterschiedlicher fallen in der Regel die jeweiligen Z-Abweichungen aus und desto größer ist die Varianz $\gamma(d_k)$ der jeweiligen Klasse. In einer Abstandsklasse mit kleinem k bzw. in einer Klasse, die kleine Abstände betrachtet, sind die Z-Abweichungen der Stützpunkte dagegen vergleichsweise „ähnlich“ und die Varianz ist eher klein.

Entsprechend dem Aussehen von S_{emp} wird ein möglichst gut passendes theoretisches Semivariogramm S_t ausgewählt. Man unterscheidet dabei zwischen vielen Modellen wie z.B. das exponentielle Modell, das Gaußsche Modell, das quadratische Modell, das sphärische Modell, das lineare Modell, das wellenförmige Modell, ... (siehe Abb. 4.9, Abb. 4.11 und [194]).

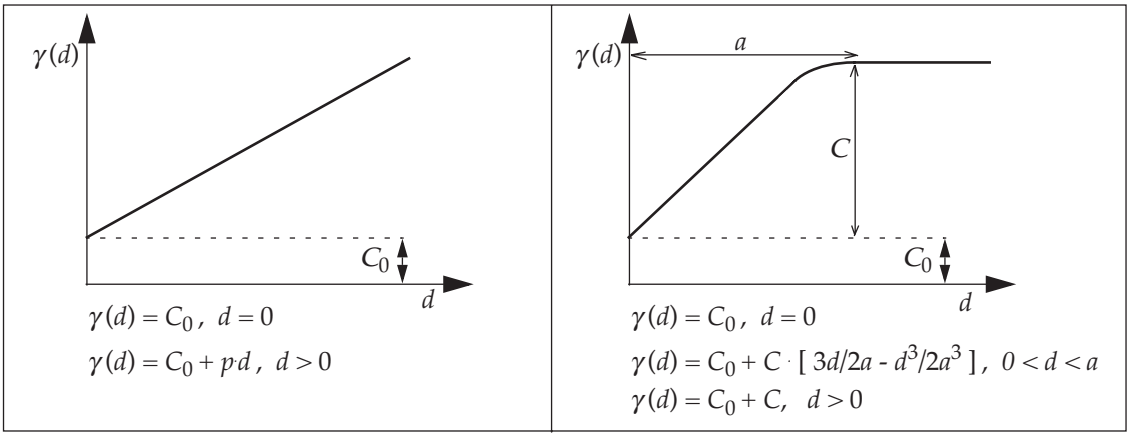


Abb. 4.11 Zwei häufig verwendete Modelle für S_t: lineares Modell und Gaußsches Modell

Die sogenannte *Nugget*- oder Grundvarianz C_0 ist ein Ausdruck für das zufällige Rauschen in den Daten, das durch räumliche Effekte nicht erklärt werden kann.

Von C_0 aus steigt die Varianz um C (engl.: sill, Schwelle) bis zur sogenannten Prozessvarianz C_0+C an. Über die Höhe von C wird quantifiziert, wieviel „ähnlicher" die Werte naher Messstationen im Vergleich zu Messstationen mit großem Abstand sind.

Die Entfernung a, in der C_0+C erreicht wird heißt Einflussbereich (engl.: range). Außerhalb a besteht keine Korrelation zwischen den Stützpunkten mehr.

Das gewählte Semivariogramm S_t wird als Basis im *Kriging* Interpolationsverfahren verwendet. Für alle Punktabstände d_{ij} und d_{iP} werden aus S_t Funktionswerte entnommen und in ein LGS eingesetzt (→LGS (4.4)). Dieses LGS besitzt n+1 Gleichungen. Die Unbekannten sind die n Messpunktgewichtungen w_i sowie der Lagrange-Faktor λ für den Schätzfehler (→Gl. (4.6)). Zur Berechnung des Schätzwerts $\tilde{Z}_P$ am Schätzpunkt P verwendet man die berechneten Gewichtungen w_i. Die Summe aller w_i ergibt 1.

$$\begin{aligned}
w_1 S(d_{11}) + w_2 S(d_{12}) + \ldots + w_n S(d_{1n}) + \lambda &= S(d_{1P}) \\
w_1 S(d_{21}) + w_2 S(d_{22}) + \ldots + w_n S(d_{2n}) + \lambda &= S(d_{2P}) \\
&\cdots \\
w_1 S(d_{n1}) + w_2 S(d_{n2}) + \ldots + w_n S(d_{nn}) + \lambda &= S(d_{nP}) \\
w_1 + w_2 + \ldots + w_n + 0 &= 1
\end{aligned} \tag{4.4}$$

Im LGS (4.4) beschreibt d_{ij} den Abstand zwischen zwei Messpunkten M_i und M_j. d_{iP} beschreibt den Abstand zwischen einem Messpunkt M_i und der zu berechnenden Schätzstelle P. $S(d_{ij})$ bzw. $S(d_{iP})$ bezeichnet den Semivariogrammwert für den Abstand d_{ij} bzw. d_{iP}.

„Geclusterte" Messpunkte haben kleine Abstände. Das führt zu kleinen Funktionswerten aus S_t und somit beim Lösen des LGS zu kleinen Gewichtungen für redundante Messpunkte.

Zur Bestimmung der benötigten Gewichtungen w_i ist also ein lineares Gleichungssystem $A \cdot W = B$ zu lösen. Die rechte Seite B sieht für jede zu berechnende Schätzstelle P anders aus und wird mit den Semivariogrammwerten der jeweiligen Abstände d_{iP} gebildet. Im Gegensatz dazu ist die Matrix A für jedes P konstant, da sich A aus den Semivariogrammwerten der fixen Stützpunktabstände d_{ij} zusammensetzt. Da die Matrix A aufgrund der Definitheit der Semivariogramme invertierbar ist, kann das LGS mit $W = A^{-1} \cdot B$ gelöst werden.

Mit den berechneten Gewichtungen w_i, lässt sich ein Interpolationswert $\tilde{Z}_P$ für die Schätzstelle P berechnen.

$$\tilde{Z}_P = \sum_{i=1}^{n} w_i \, Z(M_i) \tag{4.5}$$

Kriging ist ein exakter Interpolator, der die Stützpunktwerte einhält.

Kriging ist ein Verfahren, bei dem man für eine Schätzstelle P auch einen Schätzfehler $\bar{s}_P$ berechnen kann:

$$\bar{s}_P^{\,2} = w_1 \, S(d_{1P}) + w_2 \, S(d_{2P}) + \ldots + w_n \, S(d_{nP}) + \lambda \tag{4.6}$$

Außerdem kann man bei normalverteiltem $\bar{s}_P$ eine Wahrscheinlichkeitsaussage für den berechneten Intepolationswert $\tilde{Z}_P$ machen. Mit 95%iger Wahrscheinlichkeit $\overline{W}$ ist $\tilde{Z}_P$ maximal $2 \cdot \bar{s}_P$ vom realen Wert Z_P entfernt.

$$\overline{W}(Z_P - 2\bar{s}_P < \tilde{Z}_P < Z_P + 2\bar{s}_P) = 0{,}95 \tag{4.7}$$

Die *Kriging* Technik gibt also im Gegensatz zu *Inverse Distance to a Power* und vielen anderen Methoden ein Kriterium für die Güte der Schätzung an die Hand. Die Veränderlichkeit des Schätzfehlers $\bar{s}$ über dem betrachteten Gebiet wird *Kriging*-Varianz genannt. Sie spiegelt die Messnetzkonfiguration wider und ist ein Maß für den Informationsmangel. Die am weitesten von Stützpunkten entfernten Interpolationsorte weisen die höchsten Werte der *Kriging* Varianz auf. Wenn man neue Stützpunkte primär in diese Maxima der *Kriging* Varianz legt, kann das Messnetz gezielt optimiert werden.

Weiterführende Literatur zu dieser Thematik findet man in [14, 36, 146].

4.3 Erzeugung von *NxM* Viereckgittern

Typischerweise besitzen die betrachteten Gebiete einen rechteckigen Grundriss. Dann werden *NxM* Rechtecksgitter als Trennflächen verwendet (vgl. S. 37). Teilweise ist der Grundriss eines Gebiets jedoch komplexer. Dann benötigt man angepasste Viereckgitter, die sich auf ein kartesisches *NxM*-Gitter abbilden lassen, sogenannte Tensorproduktgitter.

Eine weitere Aufgabenstellung besteht also darin, für ein nicht konvexes zweidimensionales polygonales Gebiet ein Gitter zu finden, das aus konvexen möglichst gleich großen und möglichst rechtwinkligen Vierecken besteht, die in *N* Reihen und *M* Spalten angeordnet sind.

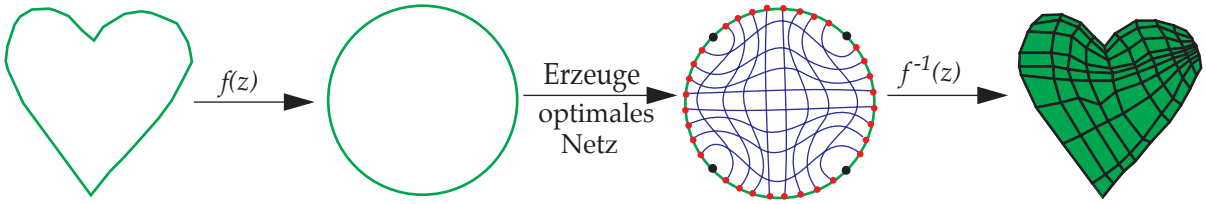


Abb. 4.12 Suche nach einer biholomorphen Abbildung *f(z)*

Laut Riemannschem Abbildungssatz lässt sich ein einfach zusammenhängendes Gebiet *G*, das eine echte Teilmenge der komplexen Zahlenebene **C** ist, biholomorph auf die Einheitskreisscheibe *E* abbilden. Eine biholomorphe Abbildung oder konforme Abbildung ist eine Abbildung $w = f(z)$, bei der ein Gebiet *G* in der (komplexen) *z*-Zahlenebene auf ein Gebiet *G'* in der *w*-Ebene so abgebildet wird, dass der Schnittwinkel zweier Kurven der einen Ebene der Größe nach der gleiche ist wie der in der zweiten Ebene. Weiterhin bleibt der Drehsinn erhalten. Daraus ergibt sich, dass eine biholomorphe Abbildung eine holomorphe Abbildung ist, deren Umkehrabbildung ebenfalls holomorph ist.

Abb. 4.12 zeigt hierfür ein Beispiel. *f(z)* bildet ein Herz auf eine Einheitskreisscheibe ab. Diese wird in 9 Spalten und 9 Reihen viereckiger Gitterelemente mit möglichst 90°-nahen Winkeln vernetzt. Die inverse Abbildung $f^{-1}(z)$ liefert das gesuchte NxM Viereckgitter, ebenfalls mit guten Winkeln für das Herz.

Für ein beliebiges einfach zusammenhängendes Gebiet *G* die Abbildungen $f(z)$ und $f^{-1}(z)$ zu finden ist jedoch sehr aufwendig. Deshalb wurde im Rahmen des Praktikums [105] mit *Create_NxM_Quad_Grid* ein halbautomatisches Werkzeug zur Erstellung von *NxM* Viereckgittern realisiert.

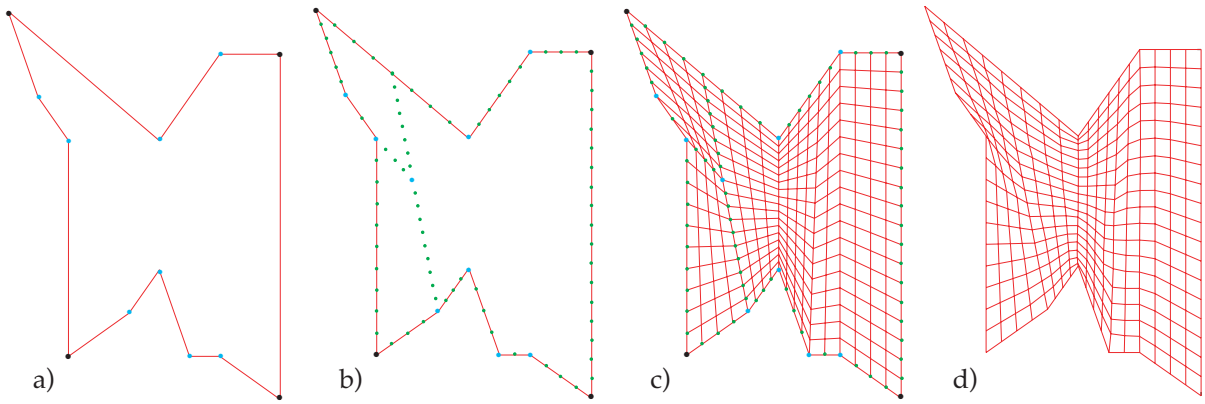


Abb. 4.13 Vorgehensweise von *Create_NxM_Quad_Grid* anhand eines Beispiels

Da insgesamt N Reihen und M Spalten entstehen sollen, muss man sich zuerst für 4 möglichst sinnvolle Ecken des Gebiets entscheiden, die eine gute NxM Aufteilung ermöglichen (Abb. 4.13a → schwarze Knoten). Anschließend müssen an charakteristischen Knicken des Gebietsrands weitere Knoten hinzugefügt werden (Abb. 4.13a → cyanfarbene Knoten). Die Verbindungsstrecken zwischen den schwarzen und cyanfarbenen Knoten werden mit Zwischenpunkten so unterteilt, dass eine NxM-Aufteilung möglich ist (Abb. 4.13b, grünfarbene Knoten). Auf dieser Basis können nun Verbindungslinien in einer beliebigen Reihenfolge erstellt und äquidistant unterteilt werden. In Abb. 4.13b sind die beiden ersten Verbindungslinien eingezeichnet. Wie man sieht, ist dabei auch eine partielle Aufteilung möglich. Schließlich werden alle fehlenden Verbindungen und Punkte mit äquidistanten Abständen automatisch erzeugt, so dass ein NxM Gitter entsteht (Abb. 4.13c). Dieses kann dann noch mit einem Glättungsalgorithmus verbessert werden (Abb. 4.13d).

Der Glättungsalgorithmus von *Create_NxM_Quad_Grid* läuft in mehreren Durchläufen zeilen- und spaltenweise über das NxM Netz und betrachtet jeweils 3x3 Knoten als ein fixes Achteck mit einem neunten Knoten K_m in der Mitte. Der Glätter optimiert die Lage von K_m. Zum einen muss K_m in seiner Position so verändert werden, dass die 4 Winkel bei K_m möglichst alle nahe 90° sind. Hierfür ist ratsam K_m in Richtung des kleinsten der 4 Winkel zu verschieben. Zum anderen sollte jede der 4 Gitterkanten von K_m möglichst so auf das umgebende Achteck stossen, dass am zugehörigen Achtecksknoten jeweils 2 möglichst gleich große Winkel entstehen. Weitere Glättungsalgorithmen findet man z.B. in [159, 220, 222].

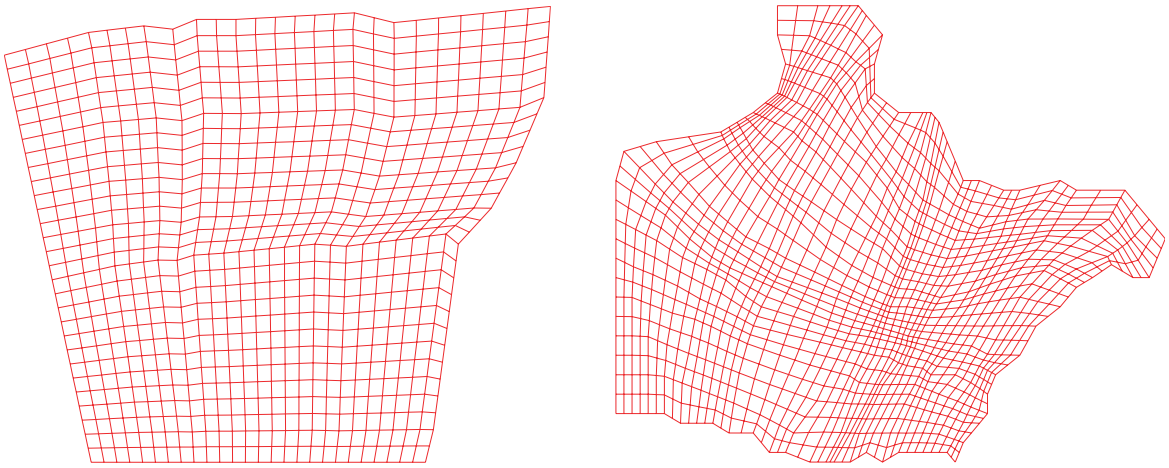


Abb. 4.14 NxM Viereckgitter für Langeoog (links) und Orange County (rechts)

Der halbautomatische Viereckgittergenerator *Create_NxM_Quad_Grid* [105] ist für viele praktische Fälle nutzbar, z. B. für die vom Projektpartner GRS vorgegebene „study domain“ der Insel Langeoog (Abb. 4.14 links). Bei komplexeren Gebieten wie Orange County ist dagegen noch etwas Nacharbeit notwendig bis eine ideale NxM Aufteilung erstellt ist (Abb. 4.14 rechts).

4.4 Schichtenmodellierung mit Mächtigkeiten

Wie in Kapitel 4.3 vorgestellt, erhält man für ein Geoschichtengebiet einen Stapel von übereinander angeordneten Trennflächen mit *NxM* Struktur (Abb. 4.15→(a)).

Die Trennflächen werden mit Verfahren wie bspw. *Inverse Distance to a Power* oder *Kriging* generiert. Diese Algorithmen erzeugen allerdings stets Daten für den Verlauf von nur einer Trennfläche, ohne den Verlauf der übrigen an der Modellbildung beteiligten Trennflächen zu berücksichtigen [44, 191, 207].

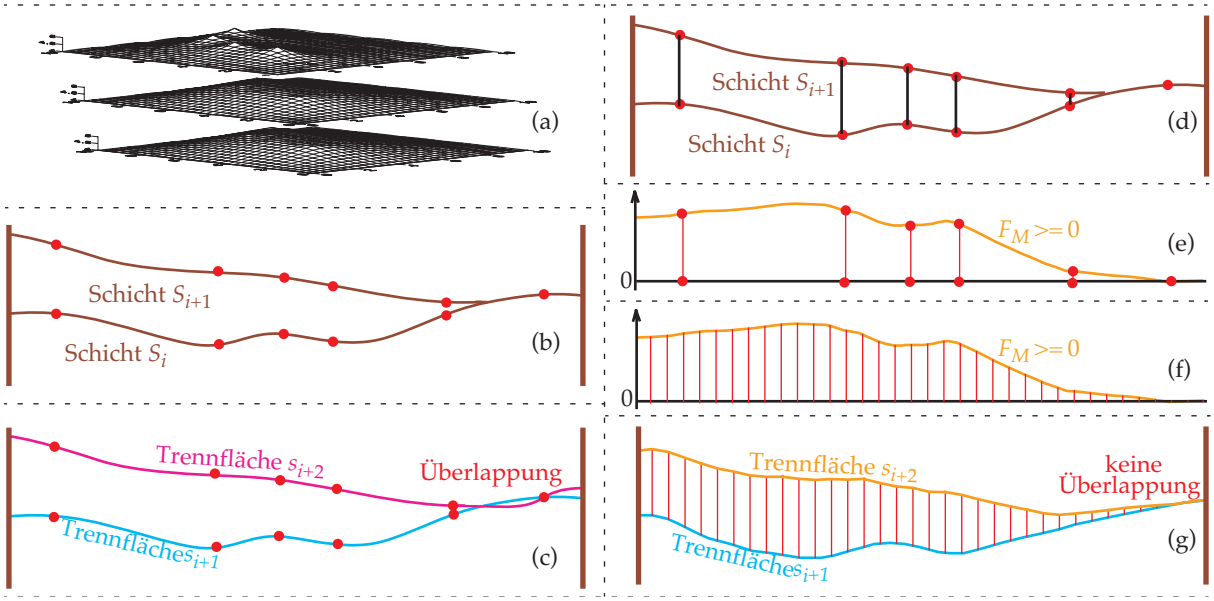


Abb. 4.15 Überlappungsfreie Schichtenmodellierung mit Hilfe von Mächtigkeiten

Aufgrund der typischerweise anisotropen, geringmächtigen und oftmals ausstreichenden Schichten entstehen Trennflächen, die sich gegenseitig schneiden oder überlappen. Dieser unerwünschte Effekt bei der Trennflächenmodellierung lässt sich vermeiden, wenn man vorab die einzelnen Schichten mit ihren Mächtigkeiten (thicknesses) beschreibt bzw. modelliert.

In obigem Beispiel erstreckt sich die Schicht S_i über das gesamte Gebiet, die Schicht S_{i+1} dagegen streicht auf der rechten Seite aus (Abb. 4.15→(b)). Angenommen, es sind lediglich die roten Punkte als Messstellen gegeben, dann kann es bei der Approximation der Trennfläche s_{i+2} leicht zu einer Überlappung mit der approximierten Trennfläche s_{i+1} kommen (Abb. 4.15→(c)).

Um dies zu vermeiden, berechnet man vorab die Mächtigkeiten der Schicht S_{i+1} an den vorhandenen Messstellen durch Subtraktion des jeweiligen unteren Messwerts vom jeweiligen oberen Messwert (Abb. 4.15→(d)). So erhält man für jede Messstelle einen positiven Mächtigkeitswert und an der äußersten Messstelle rechts, wo S_i ausstreicht, den Mächtigkeitswert 0.

Anhand dieser Mächtigkeitswerte approximiert man eine Fläche F_M, welche keine reale Trennfläche darstellt sondern die Mächtigkeit der Schicht S_i beschreibt (Abb. 4.15→(e)). Es muss überall $F_M >= 0$ gelten. Sollten bei der Approximation von F_M an einigen Stellen dennoch negative Werte entstehen, werden diese auf 0 gesetzt. Negative Mächtigkeiten gibt es nicht.

Unabhängig von den Messstellen greift man nun mit einer bestimmten Maschenweite h in äquidistanten Abständen Mächtigkeitswerte von F_M ab (Abb. 4.15→(f)).

Diese Mächtigkeitswerte addiert man zu den Werten der bereits existierenden Trennfläche s_{i+1} und erhält die Trennfläche s_{i+2}. So werden Überlappungen vermieden und es ist sicher gestellt, dass überall dort, wo S_{i+1} existiert, $s_{i+2} > s_{i+1}$ gilt und überall sonst $s_{i+2} = s_{i+1}$ (→Abb. 4.15→(g)). Nach diesem Prinzip werden alle Schichten eines Gebiets mit Mächtigkeiten beschrieben.

Zusätzlich modelliert man die sogenannte „Basistrennfläche“. Diese stellt eine untere Bezugsfläche des Gebiets dar, die als einzige mit realen Höhenwerten beschrieben wird. Zu dieser Basistrennfläche werden nach und nach die Mächtigkeiten der einzelnen Schichten addiert und so die realen Höhenwerte der übereinander angeordneten Trennflächen erzeugt. Überlappungen bzw. Schnitte von Trennflächen sind ausgeschlossen, da Mächtigkeiten immer positiv sind [44, 191, 207].

Mit der vorgestellten „Mächtigkeits-Methode“ werden für anisotrope Geoschichtungen *lgm*-Geometrien erzeugt, die vom Simulationssystem *UG* eingelesen werden können.

4.5 Behandlung von Schichten mit variierenden Mächtigkeiten

Zwischen den erzeugten Trennflächen sollen Gitterelemente erzeugt werden. Um günstige Winkel zu erhalten, sollen wie in Kap. 4.1 auch hier wieder vertikale Kanten bzw. vertikale Begrenzungsflächen verwendet werden (siehe Kap. 4.6). Dieses Vorgehen führt allerdings bei Schichten mit stark variierenden Mächtigkeiten zu inhomogenen Gitterelementen, deren Z-Ausdehnungen sich entsprechend ändern.

Deshalb wird das Werkzeug *split* realisiert [207], welches Schichten mit stark variierenden Mächtigkeiten in homogene Subschichten aufteilt. Eine Mächtigkeitsdatei mit sich signifikant ändernden Z-Werten wird in mehrere Mächtigkeitsdateien mit kleineren und inbesondere homogeneren Höhenwerten aufgeteilt bzw. gesplittet.

Sei Δz_{max} die größte Mächtigkeit einer Schicht und n die Anzahl der gewünschten Teilschichten, so ist durch den Quotienten $\Delta z_{max}/n$ eine Aufteilung in n gleich große Intervalle $]a_j, a_{j+1}]$ gegeben, wobei $a_j = j \cdot \Delta z_{max}/n$ mit $j \in \{0, 1, ..., n\text{-}1\}$ gilt. Für einen Rasterpunkt P mit Mächtigkeit $\Delta z_P > 0$ gibt es stets ein j, so dass $\Delta z_P \in]a_j, a_{j+1}]$. Fällt Δz_P in das unterste Intervall $]a_0, a_1]$, so erhält die unterste der n neuen Mächtigkeitsdateien über P die Mächtigkeit Δz_P, während die restlichen n-1 Dateien bei P die Mächtigkeit 0 haben, d.h. die zweite bis n-te Schicht ist bei P nicht vorhanden. Für $\Delta z_P \in]a_1, a_2]$ sind die Mächtigkeiten über P für die untersten beiden Dateien jeweils $\Delta z_P/2$, während die übrigen n-2 Dateien über P keine Mächtigkeit besitzen. Allgemein ergibt sich für $\Delta z_P \in]a_j, a_{j+1}]$ für die ersten j+1 Dateien die Mächtigkeit $\Delta z_P/(j+1)$ und für die restlichen n-j-1 Dateien die Mächtigkeit 0 über dem Rasterpunkt P. Für den Spezialfall $\Delta z_P = 0$, erhalten alle n Dateien die Mächtigkeit 0 über P [207].

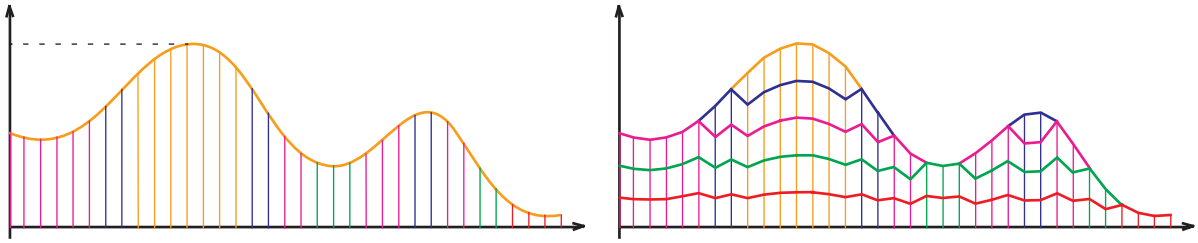


Abb. 4.16 Beispiel für das Werkzeug *split*: Aufteilung einer Mächtigkeitsbeschreibung mit $n = 5$

In Abb. 4.16 ist links eine stark variierende Mächtigkeit gegeben. An der gestrichelten schwarzen Linie wird $\Delta z_{max} = 2.43$ ermittelt. Für $n = 5$ liegt $\Delta z_P > 0$ in einem der Intervalle]0, 0.486],]0.486, 0.972],]0.972, 1.458],]1.458, 1.944] oder]1.944, 2.43]. Für die 35 Messstellen wird das jeweilige Intervall $]a_j, a_{j+1}]$ bestimmt (farblich hervorgehoben in Abb. 4.16, links) und dementsprechend eine Aufteilung in $j+1$ gleich große Teilmächtigkeiten vorgenommen (→Abb. 4.16, rechts).

Das Ergebnis zeigt, dass lediglich die erste der 5 entstehenden Subschichten über das gesamte Gebiet definiert ist. Die anderen Subschichten streichen an verschiedenen Stellen aus und besitzen ab dort die Mächtigkeit 0 (→Abb. 4.16, rechts).

Insgesamt wird die stark variierende Mächtigkeit (links) in homogene Teilmächtigkeiten (rechts) aufgetrennt. Addiert man die 5 Teilmächtigkeiten, erhält man wieder genau die eingangs gegebene Gesamtmächtigkeit (→Abb. 4.16).

Die Anwendung von *split* wirkt sich auch auf die Größenverhältnisse bei der Netzgenerierung aus. Entsprechend den homogeneren Teilschichten sind auch die Anisotropiewerte der neuen Gitterelemente einheitlicher (vgl. Kapitel 6).

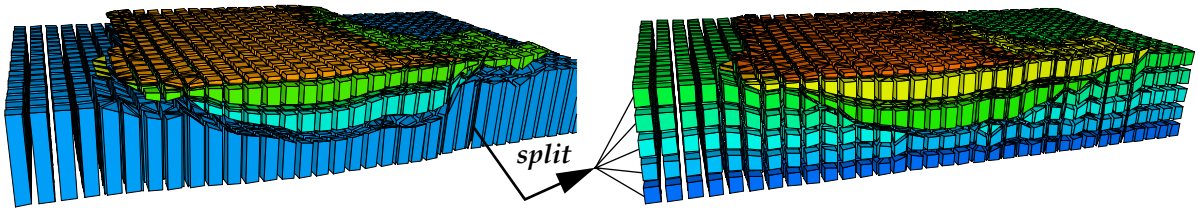


Abb. 4.17 Die Methode *split* am Beispiel „Orange County" (vgl. Kap. 2.6 u. Kap. 7.7)

In Abb. 4.17 sieht man die dunkelblaue Muttergesteinsschicht („BEDROCK") unter dem Grundwasserbassin von Orange County (→Kapitel 2.6 u. 7.7). Diese Schicht weist stark variierende Mächtigkeiten auf. Durch Anwendung von *split* kommt es ortsabhängig zu einer Aufteilung in 2 bis 5 Subschichten. Die Gitterelemente werden in ihrer Größe und Anisotropie dadurch homogener.

Im Rahmen dieser Arbeit konnte das Werkzeug *split* auch bei mehreren anderen Gebieten eingesetzt werden, die Schichten mit stark variierenden Mächtigkeiten aufweisen (siehe z. B. in Abb. 7.4 (Höfer) und in Abb. 7.17 (Willersinnweiher)).

Durch den Einsatz von *split* werden einzelne Mächtigkeitsdateien durch mehrere neue Mächtigkeitsdateien ersetzt. Dies erhöht in entsprechender Weise die Anzahl der resultierenden übereinanderliegenden Trennflächen. Im nächsten Kapitel wird beschrieben, wie zwischen Trennflächen Gitterelemente erzeugt werden.

4.6 Gittererzeugung zwischen Trennflächen

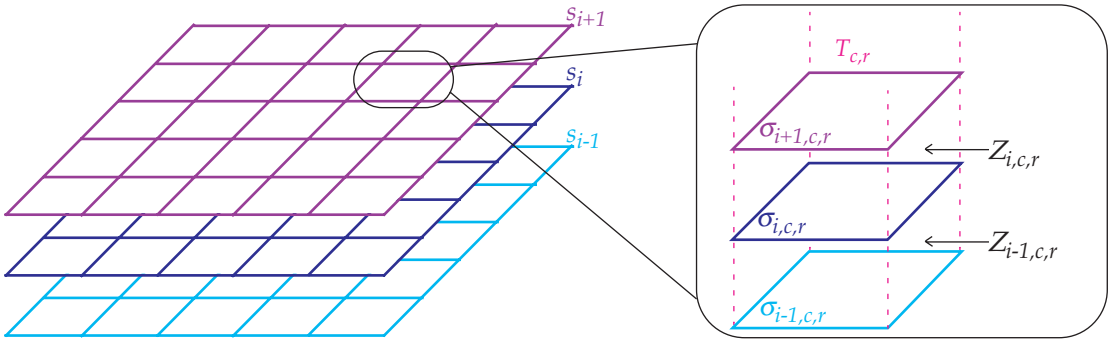


Abb. 4.18 Übeinanderliegende Trennflächen bilden $n \cdot m$ Türme $T_{c,r}$

Für ein Geoschichtengebiet wird ein Stapel von n_T übereinander angeordneten und im Grundriss gleichen Trennflächen s_i ($\rightarrow s_0, s_1, s_2, \ldots, s_{n_T-1}$) erzeugt (Abb. 4.18), die aus der Kombination der Basistrennfläche s_0 mit n_T-1 Mächtigkeitsdateien entstehen ($\rightarrow$Kap. 4.4). Jede Trennfläche s_i besteht aus n Spalten und m Zeilen mit (normalerweise) rechtwinkligen Trennflächensegmenten $\sigma_{i,c,r}$. Die Position eines Segments $\sigma_{i,c,r}$ innerhalb einer Trennfläche s_i wird durch einen Spaltenindex c und einen Zeilenindex r definiert.

Für jede Spalten-Zeilenkombination (c, r) existieren n_T übereinander angeordnete $\sigma_{i,c,r}$. Eine solche Anordnung wird als *Turm* $T_{c,r}$ bezeichnet.

Bei der Gittererzeugung werden die $n \cdot m$ *Türme* isoliert betrachtet. Jeder *Turm* ist durch n_T Trennflächensegmente in n_T -1 Zellen $Z_{i,c,r}$ unterteilt. Jede Zelle $Z_{i,c,r}$ wird unten von $\sigma_{i,c,r}$ und oben von $\sigma_{i+1,c,r}$ begrenzt ($\rightarrow$Abb. 4.18 rechts).

Um günstige Winkeleigenschaften zu erhalten, werden auch hier wieder vertikale Kanten bzw. vertikale Begrenzungsflächen verwendet (vgl. Kap. 4.1).

Einer Zelle $Z_{i,c,r}$ werden, je nachdem in welchen und in wie vielen ihrer vier Ecken die Segmente $\sigma_{i,c,r}$ und $\sigma_{i+1,c,r}$ identisch sind, Gitterelemente einbeschrieben. In Abhängigkeit der Ekken mit Mächtigkeit = 0, lassen sich zunächst fünf grundsätzliche Fälle unterscheiden:

- Die Segmente $\sigma_{i,c,r}$ und $\sigma_{i+1,c,r}$ sind in keiner der vier Ecken identisch. Das ist der Normalfall. Die Zelle $Z_{i,c,r}$ wird mit einem Hexaeder ausgefüllt (Abb. 4.20$\rightarrow$(0)).
- Die Segmente $\sigma_{i,c,r}$ und $\sigma_{i+1,c,r}$ sind in einer der vier Ecken identisch. Die Zelle $Z_{i,c,r}$ wird mit zwei Pyramiden ausgefüllt (Abb. 4.20$\rightarrow$(1)).
- Die Segmente $\sigma_{i,c,r}$ und $\sigma_{i+1,c,r}$ sind in zwei diagonal gegenüberliegenden Ecken identisch. Die Zelle $Z_{i,c,r}$ wird mit zwei Tetraedern ausgefüllt (Abb. 4.20$\rightarrow$(2a)). Dieser selten auftretende Fall muss unbedingt beachtet werden.
- Die Segmente $\sigma_{i,c,r}$ und $\sigma_{i+1,c,r}$ sind in zwei benachbarten Ecken identisch. Die Zelle $Z_{i,c,r}$ wird mit einem (horizontal ausgerichteten) Prisma ausgefüllt (Abb. 4.20$\rightarrow$(2b)).
- Die Segmente $\sigma_{i,c,r}$ und $\sigma_{i+1,c,r}$ sind in drei Ecken identisch. Die Zelle $Z_{i,c,r}$ wird mit einem Tetraeder ausgefüllt (Abb. 4.20$\rightarrow$(3)).

Neben diesen fünf Varianten besteht auch noch die Möglichkeit, dass die Trennflächensegmente $\sigma_{i,c,r}$ und $\sigma_{i+1,c,r}$ in allen 4 Ecken identisch sind und somit komplett übereinstimmen. Dann hat die betrachtete Schicht S_i im *Turm* $T_{c,r}$ an allen 4 Ecken die Mächtigkeit 0. In diesem Fall bleibt die Zelle $Z_{i,c,r}$ leer und es muss kein Gitterelement erzeugt werden.

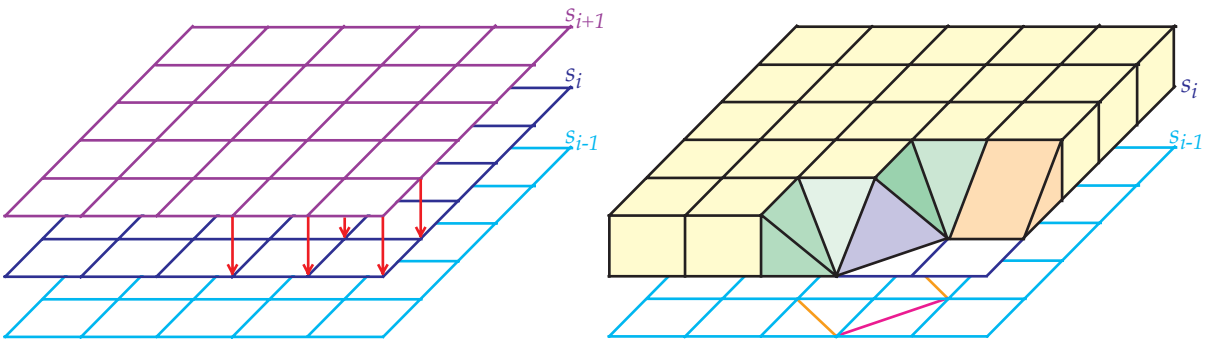


Abb. 4.19 Gittererzeugung für die Schicht S_i zwischen den Trennflächen s_i und s_{i+1} mit Auswirkung auf die Vernetzung der Schicht S_{i-1} zwischen den Trennflächen s_{i-1} und s_i

In der Praxis werden mit der hier beschriebenen Methode größtenteils Hexaeder (Abb. 4.20→(0)) erzeugt. In Abb. 4.19 sind bspw. 77% der Gitterelemente zwischen den Trennflächen s_i und s_{i+1} Hexaeder. Je feiner die Maschenweite der Trennflächen, desto größer wird der Hexaederanteil (oftmals mehr als 90%, siehe z.B. in Tab. 7.6 auf S. 120). Bei Ausstreichungen sind dagegen Abschlusselemente notwendig. Im Beispiel Abb. 4.19 sind das 4 Pyramiden, 1 Prisma und 1 Tetraeder. Diese Abschlusselemente sind notwendig, weil die Schicht S_i zwischen den Trennflächen s_i und s_{i+1} rechts vorne ausstreicht. Bei den 5 roten Pfeilen ist die Mächtigkeit von S_i gleich null bzw. es gilt $s_{i+1} - s_i = 0$.

Bei Tetraeder- und Pyramidenabschlusselementen ist zu beachten, dass sie Kanten besitzen, die diagonal durch ein Trennflächensegment bzw. diagonal durch einen *Turm* verlaufen. Für das Beispiel in Abb. 4.19 resultieren aus der Vernetzung von S_i drei solcher Diagonalkanten. Diese sind als Projektionen in s_{i-1} eingezeichnet (Abb. 4.19→$T_{3,1}$, $T_{4,1}$, $T_{4,2}$). Bei der Vernetzung von S_{i-1} und auch anderen Schichten müssen solche Diagonalen in den jeweiligen *Turm*-Zellen durch entsprechende Verfeinerungen berücksichtigt werden (Abb. 4.20→2. u. 3. Zeile). Bei einem *Turm* können die Hauptdiagonale (Abb. 4.19→$T_{4,1}$ (magentafarben)), die Nebendiagonale (Abb. 4.19→$T_{3,1}$, $T_{4,2}$ (orangefarben)) oder beide Diagonalen betroffen sein. Es ist für jeden *Turm* festzustellen, ob und für welche Diagonale(n) dies gilt.

Für den Fall, dass in keiner Ecke die Mächtigkeit = 0 ist, entstehen bei **einer** gesetzen Diagonalen 2 Prismen (Abb. 4.20→(0') und bei zwei gesetzten Diagonalen 4 Prismen (Abb. 4.20→(0'').

Wenn die Segmente $\sigma_{i,c,r}$ und $\sigma_{i+1,c,r}$ in **einer** der vier Ecken identisch sind, führt eine entsprechend orientierte Diagonale zu einer Verfeinerung in 2 vertikal ausgerichtete Prismen und 2 Pyramiden (Abb. 4.20→(1')).

Für den Fall, dass in zwei diagonal gegenüberliegenden Ecken die Mächtigkeit = 0 ist, bewirkt eine entsprechend orientierte Diagonale eine Verfeinerung der Zelle in vier Tetraeder (Abb. 4.19→(2a')).

Wenn in zwei benachbarten Ecken die Mächtigkeit = 0 ist, so kommt es bei **einer** Diagonalen zur Aufteilung in Pyramide und Tetraeder (Abb. 4.19→(2b')) und falls beide Diagonalen gesetzt sind, zur Verfeinerung in 2 Pyramiden, ein vertikal ausgerichtetes Prisma und einen Tetraeder (Abb. 4.19→(2b'')).

Für den Fall, dass drei Ecken identisch sind, wird bei entsprechend orientierter Diagonale in zwei Tetraeder verfeinert (Abb. 4.19→(3')).

Damit ist die Vorgehensweise bei der Gittergenerierung zwischen Trennflächen erläutert. Eine ausführlichere und detailliertere Beschreibung der vorgestellten Methode und ihrer Fallunterscheidungen findet man in [207].

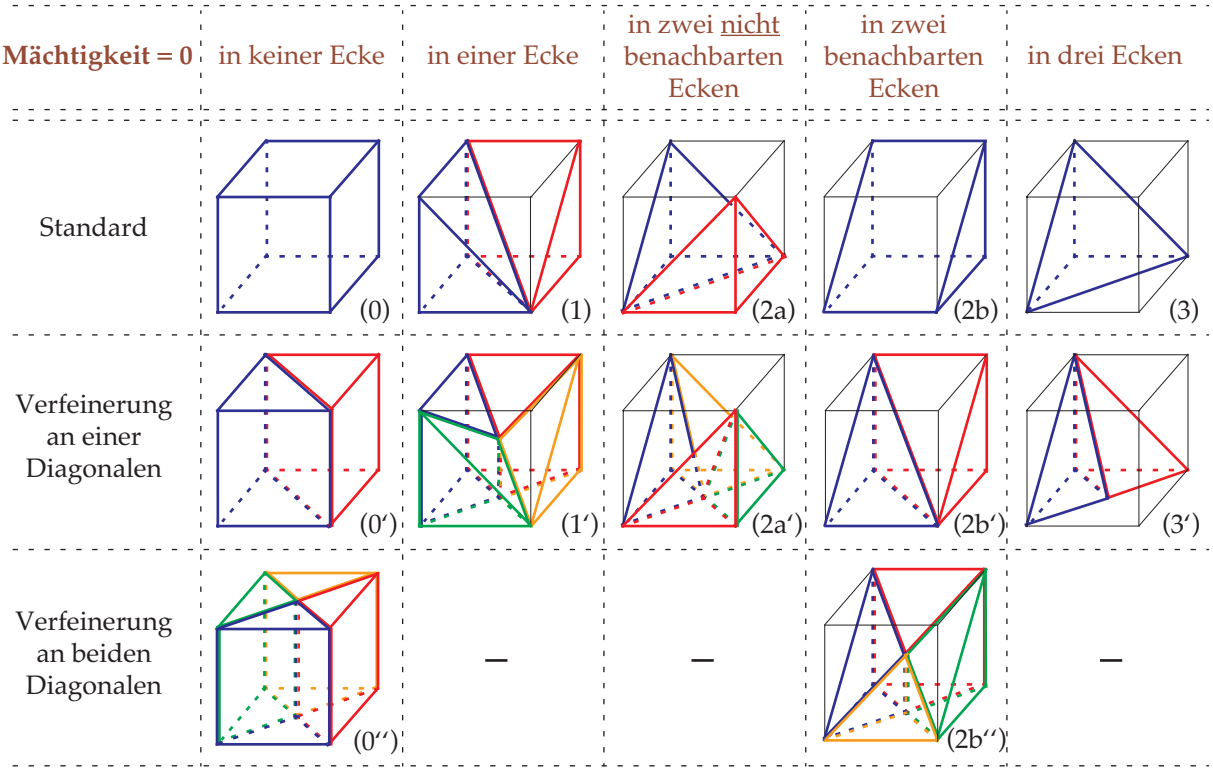


Abb. 4.20 Fallunterscheidungen bei der Gittererzeugung zwischen zwei Segmenten $\sigma_{i,c,r}$ und $\sigma_{i+1,c,r}$

Ein Gitter, das mit der beschriebenen Methode entsteht, muss in eine *ng*-Gitterdatei ausgegeben werden. Zuvor muss jedoch der Bezug eines jeden Gitterknotens auf ein *lgm*-Geometriemodell bestimmt werden, da *UG* nur ein konsistentes *lgm*-/*ng*-Dateipaar einlesen kann (siehe Kapitel 3). Hierfür muss zum Gitter eine passende *lgm*-Geometrie mit *Subdomains, Lines, Triangles, Points* und sinnvollen *Surfaces* erzeugt werden.

4.7 Zusammenfassung von Randflächen bei der Geometrieerzeugung

Jedes gemäß Kap. 4.6 erzeugte Gitterelement ist ein Randelement, das mehrere Seiten besitzt, die auf *Subdomain*-Rändern liegen. So liegt jede obere und untere Seite eines Gitterelements immer auf einem *Subdomain*-Rand und in der *lgm*-Geometriebeschreibung muss eine entsprechende *Surface* erzeugt werden. Die seitlichen vertikalen Elementseiten sind meistens innere Flächen. Liegen sie dagegen auf dem äußeren Rand des Gesamtgebiets, müssen ebenfalls entsprechende *lgm-Surfaces* gebaut werden.

Aus einer Gitterelementseite, die auf einem *Subdomain*-Rand liegt, wird im Fall von 3 Knoten eine *Surface* bestehend aus einem Dreieck und 3 umgebenden *Lines* und im Fall von 4 Knoten eine *Surface* bestehend aus 2 Dreiecken und 4 umgebenden *Lines* erzeugt.

Bei einer derartigen, auf Gitterelementen basierenden *lgm*-Geometrieerzeugung, entsteht natürlich eine unübersichtliche Vielzahl kleiner Einzel-*Surfaces*. Deren Handhabung ist bei der Zuordnung von Randbedingungen für numerische Simulationen sehr aufwendig und es kommt außerdem zu sehr großen Einlesezeiten aufgrund einer Routine mit quadratischer Komplexität im *lgm*-Präprozessor von *UG*. Daher besteht eine wichtige Aufgabe der Geometrieerzeugung darin, mit möglichst geringem Aufwand die fein granularen *lgm-Surfaces* zu möglichst großen *Surfaces* zusammenzufassen, die das Gesamtgebiet sinnvoll unterteilen.

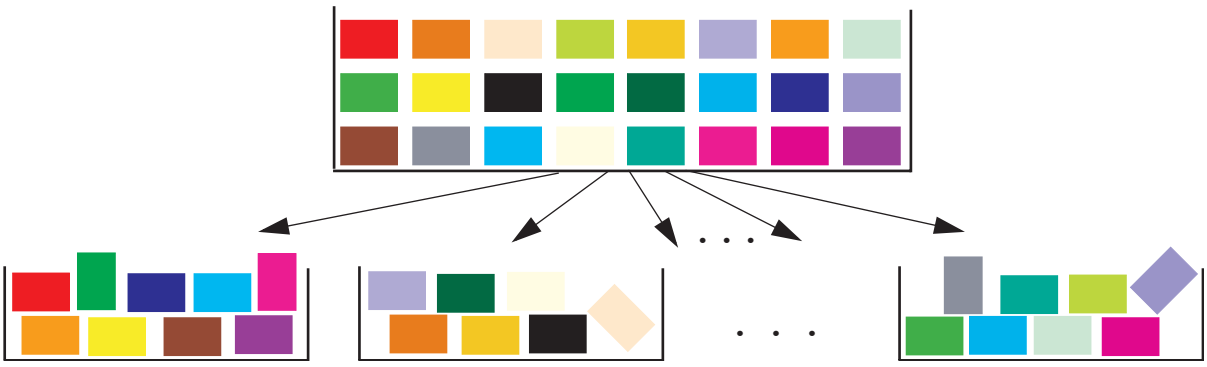


Abb. 4.21 Sortierung der zahlreichen kleinen *Surfaces*

Zuerst sortiert man die zahlreichen kleinen *Surfaces* in verschiedene Datenspeicher, die im Folgenden als *Töpfe* bezeichnet werden. Die Sortierung erfolgt so, dass alle *Surfaces* eines *Topfs* das selbe Schichtenpaar begrenzen beziehungsweise die beiden gleichen *lgm-Subdomain*-Ids („*left*=...“, „*right*=...“) besitzen (Abb. 4.21). Es können nur *Surfaces* aus dem selben *Topf* zusammengesetzt werden.

Aus den vielen kleinen *Surfaces* eines *Topfs* wird in der Regel **nicht nur eine** zusammengefasste *Surface* erzeugt. Ein Winkelkriterium schränkt das Zusammenfassen ein und bewirkt, dass sinnvolle und für das Gebiet charakteristische *Surfaces* entstehen.

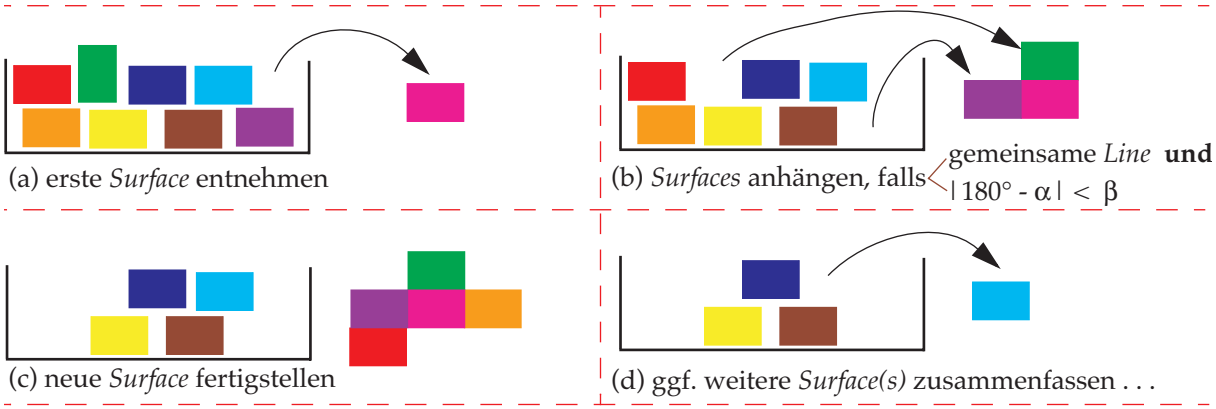


Abb. 4.22 Erzeugung einer oder mehrerer neuer *Surfaces* aus den einzelnen *Surfaces* eines *Topfs*

Zu Beginn wird aus dem ersten *Topf* die erste *Surface* herausgenommen und mit ihren Daten eine neue *Surface* s_{neu} mit *Triangles*, *Lines* und *Points* vorbereitet (Abb. 4.22→(a)).

Nun wird zu jeder *Line* l_i von s_{neu} nach einer benachbarten *Surface* s_l mit der selben *Line* l_i im *Topf* gesucht. Wenn der Winkel α zwischen s_{neu} und s_l an dieser *Line* nahe 180° ist, wird auch s_l aus dem Topf geholt und mit ihren *Triangles*, *Lines* und *Points* zu s_{neu} hinzugefügt (Abb. 4.22→(b)). Weicht α dagegen um einen signifikanten Wert β von 180° ab (z.B. $\beta > 30°$), wird an dieser Stelle nicht weiter zusammengefasst und die vorliegende Richtungsänderung bzw. der Knick des Gebiets berücksichtigt. So kann es sein, dass aus den kleinen *Surfaces* eines *Topfs* auch zwei oder mehrere große *Surfaces* erzeugt werden.

Die gemeinsamen *Lines* von s_{neu} und s_l werden beim Zusammenfassen gelöscht und für s_{neu} nicht mehr benötigt. Durch das Zusammenfassen kommen aber auch neue *Lines* zu s_{neu} hinzu, für die auch wieder Nachbarn gesucht werden müssen. Können schließlich keine weiteren *Surfaces* mehr hinzugefügt werden, kann s_{neu} fertiggestellt werden (Abb. 4.22→(c)).

Sind danach noch einzelne *Surfaces* im *Topf* vorhanden, wird mit dem Zusammenbau einer weiteren neuen *Surface* in gleicher Weise begonnen (Abb. 4.22→(d)). Es werden so lange neue *Surfaces* erstellt, bis der *Topf* ganz leer ist.

Das beschriebene Verfahren wird nacheinander für jeden einzelnen *Topf* durchgeführt. So entstehen schließlich alle *Surfaces* für das neue *lgm-Domain*.

Für die neue *lgm*-Datei müssen die neuen *Surfaces* und die verbliebenen *Lines* neu durchnummeriert werden. In der zugehörigen *ng*-Gitterdatei müssen für jeden Randknoten die Referenzen auf die neuen *Surfaces* und *Lines* aktualisiert werden.

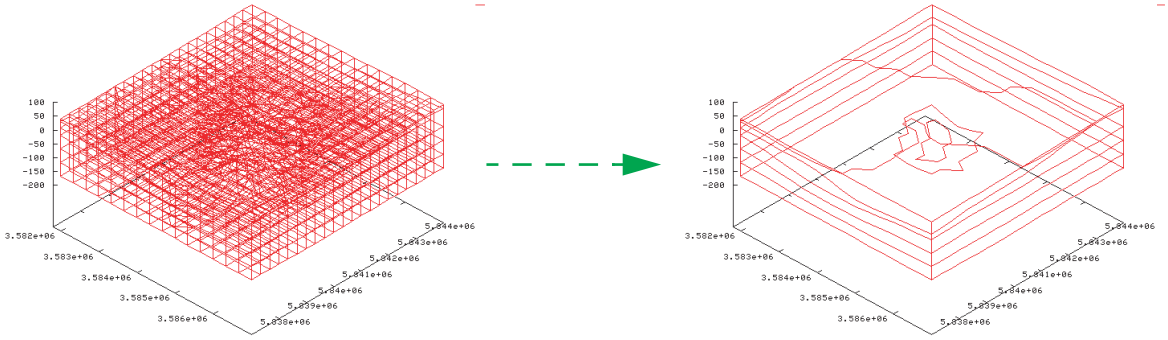


Abb. 4.23 Zusammenfassung von *Surfaces* am Beispiel Höfer (2707 *Surfaces* → 34 *Surfaces*)

Für die beschriebene Problemstellung wurde im Rahmen der Bachelorarbeit von S. Handel [88] das Werkzeug *SurfaceMerge* entwickelt. Dies ermöglicht eine drastische Reduktion der *Surface*-Anzahl (teilweise auf < 1/1000-stel, siehe in [207→Tab 5. 3]).

Abb. 4.23 zeigt am Beispielgebiet Höfer (vgl. Kap. 2.4 u. 7.4) wie 2707 *Surfaces* zu 34 *Surfaces* zusammengefasst werden. Danach lassen sich die einzelnen Schichten gut voneinander unterscheiden, was zuvor nicht möglich war. Man sieht zum einen, wie die einzelnen Schichten an den Seiten des Gebiets jeweils durch 4 *Surfaces* begrenzt werden und zum anderen erkennt man nun die inneren Strukturen des Gebiets. Das Zusammenfassen von *Surfaces* erhöht die Anschaulichkeit und Verwendbarkeit der *lgm*-Domains. Weitere Beispiele findet man im Ergebnisteil (→Abb. 7.6, Abb. 7.10) sowie in [88].

Unabhängig von der Gittermaschenweite bzw. der Anzahl der gegebenen Einzel-*Surfaces* werden für ein bestimmtes Gebiet normalerweise ähnliche charakteristische *Surfaces* erzeugt. Das *UG*-Einleseprogramm muss somit selbst bei sehr feinen Auflösungen immer nur über eine begrenzte Anzahl von *Surfaces* laufen. Damit wird die eingangs erwähnte $O(N^2)$-Routine des *UG lgm*-Präprozessors unbedenklich.

Der Einlesevorgang in *UG* ist für die zusammengefassten Gebiete deutlich schneller (oft mehr als 100fach). Der hohe Gewinn ist um so erfreulicher, da der zusätzliche Mehraufwand für das Zusammenfassen der vielen kleinen Einzel-*Surfaces* eine bessere Komplexität als $O(N\log N)$ aufweist. Hierauf wurde bei der Konzeption der Algorithmen und Datenstrukturen geachtet [88].

Allerdings stößt man mit den nunmehr großen, aus vielen Dreiecken bestehenden *Surfaces*, beim Einlesen im *lgm*-Präprozessor von *UG* auf eine andere quadratische Routine, die 99% der verbleibenden Einlesezeit ausmacht. Dieser „bottle-neck“ in *UG* wurde überarbeitet und mit der Realisierung eines Hashverfahrens verbessert.

Eine ausführliche Beschreibung der Algorithmen und ihrer Implementierungen sowie mehrerer Experimente findet man in [88].

Kapitel 5

Methoden zur Erfassung des Stratum corneum

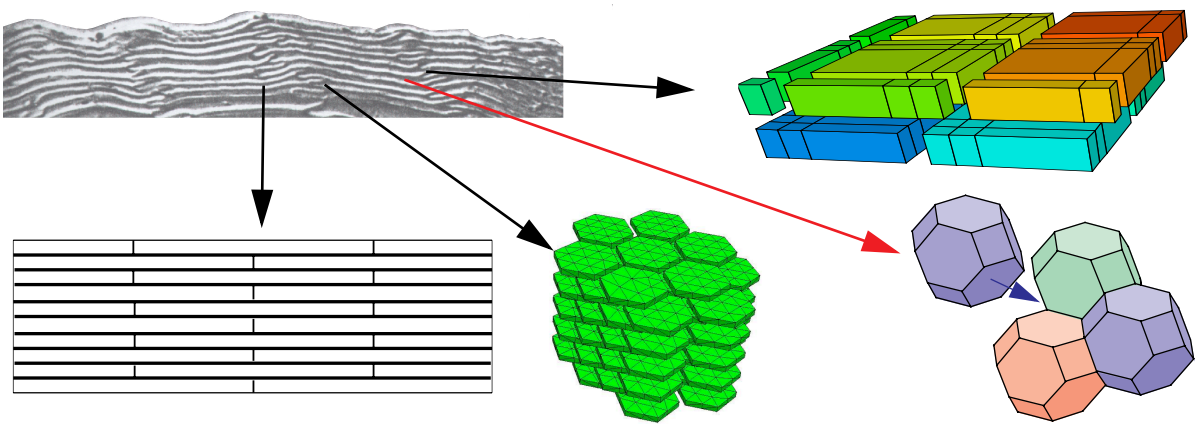


Abb. 5.1 Diverse Geometriemodelle für das Stratum corneum: links unten → „Brick-and-Mortar" Modell [40, 93]; rechts oben → quaderförmiges Modell [206]; unten mittig → Modell mit hexagonalen Prismen [73, 74]; rechts unten → Modell mit Tetrakaidekaedern; links oben → Lichtmikroskopische Aufnahme aus [141]

Für die numerische Simulation der transdermalen Arzneimitteldiffusion werden Geometrie- und Gittermodelle für das Stratum corneum benötigt (→ Kapitel 2.9).

Bereits vor einigen Jahren führten M. Heisig, G. Wittum et al. solche Simulationen in 2D durch [92, 93, 131]. Dabei wird ein „Brick-and-Mortar" Gebiet verwendet, welches das Stratum corneum als „Backsteinwand" modelliert. Die Korneozyten werden als rechteckige „Backsteine" modelliert. Dazwischen befindet sich „als Mörtel" die Lipidmatrix (siehe in Abb. 5.1 links unten und in [93]). Das Gitter besteht aus Vierecken.

Für 3 Raumdimensionen entwickelte C. Wagner ein ähnliches Geometriemodell, bei dem Quader (engl.: „cuboids") zusammengesetzt werden (Abb. 5.1 rechts oben und [206]). Die Software *CuboidModeler* bietet die Möglichkeit, Länge, Breite und Höhe sowie Anzahl und Verschiebung der quaderförmigen Zellen und zudem die Lipidkanaldicke einzustellen. Die Vernetzung erfolgt ausschließlich mit Hexaedern.

Außerdem arbeitet C. Goodyer an der Universität von Leeds an einem Geometriemodell für

das Stratum corneum, bei dem Korneozyten durch hexagonale Prismen repräsentiert werden (siehe Abb. 5.1 unten mittig und [73, 74]). Die erzeugten Gitter bestehen aus Tetraedern.

Bei den beiden genannten 3D Geometriemodellen kann man die Korneozyten lediglich in horizontaler Richtung, d.h. nur zweidimensional verschieben und die modellierten Lipidkanäle durchlaufen ununterbrochen in horizontaler Richtung das gesamte Gebiet. Mikroskopische Aufnahmen zeigen jedoch, dass benachbarte Korneozyten versetzt und überlappend angeordnet sind ([142] Fig. 6 und [142] S.3→(3)).

Es besteht der Wunsch, ein neues 3D Geometriemodell zu entwickeln, das die geometrischen Eigenschaften des Stratum corneum realitätsnäher abbildet. Die folgenden Unterkapitel stellen dafür ein neues Geometriekonzept vor.

Zunächst wird in Kap. 5.1 zur Verwendung von Tetrakaidekaedern angeregt (siehe Abb. 5.1 rechts unten). Kap. 5.2 stellt dann den Zusammenbau von in-sich-geschachtelten Tetrakaidekaedern vor. Verschiedene Geometrieparameter des neuen Modells wie Winkel und Überlappung werden in Kap. 5.3 hergeleitet. Abschließend behandelt Kap. 5.4 die Vernetzung des neuen Geometriemodells mit den 4 *UG*-Elementtypen.

5.1 Motivation für ein Geometriemodell mit Tetrakaidekaedern

In den 60er Jahren wurde durch mikroskopische Untersuchungen von gefrorenen Schnitten des Stratum corneum die Form der Korneozyten als „hexagonal“ bezeichnet [28, 141]. Neuere Untersuchungen bestätigen diese Eigenschaft [117, 118, 171, 172, 174].

Einige Arbeiten, wie bspw. von D. N. Menton [142, 143], R. Lieckfeldt [130, S. 8 u. 138] oder P. Fritsch [60, S. 6] nennen Modelle aus vierzehnflächigen Tetrakaidekaedern, die sich lückenlos packen lassen (siehe Abb. 5.2).

Physikalisch lässt sich die Tetrakaidekaeder-Form im Falle der Epidermis folgendermaßen erklären: Wenn die Keratinozyten in der Epidermis im Zuge der Differenzierung nach außen verdrängt werden, nehmen sie dabei aufgrund ihrer Oberflächenspannung und des gegenseitigen Drucks eine geometrische Form an, mit der sie möglichst oberflächensparend und zwischenraumlos gepackt werden können.

Bei der Differenzierung werden aus den „cuboidalen“, verschieden großen und unregelmäßig angeordneten Keratinozyten flache und ähnlich große Korneozyten, die im Normalfall säulenförmig angeordnet sind („Columnärstruktur“ in [29], [142]) (→Abb. 5.1 und Abb. 5.2a).

Bei genauerem Betrachten von Abb. 5.1 und Abb. 5.2a kann man erkennen, dass diese „Zellsäulen“ versetzt zueinander angeordnet sind und ineinandergreifen. Die Überlappung von benachbarten Korneozyten ist je nach Körperregion und deren Belastung unterschiedlich stark ausgeprägt. Eine derartige „verzahnte“ Anordnung ist oberflächensparend, dicht und elastisch und bietet eine ideale Schutzfunktion.

Die Realisierung einer solchen Verzahnung ist mit den bisherigen Geometriemodellen (siehe in Abb. 5.1) nicht möglich. Laut D. N. Menton muss ein Geometriemodell aber den Aspekt der „interdigitating cells“ mitberücksichtigen [142, 143, vgl. 60].

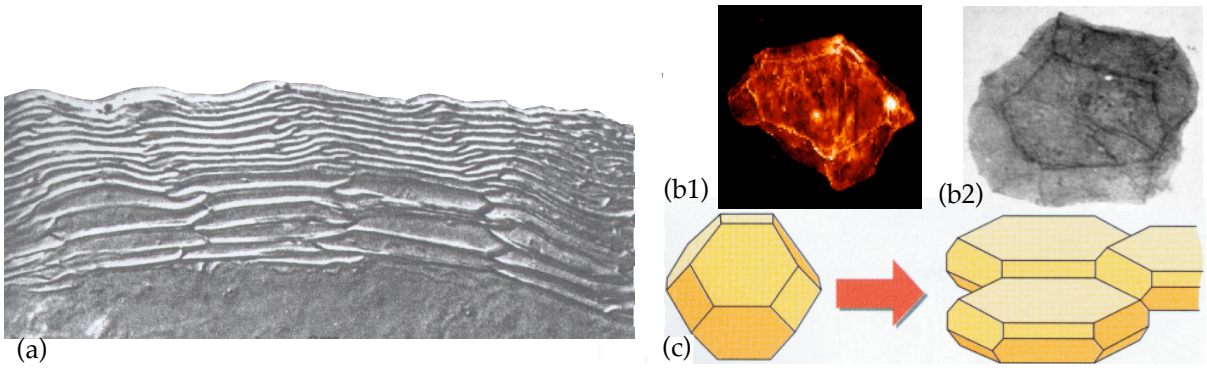


Abb. 5.2 (a) Lichtmikroskopische Aufnahme der Epidermis aus [141]; (b1) Aufnahme eines einzelnen Korneozyten am Rasterkraftmikroskop aus [171]; (b2) lichtmikroskopische Aufnahme eines einzelnen Korneozyten aus [163→Fig.3D]; (c) Korneozytenmodell mit Tetrakaidekaedern aus [60]

Menton führt verschiedene mikroskopische Aufnahmen von Korneozyten durch [142→Fig.18, 163→Fig.3D] und verweist auch auf Aufnahmen von Holundermark [124] und Korkzellen [125, 142]. Ferner macht Menton in seiner Arbeit zum Vergleich Experimente mit Seifenschaum, die zeigen, dass sich Seifenblasen auch spaltenförmig und überlappend anordnen. Im Falle von Seifenschaum ähnelt die Anordnung der Seifenblasen sehr stark zusammengesetzten Tetrakaidekaedern.

Basierend auf seinen Überlegungen zur Entstehung, zur Größe und zur Anordnung der Korneozyten sowie seinen Experimenten mit Seifenschaum [143] schlägt Menton für das Stratum corneum ein Tetrakaidekaedermodell vor, welches auf Kelvin zurückgeht.

Im Rahmen seiner Forschungsarbeiten suchte Lord Kelvin 1887 nach einer idealen Anordnung von Seifenschaum. Kelvin führte Experimente mit gelöteten Drahtmodellen durch, die er in eine Seifenlösung eintauchte und die Entfaltung des Seifenfilms am Drahtgitter beobachtete. Dabei stellte sich die Frage (Kelvin Problem), den Raum in gleich große „Zellen" mit kleinstmöglicher Scheidewand zu unterteilen [107, 108, 199, 212]. Die gängige Lösung vor Kelvin war eine Zerlegung mit rhombischen Dodekaedern (→Abb. 5.3c). Kelvin kam zu dem Schluss, dass sein Problem mit einer Aufteilung in „Tetrakaidekaeder" gelöst werden kann, welche 6 quadratische und 8 sechseckige Seitenflächen besitzen (Abb. 5.3a,b). Der Ausdruck „Tetrakaidekaeder" wurde damals von Kelvin verwendet und blieb diesem Vierzehnflächner bis heute anhaften. Der Name lässt sich aus dem Griechischen ableiten: τετραγωνο =Viereck, τεσσερα =vier, και =und, δεκα =zehn.

Kelvin verbesserte das Polyeder durch leichtes Verbiegen der Kanten der Quadrate nach außen sowie durch leichtes Verbiegen der Kanten zwischen Sechsecken zur Mitte des Polyeders.

Kelvin baute auf den Arbeiten von Joseph Plateau auf [162]. Dessen „Plateau Regeln" besagen zum einen, dass in einer Kante des Schaumes immer drei Flächen der Seifenblasen in einem Winkel von 120° aufeinander treffen („Plateau-Kante"). Zum anderen treffen an einem Knoten jeweils vier Plateau-Kanten unter einem Winkel von 109.47° (dem Tetraederwinkel *) zusammen. Anordnungen mit mehr als 4 Kanten pro Knoten oder mehr als 3 Flächen an einer Kante gelten als instabil und tendieren dazu, sich den Regeln entsprechend umzugestalten. So gilt die Zerlegung mit rhombischen Dodekaedern in Abb. 5.3c als instabil, da sich dabei 8 Kanten in einem Knoten schneiden [18, 230, vgl. 198].

* Die Verbindungsstrecken zwischen dem Mittelpunkt eines gleichseitigen Tetraeders und zwei seiner Ecken schließen einen Winkel von 109,47° ein.

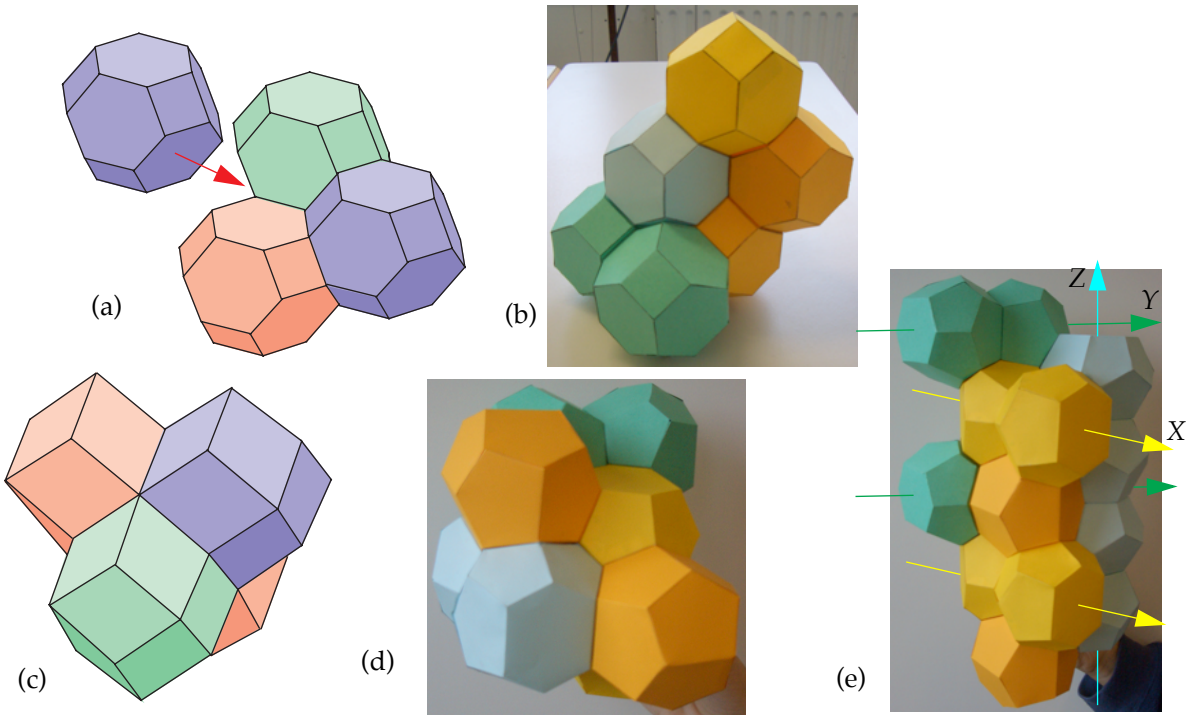


Abb. 5.3 Drei lückenlose Raumzerlegungen mit Polyedern gleichen Volumens: (a) Kelvin Tetrakaidekaeder, (b) Papiermodell [39] der Kelvin-Zerlegung, (c) rhombische Dodekaeder, (d) Papiermodell [39] der Weaire-Phelan-Zerlegung [38, 211, 212, 213] → Basiseinheit aus 3·2 Goldberg Tetrakaidekaedern und 2 pentagonalen Dodekaedern, (e) Papiermodell [39] einer Baugruppe aus 2 Basiseinheiten der Weaire-Phelan-Zerlegung [38, 211-213]

Kelvin-Tetrakaidekaeder lassen sich lückenlos, d.h. 100% dicht, packen (siehe Abb. 5.2 rechts und Abb. 5.3a,b). Dabei schneiden sich nur 4 Kanten in einem Knoten. Nach J. Plateau (s.o.) ist die Aufteilung mit Kelvin-Tetrakaidekaedern im Gegensatz zu der lückenlosen Dodekaederzerlegung aus Abb. 5.3c folglich eine stabile Zerlegung.

Auf der Suche nach der minimalen Trennfläche zur Aufteilung des Raums in eine Anordnung gleich großer und gleichartiger Zellen galt eine Packung mit Kelvin-Tetrakaidekaedern über ein Jahrhundert lang als ideal [199, 230]. Kelvins Anordnung kommt mit 0,7% weniger Gesamtfläche als die lückenlose rhombische Dodekaederzerlegung aus.

1994 stellten D. Weaire und R. Phelan eine Lösung vor, die nochmals 0,3% weniger Gesamtfläche benötigt (Abb. 5.3d,e und [38, 211-213, 230]). Hierbei wird allerdings eine hybride Zerlegung aus gleich großen aber nicht gleichartigen Zellen verwendet. Diese Zerlegung besteht aus pentagonalen Dodekaedern (Zwölfflächner mit fünfeckigen Seitenflächen) und sogenannten Goldberg-Tetrakaidekaedern. Das sind Vierzehnflächner, die 2 hexagonale (sechseckige) und 12 pentagonale (fünfeckige) Seitenflächen besitzen.

Im Rahmen des Schülerpraktikums von R. Dörr [39] konnte die Bauweise veranschaulicht werden. In Abb. 5.3e werden die Goldberg-Tetrakaidekaeder in X-Richtung (gelb), in Y-Richtung (grün) und in Z-Richtung (blau) säulenförmig aneinandergereiht. Zwischen mehreren solcher zusammengesetzten „Säulen“ verbleiben einzelne Hohlräume, in die die pentagonalen Dodekaeder (orange) passen. Abb. 5.3d zeigt die Basiseinheit der Weaire-Phelan-Zerlegung bestehend aus 3·2 (X,Y,Z) Goldberg-Tetrakaidekaedern sowie 2 Dodekaedern. Genau genommen kann man auch von „...a smaller unit of four cells...“ [38, 211-213, 230] sprechen, da die vier oberen Zellen in Abb. 5.3d (2 grüne Tetrakaidekaeder, oberer gelber Tetrakaidekaeder und oberer orangener Dodekaeder) durch 90° Drehung die 4 unteren Zellen ergeben.

Neben der Diskussion solcher Anordnungen von Polyedern ist es wichtig, zu untersuchen, wie sich das Verhältnis von Oberfläche zu Volumen bei einzelnen, für sich betrachteten Polyedern verhält bzw. welche konvexen Polyeder bei möglichst geringer Oberfläche ein möglichst großes Volumen besitzen.

In diesem Zusammenhang sei auf die Polyederungleichung von M. Goldberg (→ Gl. (5.1)) verwiesen [70]. In dieser Abschätzung für konvexe Polyeder beschreibt A^3/V^2 ein dimensionsangepasstes Verhältnis von Oberfläche A und Volumen V und n die Anzahl der Flächen des Polyeders. Mit der Funktion $u(n)$ fand Goldberg eine untere Schranke für A^3/V^2. Je größer n, desto kleiner wird die Begrenzung $u(n)$ (vgl. Tab. 5.1). Für n→∞ existiert der Grenzwert 36π. Das entspricht dem Oberflächen-Volumenverhältnis einer Kugel K und es gilt ${A_K}^3/{V_K}^2 = u(n)_{n\to\infty} = 36\pi \approx 113$.

$$\frac{A^3}{V^2} \geq u(n) = \frac{36\pi n(n-1)}{(n-2)^2} \tag{5.1}$$

Ein möglichst kleiner Wert für das Verhältnis A^3/V^2 ist in der Praxis vorteilhaft um bspw. die Angriffs- oder Verdunstungsfläche gering zu halten oder teures Oberflächenmaterial zu sparen [5].

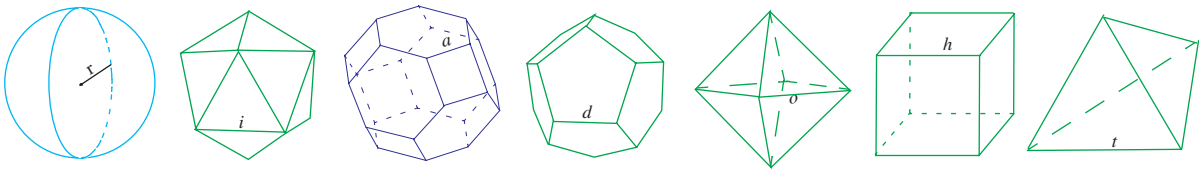


Abb. 5.4 Kugel, Ikosaeder, Tetrakaidekaeder, Dodekaeder, Oktaeder, Würfel, Tetraeder

Körper	Oberfläche A	Volumen V	A^3/V^2	n	$u(n)$	A_J **if** ($V_K = V_I = V_D = V_{Tkd} = V_O = V_H = V_T$)
Kugel	$A_K = 4\,\pi\ r^2$	$V_K = \frac{4}{3}\ \pi\ r^3$	$36\,\pi$	∞	$36\,\pi$	$A_K = A_K \cdot 1.000$
Ikosaeder	$A_I = 5\sqrt{3}\ i^2$	$V_I = \frac{5}{12}\ (3+\sqrt{5})\ i^3$	136.460	20	132.645	$A_I = A_K \cdot 1.064$
Tetrakaidekaeder	$A_{Tkd} = (6+12\sqrt{3})\ a^2$	$V_{Tkd} = 8\sqrt{2}\ a^3$	150.123	14	142.942	$A_{Tkd} = A_K \cdot 1.099$
Dodekaeder	$A_D = 3\sqrt{(5(5+2\sqrt{5}))}\ d^2$	$V_D = \frac{1}{4}\ (15+7\sqrt{5})\ d^3$	149.858	12	149.288	$A_D = A_K \cdot 1.098$
Oktaeder	$A_O = 2\sqrt{3}\ o^2$	$V_O = \frac{1}{3}\ \sqrt{2}\ o^3$	187.061	8	175.929	$A_O = A_K \cdot 1.182$
Hexaeder	$A_H = 6\ h^2$	$V_H = h^3$	216.000	6	212.058	$A_H = A_K \cdot 1.241$
Tetraeder	$A_T = \sqrt{3}\ t^2$	$V_T = \frac{1}{12}\ \sqrt{2}\ t^3$	374.123	4	339.292	$A_T = A_S \cdot 1.490$

Tab. 5.1 Oberflächen- und Volumenbetrachtung für die 5 platonischen Körper, Kugel und Tetrakaidekaeder

Die Goldbergabschätzung wird in Tab. 5.1 für einen Tetrakaidekaeder, die Kugel und die 5 platonischen Körper [91] eingesetzt. Als „platonische Körper" werden folgende 5 regulären Polyeder bezeichnet: Ikosaeder, Dodekaeder, Oktaeder, Hexaeder und Tetraeder.

Für alle Ergebnisse bestätigt sich $A^3/V^2 \geq u(n)$. Das Verhältnis A^3/V^2 ist beim Tetrakaidekaeder geringer als beim Oktaeder, Hexaeder und Tetraeder und ist dem Oberflächen-Volumenverhältnis des regulären Dodekaeders sehr ähnlich.

Außerdem wird in Tab. 5.1 (7. Spalte) ein interessanter Oberflächenvergleich für die Körper aus Abb. 5.4 durchgeführt. Die Oberfläche A_K einer Kugel K mit Volumen V_K wird mit der Oberfläche A_{Tkd} eines Tetrakaidekaeders verglichen, welcher dasselbe Volumen wie die Kugel K besitzt, d.h. $V_{Tkd} = V_K$. Für die platonischen Körper erfolgen entsprechende Oberflächenvergleiche mit $V_K = V_I = V_D = V_O = V_H = V_T$.

Bei diesem Vergleich schneidet der Tetrakaidekaeder sehr gut ab und benötigt nicht einmal 10% mehr Oberfläche als die Kugel.

Kugeln besitzen zwar das allerbeste Oberflächen-Volumenverhältnis, lassen sich aber nicht 100% dicht packen. Die Raumausfüllung bei Keplers dichtester Kugelpackung beträgt lediglich $\pi/\sqrt{18} \cong 74\%$ [87, 109, 129, 190]. Mit regulären Ikosaedern, regulären Dodekaedern, regulären Oktaedern und regulären Tetraedern [62] ist ebenfalls keine 3D-Parkettierung möglich. Im Gegensatz dazu ist eine Anordnung mit Tetrakaidekaedern eine lückenlose und zugleich oberflächenminimierende Packung. Beide Eigenschaften gelten auch nach einer Stauchung auf die Größenverhältnisse von Korneozyten (→Abb. 5.2c und [143]→S. 290 links oben).

Das folgende Geometriekonzept basiert auf einer einheitlichen Zerlegung mit Tetrakaidekaedern, da sie das Bauprinzip des Stratum corneum (Differenzierung) am besten wiedergibt und eine dichteste Packung mit nahezu minimaler Fläche ermöglicht. Dabei wird auch die Lipidmatrix zwischen den Korneozyten berücksichtigt und eine Vorgehensweise mit in-sich-geschachtelten Tetrakaidekaedern verwendet (→Kap. 5.2).

5.2 Ein Geometriekonzept mit geschachtelten Tetrakaidekaedern für die Stratum corneum Modellmembran Ω_{SC}

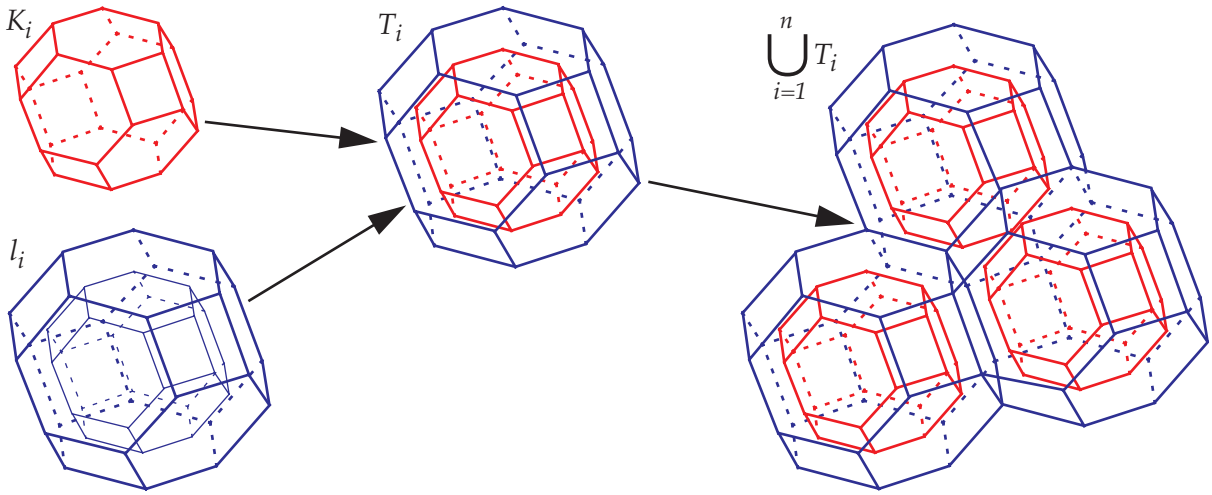


Abb. 5.5 Tetrakaidekaeder K_i (Korneozyt) eingebettet in Tetrakaidekaederhülle l_i (Lipidmantel) → Zusammenbau mehrerer geschachtelter Tetrakaidekaeder T_i

In diesem Kapitel erfolgt ein Aufbau der Stratum corneum Modellmembran Ω_{SC} mit n lückenlos zusammengesetzten Tetrakaidekaedern T_i .

$$\Omega_{SC} = \bigcup_{i=1}^{n} T_i \tag{5.2}$$

Es wird berücksichtigt, dass die Korneozyten des Stratum corneum in eine Lipidmatrix eingebettet sind. Ein Tetrakaidekaeder T_i besteht deshalb aus einem Tetrakaidekaeder K_i (→Korneozyt) mit einer passenden tetrakaidekaederförmigen Hülle l_i mit konstanter Dicke für das umgebende Lipid (siehe Gl. (5.3) und Abb. 5.5). Jedes T_i beschreibt somit eine Einheit aus zwei ineinander geschachtelten Tetrakaidekadern (engl.: nested tetrakaidecahedra).

$$T_i = K_i \cup l_i \quad \leftrightarrow \quad l_i = T_i \setminus K_i \quad \leftrightarrow \quad K_i = T_i \setminus l_i \tag{5.3}$$

Die Vereinigung aller Hüllen l_i ergibt die Lipidmatrix L der SC-Modellmembran Ω_{SC} .

$$L = \bigcup_{i=1}^{n} l_i \tag{5.4}$$

In der *UG-lgm*-Repräsentation von Ω_{SC} wird L mit einer einzigen *Subdomain* beschrieben. Hinzu kommen n innere „Subdomains“ für die Korneozyten K_i (siehe Gl. (5.5)).

$$\Omega_{SC} = L \cup \left(\bigcup_{i=1}^{n} K_i \right) \tag{5.5}$$

Da die *Subdomain L* den gesamten Raum zwischen den „Korneozyten“ beschreibt, besitzt sie eine recht komplexe Form und ist als Ganzes schwer zu vernetzen. Bei der Gittererzeugung wird daher Gl. (5.6) verwendet, die durch Einsetzen von Gl. (5.3) in Gl. (5.2) entsteht.

$$\Omega_{SC} = \bigcup_{i=1}^{n} (K_i \cup l_i) \tag{5.6}$$

Das bedeutet, dass man lediglich für die Grundeinheit „$K_i \cup l_i$“ eine Zerlegung in Gitterelemente finden muss. Dieses Gitter muss allerdings so beschaffen sein, dass man es beliebig oft kopieren und mit angepassten Koordinaten konsistent aneinandersetzen kann. Die Vernetzung der Grundeinheit wird in Kapitel 5.4 beschrieben.

Das vorgestellte Konzept ist in der Software *Tkd_Modeler* [48, 53] umgesetzt. Damit besteht die Möglichkeit, Geometrie- und Gitterdateien für dreidimensionale SC-Modellmembranen zu erzeugen (wie z.B. Ω_{sSC} in Kap. 5.3.4 u. 8.4 oder Ω_{rSC} in Kap. 8.5). Die Dateien werden im *lgm*- und *ng*-Dateiformat ausgegeben (Kap. 3.1, Kap. 3.2 u. [44]) und können für numerische Simulationen mit *UG* [9, 10] verwendet werden.

Die geometrischen Eigenschaften und Konfigurationsmöglichkeiten des neuen Geometriemodells werden im folgenden Kapitel 5.3 behandelt.

5.3 Geometrieeigenschaften des vorgestellten Konzepts

In diesem Kapitel werden die geometrischen Charakteristiken und Konfigurationsmöglichkeiten des geschachtelten Tetrakaidekaedermodells hergeleitet und beschrieben.

Zunächst wird gezeigt, wie man die Überlappung, die Breite, den Durchmesser sowie die verschiedenen dihedralen Winkel eines „Korneozyten“ K_i berechnen kann (→Kap. 5.3.1). Damit kann man die Geometrieeigenschaften von Einheitstetrakaidekaedern sowie Tetrakaidekaedern mit korneozytenähnlichen Größenverhältnissen herleiten (→Kap. 5.3.2). Anschließend erfolgt eine Beschreibung der Dicke der Lipidkanäle von Ω_{SC} (→Kap. 5.3.3). Danach wird anhand der Modell SC-Membran Ω_{sSC} veranschaulicht, wie die Tetrakaidekaeder in Reihen, Säulen und Schichten zu einem Geometriemodell zusammengebaut werden können (→Kap. 5.3.4). Schließlich wird die Länge des Diffusionswegs durch ein solches Tetrakaidekaedermodell diskutiert (→Kap. 5.3.5).

5.3.1 Überlappung, Breite, Durchmesser und Winkel - allgemein für einen Tetrakaidekaeder K_i

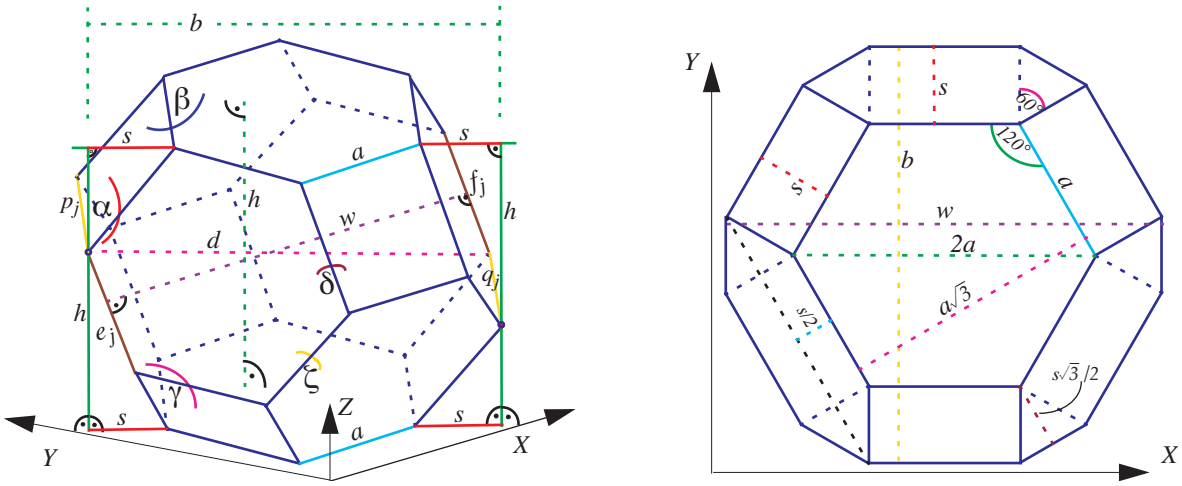


Abb. 5.6 Winkel- und Längenbezeichnung für einen Tetrakaidekaeder K_i; links: 3D-Darstellung, rechts: Draufsicht

Die Parameter *a*, *h* und *w* sind Inputparameter der Software *Tkd_Modeler* [48]. Mit ihnen kann der Tetrakaidekaeder K_i eindeutig beschrieben werden.

a: die einheitliche Kantenlänge des Basishexagons,
h: die Höhe von K_i ,
w: der Abstand zweier paralleler Kanten e_j und f_j

Für *a* und *w* muss folgende Bedingung gelten:

$$w > 2\,a \tag{5.7}$$

Die Länge *s* ist ein Maß für die Überlappung zusammengesetzter Tetrakaidekaeder.

$$s = \frac{1}{\sqrt{3}}(w - 2 \cdot a) \tag{5.8}$$

Für a gegen 0 wird die Überlappung s maximal und geht gegen $w/\sqrt{3}$. Es gilt

$$s_{max} < \frac{w}{\sqrt{3}} \tag{5.9}$$

Die Breite b bezeichnet den „Horizontalabstand“ zweier Kanten p_j und q_j. Es gilt:

$$b = \frac{1}{\sqrt{3}}(2w - a) = 2s + a\sqrt{3} \tag{5.10}$$

Der größte Abstand zweier Punkte eines Tetrakaidekaeders ist dessen Durchmesser d. Es gilt:

$$d = \frac{1}{3}\sqrt{h^2 + 12(a^2 - aw + w^2)} = \sqrt{a^2 + b^2 + \frac{1}{9}h^2} \tag{5.11}$$

$$d > b \tag{5.12}$$

$$d > w \tag{5.13}$$

Mit den Parametern a, h und w lassen sich auch die Berechnungsformeln für die 5 dihedralen Winkel von K_i herleiten. Diese Winkel sind:

α, der Winkel zwischen einem Seitensechseck und einem Seitenrechteck(vertikal benachbart),
β, der Winkel zwischen einem Basissechseck und einem Seitenrechteck,
γ, der Winkel zwischen einem Basissechseck und einem Seitensechseck,
δ, der Winkel zwischen einem Seitensechseck und einem Seitenrechteck(horizontal benachbart),
ξ, der Winkel zwischen zwei benachbarten Seitensechsecken.

$$\alpha = 2\pi - \gamma - \beta \tag{5.14}$$

$$\beta = \frac{\pi}{2} + \arccos\frac{h}{\sqrt{h^2 + 3(w - 2a)}} \tag{5.15}$$

$$\gamma = \frac{\pi}{2} + \arccos\frac{2h}{\sqrt{4h^2 + 3(w - 2a)^2}} \tag{5.16}$$

$$\delta = \pi - \arccos\frac{\frac{1}{2}h^2 + \frac{3}{2}\cdot(w - 2a)^2}{\sqrt{h^2 + 3\cdot(w - 2a)^2}\cdot\sqrt{h^2 + \frac{3}{4}\cdot(w - 2a)^2}} \tag{5.17}$$

$$\xi = \pi - \arccos\left(\frac{3h^2}{2h^2 + \frac{3}{2}\cdot(w - 2a)^2} - h^2\right) \tag{5.18}$$

Für die Summe ω aller Winkel im Tetrakaidekaeder K_i gilt:

$$\omega = 6\alpha + 6\beta + 6\gamma + 12\delta + 6\xi = 24\pi \tag{5.19}$$

5.3.2 Überlappung, Breite, Durchmesser und Winkel - speziell für Einheitstetrakaidekaeder und Tetrakaidekaeder mit korneozytenähnlichen Größenverhältnissen

Mit den realistischen Größenverhältnissen aus dem 2D Modell von M. Heisig et al. [93], d.h. $h=1$ und $w=30$, lassen sich die Breite $b_{30,1}$, der Durchmesser $d_{30,1}$, die charakteristischen Winkel $\alpha_{30,1}$, $\beta_{30,1}$, $\gamma_{30,1}$, $\delta_{30,1}$, $\zeta_{30,1}$ sowie die Verschiebung $s_{30,1}$ in Abhängigkeit von der Basiskantenlänge a herleiten:

$$\alpha_{30,1} = 2\pi - \beta_{30,1} - \gamma_{30,1} \tag{5.20}$$

$$\beta_{30,1} = \frac{\pi}{2} + \arccos\frac{1}{\sqrt{12\,a^2 - 360\,a + 2701}} \tag{5.21}$$

$$\gamma_{30,1} = \frac{\pi}{2} + \arccos\frac{2}{\sqrt{12\,a^2 - 360\,a + 2704}} \tag{5.22}$$

$$\delta_{30,1} = \pi - \arccos\frac{1 + 3\cdot(30-2a)^2}{\sqrt{1 + 3\cdot(30-2a)^2}\cdot\sqrt{4 + 3\cdot(30-2a)^2}} \tag{5.23}$$

$$\zeta_{30,1} = \pi - \arccos\left(\frac{3}{6a^2 - 180a + 1352} - 1\right) \tag{5.24}$$

$$s_{30,1} = \frac{1}{\sqrt{3}}\cdot(30-2a) \tag{5.25}$$

$$b_{30,1} = \frac{1}{\sqrt{3}}\cdot(60-a) \tag{5.26}$$

$$d_{30,1} = \frac{1}{3}\sqrt{1^2 + 12(a^2 - 30a + 900)} \tag{5.27}$$

In Tab. 5.2 sind Überlappung, Breite, Durchmesser und die Winkel für $w = 30$ und $h = 1$ für diverse $a < 15$ (vgl. Gl. (5.7)) berechnet. Die Summe aller Winkel ergibt immer 24 π und bestätigt somit Gl. (5.19). Der Durchmesser d ist stets größer als b und stets größer als w. Damit sind die Ungleichungen (5.12) und (5.13) bestätigt.

a	$s_{30,1}$	$b_{30,1}$	$d_{30,1}$	$\alpha_{30,1}$	$\beta_{30,1}$	$\gamma_{30,1}$	$\delta_{30,1}$	$\zeta_{30,1}$	$\omega_{30,1}$
0.01	17.31	34.635	34.637	3.31°	178.90°	177.79°	178.09°	3.82°	24 π
1	16.17	34.064	34.080	3.54°	178.82°	177.64°	177.96°	4.09°	24 π
10	5.77	28.868	30.552	9.89°	176.70°	173.41°	174.30°	11.40°	24 π
13	2.31	27.135	30.091	24.31°	171.79°	163.90°	166.10°	27.80°	24 π
14.0	1.15	26.558	30.024	46.10°	163.90°	150.00°	154.34°	51.32°	24 π
14.5	0.58	26.269	30.007	79.11°	150.00°	130.89°	139.11°	81.79°	24 π
14.75	0.29	26.125	30.003	115.70°	130.89°	113.41°	127.37°	105.26°	24 π
14.9	0.12	26.038	30.002	151.06°	109.11°	99.83°	121.43°	117.15°	24 π
14.99	0.01	25.987	30.002	177.03°	91.98°	90.99°	120.01°	119.97°	24 π

Tab. 5.2 Überlappung, Breite, Durchmesser und Winkel für einen Tetrakaidekaeder mit w=30 und h=1 in Abhängigkeit der Basiskantenlänge a

Abb. 5.7 zeigt einige Paare zusammengesetzter Tetrakaidekaeder in realistischer Korneozytengröße, d.h. $w = 30$, $h = 1$ und $a \in \{1, 10, 13, 14.9\}$. Es wird veranschaulicht, wie durch die Wahl von a unterschiedliche Überlappungen s realisiert werden können. Je größer die Überlappung ist, desto kleiner ist der seitliche Tetrakaidekaederwinkel α.

Zum Vergleich sind unten in Abb. 5.7 zwei Einheitstetrakaidekaeder zusammengesetzt, bei denen alle Kanten die konstante Länge 1 besitzen.

Für einen Tetrakaidekaeder mit einheitlicher Kantenlänge a_c gelten:

$$s_c = \frac{a_c}{\sqrt{3}} \tag{5.28}$$

$$b_c = \frac{5a_c}{\sqrt{3}} \tag{5.29}$$

$$d_c = a_c\sqrt{10} \tag{5.30}$$

$$w_c = 3 \cdot a_c \tag{5.31}$$

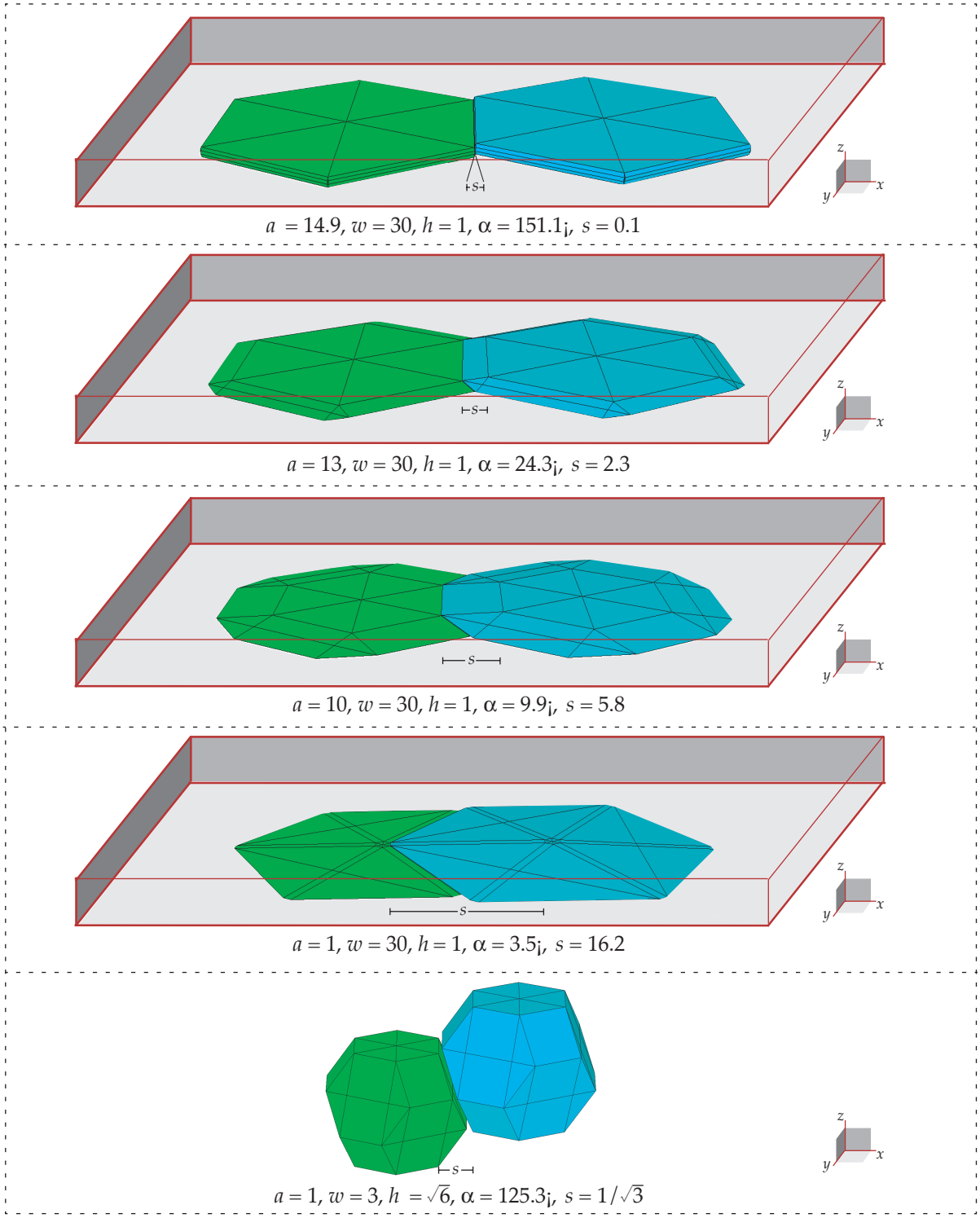
$$h_c = \sqrt{6} \cdot a_c \tag{5.32}$$

$$\alpha_c = \beta_c = \delta_c = \frac{\pi}{2} + \arccos\sqrt{\frac{2}{3}} = 125.26° \tag{5.33}$$

$$\gamma_c = \zeta_c = \frac{\pi}{2} + \arccos\left(\frac{2}{3}\sqrt{2}\right) = 109.47° \tag{5.34}$$

Ein Tetrakaidekaeder mit einheitlicher Kantenlänge a_c besitzt demnach nur zwei unterschiedliche Arten von dihedralen Winkeln. Für benachbarte Sechsecke ist der Winkel stets 109.47° * und für Nachbarschaften zwischen Sechsecken und Rechtecken beträgt der Winkel immer 125.26°.

* Der Winkel von 109.47° = $2\cdot\arctan\sqrt{2}$ entspricht wieder dem „Tetraederwinkel“ (vgl. S. 55 in Kap. 5.1)



$a = 14.9,\ w = 30,\ h = 1,\ \alpha = 151.1_{\text{j}},\ s = 0.1$

$a = 13,\ w = 30,\ h = 1,\ \alpha = 24.3_{\text{j}},\ s = 2.3$

$a = 10,\ w = 30,\ h = 1,\ \alpha = 9.9_{\text{j}},\ s = 5.8$

$a = 1,\ w = 30,\ h = 1,\ \alpha = 3.5_{\text{j}},\ s = 16.2$

$a = 1,\ w = 3,\ h = \sqrt{6},\ \alpha = 125.3_{\text{j}},\ s = 1/\sqrt{3}$

Abb. 5.7 Einige Überlappungen *s* zweier Tetrakaidekaeder in Abhängigkeit der Basiskantenlänge *a*

5.3.3 Lipidkanaldicke

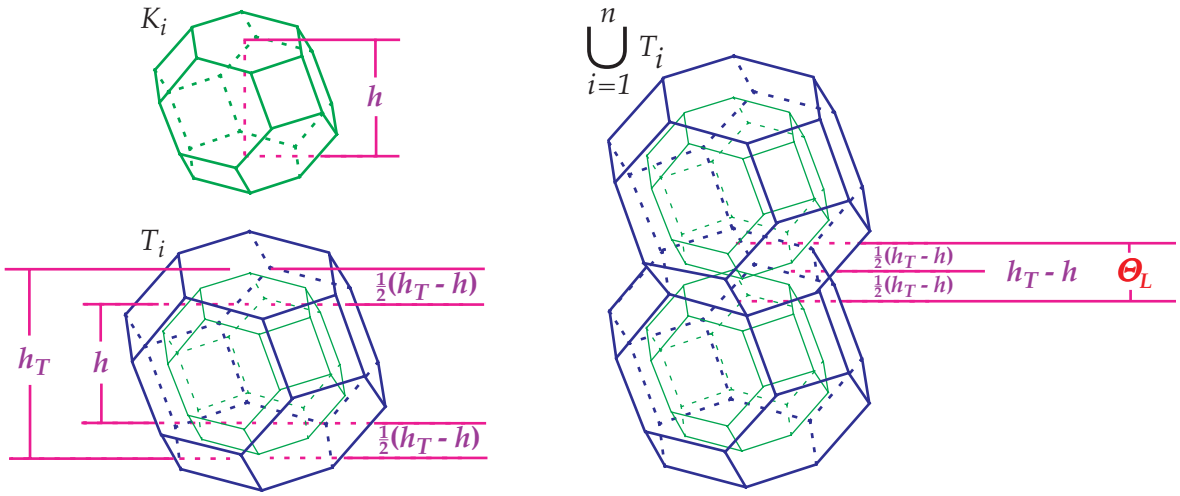


Abb. 5.8 Veranschaulichung von Gl. (5.36) zur Bestimmung der Lipidkanaldicke Θ_L

In Abb. 5.8 wird veranschaulicht, wie man die Dicke Θ_L der Lipidkanäle bestimmen kann. Der Parameter h beschreibt die Höhe des „Korneozyten“ K_i. Der Parameter h_T beschreibt die Höhe der Tetrakaidekaederschachtelung T_i (vgl. Anfang Kap. 5.2). Das Größenverhältnis von K_i und T_i kann mit dem Skalierungsfaktor f_{scale} kontrolliert werden (→Gl. (5.35)). Die Differenz der beiden Höhen h_T und h ergibt die Dicke Θ_L der Lipidkanäle (→Gl. (5.36)).

$$h_T = f_{scale} \cdot h \tag{5.35}$$

$$\Theta_L = h_T - h \tag{5.36}$$

Der Parameter Θ_L ist einer der Inputparameter der Software *Tkd_Modeler* [48].

5.3.4 Anordnung in Reihen, Spalten und Schichten

In Kap. 5.2 wird beschrieben, dass zur Erstellung einer Stratum corneum Modellmembran Ω_{SC} n Tetrakaidekaeder T_i zusammengebaut werden (vgl. Gl. (5.2)). Mit der Software *Tkd_Modeler* [48], ist es möglich, n_{row} Reihen, n_{col} Spalten und n_{high} Lagen von Tetrakaidekaedern zusammenzubauen. Für diesen Fall gilt für den Parameter n :

$$n_{Tkd_Modeler} = n_{row} \cdot n_{col} \cdot n_{high} \tag{5.37}$$

In Abb. 5.9 kann man in der Modell SC-Membran Ω_{sSC} die einzelnen Reihen, Spalten und Lagen sowie die säulenförmige Anordnung (vgl. S. 54) aus verschiedenen Richtungen gut erkennen. Zur besseren Unterscheidung wurde die „Lipidmatrix“ weggelassen (Ausnahme: Abb. 5.9b). Bei diesem Beispiel mit Einheitstetrakaidekaedern ist n_{row}=5, n_{col}=4 und n_{high}=3 gesetzt. Das Modell besteht folglich aus 5 · 4 · 3 = 60 zusammengesetzten „Korneozyten“. Die anderen Eingangsparameter sind a=1, w=3, h=$\sqrt{6}$ und Θ_L=$\sqrt{6}/10$.

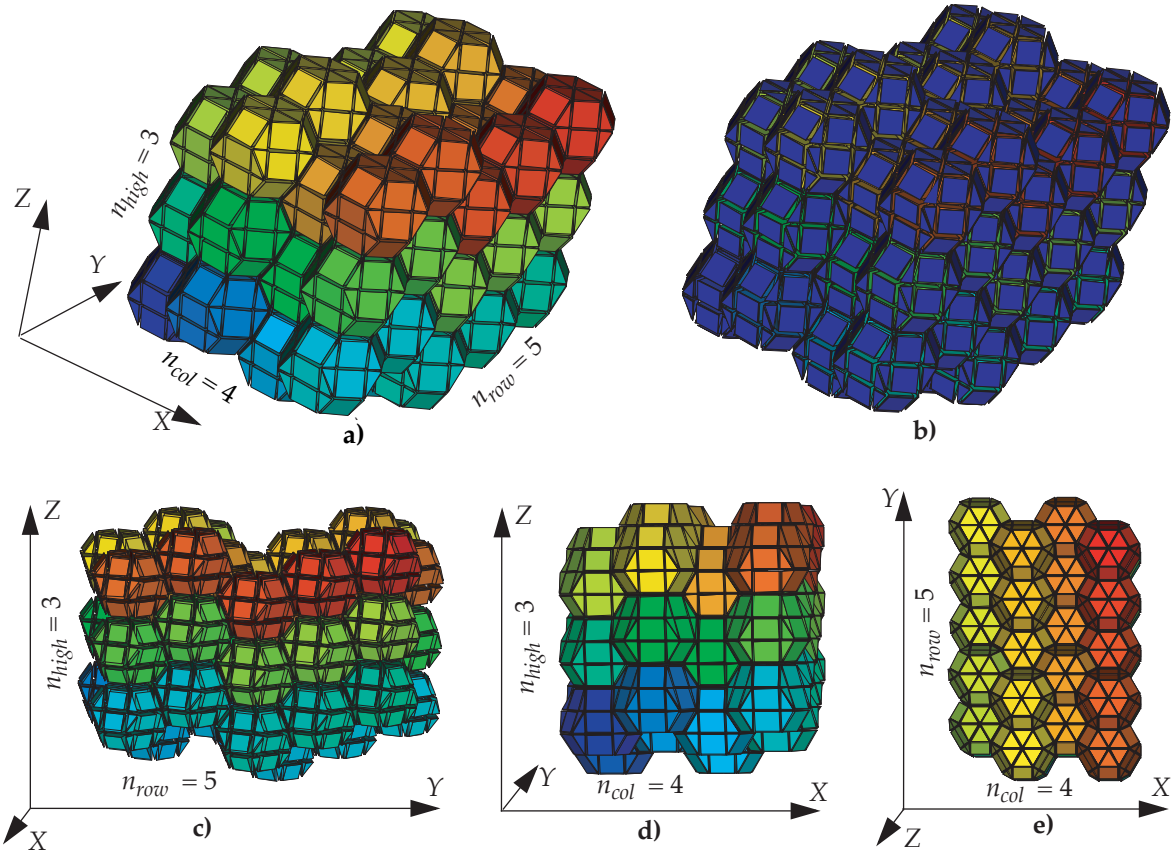


Abb. 5.9 Veranschaulichung der Modellparameter n_{row}, n_{col} und n_{high} anhand der einfachen Modell SC-Membran Ω_{sSC}, bestehend aus $5 \cdot 4 \cdot 3$ Einheitstetrakaidekaedern; fünf verschiedene Ansichten: a) ohne Lipidmatrix, b) mit Lipidmatrix, c) in X-Richtung, d) in Y-Richtung, e) in Z-Richtung.

5.3.5 Weglänge durch die Tetrakaidekaederpackung

Für die Arzneimitteldiffusion durch die dünnen Lipidkanäle ist die Weglänge durch die Tetrakaidekaederanordnungen in Abhängigkeit der Schichtenanzahl n_{high} ein weiterer wichtiger geometrischer Parameter der Stratum corneum Modellmembran Ω_{SC}. Im Folgenden werden zwei Wege mit den Längen l_K und l_F unterschieden. Der Parameter l_K beschreibt die Länge des Weges entlang der Kanten der Tetrakaidekaeder. Der Parameter l_F beschreibt die Länge des Weges über die Seitenflächen der Tetrakaidekaeder. Zur Berechnung von l_K und l_F können die Formeln (5.38) und (5.39) hergeleitet werden. Daraus kann man eine Beziehung zwischen l_F und l_K herleiten ($\rightarrow$ Gl.(5.40)).

$$l_K = (n_{high} - 1) \cdot \sqrt{3(w - 2a)^2 + h^2} \tag{5.38}$$

$$l_F = \frac{(n_{high} - 1)}{3} \cdot \left(\sqrt{3(w - 2a)^2 + 4h^2} + \sqrt{3(w - 2a)^2 + h^2} \right) \tag{5.39}$$

$$l_F < l_K < \tfrac{3}{2} l_F \tag{5.40}$$

In Tab. 5.3 werden die Weglängen l_K und l_F für einige Geometriebeispiele mit 10 Lagen, d.h. $n_{high}=10$ berechnet (vgl. [92, 93]).

Zum Vergleich ist in Tab. 5.3 auch die Länge l_B eines vergleichbaren Weges durch ein „Brick-and-Mortar" Geometriemodell [92, 93] mit Gl. (5.41) bestimmt. Die „Korneozyten" des „Brick-and-Mortar" Geometriemodells besitzen dieselbe Überlappung s, dieselbe Höhe h und dieselbe Breite b wie beim jeweiligen Modell mit Tetrakaidekaedern.

$$l_B = (n_{high} \cdot h) + (n_{high} - 1) \cdot s \tag{5.41}$$

a	14.9	14.5	14.0	13.5	13.0	12.5	10.0	1.0	$\to 0$	1
w	30.0	30.0	30.0	30.0	30.0	30.0	30.0	30.0	30.0	3
h	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	$\sqrt{6}$
s	0.115	0.577	1.155	1.732	2.309	2.887	5.774	16.166	<17.322	$1/\sqrt{3}$
b	26.038	26.269	26.558	26.847	27.135	27.424	28.868	34.064	<34.641	$5/\sqrt{3}$
d	30.002	30.007	30.024	30.052	30.091	30.140	30.552	34.080	<34.643	$\sqrt{10}$
l_K	9.525	18.0	32.450	47.624	63.0	78.460	156.144	436.570	<467.74	27
l_F	9.264	13.937	22.817	32.578	42.633	52.818	104.355	291.139	<311.92	$9\,(\sqrt{3}+1)$
l_B	11.035	15.193	20.395	25.588	30.781	35.983	61.966	155.494	<165.90	$10\sqrt{6}+3\sqrt{3}$
l_K / l_F	1.028	1.292	1.422	1.462	1.478	1.485	1.496	1.499	<1.5	$3/(\sqrt{3}+1)$
l_F / l_B	0.840	0.917	1.119	1.273	1.385	1.468	1.684	1.872	<1.88	0.828

Tab. 5.3 Weglängen l_K, l_F und l_B für einige SC-Modellmembranen mit n_{high} = 10

Mit zunehmender Überlappung s, bzw. kleiner werdendem a, wachsen die Diffusionswege-längen l_K und l_F sowie auch deren Quotient l_K/l_F. Für $a \to 0$, konvergieren l_K/l_F gegen 1.5, s gegen $30/\sqrt{3} = 17.3205...$, l_K gegen $9 \cdot (\sqrt{2701}) = 467.740...$ und l_F gegen $3 \cdot (\sqrt{2704}+\sqrt{2701}) = 311.913...$ (vgl. Gleichungen (5.9), (5.38) und (5.39)).

Die Berechnungen bestätigen Gl. (5.40). Der Weg l_F über die Tetrakaidekaederseitenflächen ist stets kürzer als der Weg l_K über die Tetrakaidekaederkanten und der Quotient l_K/l_F ist immer kleiner als 1.5 .

Die Weglänge l_B ist bei kleinen Überlappungen ähnlich groß wie l_F. Bei größer werdenden Überlappungen nimmt die Weglänge l_F allerdings schneller zu als l_B und l_F ist bei maximaler Überlappung fast doppelt so groß wie l_B [92, 93].

5.4 Gittererzeugung für Ω_{SC}

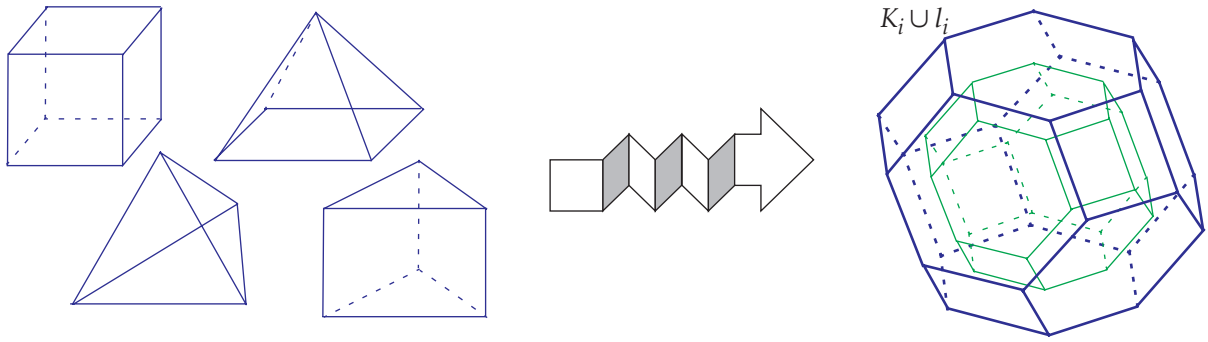


Abb. 5.10 Gesucht: ein hybrides Gitter für die Basiseinheit "$K_i \cup l_i$", bestehend aus Hexaedern, Prismen, Pyramiden und Tetraedern

Die zentrale Aufgabe bei der Netzgenerierung für Ω_{SC} besteht darin, eine sinnvolle Zerlegung G der Grundeinheit „$K_i \cup l_i$" zu finden (→Abb. 5.10, vgl. Gl. (5.6), in Kap. 5.2). Das gesuchte Gitter benötigt einen konsistenten Übergang zwischen den Teilgittern $G(K_i)$ und $G(l_i)$. Zudem muss das gesuchte Gitter so beschaffen sein, dass man es für Ω_{SC} beliebig oft kopieren und mit angepassten Koordinaten konsistent aneinandersetzen kann. Für die Zerlegung stehen im *lgm*-Domain des Simulationswerkzeugs *UG* die vier Elementtypen Hexaeder, Prismen, Pyramiden und Tetraeder zu Verfügung (siehe Kap. 3.2 u. [44]). Die Lösung für die beschriebene Aufgabe basiert auf der Zusammenarbeit mit Y. Liu [48].

In Kap. 5.4.1 wird mit $G(K_i)$ die Zerlegung des „Korneozyten" K_i vorgestellt. Kap. 5.4.2 zeigt dann $G(l_i)$, das Gitter für den „Lipidanteil" l_i. Danach werden die Netze $G(K_i)$ und $G(l_i)$ zum Gitter $G(K_i \cup l_i)$ konsistent zusammengefügt. In Kap. 5.4.3 folgt eine Betrachtung der Elementverteilung sowohl für das Grundgitter $G(K_i \cup l_i)$ als auch für ein Gitter $G(\bigcup_{i=1}^{n}(K_i \cup l_i))$ aus mehreren Grundeinheiten. Zum Schluss zeigt Kap. 5.4.4, dass die Zerlegung $G(K_i \cup l_i)$ zur anisotropen Verfeinerung geeignet ist.

5.4.1 Vernetzung von K_i

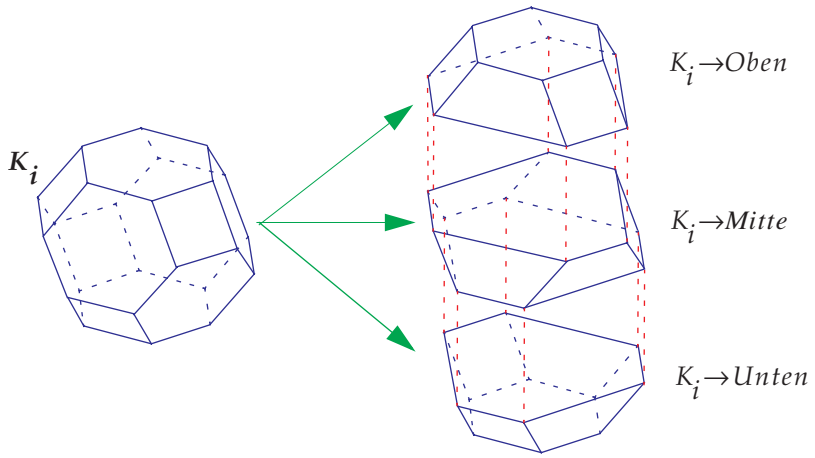


Abb. 5.11 Aufteilung von K_i in $K_i \rightarrow Oben$, $K_i \rightarrow Mitte$ und $K_i \rightarrow Unten$

Zunächst erfolgt die Zerlegung des Tetrakaidekaeders K_i in 3 Teile.

$$K_i = K_i \rightarrow Oben \cup K_i \rightarrow Mitte \cup K_i \rightarrow Unten \tag{5.42}$$

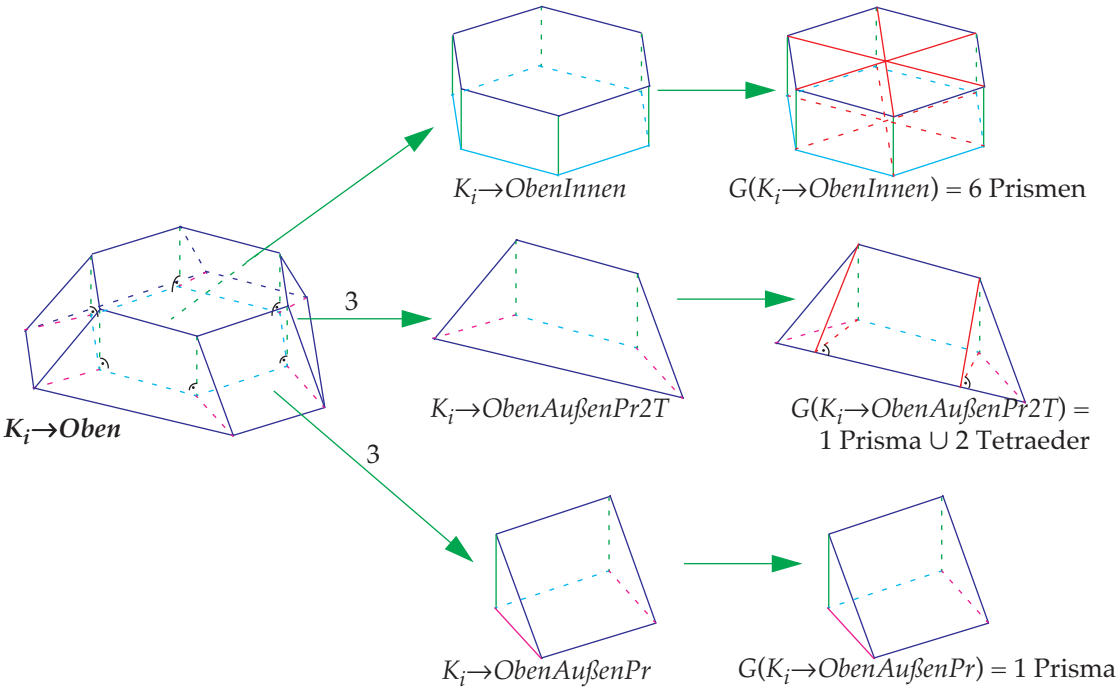


Abb. 5.12 Vernetzung von $K_i \rightarrow Oben$

Nun wird $K_i \rightarrow Oben$ aufgeteilt:

$$K_i \rightarrow Oben = K_i \rightarrow ObenInnen \cup 3\, K_i \rightarrow ObenAußenPr2T \cup 3\, K_i \rightarrow ObenAußenPr \qquad (5.43)$$

Das erzeugte Gitter $G(K_i \rightarrow Oben)$ besteht aus 12 Prismen und 6 Tetraedern.

Analog zur Vernetzung von $K_i \rightarrow Oben$ erhält man die Zerlegung für $K_i \rightarrow Unten$ bzw. das Gitter $G(K_i \rightarrow Unten)$, das ebenfalls aus 12 Prismen und 6 Tetraedern besteht (→Gl.(5.44)).

$$K_i \rightarrow Unten = K_i \rightarrow UntenInnen \cup 3\, K_i \rightarrow UntenAußenPr2T \cup 3\, K_i \rightarrow UntenAußenPr \qquad (5.44)$$

Abb. 5.13 zeigt die Zerlegung von $K_i \rightarrow Mitte$ in $K_i \rightarrow MitteInnen$ und 3 $K_i \rightarrow MitteAußen$.

$$K_i \rightarrow Mitte = K_i \rightarrow MitteInnen \cup 3\, K_i \rightarrow MitteAußen \qquad (5.45)$$

$$K_i \rightarrow MitteAußen = K_i \rightarrow MitteAußen2Pr \cup K_i \rightarrow MitteAußen2PrH \cup K_i \rightarrow MitteAußenH \cup K_i \rightarrow MitteAußenH2Pr \qquad (5.46)$$

$K_i \rightarrow MitteAußenH2Pr$ beschreibt einen Übergang von einem Hexaeder zu 2 Prismen und $K_i \rightarrow MitteAußen2PrH$ einen Übergang von 2 Prismen zu einem Hexaeder.

Es entsteht das Gitter $G(K_i \rightarrow Mitte)$, das aus 12 Prismen, 6 Tetraedern, 6 Pyramiden und 3 Hexaedern besteht.

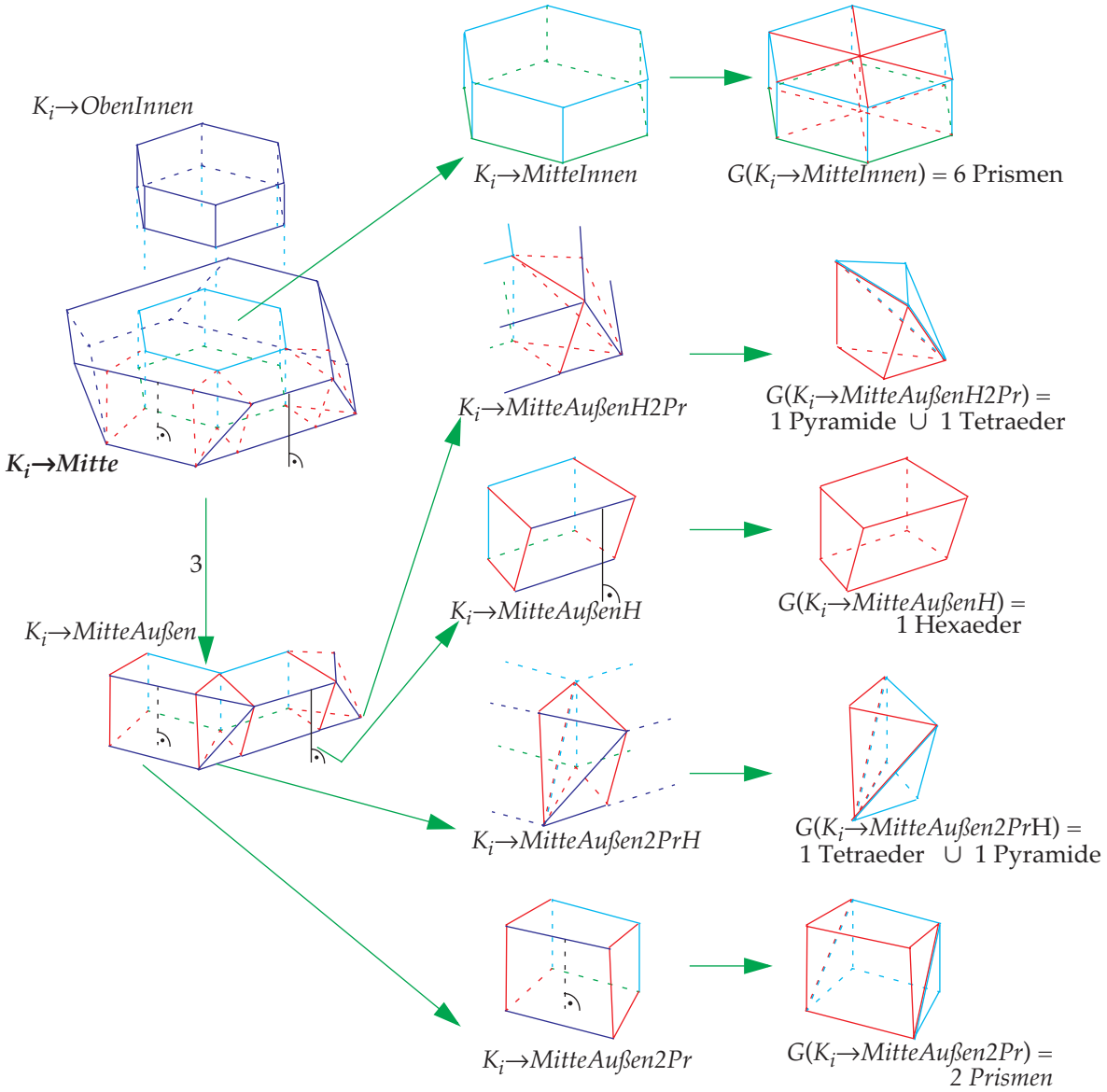


Abb. 5.13 Vernetzung von $K_i \rightarrow Mitte$

Zusammengefasst erhält man für jeden Tetrakaidekaeder K_i eine Zerlegung $G(K_i)$ bestehend aus 3 Hexaedern, 36 Prismen, 6 Pyramiden und 18 Tetraedern, d.h. insgesamt 63 Elementen für einen „Korneozyten“ (siehe Abb. 5.14).

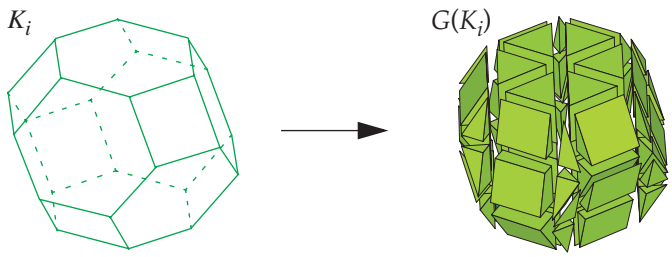


Abb. 5.14 Vernetzung von K_i mit 3 Hexaedern, 36 Prismen, 6 Pyramiden und 18 Tetraedern, d.h. mit insgesamt 63 Elementen

5.4.2 Vernetzung von l_i

In diesem Kapitel wird die Zerlegung des „Lipidanteils“ l_i vorgestellt. Dieser besitzt die Form eines Tetrakaidekaeders T_i , in dessen Mitte ein kleinerer, aber winkelgleicher Tetrakaidekaeder K_i ausgeschnitten ist (vgl. Kap. 5.2).

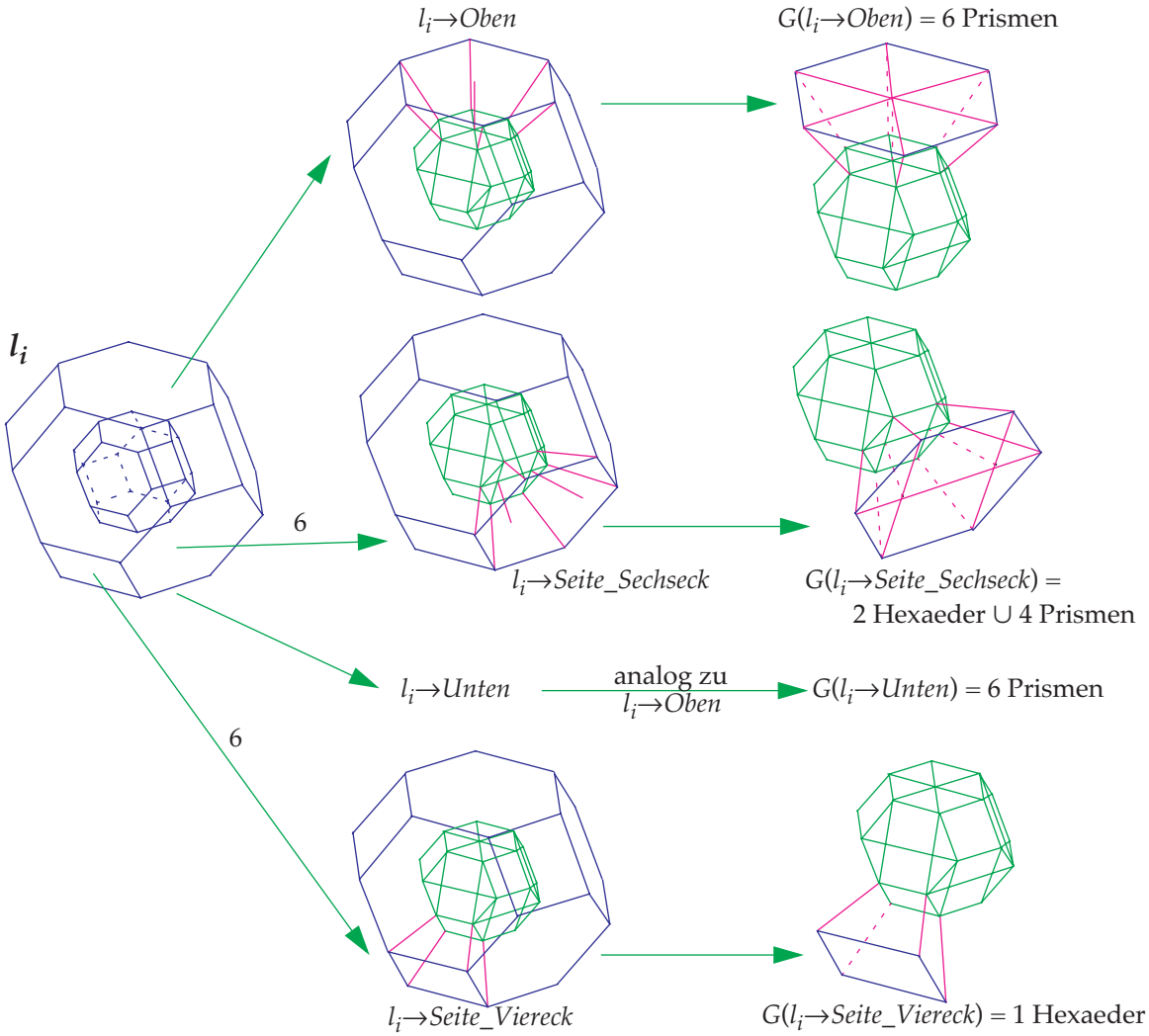


Abb. 5.15 Zerlegung des „Lipidanteils“ bzw. der Tetrakaidekaederhülle l_i

Bei der Vernetzung verwendet man für den inneren Rand von l_i das Oberflächengitter O_{K_i} des bereits existierenden Gitters $G(K_i)$. Außerdem wird ein gleichartiges Oberflächengitter O_{l_i} auf dem äußeren Rand von l_i erzeugt. Verbindet man jeden der 38 Knoten von O_{K_i} mit dem entsprechenden Partnerknoten von O_{l_i} , so entstehen Kanten eines 3D-Gitters für l_i .

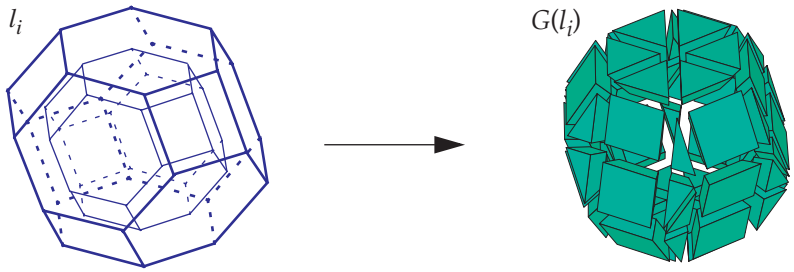


Abb. 5.16 Vernetzung von l_i mit 18 Hexaedern und 36 Prismen, d.h. mit insgesamt 54 Elementen

Die Aufteilung für l_i wird in Abb. 5.15 veranschaulicht. Es gilt

$$l_i = l_i \rightarrow Oben \cup l_i \rightarrow Unten \cup 6\, l_i \rightarrow Seite_Sechseck \cup 6\, l_i \rightarrow Seite_Viereck \tag{5.47}$$

Für $l_i \rightarrow Oben$ und $l_i \rightarrow Unten$ entsteht dabei jeweils ein Gitter bestehend aus 6 Prismen. Für jedes Teilgebiet $l_i \rightarrow Seite_Sechseck$ entsteht ein Gitter bestehend aus 4 Prismen und 2 Hexaedern. Für jedes Teilgebiet $l_i \rightarrow Seite_Viereck$ wird ein einzelner Hexaeder erzeugt.

Insgesamt wird für den „Lipidmantel“ l_i das Gitter $G(l_i)$ bestehend aus 36 Prismen und 18 Hexaedern, d.h. insgesamt 54 Elementen, erzeugt (→Abb. 5.16).

5.4.3 Vernetzung von $(K_i \cup l_i)$ und $\bigcup_{i=1}^{n} (K_i \cup l_i)$

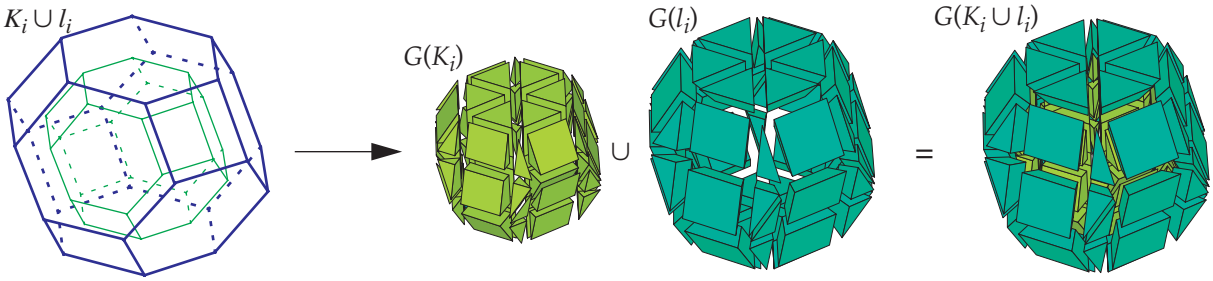


Abb. 5.17 Vernetzung von $(K_i \cup l_i)$ mit 21 Hexaedern, 72 Prismen, 6 Pyramiden und 18 Tetraedern, d.h. mit insgesamt 117 Elementen

Durch Vereinigung der beiden zusammenpassenden Gitter $G(K_i)$ aus Kap. 5.4.1 und $G(l_i)$ aus Kap. 5.4.2 entsteht das Gitter $G(K_i \cup l_i)$, das in Abb. 5.17 rechts abgebildet ist.

$$G(K_i \cup l_i) = G(K_i) \cup G(l_i) \tag{5.48}$$

$G(K_i \cup l_i)$ besteht aus 117 Elementen. Es sind 21 Hexaeder, 72 Prismen, 6 Pyramiden und 18 Tetraeder. Dies entspricht einer Elementverteilung von 17.95% Hexaedern, 61.54% Prismen, 5.13% Pyramiden und 15.38% Tetraedern.

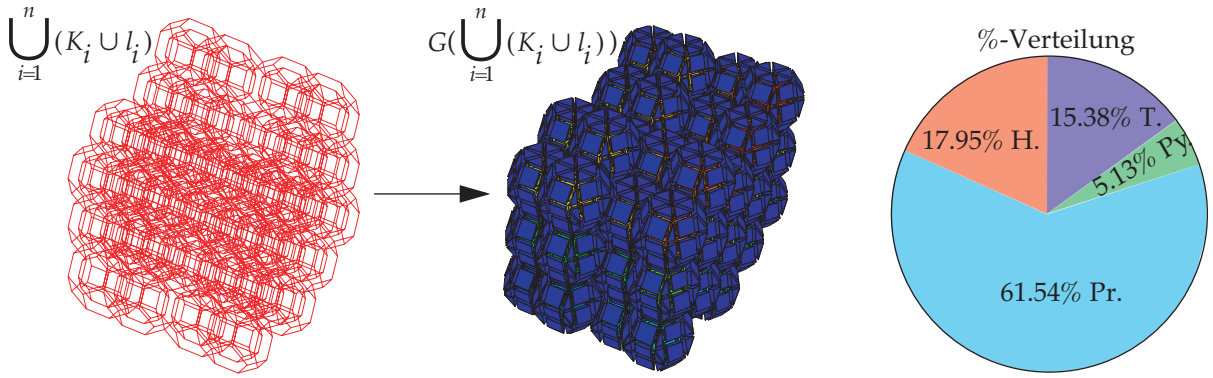


Abb. 5.18 Vernetzung von $\bigcup_{i=1}^{n}(K_i \cup l_i)$ mit insgesamt $n \cdot 117$ Elementen; $\forall n$ entstehen Gitter mit 17.95% Hexaedern, 61.54% Prismen, 5.13% Pyramiden und 15.38% Tetraedern

Die prozentuale Elementverteilung ist unabhängig von n, der Anzahl der zusammengesetzten Grundeinheiten und gilt für jedes hybride Netz $G(\bigcup_{i=1}^{n}(K_i \cup l_i))$ der beschriebenen Machart (siehe Abb. 5.18).

Mit der vorgestellten Methode werden für eine inhomogene Stratum corneum Modellmembran Ω_{SC} Gitterelemente erzeugt, die sich für Simulationsrechnungen mit springenden Koeffizienten eignen (siehe Kap. 8.4 u. 8.5).

Für die datentechnische Repräsentation der Gitter für Ω_{SC} wird das *UG*-Dateiformat *ng* verwendet (siehe Kap. 3.2 u. [44]).

5.4.4 Anisotrope Verfeinerung

Bei der vorgestellten Gittererzeugungsmethode entstehen insbesondere bei realistischen Größenverhältnissen mit starker Anisotropie von Korneozyten und Lipidkanälen flache und langgestreckte Gitterelemente (siehe Anisotropiewerte Tab. 8.2 in Kap. 8.2).

Die Elementanzahl des Grobgitters ist mit $n \cdot 117$ möglichst gering gehalten. Da die langgestreckten flachen Gitterelemente aber teilweise keine genauen Approximationen ermöglichen, sind oftmals Elemente mit einer feineren Maschenweite in horizontaler Richtung wünschenswert. Das Gitter soll also einerseits so grob wie möglich und andererseits so fein wie nötig sein.

Bei diesen gegensätzlichen Anforderungen ist es von großem Vorteil, dass sich die Zerlegung $G(K_i \cup l_i)$ aus Kap. 5.4.3 neben der regulären Verfeinerung auch anisotrop verfeinern lässt (Abb. 5.19, [8], [48]). Die roten Linien in Abb. 5.19 veranschaulichen, wie die Gitterelemente von $G(K_i \cup l_i)$ lediglich in vertikaler Richtung geteilt werden können, ohne die Konsistenz des Gitters zu beeinträchtigen (vgl. Kap. 4.1).

Für die anisotrope Verfeinerung von $G(K_i \cup l_i)$ werden die Verfeinerungsregeln *hex_bisect*, *pri_bisect* und *pri_quadsect* (siehe Abb. 5.20) im Simulationswerkzeug *UG* realisiert. Beim Aufbau der Mehrgitterhierarchie können somit neben regulären Verfeinerungen auch elementsparende und der jeweiligen Lösung angepasste anisotrope Verfeinerungen durchgeführt werden.

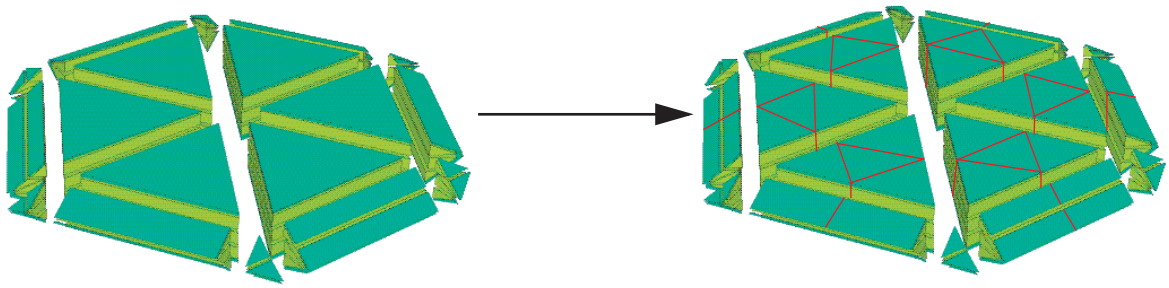


Abb. 5.19 Anisotrope Verfeinerung des Gitters $G(K_i \cup l_i)$ mit vertikalen Schnitten

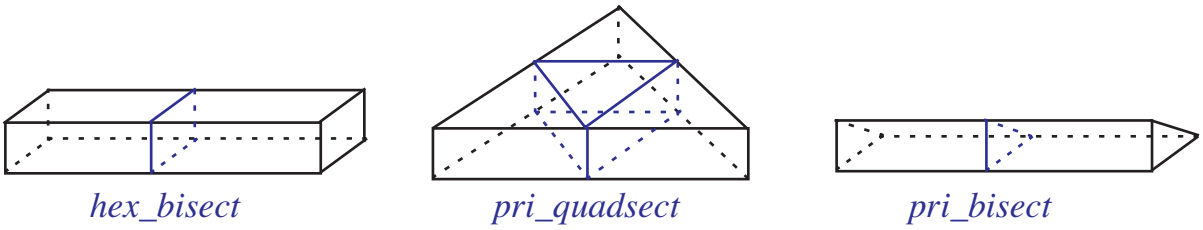


Abb. 5.20 Anisotrope Verfeinerungsregeln für $G(K_i \cup l_i)$

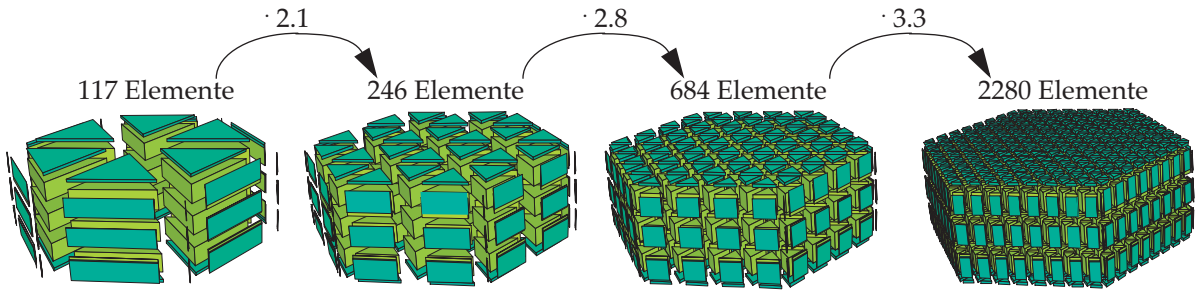


Abb. 5.21 Dreifache anisotrope Verfeinerung des Gitters $G(K_i \cup l_i)$

In Abb. 5.21 wurde ein Grundeinheitsgitter mit Hilfe der Regeln aus Abb. 5.20 dreimal anisotrop verfeinert. In Abb. 5.21 ist auch die Elementzunahme durch jeden anisotropen Verfeinerungsschritt dargestellt. Tab. 5.4 zeigt, dass diese Zunahme deutlich geringer als bei einer regulären Verfeinerung ausfällt.

	#Elemente							#Knoten						
	Level 0		Level 1		Level 2		Level 3	Level 0		Level 1		Level 2		Level 3
anisotrope Verfeinerung	117	· 2.1	246	· 2.8	684	· 3.3	2280	90	· 2.1	186	· 2.6	486	· 3.1	1518
reguläre Verfeinerung	117	· 8.1	948	· 8.1	7656	· 8.1	61680	90	· 6.5	587	· 7.3	4293	· 7.7	32969

Tab. 5.4 Vergleich der Element- und Knotenanzahl bei anisotroper bzw. regulärer Verfeinerung für $G(K_i \cup l_i)$

Kapitel 6

Anisotropie und Qualität von Gitterelementen

Bei anisotropen Schichtengebieten würde bei einer Zerlegung in isotrope Elemente eine immens große Elementanzahl entstehen. Für numerische Simulationen möchte man aber ein möglichst grobes Gitter. Deshalb erfolgt für stark anisotrope Geometrien typischerweise eine Vernetzung mit Gitterelmenten, die ebenfalls extreme Seitenverhältnisse besitzen.

Anisotrope Gitterelemente müssen jedoch bei numerischen Simulationen kein Nachteil sein. Unter Umständen sind anisotrope Elemente mit einer ganz bestimmten Ausdehnung in einer bestimmten Richtung für die zu lösende PDG sogar besser geeignet als isotrope oder gleichseitige Elemente [187]. Es ist also von Interesse ein geeignetes Maß für die Anisotropie von Gitterelementen zu finden.

Mit dem Kantenverhältnis in Kap. 6.1, dem Oberflächen-Volumen-Verhältnis in Kap. 6.2 und dem Radienverhältnis in Kap. 6.3 werden vor dem Hintergrund der hier betrachteten hybriden 3D *UG*-Gitter drei Verfahren zur Anisotropiebeschreibung von Gitterelementen vorgestellt und anhand der 12 ähnlich „flachen" Testelemente aus Abb. 6.1 diskutiert.

Alle 12 Beispielelemente besitzen einen „Durchmesser" von 10 und eine „Dicke" von 1.*

In Kap. 6.3 wird zunächst zwischen verschiedenen Radien unterschieden (Kap. 6.3.1). Danach werden zwei iterative Verfahren zu Radienberechnung beschrieben (Kap. 6.3.2 und 6.3.3) und anhand herleitbarer Beispielelemente (Kap. 6.3.4) sowie einer Vorgehensweise der TU München (Kap. 6.3.5) validiert.

In Kap. 6.4 wird auf den Aspekt der Winkeleigenschaften von Gitterelementen eingegangen. Elementwinkel werden in J. Shewchuks [187] und vielen anderen Arbeiten [2, 4, 55, 58, 128, 189, 192, 218] unter verschiedenen Gesichtspunkten genannt und müssen für einen erfolgreichen numerischen Simulationsprozess berücksichtigt werden.

Die Frage nach dem optimalen Gitter zur Simulation einer PDG ist im Allgemeinen nicht einfach zu beantworten. Je nach PDG, Vorzugsrichtung der Lösung sowie den Eigenschaften der Geometrie können die idealen Elemente völlig unterschiedlich aussehen. Eine ausführliche Analyse dieser Thematik würde den Rahmen der Arbeit sprengen. Die wesentlichen Aspekte werden jedoch in Kap 6.5 basierend auf [187] dargestellt, um eine Basis zur weiteren Diskussion dieser Fragestellung zu legen.

* Durchmesser: größter Abstand zweier Punkte eines Elements;
Dicke: kleinster Abstand zweier paralleler Ebenen, die ein Element begrenzen

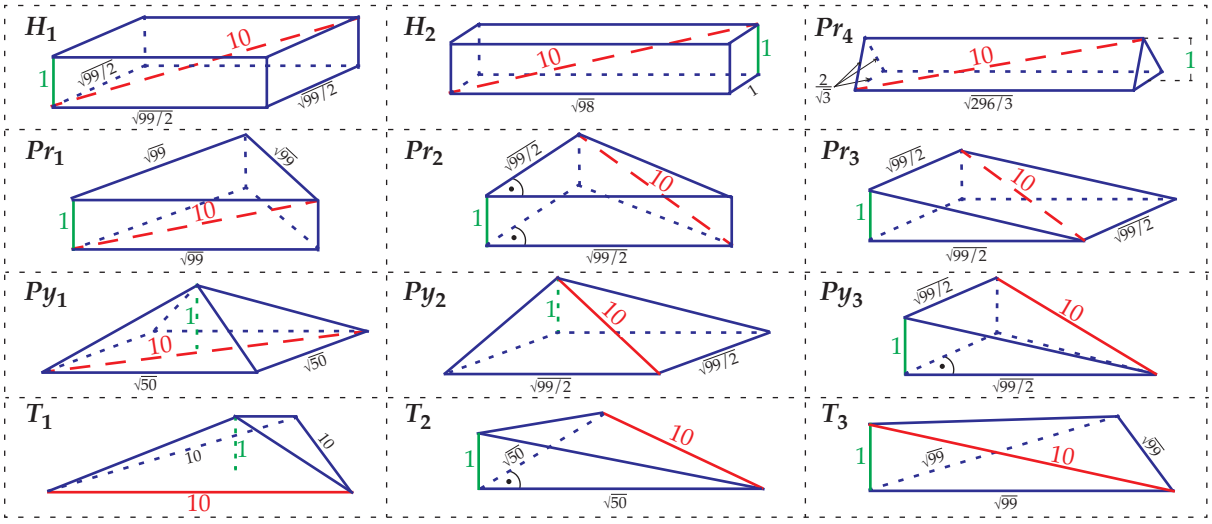


Abb. 6.1 Zwölf „flache“ Gitterelemente mit ähnlichen Größenverhältnissen

	K=l_{max}/l_{min} (→Kap. 6.1)	Ψ=$\sqrt{A}/\sqrt[3]{V}$ (→Kap. 6.2)	P=R/r (→Kap. 6.3)
H_1	$\sqrt{99/2}/1$ = 7.04	$\sqrt{127.14}/\sqrt[3]{49.50}$ = 3.07	5.00/0.50 = 10.00
H_2	$\sqrt{98}/1$ = 9.90	$\sqrt{41.60}/\sqrt[3]{9.90}$ = 3.00	5.00/0.50 = 10.00
Pr_1	$\sqrt{99}/1$ = 9.95	$\sqrt{115.59}/\sqrt[3]{42.87}$ = 3.07	5.77/0.50 = 11.54
Pr_2	$\sqrt{99}/1$ = 9.95	$\sqrt{73.52}/\sqrt[3]{24.75}$ = 2.94	5.00/0.50 = 10.00
Pr_3	$\sqrt{101/2}/1$ = 7.11	$\sqrt{113.57}/\sqrt[3]{24.75}$ = 3.66	5.00/0.46 =10.87
Pr_4	$\sqrt{3}\sqrt{296/3}/2$ = 8.60	$\sqrt{35.56}/\sqrt[3]{5.735}$ = 3.33	5.01/0.33 = 15.03
Py_1	$\sqrt{50}/\sqrt{26}$ = 1.39	$\sqrt{101.96}/\sqrt[3]{16.67}$ = 3.95	5.00/0.49 = 10.20
Py_2	10/1 = 10.00	$\sqrt{106.53}/\sqrt[3]{16.50}$ = 4.05	5.00/0.40 = 12.50
Py_3	10/1 = 10.00	$\sqrt{65.28}/\sqrt[3]{16.50}$ = 3.17	5.00/0.46 = 10.87
T_1	$10/\sqrt{34.33}$ = 1.71	$\sqrt{89.13}/\sqrt[3]{14.43}$ = 3.88	5.78/0.49 = 11.80
T_2	10/1 = 10.00	$\sqrt{57.57}/\sqrt[3]{8.33}$ = 3.74	5.00/0.43 = 11.63
T_3	10/1 = 10.00	$\sqrt{95.97}/\sqrt[3]{14.29}$ = 4.04	5.79/0.45 = 12.87
	arithmetisches Mittel = 7.97	arithmetisches Mittel = 3.49	arithmetisches Mittel =11.44
	Standardabweichung = 3.06	Standardabweichung = 0.42	Standardabweichung = 1.43
	Variationskoeffizient = 0.384	Variationskoeffizient = 0.120	Variationskoeffizient = 0.125
	Spannweite = 8.61	Spannweite = 1.11	Spannweite = 5.03

Tab. 6.1 Ergebniswerte für die Anisotropie der Gitterelemente aus Abb. 6.1 mit den Methoden der Kapitel 6.1, 6.2 und 6.3

6.1 Kantenverhältnis

Ein häufig verwendetes Maß zur Beschreibung der Anisotropie eines Gitterelements E_i ist das Kantenverhältnis $K(E_i)$, der Quotient aus größter Kantenlänge l_{max} und kleinster Kantenlänge l_{min} (→ Gl. (6.1), vgl. [103]→Ende Kap. 6.1.1). Die englische Bezeichnung dieses Maßes ist „edge ratio". *

$$K(E_i) = \frac{l_{max}(E_i)}{l_{min}(E_i)} \tag{6.1}$$

Für Einheitselemente mit der Kantenlänge 1 (siehe S. 90) ist $K(E_i)$ =1 unabhängig vom Elementtyp. Inwieweit sich dieses Maß aber für die in dieser Arbeit betrachteten anisotropen Gitter aus Hexaedern, Prismen, Pyramiden und Tetraedern eignet, soll nun diskutiert werden.

Mit Gl. (6.1) erhält man für die 12 Beispielelemente aus Abb. 6.1 in 10 Fällen Werte zwischen 7 und 10, d.h. Ergebnisse der selben Größenordnung. Allerdings gibt es mit $K(T_1)$ und $K(Py_1)$ zwei Werte, die von den anderen Elementen sehr stark abweichen (→Tab. 6.1, 2. Spalte).

Betrachtet man die Tetraeder T_1 , T_2 und T_3, so ist $K(T_2) = K(T_3) = 10/1 = 10$ fast 6 mal größer als $K(T_1) = 10/\sqrt{34.33} = 1.71$ (→ Abb. 6.1, Tab. 6.1, Abb. 6.2).

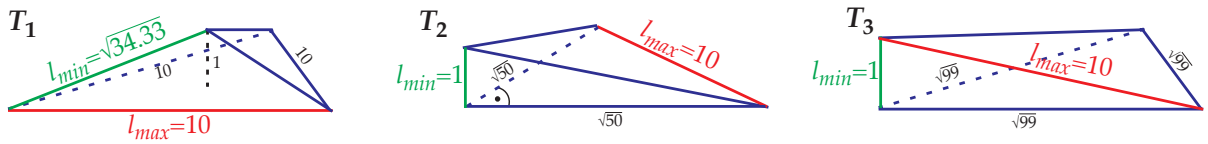


Abb. 6.2 Diskrepanz mit $K(E_i)$ bei ähnlich flachen Tetraedern: $K(T_2) = K(T_3) >> K(T_1)$

Bei den Pyramiden Py_1 , Py_2 und Py_3 ist die Diskrepanz noch deutlicher. Das Ergebnis für die mittlere und rechte Pyramide $K(Py_2) = K(Py_3) = 10/1 = 10$ ist mehr als 7 mal größer als das Ergebnis für die linke Pyramide $K(Py_1) = \sqrt{50}/\sqrt{26} = 1.39$ (→ Abb. 6.1, Tab. 6.1, Abb. 6.3).

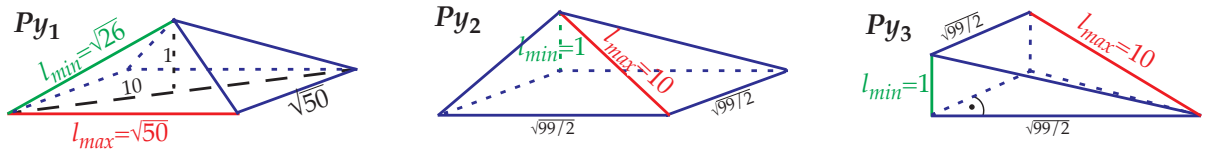


Abb. 6.3 Diskrepanz mit $K(E_i)$ bei ähnlich flachen Pyramiden: $K(Py_2) = K(Py_3) >> K(Py_1)$

Das Anisotropiemaß $K(Ei)$ ist also für hybride Gitter mit entsprechender Elementzusammensetzung unter Umständen ungeeignet.

In den nächsten beiden Kapiteln werden zwei andere Maße zur Anisotropiebeschreibung von Gitterelementen vorgestellt, die für T_1 und Py_1 deutlich besser passende Ergebnisse liefern (vgl. 3. und 4. Spalte von Tab. 6.1).

* Dieses Maß wird manchmal fälschlicherweise „aspect ratio" genannt. Als „aspect ratio" bezeichnet man aber das Verhältnis von „Durchmesser" zu „Dicke" (vgl. Anfang von Kapitel 6 und [189]).

6.2 Oberflächen-Volumen-Verhältnis

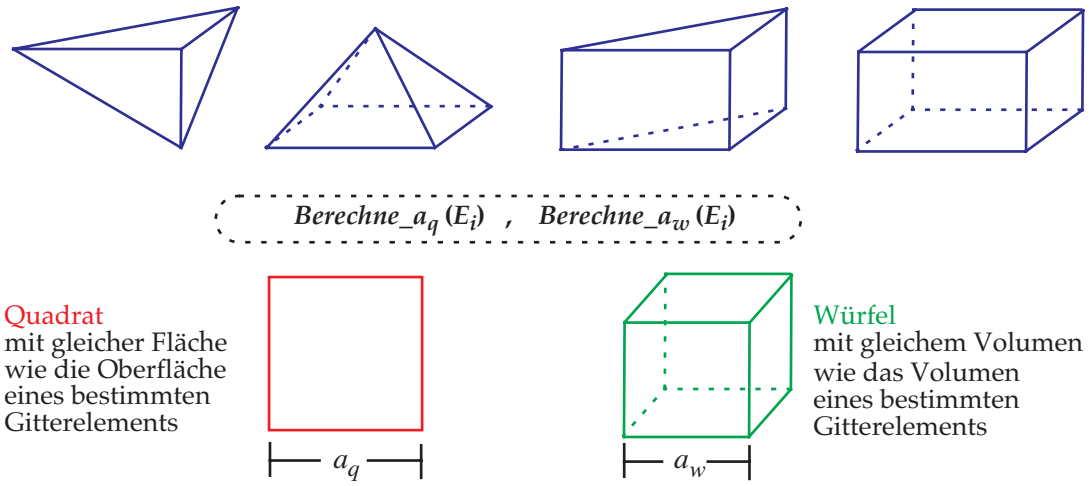


Abb. 6.4 Bestimmung von a_q und a_w für ein bestimmtes Gitterelement E_i

$$\Psi(E_i) = \frac{a_q}{a_w} = \frac{\sqrt{A(E_i)}}{\sqrt[3]{V(E_i)}} \qquad (6.2)\ ^*$$

Das Anisotropiemaß $\Psi(E_i)$ in Gl. (6.2) * ist eine weitere Möglichkeit zur Beschreibung der Anisotropie eines Gitterelements E_i, bei dem die Oberfläche $A(E_i)$ in Relation zum Volumen $V(E_i)$ gesetzt wird. Ein sehr „flaches" Element besitzt eine große Oberfläche bei vergleichsweise kleinem Volumen und führt folglich zu einem großem Anisotropiewert. Umgekehrt liefern isotrope Elemente einen kleinen Ergebniswert für $\Psi(E_i)$.

Um die Oberfläche und das Volumen gleichermaßen zu berücksichtigen, wird a_q , die Quadratwurzel von $A(E_i)$ mit a_w , der Kubikwurzel von $V(E_i)$ in Verhältnis gesetzt. a_q entspricht der Kantenlänge jenes Quadrats, welches den gleichen Flächeninhalt wie die Oberfläche des betrachteten Gitterelements besitzt und a_w entspricht der Kantenlänge jenes Würfels, welcher das gleiche Volumen wie das betrachtete Gitterelement beinhaltet (→ Abb. 6.4).

Berechnet man mit dem Maß $\Psi(E_i)$ aus Gl. (6.2) * die geometrische Anisotropie für die 12 Beispielelemente aus Abb. 6.1, fallen Spannweite und Standardabweichung deutlich kleiner aus als beim Kantenverhältnis $K(E_i)$. Die beiden in Kap. 6.1 beschriebenen „Ausreißer" sind verschwunden. Mit $\Psi(T_1)$=3.88 und $\Psi(Py_1)$=3.95 entstehen nun sowohl für den Tetraeder T_1 als auch die Pyramide Py_1 Ergebnisse der selben Größenordnung wie bei den anderen Beispielelementen (→ Tab. 6.1, 3. Spalte).

Mit $\Psi(E_i)$ wird also ein Maß vorgeschlagen, das die Anisotropie der Gitterelemente aus Abb. 6.1 bei den hier vorkommenden Elementtypen deutlich besser und gleichmäßiger beschreibt als mit dem Kantenverhältnis $K(E_i)$ aus Kap. 6.1.

Auch für die 4 Einheitselemente mit Kantenlänge 1 (→ S. 90) erhält man mit dem Anisotropiemaß Ψ gute Resultate. Es sind $\Psi(H_1) = \sqrt{6}/\sqrt[3]{1} = 2.449$, $\Psi(Pr_1) = \sqrt{3 + 0.5*\sqrt{3}}\ /\ \sqrt[3]{0.25*\sqrt{3}} = 2.6$, $\Psi(Py_1) = \sqrt{1+\sqrt{3}}/\sqrt[3]{\sqrt{2}/6} = 2.676$ und $\Psi(T_1) = \sqrt{\sqrt{3}}/\sqrt[3]{\sqrt{2}/12} = 2.684$. Diese Ergebniswerte haben ein arithmetisches Mittel bei 2.602, eine Spannweite von 0.235 und eine Standardabweichung von lediglich 0.109 (Variationskoeffizient = 0.042).

* Der Ausdruck „$\sqrt{A}/\sqrt[3]{V}$" in Gl. (6.2) kommt in ähnlicher Form auch in der Polyederabschätzung von Goldberg vor [5, 70], die in Kapitel 5.1 bzw. Gl. (5.1) im Rahmen der Überlegungen zur minimalen Oberfläche des Stratum corneum verwendet wird. Dort beschreibt die linke Seite der Ungleichung mit A^3/V^2 ein Verhältnis das genau Ψ^6 entspricht.

Zur Berechnung der Anisotropie $\Psi(E_i)$ eines Gitterelements müssen für die hybriden Netze dieser Arbeit die Oberflächen und Volumina für Hexaeder, Prismen, Pyramiden und Tetraeder bestimmt werden.

Bei diesen Elementtypen ist zu beachten, dass Hexaeder, Prismen und Pyramiden im Gegensatz zu Tetraedern auch **viereckige** Elementseiten besitzen.

Bei den Gittern mit *lgm2ng* (→ Kap. 4.1) sowie den in Kap. 5.4 vorgestellten Gittern für das Stratum corneum sind diese viereckigen Elementseiten stets plan. Solche Gitterelmente sind bzgl. der Oberflächen- und Volumenberechnung eindeutig.

Bei den Gittern für geologische Schichtungen (siehe Kap. 4.6) sind die vorderen, hinteren, linken und rechten viereckigen Seiten der Gitterelmente aufgrund der verwendeten vertikalen Kanten ebenfalls plan. Die oberen und unteren viereckigen Elementseiten der Hexaeder und horizontal verlaufenden Prismen sind dagegen typischerweise nicht plan, da die vier Eckpunkte eines Trennflächensegments in der Regel nicht in einer Ebene liegen. Man spricht im *UG*-Jargon dennoch von Polyedern (Vielflächner), da die Elemente im Simulationssystem *UG* [9, 10] intern auf Referenzelemente mit planen Seiten abgebildet werden (siehe ausführliche Behandlung dieser Thematik in Kap. 3.2).

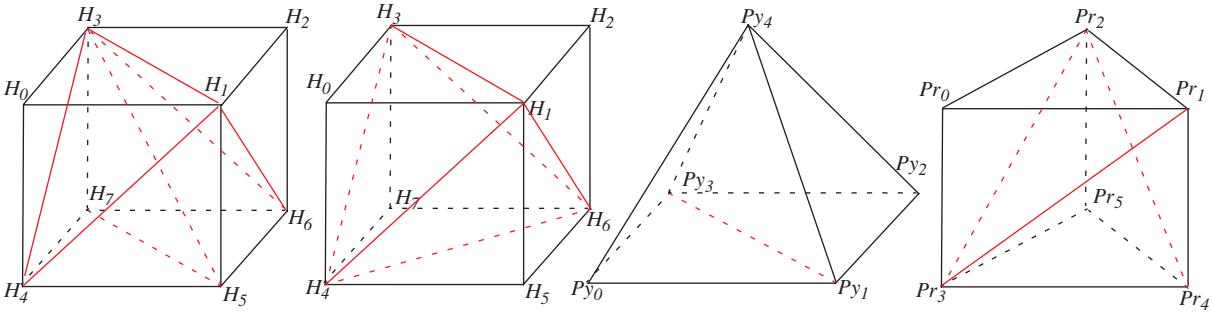
Für die hier gewünschte Oberflächen- und Volumenberechnung müssen die gekrümmten viereckigen Elementseiten approximiert werden.

Es wäre z. B. denkbar, derartige viereckige Elementseiten, wie in den Kapiteln 4.2.1 und 4.2.2 beschrieben, mit einem *Inverse Distance to a Power*- oder *Kriging*-Verfahren feiner zu unterteilen und mit der erweiterten Trapez- oder der erweiterten Simpsonregel die Elementvolumina zu berechnen ([194]→ Ch. 19, [167] → Section 4.1).

Eine solch aufwendige Herleitung der Oberflächen bzw. Volumina für jedes einzelne Gitterelement ist allerdings nicht notwendig, um gute Ergebnisse mit $\Psi(E_i)$ zu erhalten. Die Genauigkeit folgender Vorgehensweise ist ausreichend:

Die drei Elementtypen mit viereckigen Seitenflächen (Hexaeder, Prismen und Pyramiden) werden in t Tetraeder aufgeteilt (→Abb. 6.5). Für diese können Volumina und Oberflächen berechnet (→ Kap. 6.2.1 u. 6.2.2) und anschließend addiert werden.

In Abb. 6.5 sieht man, dass Hexaeder in 5 oder 6 Tetraeder aufgeteilt werden können. Die Unterschiede zwischen diesen beiden Aufteilungen sind bei der Berechnung von Ψ für die in dieser Arbeit betrachteten Gitter jedoch marginal.



$T(H_4H_5H_7H_3)$
$T(H_4H_5H_3H_1)$
$T(H_4H_1H_3H_0)$
$T(H_5H_6H_7H_3)$
$T(H_5H_6H_3H_1)$
$T(H_6H_3H_1H_2)$

$T(H_0H_1H_3H_4)$
$T(H_5H_4H_6H_1)$
$T(H_2H_1H_3H_6)$
$T(H_7H_4H_6H_3)$
$T(H_3H_1H_4H_6)$

$T(Py_0Py_1Py_4Py_3)$
$T(Py_1Py_2Py_4Py_3)$

$T(Pr_0Pr_1Pr_2Pr_3)$
$T(Pr_1Pr_2Pr_3Pr_4)$
$T(Pr_3Pr_4Pr_5Pr_2)$

Abb. 6.5 Tetraederzerlegung für Hexaeder, Pyramiden und Prismen

6.2.1 Berechnung der Volumina von Gitterelementen

$$V_{E_i} = \sum_{j=1}^{t} V_{Tet_j} \tag{6.3}$$

Die einzelnen Tetraedervolumina V_{Tet_j} eines Elements E_i können relativ einfach berechnet und dann zum Gesamtvolumen V_{E_i} addiert werden (→ Gl. (6.3)). Dabei gelten für einen Tetraeder $t=1$, für eine Pyramide $t=2$, für ein Prisma $t=3$ und für einen Hexaeder je nach Aufteilung $t=5$ oder $t=6$. (→Abb. 6.5).

Zur Volumenberechnung für die 4 vorkommenden Elementtypen reicht es also, das Volumen V_{Tet} eines Tetraeders bestimmen zu können. Eine gute Berechnungsmöglichkeit, die ohne Wurzelausdruck auskommt, zeigt Gl. (6.4). Es werden die Koordinatenwerte der vier Tetraedereckpunkte *a, b, c* und *d* verwendet. Das Ergebnis ist vorzeichenbehaftet (→[189], S. 61).

$$V_{Tet} = \frac{1}{6} \cdot \begin{vmatrix} a_x-d_x & b_x-d_x & c_x-d_x \\ a_y-d_y & b_y-d_y & c_y-d_y \\ a_z-d_z & b_z-d_z & c_z-d_z \end{vmatrix} \tag{6.4}$$

6.2.2 Berechnung der Oberflächen von Gitterelementen

Zur Bestimmung von A_{Ei}, der Oberfläche eines Gitterelements E_i, müssen die d dreieckigen Seitenflächen A_{Tri_j} des Elements berechnet und dann addiert werden (→ Gl. (6.5)).

$$A_{E_i} = \sum_{j=1}^{d} A_{Tri_j} \tag{6.5}$$

Bei der in Abb. 6.5 beschriebenen Aufteilung gilt für einen Tetraeder $d=4$, für eine Pyramide $d=6$, für ein Prisma $d=8$ und für einen Hexaeder $d=12$.

Zur Berechnung der Fläche A_{Tri} eines Dreiecks mit den Punkten *a*, *b* und *c* ist computertechnisch Gl. (6.6) empfehlenswert [189, S. 61]. Während andere Formeln bis zu 4 Wurzelausdrükke benötigen, kommt Gl. (6.6) mit einer einzigen Wurzelberechnung aus.

$$A_{Tri} = \frac{\sqrt{\begin{vmatrix} a_y-c_y & b_y-c_y \\ a_z-c_z & b_z-c_z \end{vmatrix}^2 + \begin{vmatrix} a_z-c_z & b_z-c_z \\ a_x-c_x & b_x-c_x \end{vmatrix}^2 + \begin{vmatrix} a_x-c_x & b_x-c_x \\ a_y-c_y & b_y-c_y \end{vmatrix}^2}}{2} \tag{6.6}$$

Mit den Gleichungen (6.3) bis (6.6) lassen sich die Oberfläche A_{Ei} und das Volumen V_{Ei} für ein Gitterelement E_i berechnen. Für die Gitterelemente aus den Kapiteln 4.1 und 5.4 erhält man dabei exakte Ergebniswerte und für Gitterelemente gemäß Kap. 4.6 Resultate mit hinreichender Genauigkeit für die Bestimmung der Anisotropie $\Psi(E_i)$ durch Gl. (6.2).

Die Software *Eval_Volume_Area* [50] ermöglicht es, mit den Zerlegungen von Abb. 6.5 und den Gleichungen (6.3) bis (6.6) die Volumina und Oberflächen von *ng*-Gitterelementen zu berechnen (siehe Experimentalteil, insbesondere Kap. 8.1).

6.3 Radienverhältnis

Mit dem Radienverhältnis $P(E_i)$ soll noch ein drittes Maß zur Anisotropiebeschreibung von Gitterelementen vorgestellt werden.

In Gleichung (6.7) werden der Umkugelradius R sowie der Inkugelradius r eines Gitterelements E_i verwendet. Der Radienquotient R/r soll die Anisotropie P von E_i beschreiben.

$$P(E_i) = \frac{R(E_i)}{r(E_i)} \tag{6.7}$$

Berechnet man die Radienverhältnisse für die Elementbeispiele aus Abb. 6.1, so erhält man Werte zwischen 10 und 15 (→ Tab. 6.1, 4. Spalte) und die extremen Diskrepanzen wie beim Kantenlängenverhältnis $K(E_i)$ treten nicht mehr auf. Die Ergebniswerte $P(T_1) = 11.80$ und $P(Py_1) = 10.20$ besitzen nun die selbe Größenordnung wie die anderen Elemente. Mit $P(E_i)$ wird demnach ein Maß vorgeschlagen, das die Anisotropie der Gitterelemente bei den 4 hier auftretenden Elementtypen deutlich besser und gleichmäßiger beschreibt als dies mit dem Kantenverhältnis $K(E_i)$ aus Kap. 6.1 der Fall ist.

Im folgenden Kap. 6.3.1 wird zwischen verschiedenen Radien unterschieden (z.B. Abb. 6.6) und es wird aufgezeigt, dass die Radienbestimmung nicht trivial ist.

In den Kapiteln 6.3.2 und 6.3.3 werden dann zwei iterative Algorithmen vorgestellt, die den kleinsten Umkugelradius und den größten Inkugelradius eines Gitterelements approximieren.

Als erste Probe dieser Verfahren werden in Kap. 6.3.4 iterative Berechnungen für vier isotrope Einheitselemente durchgeführt, für die sich die realen In- und Umkugelradien herleiten lassen. Danach erfolgt zur weiteren Validierung in Kap 6.3.5 ein Vergleich mit den Resultaten einer Vorgehensweise des Lehrstuhls *Kombinatorische Geometrie* der TU München anhand von drei anisotropen Schichtengebieten aus Kapitel 2.

6.3.1 Unterschiedliche Radien

In den 2D-Beispielen in Abb. 6.6 werden verschiedene Radien dargestellt:

Beim Dreieck links liegen alle 3 Knoten exakt auf dem Rand des orangefarbenen Umkreises. Dieser ist allerdings nicht der kleinstmögliche Umkreis. Der grüne Umkreis ist um einiges kleiner und beinhaltet das Dreieck dennoch vollständig, wenngleich der Punkt beim stumpfen Dreieckswinkel nicht auf dem Rand sondern im Inneren des grünen Umkreises liegt. Rechts findet man einen vergleichbaren Umkreis (ebenfalls in grün), der das Viereck vollständig beinhaltet. Einen (orangefarbenen) Umkreis, auf dessen Rand alle vier Punkte des Vierecks liegen, existiert für dieses und die meisten anderen Vierecke nicht. *

Der größtmögliche (hier rote) Inkreis berührt bei einem Dreieck stets alle drei Kanten. Beim Viereck bleibt meistens eine Kante unberührt (→ Abb. 6.6). **

Die beschriebenen Eigenschaften gelten auch für 3D: Analog zum Dreieck findet man zu jedem Tetraeder eine „orangene“ Umkugel U°, auf deren Rand alle 4 Knoten liegen („circumscribing sphere“ → [189]) U° hat den Umkugelradius R°. Im Gegensatz dazu liegen bei der kleineren „grünen“ Umkugel U nicht alle Tetraederknoten auf dem Rand. Der Tetraeder ist dennoch vollständig in U enthalten („circumsphere“, „smallest sphere“ in [189]). Die Umkugel U besitzt

* Im Allgemeinen berührt der Umkreis eines Vierecks nur dann alle 4 Knoten, wenn zwei gegenüberliegende Winkel zusammen 180° ergeben.

** ...es sei denn, der Spezialfall liegt vor, dass die Summen der Längen gegenüberliegender Seiten gleich groß sind.

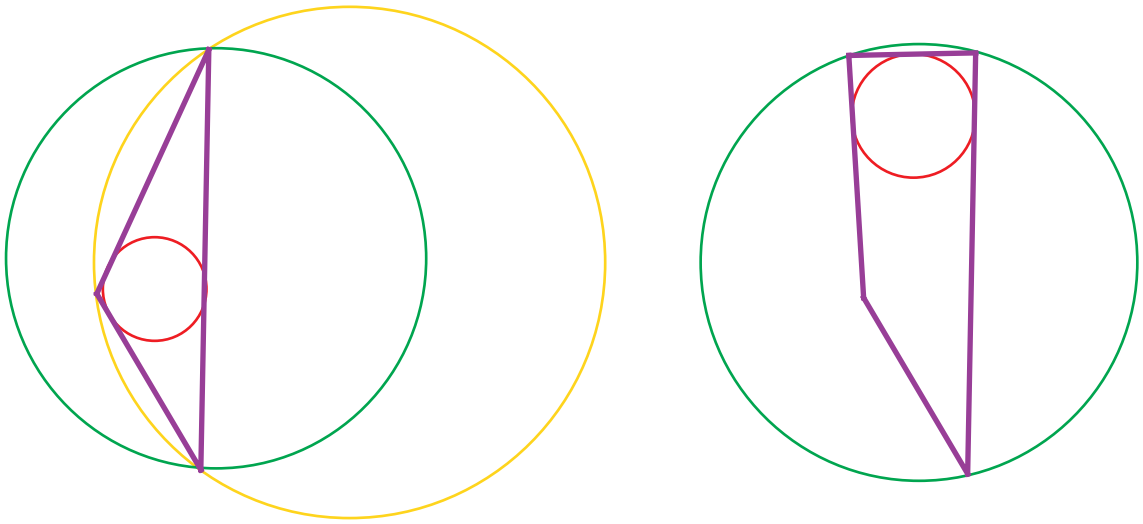


Abb. 6.6 Veranschaulichung in 2D: Verschiedene Radien für ein Dreieck und ein Viereck

den Umkugelradius R. Eine derartige „kleinstmögliche“ Umkugel findet man auch bei Gitterelementen mit mehr als 4 Knoten, wie bspw. Hexaedern. Eine Umkugel $U°$, mit allen Knoten auf dem Rand gibt es für diese Elementtypen lediglich in Spezialfällen wie bspw. in Abb. 6.10.

Mit dem Anisotropiemaß $P(E_i)$ für die 3D-Gitterelemente dieser Arbeit soll der **kleinstmögliche Umkugelradius *R*** („min-containment radius“) berechnet werden.

Ähnliches gilt für die Inkugel: Für einen Tetraeder findet man stets eine Inkugel $I°$, die alle 4 Seitenflächen berührt („inscribed sphere“). Beim Tetraeder ist sie identisch mit der größtmögliche Inkugel I („insphere“). Bei anderen Polyedern wie bspw. Hexaedern, Prismen usw. existiert nur in Spezialfällen (z.B. Abb. 6.10) eine Inkugel $I°$, welche alle Elementflächen berührt. Typischerweise existiert jedoch eine größtmögliche Inkugel I, die eine oder mehrere Elementseitenflächen nicht berührt. Der **Radius *r* dieser größtmöglichen Inkugel *I*** soll für das Anisotropiemaß $P(E_i)$ bestimmt werden.

Bezüglich des Umkugeldurchmessers in 3D bzw. des Umkreisdurchmessers in 2D könnte man annehmen, es sei das Beste, einfach die längste Kante oder den größten Abstand zweier Punkte des Gitterelements zu wählen. Diese Annahme stimmt im 2D-Fall lediglich für stumpfwinklige Dreiecke und muss im Allgemeinen verworfen werden, wie folgende Betrachtungen an den Beispielen in Abb. 6.7 zeigen. Sowohl für das spitzwinklige Dreieck links als auch das Viereck rechts ist der Umkreisdurchmesser größer als der größte Abstand zweier Eckpunkte. Analog dazu könnte man in 3D Polyeder konstruieren, für deren Umkugeln ähnliches gilt.

Betrachtet man das spitzwinklige Dreieck in Abb. 6.7 links: Dieses hat die größte Kantenlänge $lk = \text{Distanz}(A,B) = \sqrt{2}$. Der Mittelpunkt auf der längsten Kante ist M_{lk} $(1/2,\ 1/2)$. Es gilt $\text{Distanz}(M_{lk},A) = lk/2 = \sqrt{2}/2 = \sqrt{8/16}$. Es gilt aber $\text{Distanz}(M_{lk},C) = \sqrt{1/4 + 9/16} = \sqrt{13/16}$ und damit $\text{Distanz}(M_{lk},C) > \text{Distanz}(M_{lk},A)$. Aber auch bei anderer Position des Mittelpunkts wäre ein Radius $lk/2$ zu klein. Mit der Formel $R° = l_1 l_2 l_3/(4A)$ kann man gemäß [189→S.62→A.2] den Umkreisradius für spitzwinklige Dreiecke berechnen. Für den spitzwinkligen Fall sind U und $U°$ identisch (Abb. 6.7 -> links -> cyanfarbener Umkreis). Es gilt $R°(U°) = \sqrt{17/16} \cdot \sqrt{2}/2 > lk/2$.

Beim Viereck in Abb. 6.7 rechts sei M_{ld} $(1/4,\ 3/4)$, die Mitte der längeren Diagonale des Vierecks. Es gilt $\text{Distanz}(M_{ld},B) = \sqrt{9/16 + 9/16} = \sqrt{18}/4$. Es gilt $\text{Distanz}(M_{ld},C) = \sqrt{25/16 + 1/16} = \sqrt{26}/4$. Es gilt also $\text{Distanz}(M_{ld},C) > \text{Distanz}(M_{ld},B)$. Ähnlich gilt für die Mitte der längsten Kante CD $\text{Distanz}(M_{lk},C) = \sqrt{17}/4 < \text{Distanz}(M_{lk},A) = \sqrt{1/4 + 25/16} = \sqrt{29}/4$. Aber auch bei anderer Position des Mittelpunkts wäre ein Radius $\sqrt{18}/4 \cong 1.06$ trotzdem zu klein, da der reale kleinstmögliche

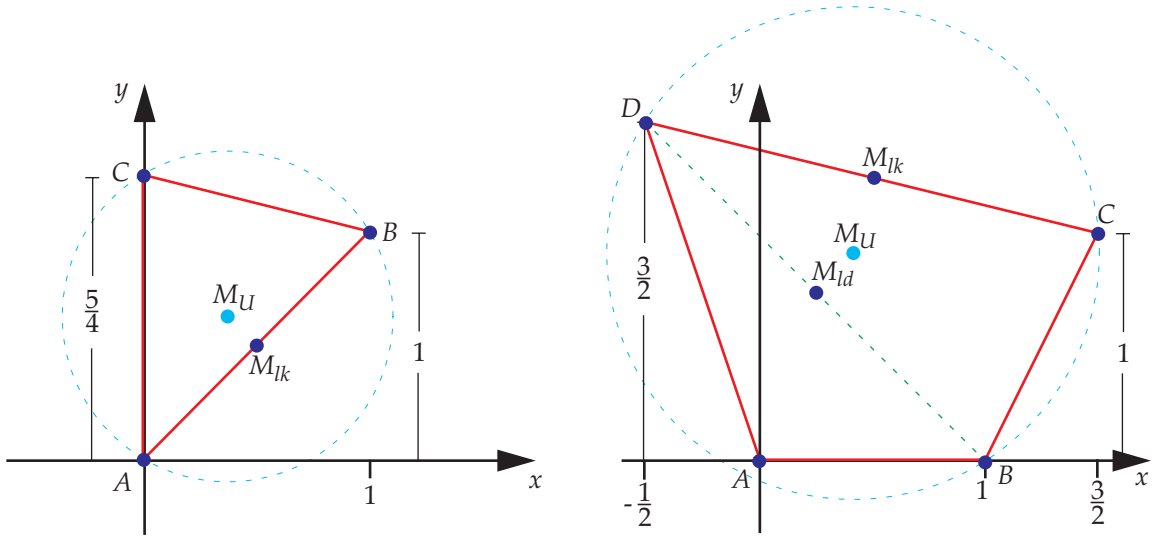


Abb. 6.7 Gegenbeispiele zur alternativen Umkreis- bzw. Umkugelradiusberechnung

Umkreis einen Radius $\text{Distanz}(M_U,C) = R°(BCD) = \sqrt{170}/12 \cong 1.09$ besitzt. Es ist zu klären, warum der kleinstmögliche Umradius in diesem Fall $R°(BCD)$ entspricht bzw. wie man den kleinstmöglichen Umradius für ein konvexes Polygon ermittelt. Man bestimmt dazu als erstes den Mittelpunkt M_{ld} der Punkte P_i und P_j mit dem größten Abstand zueinander. Dann sucht man den übriggebliebenen Punkt P_{gA}, der den größten Abstand zu M_{ld} hat. Wenn $\text{Distanz}(M_{ld},P_{gA}) > \text{Distanz}(M_{ld},P_i)$, dann ist der gesuchte kleinstmögliche Umkreisradius R des Polygons gleich dem Umkreisradius $R°$ des Dreiecks $P_iP_jP_{gA}$. Man berechnet $R°$ gemäß der Formel $R° = l_1l_2l_3/(4A)$ oder [189→S.62→A.2]. Ist $\text{Distanz}(M_{ld},P_{gA}) < \text{Distanz}(M_{ld},P_i)$, dann hat der gesuchte Umkreis des Polygons den Mittelpunkt M_{ld} und den Radius $\text{Distanz}(M_{ld},P_i)$.

Nach diesen Betrachtungen in 2D stellt sich nun die Frage, ob es in 3D einfache Formeln zur Berechnung von R und r für alle vier hier gewünschten Elementtypen gibt.

Für den Inkugelradius r existiert lediglich bei Tetraedern eine vergleichsweise einfache Berechnungsvorschrift $r(T_i) = 3V/(A_1+A_2+A_3+A_4)$. Hierzu müssen das Volumen V sowie die einzelnen dreieckigen Seitenflächen A_i berechnet werden. Es sei hierbei auf die Gleichungen (6.4) und (6.6) in Kapitel 6.2 verwiesen. Für die Pyramiden, Prismen und Hexaeder bzw. sonstige konvexe Polyeder, die im Rahmen dieser Arbeit vorkommen, ist keine vergleichbare Berechnungsvorschrift zu finden.

Für den kleinstmöglichen Umkugelradius R („min-containment radius“) findet man für Tetraeder folgende Vorgehensweise in [189→ A.3]: Man berechnet zunächst mit einer langen aber „wurzelfreien“ Formel den Mittelpunkt $M_{U°}(T_i)$ der Umkugel $U°(T_i)$. Danach muss man prüfen, ob $M_{U°}(T_i)$ im Tetraeder liegt. Dazu berechnet man vier vorzeichenbehaftete Volumina (→ Gl. (6.4)) derjenigen Tetraeder, die $M_{U°}(T_i)$ mit den vier Seitenflächen von T_i bildet. Wenn alle Volumina positiv sind, gilt $M_U(T_i) = M_{U°}(T_i)$ und $R(T_i) = R°(T_i)$ (Berechnungsmöglichkeit siehe [189] → S. 62, 2te Formel). Wenn dagegen genau ein Volumen negativ ist, dann ist $R(T_i)$ gleich dem kleinstmöglichen Umradius des zugehörigen Dreiecks (vgl. in Abb. 6.6 grüner Umkreis). Wenn zwei Volumina negativ sind, dann ist $R(T_i)$ der größere der kleinstmöglichen Umkreisradien der beiden zugehörigen Dreiecke. Zur Berechnung eines solchen „min containment“-Radius für ein Dreieck wird zunächst mit den Skalarprodukten von Kantenvektoren geprüft, ob es einen Winkel größer 90° im Dreieck gibt. Wenn ja, dann ist $R(T_i)$ gleich der halben Länge der gegenüberliegenden Kante. Wenn das Dreieck dagegen ausschließlich Winkel kleiner 90° hat, dann ist $R(T_i)$ gleich dem „circumscribing circle“ des Dreiecks (vgl. in Abb. 6.6 orangefarbiger Umkreis). Hierfür sei auf die Formeln in [189→ A.2] hingewiesen.

Diese Beschreibung zeigt, dass bereits für Tetraeder die Berechnung von R nicht trivial ist. Für die anderen Elementtypen der hybriden *UG*-Gitter konnten weder für den kleinstmöglichen Umradius R noch für den größtmöglichen Inradius r vergleichbare Methoden gefunden werden. Auf der Suche nach einer einheitlichen Lösung für die gemischten Netze aus Hexaedern, Pyramiden, Prismen und Tetraedern entstand daher die Idee, zur näherungsweisen Bestimmung von r und R einen iterativen Ansatz zu machen.

6.3.2 Ein Iterationsverfahren zur Berechnung des Umkugelradius *R*

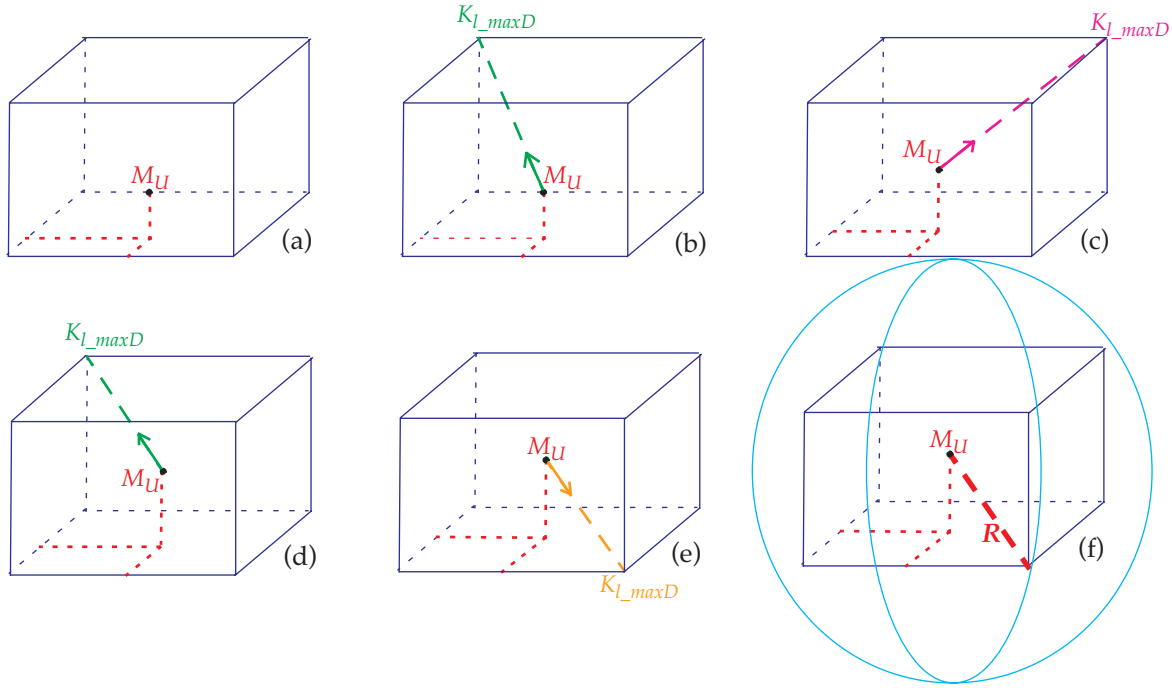


Abb. 6.8 Veranschaulichung der iterativen Bestimmung des Umkugelradius *R*

Bei der Bestimmung des Umkugelradius R wird für den Umkugelmittelpunkt die Variable M_U verwendet. Zunächst wird für M_U ein Startknoten, typischerweise im Inneren des Elements gewählt (→Abb. 6.8a). Dann wird die Position von M_U in einem Iterationsverfahren sukzessive optimiert. Dabei wird M_U in jedem Schritt in Richtung der jeweils am weitesten entfernten Ecke verschoben (→Abb. 6.8b-e). In Abb. 6.8 erfolgt die Verschiebung zweimal in Richtung der linken oberen hinteren Ecke (grün), einmal in Richtung der rechten oberen hinteren Ecke (magenta) und einmal in Richtung der rechten unteren vorderen Ecke (orange). Bei diesen Verschiebungen soll die Distanz von M_U zum entferntesten Knoten minimiert werden. Der kleinste ermittelte Abstand bei diesem Verfahren ist schließlich eine sehr gute Näherung für den Umkugelradius R (→Abb. 6.8f).

Die ausführliche Vorgehensweise wird in Algorithmus Alg. 6.1 mit Pseudocode beschrieben.

Für ein Element E wird das Iterationsverfahren mit n verschiedenen Startwerten durchgeführt („`für (s = 0; s < n; s++)`“). Als Startwerte können beispielsweise das arithmetische Mittel („`ar_Mittel`“) der Knotenkoordinaten von E, ein bestimmter Knoten von E, das arithmetische Mittel der Knotenkoordinaten einer Seitenfläche von E usw. verwendet werden („`wähle(s)`“). Einer dieser Startwerte führt zum kleinsten und damit besten Rückgabewert für den Umkugelradius R.

Im Iterationsschritt müssen für alle Elementknoten K_l die Abstände zu M_U berechnet werden („Distanz(M_U,K_l)“). Die Anzahl der Knoten von E („#Knoten(E)“) ist bei Tetraedern 4, bei Pyramiden 5, bei Prismen 6 und bei Hexaedern 8. Der Variablen K_{l_maxD} wird der Index des entferntesten Knotens zugewiesen. Der Abstand $Dist_{max}$ von diesem Knoten zu M_U wird in das Feld *Umkugelradien* eingetragen („*Umkugelradien*[*i*++] = $Dist_{max}$“). Danach wird M_U mit dem prozentualen Faktor p (z.Bsp. $p = 1\%$) durch „M_U[*d*] = M_U[*d*] + p · (K_{l_maxD}[*d*] – M_U[d])“ in Richtung des entferntesten Knotens K_{l_maxD} verschoben. Mit Hilfe der Schleife „für(*d* = 1; *d* <= 3; *d*++)“ erfolgt diese Verschiebung in die 3 Raumdimensionen X, Y und Z.

Solange die Einträge im Feld *Umkugelradien* tendenziell kleiner werden, bzw. sich die Position von M_U noch verbessern lässt, wird der Iterationsschritt mit dem verschobenen Punkt M_U erneut durchgeführt.

Einer der letzten Einträge in *Umkugelradien* ist typischerweise der kleinste und damit beste Wert für den betrachteten Startwert s. Dieser Eintrag wird in das zweite Feld *Minimale_Umkugelradien* übertragen (siehe in Alg. 6.1: „*Minimale_Umkugelradien*[*s*] = SucheKleinsten(*Umkugelradien*)“).

Nach Durchführung des Iterationsverfahrens für alle Startwerte wird zum Schluss mit der Zeile „Rückgabe(*R* = SucheKleinsten(*Minimale_Umkugelradien*))“ der allerkleinste Wert bestimmt und als Ergebnis für den Umkugelradius R zurückgegeben.

```
Berechne_Umkugelradius_R (Element E)
{
   für (s = 0; s < n; s++)
   {
      wähle (s)
      {
         0: M_U = ar_Mittel(Knoten(E))
         1: M_U = ein Knoten von E
         2: M_U = ar_Mittel(Knoten(E->Seite[1])
         3: M_U = ar_Mittel(Knoten(E->Seite[2])
         ...: weitere Startwerte
      }
      i = 0
      Solange Einträge in Umkugelradien tendenziell kleiner werden
      {
         Dist_max = 0.0
         für (l = 1; l <= #Knoten(E) ; l++)
            wenn Distanz(M_U,K_l) > Dist_max)
            {
               Dist_max = Distanz(M_U,K_l)
               K_l_maxD = K_l
            }
         Umkugelradien[i++] = Dist_max
         für (d = 1; d <= 3; d++)
            M_U[d] = M_U[d] + p · ( K_l_maxD[d] – M_U[d] )
      }
      Minimale_Umkugelradien[s] = SucheKleinsten(Umkugelradien)
   }
   Rückgabe(R = SucheKleinsten(Minimale_Umkugelradien))
}
```

Alg. 6.1 Iterative Berechnung des Umkugelradius R

Eine Perlimplementierung von Alg. 6.1 findet man in der Software *Radiana* [47].

6.3.3 Ein Iterationsverfahren zur Berechnung des Inkugelradius *r*

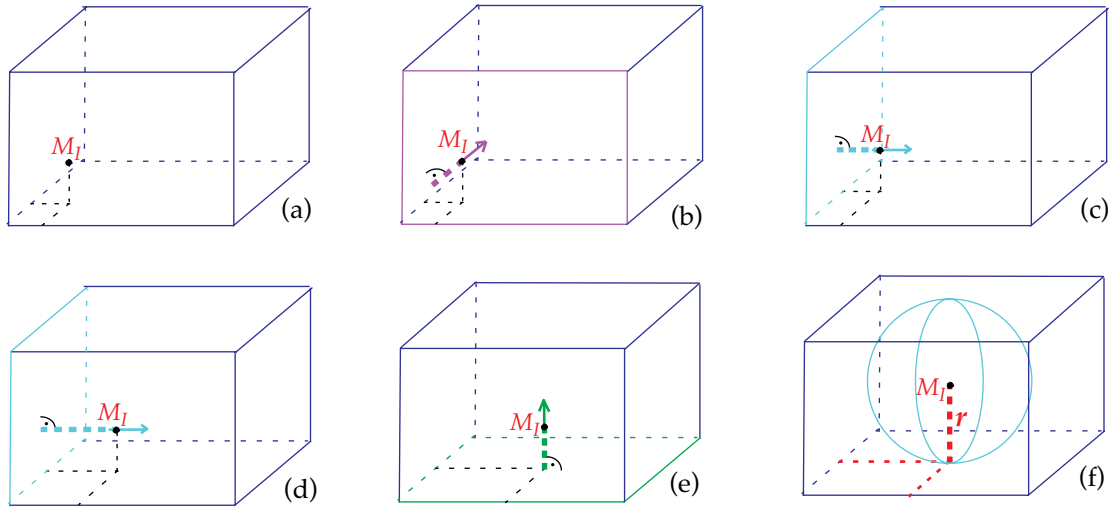


Abb. 6.9 Veranschaulichung der iterativen Bestimmung des Inkugelradius *r*

Bei der Bestimmung des Inkugelradius r wird für den Inkugelmittelpunkt die Variable M_I verwendet. Zunächst wird für M_I ein Startknoten im Inneren des Elements gewählt (→Abb. 6.9a). Dann wird die Position von M_I in einem Iterationsverfahren sukzessive optimiert. Dabei wird M_I in jedem Schritt von der jeweils am nächsten gelegenen Seitenfläche weggeschoben (→Abb. 6.9b-e). Im Beispiel wird M_I zunächst von der vorderen Seitenfläche (magenta), dann zweimal von der linken Seitenfläche (cyan) und schließlich von der unteren Seitenfläche (grün) weg bewegt. Bei diesen Verschiebungen soll die Distanz von M_I zur am nächsten gelegenen Seitenfläche maximiert werden. Der größte ermittelte Abstand bei diesem Verfahren ist schließlich eine sehr gute Näherung für den Inkugelradius r (→Abb. 6.9f).

Die ausführliche Vorgehensweise wird in Algorithmus Alg. 6.2 mit Pseudocode beschrieben.

Die Distanz von M_I zu einer viereckigen Seitenfläche ist gesondert zu betrachten. Wie in Kap. 3.2 und 6.2 beschrieben, sind viereckige Elementseiten nicht immer plan. Deshalb werden sie zu Beginn in Alg. 6.2 („`wenn (#Knoten(E→Seite[k]) == 4)...`“) in 2 dreieckige Elementseiten gesplittet. Diese Aufteilung erfolgt stets so, dass für ein Element E ein konvexes Polyeder aus Dreiecken entsteht („`KonvexPolyeder[trias++] = ...`“). Die Entscheidung welche Dreieckszerlegung für eine viereckige Seitenfläche „`{a,b,c,d}`“ verwendet wird, erfolgt durch Vergleiche von Tetraedervolumina, die die potentiellen Dreiecke mit einem Elementknoten „$e \notin$ `{a,b,c,d}`“ bilden („`wenn((Vol(a,b,c,e)+Vol(a,c,d,e))>(Vol(a,b,d,e)+Vol(b,c,d,e)))...`“). Die anderen Seitenflächen, die schon zuvor dreieckig sind, werden ohne Modifikation dem konvexen Polyeder von E zugeordnet (→„`sonst KonvexPolyeder [trias++] = E→Seite[k]`“). Seitenflächen mit mehr als 4 Ecken gibt es bei den hier betrachteten Elementtypen (Tetraeder, Pyramiden, Prismen und Hexaeder) nicht.

Das Iterationsverfahren wird mit n verschiedenen Startwerten für E durchgeführt („`für (s = 0; s < n; s++)`“). Als Startwerte können bspw. das arithmetische Mittel („`ar_Mittel`“) der Knotenkoordinaten von E, arithmetische Mittel der Knotenkoordinaten eingeschriebener Tetraeder („M_I `= ar_Mittel(Knoten(KonvexPolyeder[t]),ar_Mittel(Knoten(E)))`“) oder sonstige Knoten im Inneren von E verwendet werden. Einer dieser Startwerte führt zum größten und damit besten Rückgabewert für den Inkugelradius r.

Im Iterationsschritt müssen für alle Dreiecke des konvexen Polyeders des Elements E („`für (t=0; t<trias; t++){{a,b,c}=Knoten(KonvexPolyeder[t]) ...`“) bzw. für die zugehörigen Ebenen die Abstände zu M_I mit „$Abstand = |N° \cdot (M_I - a)|$“ berechnet werden. Dabei ist $N°$ der Einheitsvektor des Kreuzprodukts der beiden Vektoren „$v = b - a$“ und „$w = c - a$“.

Die Variable *trias* beschreibt die Anzahl der Polyederdreiecke bzw. die Anzahl der Begrenzungsflächen von E. Diese ist bei Tetraedern 4, bei Pyramiden 6, bei Prismen 8 und bei Hexaedern 12. Der Abstand zur am nächsten gelegenen Begrenzungsebene wird $Dist_{min}$ genannt und beschreibt die Distanz von M_I zum Lotpunkt L_{t_minD} auf dieser Ebene („$L_{t_minD} = M_I - Abstand \cdot N°$“).

$Dist_{min}$ wird in das Feld *Inkugelradien* eingetragen („$Inkugelradien[i++] = Dist_{min}$“). Danach wird M_I mit dem prozentualen Faktor p (z.Bsp. $p = 1\%$) ein Stück von der am nächsten liegenden Begrenzungsebene weg bewegt („$M_I[d] = M_I[d] - p \cdot (L_{t_minD}[d] - M_I[d])$“). Mit Hilfe der Schleife „`für (d=1; d<=3; d++)`“ erfolgt diese Verschiebung in die 3 Raumdimensionen X,Y und Z.

Solange die Einträge im Feld *Inkugelradien* tendenziell größer werden, bzw. sich die Position von M_I noch verbessern lässt, wird der Iterationsschritt mit dem verschobenen Punkt M_I erneut durchgeführt.

Einer der letzten Einträge in *Inkugelradien* ist typischerweise der größte und damit beste Wert für den betrachteten Startwert s. Dieser Eintrag wird in das zweite Feld *Maximale_Inkugelradien* übertragen („`Maximale_Inkugelradien[s]=SucheGrößten(Inkugelradien)`“).

Nach Durchführung des Iterationsverfahrens für alle Startwerte wird zum Schluss mit der Zeile „`Rückgabe(R = SucheGrößten(Maximale_Inkugelradien))`“ der allergrößte Wert bestimmt und als Ergebnis für den Inkugelradius r zurückgegeben.

Eine Perlimplementierung der Algorithmen Alg. 6.1 und Alg. 6.2 findet man in der Software *Radiana,* die im Rahmen des Softwarepraktikums der Informatikstudenten Michaela Föhner und Stefan Handel entstand [47]. In Tab. 6.1 auf S. 77 sind Resultate für die 12 anisotropen Beispielelemente aus Abb. 6.1. In Kap. 6.3.4 findet man eine Probe für Alg. 6.1 und Alg. 6.2 anhand von isotropen (Einheits-) Elementen. Zudem werden die iterativen Algorithmen mit einer Vorgehensweise der TU München in Kap. 6.3.5 validiert. Die Algorithmen Alg. 6.1 und Alg. 6.2 werden in den Ergebniskapiteln Kapitel 7 und Kapitel 8 eingesetzt.

```
Berechne_Inkugelradius_r (Element E)
{
    trias = 0
    für (k = 1; k <= #Seiten(E); k++)
    {
        wenn (#Knoten(E→Seite[k]) == 4)
        {
            {a,b,c,d} = Knoten(E→Seite[k]); e = Knoten(E), e ∉ {a,b,c,d}
            wenn ((Vol(a,b,c,e) + Vol(a,c,d,e)) > (Vol(a,b,d,e) + Vol(b,c,d,e)))
            {
                KonvexPolyeder[trias++] = ErgänzeNeueDreiecksSeite(a,b,c)
                KonvexPolyeder[trias++] = ErgänzeNeueDreiecksSeite(a,c,d)
            }
            sonst
            {
                KonvexPolyeder[trias++] = ErgänzeNeueDreiecksSeite(a,b,d)
                KonvexPolyeder[trias++] = ErgänzeNeueDreiecksSeite(b,c,d)
            }
        }
        sonst  KonvexPolyeder[trias++] = E→Seite[k]
    }
    für (s = 0; s < n; s++)
    {
        wähle (s)
        {   0: M_I = ar_Mittel(Knoten(E))
            1: M_I = ar_Mittel(Knoten(KonvexPolyeder[0]),ar_Mittel(Knoten(E)))
            2: M_I = ar_Mittel(Knoten(KonvexPolyeder[1]),ar_Mittel(Knoten(E)))
            ...: weitere Startwerte im Inneren von E
        }
        i = 0
        Solange Einträge in Inkugelradien tendenziell größer werden
        {
            Dist_min = 1E+99
            für (t = 0; t < trias; t++)
            {
                {a,b,c} = Knoten(KonvexPolyeder[t])
                v = b - a ;  w = c - a
                N = (v_y·w_z - v_z·w_y, v_z·w_x - v_x·w_z, v_x·w_y - v_y·w_x)
                N° = N / √(N_x·N_x + N_y·N_y + N_z·N_z)
                Abstand = |N°·(M_I - a)|
                falls (Abstand < Dist_min)
                {
                    Dist_min = Abstand
                    L_t_minD = M_I - Abstand · N°
                }
            }
            Inkugelradien[i++] = Dist_min
            für(d = 1; d <= 3; d++)
                M_I[d] = M_I[d] - p · ( L_t_minD[d] - M_I[d] )
        }
        Maximale_Inkugelradien[s] = SucheGrößten(Inkugelradien)
    }
    Rückgabe(r = SucheGrößten(Maximale_Inkugelradien))
}
```

Alg. 6.2 Iterative Berechnung des Inkugelradius *r*

6.3.4 Validierung von Ergebnissen anhand herleitbarer Beispielelemente

Nun soll validiert werden, dass das Softwarewerkzeug *Radiana* [47] verschiedene Radien auch wirklich gut approximieren kann. Dazu werden anhand der vier isotropen Beispielelemente H_I, Pr_{iso}, Py_I und T_I (→Abb. 6.10) die Radien analytisch hergeleitet. Die Ergebnisse werden anschließend mit den Approximationsergebnissen von *Radiana* [47] verglichen (siehe Tab. 6.2).

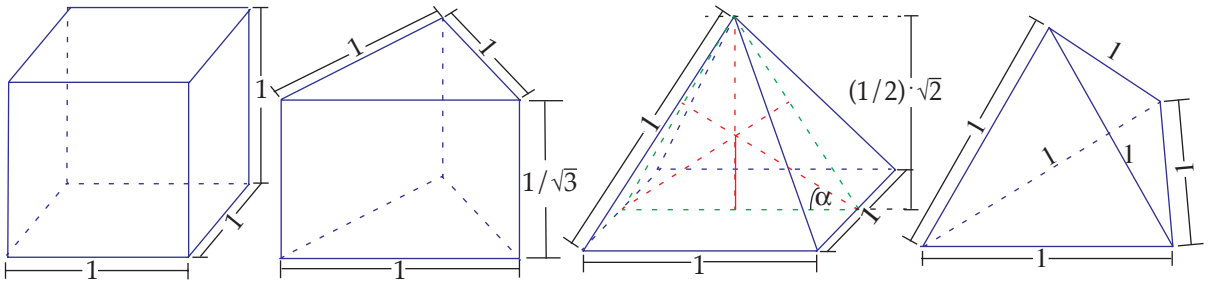


Abb. 6.10 Die vier isotropen Gitterelmente H_I, Pr_{iso}, Py_I und T_I

Bei den vier Beispielelementen in Abb. 6.10 liegen alle Knoten auf der kleinstmöglichen Umkugel, d.h. es gilt $R(E_i) = R°(E_i)$. Auch die Inkugeln berühren in den vier Beispielen jeweils alle Elementseiten, d.h. es gilt $r(E_i) = r°(E_i)$ (vgl. Kap. 6.3.1).

Für den isotropen Hexaeder H_I ist der Inkugelradius $r(H_I) = 1/2$ und der Umkugelradius $R(H_I) = \sqrt{1/4 + 1/4 + 1/4} = \sqrt{3}/2$. Für den Hexaeder H_I führt dies zum Radienverhältnis $P(H_I) = R(H_I) \,/\, r(H_I) = \sqrt{3} \approx 1.732$.

Beim isotropen Prisma Pr_{iso} liegen zwei gleichseitige Dreiecke der Kantenlänge 1 planparallel übereinander. Als Inkugelradius wurde für $r(Pr_{iso}) = 1/(2\sqrt{3})$ gewählt. Das entspricht dem Inkreisradius der beiden Dreiecke. Als Prismahöhe wurde $2 \cdot r(Pr_{iso}) = 1/\sqrt{3}$ gewählt. Die Inkugel berührt somit alle fünf Seiten von Pr_{iso}. Das führt zum Umkugelradius $R(Pr_{iso}) = \sqrt{((1/2)^2 + (r(Pr_{iso}))^2 + (r(Pr_{iso}))^2)} = \sqrt{1/4 + 1/12 + 1/12} = \sqrt{5/12} = \sqrt{5}/(2\sqrt{3})$. Für das Prisma Pr_{iso} erhält man somit $P(Pr_{iso}) = R(Pr_{iso}) \,/\, r(Pr_{iso}) = \sqrt{5} \approx 2.236$. Für ein Prisma Pr_I mit Höhe 1 gilt $P(Pr_I) = R(Pr_I) \,/\, r(Pr_I) = (\sqrt{21}/6) \,/\, (1/(2\sqrt{3})) \approx 2.646$.

Für die isotrope Pyramide Py_I ist eine quadratische Grundfläche G der Kantenlänge 1 und eine Spitze über dem Zentrum von G mit einer Höhe von $\sqrt{2}/2$ gewählt. Damit liegen alle fünf Knoten auf der kleinstmöglichen Umkugel und ihr Radius ist $R(Py_I) = \sqrt{2}/2 \approx 0.707$. Zur Berechnung von $r(Py_I)$ betrachtet man das grün gestrichelte, gleichschenklige Dreieck D im Inneren der Pyramide. Die rot gestrichelten Winkelhalbierenden schneiden sich im Inkreismittelpunkt M_{Ikr_D} von D. M_{Ikr_D} ist in diesem Fall gleich dem Inkugelmittelpunkt von Py_I. Die durchgezogene rote Linie zeigt den Inkugelradius $r(Py_I) = (1/2) \cdot \tan\alpha = (1/2) \cdot \tan((1/2)\arctan(\sqrt{2}))$ ≈ 0.259. Für die Pyramide Py_I führt dies zum Radienverhältnis $P(Py_I) = R(Py_I) \,/\, r(Py_I) = \sqrt{2} \,/\, \tan((1/2) \cdot \arctan(\sqrt{2})) \approx 2.732$.

Für den isotropen Tetraeder T_I mit 6 Kanten der Länge 1 erhält man den Umkugelradius $R(T_I) = \sqrt{6}/4 \approx 0.612$ sowie den Inkugelradius $r(T_I) = \sqrt{6}/12 \approx 0.204$. Für T_I erhält man somit das Radienverhältnis $P(T_I) = R(T_I) \,/\, r(T_I) = 3.0$.

Die hergeleiteten Ergebnisse sind in Tab. 6.2 den Approximationsresultaten von *Radiana* gegenübergestellt.

	hergeleitetes Ergebnis		*Radiana* [47]
$R(H_I)$	$\sqrt{3}/2$	≈ 0.8660	0.8660
$r(H_I)$	$1/2$	$= 0.5000$	0.5000
$R(Pr_{iso})$	$\sqrt{5}/(2\sqrt{3})$	≈ 0.6455	0.6455
$r(Pr_{iso})$	$1/(2\sqrt{3})$	≈ 0.2887	0.2887
$R(Py_I)$	$\sqrt{2}/2$	≈ 0.7071	0.7073
$r(Py_I)$	$\tan(\arctan(\sqrt{2})/2)/2$	≈ 0.2588	0.2587
$R(T_I)$	$\sqrt{6}/4$	≈ 0.6124	0.6124
$r(T_I)$	$\sqrt{6}/12$	≈ 0.2041	0.2041

Tab. 6.2 Validierung: Vergleich der Ergebnisse von *Radiana* [47] mit den hergeleiteten Werten für die isotropen Beispielelemente aus Abb. 6.10

Neben diesen Beispielen kann *Radiana* auch noch anhand vieler anderer einfacher Elemente in ähnlicher Weise geprüft werden.

Für Tetraeder können dabei die Ansätze zur exakten Berechnung des In- und Umkugelradius gemäß Kapitel 6.3.1 (→S. 84) herangezogen und zur Validierung verwendet werden. Da dies für *UG*-Pyramiden, *UG*-Prismen und *UG*-Hexaeder jedoch nicht möglich ist, besteht der Wunsch nach einer weiteren Vergleichsmöglichkeit.

Durch Kontakt [46] zum Lehrstuhl *Kombinatorische Geometrie* [80] der TU München können Ergebnisse einer anderen Vorgehensweise [21] mit Resultaten der hier vorgestellten iterativen Methode verglichen werden (→Kapitel 6.3.5).

6.3.5 Validierung von Ergebnissen mit einer anderen Vorgehensweise

Nach Realisierung der iterativen Methoden (→ Kapitel 6.3.2 und 6.3.3) entstand der Wunsch, die Ergebnisse mit einer anderen Vorgehensweise vergleichen und validieren zu können. Bei einer Internetrecherche fiel der Blick auf die TU München und den Lehrstuhl „Angewandte Geometrie und Diskrete Mathematik“ von Prof. P. Gritzmann mit dem Forschungsschwerpunkt „Computational Convexity“ [79, 80].

Die zentralen Problembereiche des „Computational Convexity“ sind laut [80] die Bestimmung der Komplexität der Berechnung geometrischer Funktionale, die Entwicklung effizienter algorithmischer Varianten konvexgeometrischer Sätze und die effiziente algorithmische Konstruktion geometrischer Objekte. Die Dimension ist ein Inputparameter und führt dazu, dass viele Probleme für konvexe Körper nicht effizient lösbar sind. In diesen Fällen rückt die Frage nach effizienter Approximation in den Mittelpunkt. Beispiele hierfür sind u. a. auch die Berechnung von In- und Umradien.

So entstand der Kontakt [→ 46] zu Dr. R. Brandenberg vom obigen Lehrstuhl, der sich mit der Bestimmung von Radien und geometrischen Verhältnissen zwischen Radien in allgemeinen Dimensionen und für spezielle Klassen von Körpern beschäftigt und eine Dissertation mit dem Titel „Radii of convex bodies“ verfasst hat [20].

Unter Anleitung von Dr. R. Brandenberg realisierten die Studenten Lucia Roth und Simon Rittsteiger an der TU München ein Prozedere [21], mit dem die Radien bzw. das vorgeschlagene Anisotropiemaß P (→ Gl.(6.7)) für die hybriden 3D *UG*-Gitter berechnet werden können. So wurde es möglich, die in Heidelberg mit *Radiana* [47] in der L2-Norm berechneten euklidischen Radien mit den L2-Norm Ergebnissen einer anderen Vorgehensweise zu vergleichen.

Zusätzlich wurde die Problemstellung an der TU München auch noch mit Verwendung einer anderen Abstandsdefinition bearbeitet. Anstelle der L2-Norm wurde die L1-Norm, auch Betragsnorm genannt, verwendet.

„Die Münchner“ basierten ihre Vorgehensweise auf einer Arbeit von P. Gritzmann und V. Klee [77]. Dort findet man in Tab. 1 für den euklidischen Fall in der zweiten Zeile bei „Inradius“ ein „P“ bei den „H-Polytopen“ und in der vierten Zeile bei „Umradius“ ein „P“ bei den „V-Polytopen“. „P“ bedeutet dabei im Wesentlichen, dass ein schneller, beliebig exakter Algorithmus zur Verfügung steht.

Ein V-Polytop ist die konvexe Hülle einer endlichen Punktmenge. Im Falle der *ng*-Gitterelemente sind solche V-Polytope gegeben. Um den **Inradius** mit Hilfe linearer Optimierung berechnen zu können, benötigt man nach Theorem 4.3 aus [77] jedoch die *H*-Darstellung des Polytops. Ein V-Polytop kann mit Hilfe eines linearen Ungleichungssystems $Ax <= b$ geschrieben werden. Dann liegt algorithmisch ein H-Polytop vor. Es muss also erst eine Umrechnung in Hyperebenendarstellung erfolgen, bevor ein LP-Solver aktiviert werden kann.

In der praktischen Umsetzung wurde an der TU München der Inkugelradius in zwei Schritten berechnet. Zunächst musste die Umrechnung der Eckendarstellung (V-Polytop) in die Hyperebenendarstellung (H-Polytop) und umgekehrt durchgeführt werden. Es kam ein Fourier-Motzkin Algorithmus zum Einsatz [78]. Es wurden die Softwaresysteme *Qhull* [170] und *PORTA* [164] verwendet [Details → siehe 21]. Im zweiten Schritt der Inkugelradiusberechnung kam für den LP-Solver das Softwaresystem *Xpress*^{MP} [225] zum Einsatz. Hierbei wurde innerhalb *Xpress*^{MP} der Newton-Barrier-Ansatz gewählt.

Die erwähnten Softwaresysteme kamen bei der Inradiusberechnung sowohl für die L1-Norm als auch für die L2-Norm zum Einsatz.

Die Frage nach dem **Umradius** lässt sich, basierend auf Theorem 4.1 aus [77], als ein konvexes Optimierungsproblem schreiben, das mit Hilfe eines Ellipsoidalgorithmus effizient gelöst werden kann [78].

In der praktischen Umsetzung wurde bei „den Münchnern" [21] der Umkugelradius in der L2-Norm mit der Software *SeDuMi* [184] berechnet. In *SeDuMi* wurde dabei ein LP-Solver mit einer „centering Predictor-Corrector Methode" verwendet. Bzgl. der Betragsnorm (L1) kam für den LP-Solver das Softwaresystem $Xpress^{MP}$ [225] zum Einsatz.

In einem Experiment mit 3 hybriden Gittern zu realen Projektbeispielen (→ Kapitel 2) wurde die Schichtenfolge oberhalb einer Salzformation der Norddeutschen Tiefebene in Höfer bei Celle (2421 Gitterelemente (2% Tetraeder, 3% Pyramiden, 37% Prismen, 58% Hexaeder) → Kap. 2.4 u. 7.4), der See Willersinnweiher (2114 Gitterelemente (4% T., 8% Py., 6% Pr., 82% H.) →Kap. 2.8 u. 7.9) sowie die Nordseeinsel Norderney (1376 Gitterelemente (1% T., 1% Py., 15% Pr., 83% H.) →Kap. 2.5 u. 7.5) untersucht.

Die angegebenen Ergebnisse in Tab. 6.3 sind arithmetische Mittel der Radienverhältnisse aller Gitterelemente des jeweiligen Gitters. Dabei wurden die Radienverhältnisse der einzelnen Gitterelemente je nach Elementtyp noch mit einem Divisor geteilt: bei Hexaedern mit 1.732, bei Prismen mit 2.236, bei Pyramiden mit 2.732 und bei Tetraedern mit 3.0; gemäß der Berechnungen der Werte für die isotropen Einheitselemente auf S. 90 in Kap. 6.3.4 .

∅ -Radienverhältnisse	*Höfer_2421.ng*	*Willersinnweiher_1732.ng*	*Norderney_1376.ng*
mit iterativen Algorithmen gemäß Kap. 6.3.2 u. 6.3.3 [47]	7.1	4.5	12.4
TU München (→ [21], L2-Norm)	7.0	4.6	12.3
TU München (→ [21], L1-Norm)	5.9	4.3	10.2

Tab. 6.3 ∅-Radienverhältnisse P_i gemäß Gl. (6.7) für 3 Geometrien aus der Praxis; Vergleich der iterativen Verfahren aus Kap. 6.3 mit der Vorgehensweise der TU München (→ [21])

Tab. 6.3 zeigt, dass die in den Kapiteln 6.3.2 u. 6.3.3 vorgestellten iterativen Verfahren und die Vorgehensweise der TU München für euklidische Abstände (d.h. in der L2-Norm) Ergebnisse der selben Größenordnung liefern. Dieses erfreuliche Vergleichsergebnis bestärkt, im Rahmen dieser Arbeit die iterativen Verfahren zur euklidischen Radienberechnung zur Anisotropiebeschreibung von Gitterelementen zu verwenden (→ siehe Kapitel 7 und 8).

6.4 Berechnung der Winkel von Gitterelementen

Viele Autoren bezeichnen zu kleine oder zu große Elementwinkel als qualitätsschädigend [2, 4, 55, 58, 128, 189, 192, 218].

Neben der Beschreibung der Anisotropie von Gitterelementen (Kap. 6.1 - 6.3) ist es daher stets wichtig, die Winkel von Gitterelementen berechnen und angeben zu können.

Bei den 3D Gitterelementen für *UG* muss man 3 Winkeltypen unterscheiden.

Der **planare Winkel** zwischen 2 benachbarten Kanten auf einer Elementseite kann mit den beiden zugehörigen Kantenvektoren a und b mit Hilfe des Skalarprodukts berechnet werden:

$$a \cdot b = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z = |a| \cdot |b| \cdot \cos \angle(a,b) \tag{6.8}$$

Außerdem existiert zwischen 2 benachbarten Seitenflächen an der zugehörigen Elementkante ein **Flächenwinkel (dihedral angle)**. Zunächst wird mit Hilfe des Kreuzprodukts zweier Kantenvektoren c und d für die eine Seitenfläche ein Normalenvektor n_{cd} und mit den Kantenvektoren e und f für die andere Seitenfläche ein Normalenvektor n_{ef} berechnet ($\rightarrow$ Gl. (6.9)). Anschließend erhält man den „dihedralen" Winkel ϑ zwischen n_{cd} und n_{ef} mit Hilfe des Skalarprodukts (s.o.) der beiden Normalenvektoren.

$$n_{cd} = c \times d = \begin{pmatrix} c_y d_z - c_z d_y \\ c_z d_x - c_x d_z \\ c_x d_y - c_y d_x \end{pmatrix} \quad , \quad n_{ef} = e \times f = \begin{pmatrix} e_y f_z - e_z f_y \\ e_z f_x - e_x f_z \\ e_x f_y - e_y f_x \end{pmatrix} \quad \rightarrow \quad \vartheta_{n_{cd}, n_{ef}} = \angle(n_{cd}, n_{ef}) \tag{6.9}$$

Ferner existiert in jedem Elementknoten K ein **Raumwinkel** ϕ, der durch die 3 von K ausgehenden Elementkanten aufgespannt wird. Die Endpunkte der 3 Kanten bilden ein Dreieck D. Projiziert man D von K aus auf eine umgebende Kugel mit Radius ρ, so entsteht damit eine Projektionsfläche S auf der Kugel. Der Raumwinkel ϕ entspricht S/ρ^2 und besitzt einen Wertebereich von 0 bis 4π, da die Gesamtoberfläche einer Kugel $4\pi\rho^2$ ist. Zur Berechnung von ϕ sei auf den Algorithmus von Oosterom und Strackee [155] sowie auf [2, 128] verwiesen.

In den Ergebnisteilen Kapitel 7 und 8 dieser Arbeit wird der dihedrale Winkel ϑ angegeben. Dieser Winkel wird auch in der umfassenden Arbeit „What is a good linear element..." von J. Shewchuk [189] verwendet ($\rightarrow$Kap. 6.5).

Damit sind die Berechnungsmethoden der Anisotropie- und Winkelbeschreibungen von Gitterelementen abgeschlossen. Für die nun folgende Betrachtung der Qualität von Gitterelementen ($\rightarrow$Kap. 6.5) sind diese Methoden eine wichtige Voraussetzung.

6.5 Qualität von Gitterelementen

Die Frage nach guten Gitterelementen geht weit zurück. So war man bspw. bis Mitte der siebziger Jahre der Auffassung, es sei sehr wichtig, kleine spitze Winkel grundsätzlich zu vermeiden. Durch die Arbeit von Babuzka und Aziz im Jahre 1976 [4] konnte dann aber für die Genauigkeit von FE-Methoden gezeigt werden, dass insbesondere große Winkel nahe 180° vermieden werden müssen.

Die Frage nach guten Gitterelementen ist bis heute aktuell geblieben. Viele Arbeiten behandeln aber nur einen bestimmten Teilaspekt dieser Thematik und die vorgestellten Qualitätsmaße besitzen oft einen gewissen „ad hoc Charakter" [189]. Das ist verständlich, da es eine einfache und allumfassende Formel oder Antwort auf die Frage nach guten Gitterelementen gar nicht gibt.

Jonathan Shewchuk behandelt die Problematik ausführlich und macht auf die vielseitigen **Hintergründe** aufmerksam. Auf seiner Internetseite [188] stellt er den 70-seitigen Preprint [189] **„What Is a Good Linear Finite Element? ..."** zur Verfügung und ruft zu kritischen Kommentaren und Rückmeldungen auf. Seine Arbeit basiert auf folgenden Grundlagen:

Zur unbekannten Lösung u einer PDG seien v_h und u_h stückweise lineare Approximationen. Gegeben ist ein Gitter T mit den Elementen t und den Vertizes x_i. Über T ist u als kontinuierliche skalare Funktion definiert.

Für v_h gilt $\boldsymbol{v_h(x_i) = u(x_i)}$ an allen Vertizes des Gitters. v_h ist linear über jedem t von T. Die Ergebnisse der Funktion v_h sind also lediglich an den Gitterknoten x_i mit den Werten von u identisch. Zwischen den Gitterknoten x_i weichen die Werte von v_h mehr oder weniger von den wahren Werten der Funktion u ab. Unter dem **Interpolationsfehler** $\| u - v_h \|_\infty$ versteht man die größte Abweichung zwischen u und v_h für ein Element t. Eine noch größere Bedeutung hat der Interpolationsfehler $\| \nabla u - \nabla v_h \|_\infty$, der die größte Abweichung in den Gradienten für ein Gitterelement beschreibt (→ Kap. 6.5.1).

Die FE- bzw. FV-Methode versucht eine stückweise lineare Approximation u_h für die unbekannte Lösung u zu finden. Im Gegensatz zum naiven linearen Interpolant v_h ist die Approximation u_h für die meisten Vertizes x_i nicht identisch mit u. Die Differenz $u - u_h$ zwischen wahrer Lösung und Approximation heißt **Diskretisierungsfehler**. Er entsteht bei der Ersetzung einer kontinuierlichen Differentialgleichung durch ein diskretes Gleichungssystem (→ Kap. 6.5.3).

Für die Konvergenz des linearen Lösungsverfahrens und den Einfluss von Rundungsfehlern ist die **Kondition** der Steifigkeitsmatrix von Interesse (→ Kap. 6.5.2). Mit der Kondition beschreibt man die Abhängigkeit der Lösung eines Problems von der Störung der Eingangsdaten. Die Konditionszahl stellt ein Maß für diese Abhängigkeit dar und beschreibt den Faktor, um den der Eingangsfehler im ungünstigsten Fall verstärkt wird.

Nach J. Shewchuk [189] sind bei der Suche nach guten Gitterelementen der Interpolationsfehler (→ Kap. 6.5.1), der Diskretisierungsfehler (→ Kap. 6.5.3) und die Kondition der Steifigkeitsmatrix (→ Kap. 6.5.2) zu beachten. Für alle drei Aspekte berücksichtigt er auch den anisotropen Fall (vgl. Kap. 2.1). Neben mehreren allgemeinen Anmerkungen (→ Kap. 6.5.4) diskutiert J. Shewchuk in seiner Arbeit auch verschiedene Arten von Qualitätsmaßen (→ Kap. 6.5.5).

6.5.1 ...im Hinblick auf den Interpolationsfehler

Für den gradientenbasierten Interpolationsfehler $\|\nabla u - \nabla v_h\|_\infty$ findet man in [189] für den 2D-Fall die Beschränkung in Gl. (6.10). Mit einer Substitution $l_{max}\, l_{med}\, l_{min} / (4A) = l_{max} / (2 \sin \alpha_{max})$ steht der Sinus des **größten** Dreieckswinkels $\sin(\alpha)$ im Nenner. Demnach sind **im 2D-Fall** große Dreiecks**winkel nahe 180° kritisch**, kleine **Winkel nahe 0°** dagegen **unproblematisch**. Zudem ist es nach Gl. (6.10) empfehlenswert, den **Umkreisradius *R*° möglichst klein** zu halten. Das bedeutet auch, dass große Elemente wichtiger sind als kleine. Mit $c_t \geq |u_d''|$ wird die Krümmung der Lösung u für ein bestimmtes Element t bzgl. einer beliebigen Richtung d begrenzt.

$$\left\|\nabla u - \nabla v_h\right\|_\infty \leq c_t \frac{l_{max}\, l_{med}\, (l_{min} + 4r)}{4A} < 3\, c_t R^{\circ} \quad , \quad \frac{l_{max}\, l_{med}\, l_{min}}{4A} = \frac{l_{max}}{2 \sin \alpha_{max}} \tag{6.10}$$

$$\left\|\nabla u - \nabla v_h\right\|_\infty \leq c_t \frac{\frac{1}{6V} \sum_{1 \leq i < j \leq 4} A_i\, A_j\, l_{ij}^{\,2} \;+ max_i \sum_{j \neq i} A_j\, l_{ij}}{\sum_{m=1}^{4} A_m} < 3 \cdot c_t \frac{\sum_{1 \leq i < j \leq 4} l_{ij}^{\,2}\; l_{kl}}{(\sin \theta_{kl}) \bullet 4 \sum_{m=1}^{4} A_m} \tag{6.11}$$

Für den 3D-Fall sieht man in Gl. (6.11) (vgl. [189]), dass der Nenner sowohl bei sehr stumpfen als auch bei sehr spitzen dihedralen Tetraederwinkeln θ_{kl} gegen 0 geht. Dies bereitet keine Schwierigkeit, sofern die Länge der gegenüberliegenden Kante l_{kl} entsprechend klein ist und der Zähler ebenfalls gegen 0 geht. So sind die Tetraeder „d)" und „f)" in Abb. 3.13 auf S. 32 trotz ihrer extrem spitzen Winkel unproblematisch. Bei den stumpfen Winkeln (nahe 180°) der Tetraeder „a)", „b)" und „c)" in Abb. 3.13 ist die gegenüberliegende Kante dagegen nicht klein. Damit sind in 3D **große Winkel nahe 180° kritisch** bzgl. des gradientenbasierten Interpolationsfehlers. Man beachte, dass Tetraeder mit spitzen Winkeln und langen gegenüberliegenden Kanten auch immer einen Winkel nahe 180° besitzen.

Shewchuk unterscheidet bzgl. $\|\nabla u - \nabla v_h\|_\infty$ zwei Arten „guter" Tetraeder: solche, die einigermaßen gleichseitig sind und solche die beliebig flach werden können, ohne dass dabei ein dihedraler Winkel nahe 180° entsteht (→Abb. 3.13 d,e,f). „Schlechte" Tetraeder bekommen dagegen einen dihedralen Winkel nahe 180° wenn sie gestaucht werden (→Abb. 3.13 a,b,c).

Neben diesen rein geometrischen Betrachtungen ist es entscheidend, ob die Krümmung von u eine bestimmte Vorzugsrichtung hat. Es ist dann von Vorteil, wenn man die Gitterelemente senkrecht zu dieser Richtung streckt.

Für eine Beurteilung der Elemente im anisotropen Fall, reicht eine richtungsunabhängige Begrenzung c_t nicht aus (s.o). Daher verwendet man den Krümmungstensor C_t aus Gl. (6.12), bei dem die 3 Schranken ξ_1, ξ_2 und ξ_3 bzgl. der drei orthogonalen Raumrichtungen w_1, w_2 und w_3 berücksichtigt werden. ξ_1, ξ_2 und ξ_3 sind die Eigenwerte von C_t.

$$C_t = \begin{bmatrix} w_1 & w_2 & w_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi_1 & 0 & 0 \\ 0 & \xi_2 & 0 \\ 0 & 0 & \xi_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 & w_2 & w_3 \end{bmatrix}^T \tag{6.12}$$

$$E = W \begin{bmatrix} \sqrt{\xi_1 / \xi_{max}} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\xi_2 / \xi_{max}} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\xi_3 / \xi_{max}} \end{bmatrix} W^T \tag{6.13}$$

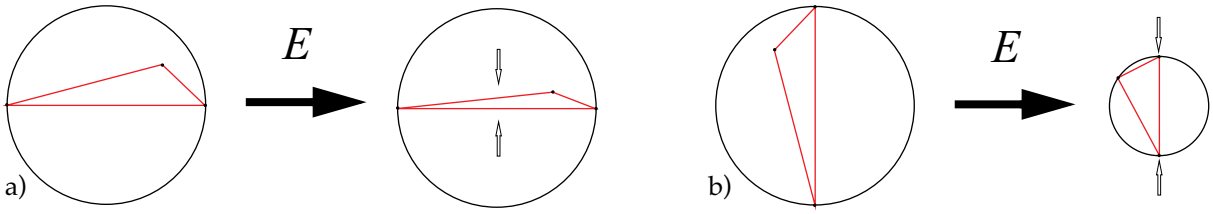


Abb. 6.11 Unterschiedliche Ergebnisse nach Transformation mit *E*

Im anisotropen Fall betrachtet man die Elemente nach einer **Transformation *E* vom physikalischen Raum in einen isotropen Raum** (→Gl.(6.13)). Dabei sollte der Elementumradius R möglichst minimiert werden. Die mögliche Skalierung bei der Transformation variiert zwischen $1/\sqrt{\upsilon}$ und 1. Die Konditionszahl des Krümmungstensors C_t ist $\upsilon = \xi_{max}/\xi_{min}$ und entspricht dem Quotienten aus größtem und kleinstem Eigenwert von C_t. **Ein Element *t* ist gut, falls *t*= E t*** im isotropen Raum **keine großen Winkel** hat (→Abb. 6.11).

Die **Gitterelemente** sollten **in Richtung der stärksten Krümmung klein** sein und idealerweise ein **Seitenverhältnis von „$1 : \sqrt{\xi_i}$“** besitzen. So werden viel weniger Elemente benötigt und es kann eine bessere Genauigkeit als bei gleichseitigen Elementen erzielt werden. Dies gilt sogar für Elemente mit großen Winkeln im physikalischen Raum.

Unter gewissen Umständen ist ein Seitenverhältnis von „$1 : \xi_i$“ sogar noch besser und wird von Shewchuk mit „superaccuracy“ bezeichnet (siehe in [189] → Chapter 2.3, insbes. S. 18).

6.5.2 ...im Hinblick auf die Kondition

Eine **zu große Konditionszahl κ der globalen Steifigkeitsmatrix K beeinträchtigt** die iterativen Methoden. κ ist der Quotient aus größtem und kleinstem Eigenwert von K. (→ Gl. (6.14)).

$$\kappa = \lambda^K_{max} / \lambda^K_{min} \tag{6.14}$$

$$\max_t \lambda^t_{max} \le \lambda^K_{max} \le m \cdot \max_t \lambda^t_{max} \tag{6.15}$$

Der kleinste Eigenwert λ^K_{min} ist von der Elementform unabhängig und hängt von der Größe der verwendeten Elemente ab.

Der größte Eigenwert von K ist λ^K_{max}. Dieser ist **abhängig vom** größten maximalen Eigenwert $\max_t \lambda^t_{max}$ der **einzelnen Elementsteifigkeitsmatrizen K_t**. Dies ist in der Abschätzung von Fried zu sehen (siehe in Gl.(6.15) bzw. [59]). Darin ist m die maximale Anzahl von Elementen, die an einem Vertex des Gitters zusammenstoßen. Eine einzige Elementsteifigkeitsmatrix mit sehr großem maximalen Eigenwert λ^t_{max} erhöht somit den maximalen Eigenwert λ^K_{max} der globalen Steifigkeitsmatrix. Die Kondition kann also von einem einzigen schlecht geformten Element abhängen.

Bezüglich der Elementform lässt sich bei Betrachtung der Elementsteifigkeitsmatrizen zeigen, dass **kleine Winkel λ^t_{max} erhöhen** ([189], S. 31). Die Elemente „cap“, „sliver“, „pancake“ und „wedge“ in Abb. 3.13 b,c,d,f (S. 32) sind mit ihren extrem spitzen dihedralen Winkeln bzgl. der Kondition demnach **ungeeignet**. Im Gegensatz dazu schadet weder das Element „spindle“ (Abb. 3.13a) mit seinem Winkel nahe 180° noch das Element „thorn“ (Abb. 3.13e) der Kondition nicht.

Im 3D-Fall kommt neben dem Formaspekt noch der Größenaspekt hinzu, da λ^K_{max} proportional zur Länge der längsten Gitterkante l_{max} ist. In 3D sind bzgl. der Kondition große Gitterelemente also wichtiger als kleine Elemente.

Bei Anisotropie der PDG empfiehlt Shewchuk eine **Transformation F** (siehe [189]→Chapter 3.2), die die Punkte des physikalischen Raums **in einen isotropen Raum** transformiert. Dabei ist der isotrope Raum gemeint, **in dem die Koeffizienten der PDG isotrop sind** und nicht notwendigerweise die Lösung. **Sowohl sehr große als auch sehr kleine Winkel** eines Elements t **können problemlos sein, sofern $\tilde{t} = F\,t$** in besagtem isotropen Raum **gut** aussieht. Im Gegensatz dazu können gleichseitige Elemente bzgl. der Kondition problematisch sein und lange, dünne aber gut orientierte Elemente können unter Umständen sogar optimal sein für die Minimierung von λ^K_{max} und die Konditionszahl κ.

6.5.3 ...im Hinblick auf den Diskretisierungsfehler

Bei der Numerik von PDGen ist der Diskretisierungsfehler (vgl. Einleitung von Kap. 6.5) in globaler Weise beschränkt. Ein schlechtes Element wirkt sich stets auf seine Nachbarschaft und unter Umständen auf das gesamte Gitter aus.

Der Diskretisierungsfehler ist üblicherweise (um einen konstanten Faktor) kleiner als der Interpolationsfehler und ist über die PDG mit dem Interpolationsfehler gekoppelt. Der Diskretisierungsfehler **lässt sich mit Fehlerschranken des Interpolationsfehlers begrenzen** (siehe in Gl. (6.16). Die Gewichtung von $u\text{-}v_h$ gegenüber $\nabla u\text{-}\nabla v_h$ hängt von den Koeffizienten der PDG ab [189].

Idealerweise sollte die Approximation u_h bei Verfeinerung des Gitters gegen u konvergieren und damit der Diskretisierungsfehler $u\text{-}u_h$ gegen 0 gehen. Diese Konvergenz tritt nur dann auf, wenn auch die Interpolationsfehler $u\text{-}v_h$ und $\nabla u\text{-}\nabla v_h$ gegen 0 konvergieren. **Elemente mit großen Winkeln** sind **für den Diskretisierungsfehler $u\text{-}u_h$** also ebenfalls **kritisch**.

$$\left\| u-u_h \right\|_{H^1(\Omega)} \leq \left\| u-v_h \right\|_{H^1(\Omega)} \leq \left(\sum_{t \in T} V_t \left(\left\| u-v_h \right\|^2_{\infty(t)} + \left\| \nabla u - \nabla v_h \right\|^2_{\infty(t)} \right) \right)^{\frac{1}{2}} \tag{6.16}$$

6.5.4 Allgemeine Anmerkungen

Es folgen einige allgemeine Anmerkungen und Empfehlungen aus der Arbeit von J. Shewchuk, die bzgl. der Qualität von Gitterelementen zu berücksichtigen sind:

- Nach Shewchuk hängen Interpolationsfehler, Diskretisierungsfehler und die Kondition neben der Elementform stets auch von der **Elementgröße** ab. Bei großen Elementen wirkt sich eine schlechte Elementform viel stärker aus wie bei kleinen Elementen. Bei der Qualitätsbetrachtung eines Gitters sind somit große Elemente wichtiger als kleine Elemente.
- Oftmals führen scheinbar „schöne“ Gitter dennoch zu Problemen, weil sie ein paar schlechte Elemente besitzen. Bereits **ein einziges schlechtes Element** kann die numerische Simulation ernsthaft beeinträchtigen, wenngleich alle anderen Elemente gut sind. Es ist also ratsam, schlechte Elemente gänzlich zu vermeiden. Die Auswirkung solcher Ausreißer hängt allerdings entscheidend von der verwendeten Lösungsmethode im numerischen Prozess ab.
- Sprunghafte Änderungen der Elementgröße sind zu vermeiden und es ist vorteilhaft, einen allmählichen Übergang von kleinen auf große Elemente zu schaffen, d.h. **gradierte Gitter** zu verwenden [67, 98].
- Bei der Suche nach einem guten Gitterelement muss man sich bewusst machen, dass die **beschriebenen Teilaspekte bzgl. der Gitterelementqualität nicht immer zusammenpassen.** Deshalb muss man Prioritäten setzen, wie folgende 3 Beispiele zeigen:
  - → Beim Interpolations- und Diskretisierungsfehler lassen sich die Effekte schlecht geformter Elemente durch Verwendung kleinerer Elemente kompensieren. Bezüglich der Kondition ist das nicht möglich.
  - → Der ideale „aspect ratio“ und die ideale Orientierung eines Gitterelements stimmen bezüglich des Interpolationsfehlers und bezüglich der Kondition nicht immer überein.
  - → Bei Shewchuks „superaccurate elements“ verhält sich der Diskretisierungsfehler teilweise widersprüchlich zum Interpolationsfehler und zur Kondition.
- Für die Qualitätsbeschreibung eines Elements kann es sinnvoll sein, mehrere Maße vorzugeben oder sogar ein **kombiniertes Maß**, das ein gewichtetes harmonisches Mittel diverser Einzelmaße berechnet.

6.5.5 Qualitätsmaße

Qualitätsmaße werden für Knotenplatzierungen, Glättungen, Transformationen, Verfeinerungen oder zum Vergleich von Gitterelementen verwendet. Jonathan Shewchuk unterscheidet in [189] zwischen zwei Arten von Qualitätsmaßen:

- Skalierungsinvariante Maße (**„scale-invariant measure“**) bewerten insbesondere die Elementform und berücksichtigen die Elementgröße nicht.
- **„size-and-shape“** Qualitätsmaße berücksichtigen die Elementgröße und die Elementform in einer Zahl (→ von Shewchuk favorisiert [189]).

Während skalierungsinvariante Maße schlechte Winkel stets streng benachteiligen, wird bei „size-and-shape“ Qualitätsmaßen die Restriktion bzgl. der Elementform allmählich gelockert, wenn die Elemente kleiner werden (z.B. sinnvoll zur Vermeidung einer „Überverfeinerung“). Andererseits bergen „size-and-shape“ Qualitätsmaße aber auch die Gefahr, dass beim Glätten gradierte Gitter uniformer werden als gewünscht und dass die Elementanzahl des Gitters nicht berücksichtigt wird. Shewchuk schlägt diesbezüglich vor, er ein bestimmtes Element t zuerst uniform auf ein Volumen von 1 zu skalieren bevor die „size-and-shape“-Qualitätsmessung durchgeführt wird.

Die Tab. 6.4 zeigt „scale-invariant“ und „size-and-shape“ Qualitätsmaße für Tetraeder nach Shewchuk [189] basierend auf Reziprokwerten von Interpolationsfehlerschranken bzw. maximalem Eigenwert.

	$\|u - v_h\|_\infty$	$\|\nabla u - \nabla v_h\|_\infty$	Kondition
[a]size and shape	$\frac{1}{c_t\, r_{mc}^2}$	$\frac{V \sum_{m=1}^{4} A_m}{c_t\left(\sum_{1\le i<j\le 4} A_i A_j l_{ij}^2 \;+\; 6\lvert V\rvert \; max_i \sum_{j\neq i} A_j l_{ij} \right)}$	$\mathrm{sign}(V)\frac{1}{\lvert\lambda_{max}\rvert}$ or zero if $V = 0$
[a]scale-invariant	$\frac{V}{r_{mc}^3}$	$V\left(\frac{\sum_{m=1}^{4} A_m}{\sum_{1\le i<j\le 4} A_i A_j l_{ij}^2 \;+\; 6\lvert V\rvert \; max_i \sum_{j\neq i} A_j l_{ij}} \right)^{3\,4}$	$\frac{V}{\lvert V\,\lambda_{max}\rvert^{3\,4}}$ or zero if $V = 0$

Tab. 6.4 Qualitätsmaße für Tetraeder aus J. Shewchuk [189]→Tab. 6.4 *

Außerdem gibt Shewchuk in [189→Tables 7, 8] eine Übersicht und kritische Beurteilung einiger skalierungsinvarianter Qualitätsmaße. Dabei weist er auf Merkmale eines guten Qualitätsmaßes q hin:

- Für degenerierte Elemente sollte $q=0$ sein und mit zunehmender Elementqualität sollte q größer werden, maximal jedoch den Wert 1 liefern. Wenn ein Qualitätsmaß dies erfüllt und zudem skalierungsinvariant ist, dann spricht Fried [59, 189] von einem „fair measure“.
- Ein Qualitätsmaß q sollte für die meisten degenerierten Elemente einen finiten Gradienten ungleich 0 besitzen. Das Maß in Abb. 6.12c hat dagegen einen finiten Gradienten der für degenerierte Elemente 0 wird.

* r_{mc} entspricht R in Kap. 6.3.1

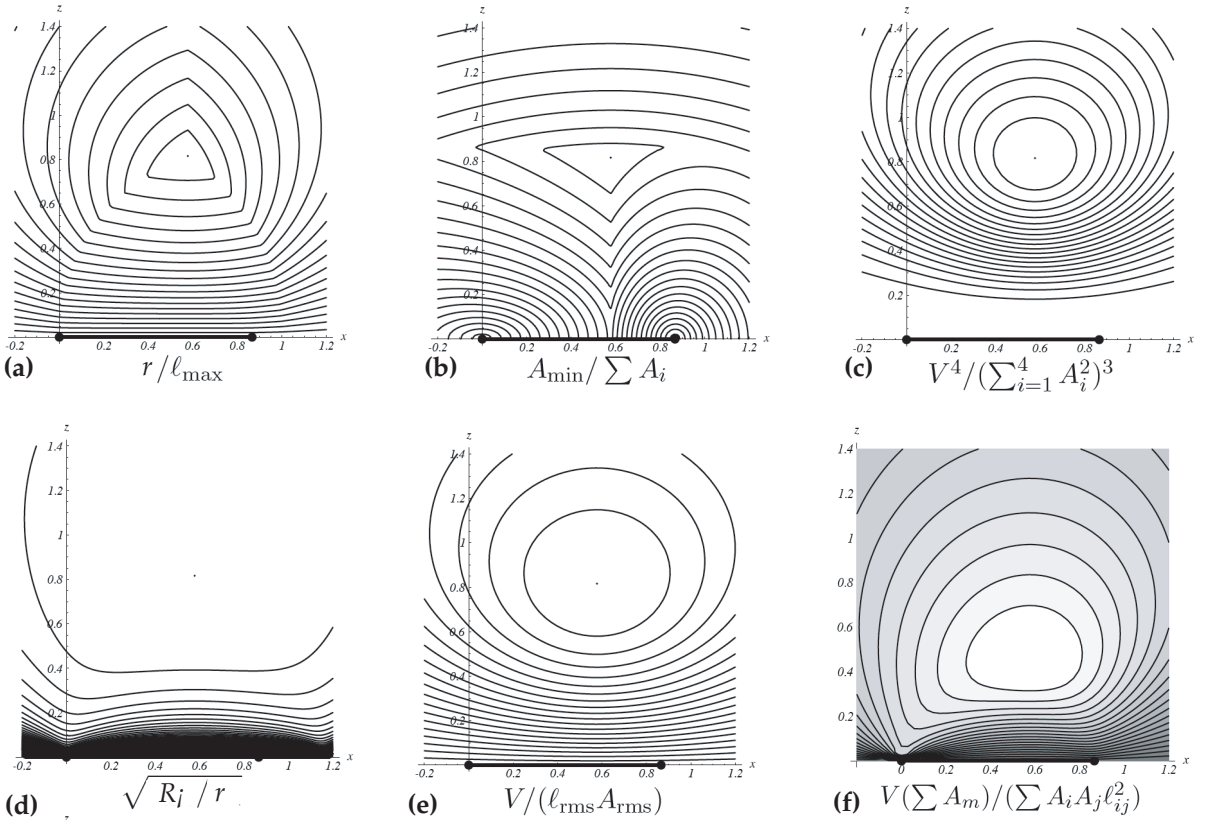


Abb. 6.12 Höhenlinienplots einiger Qualitätsmaße für einen Tetraeder mit den Vertizes (0, 0, 0), (√3/2, 1/2, 0), (√3/2, -1/2, 0), (*x*, 0, *z*) zur Erläuterung der Eigenschaften von Qualitätsmaßen (aus der Arbeit [189] von J. Shewchuk → Fig. 16, Fig. 20 und Fig. 21)

- Qualitätsmaße mit infiniten Gradienten wie bspw. das Maß in Abb. 6.12d können die Stabilität numerischer Optimierungsalgorithmen beeinträchtigen, falls das Ausgangsgitter degenerierte oder invertierte Elemente besitzt. Qualitätsmaße sollten daher keinen infiniten Gradienten besitzen.
- Die Glattheit eines Qualitätsmaßes ist wichtig für den Optimierungsalgorithmus beim Glätten. Die Maße in Abb. 6.12a und Abb. 6.12b sind dagegen nicht glatt.
- Ein Qualitätsmaß q sollte quasikonvex sein, d.h., dass die Punkte innerhalb einer Höhenlinie eine konvexe Punktmenge bilden müssen. Die Maße in Abb. 6.12b und Abb. 6.12d sind dagegen nicht quasikonvex.

Die beiden Maße in Abb. 6.12b und Abb. 6.12d werden von J. Shewchuk besonders kritisiert. Das Maß in Abb. 6.12b liefert für ein flaches „sliver"-Element (siehe Abb. 3.13c, S. 32) den Wert 1 und für ein flaches „cap"-Element (→Abb. 3.13b, S. 32) den Wert 2/3. Der infinite Gradient beim Maß in Abb. 6.12d bedroht die Stabilität von numerischen Optimierungsalgorithmen und kann fatal sein, falls das Startgitter degenerierte Elemente besitzt.

Im Gegensatz dazu lobt Shewchuk das Maß in Abb. 6.12e, das alle obigen Anforderungen erfüllt und zitiert diesbezüglich die Arbeit von P. Knupp [116].

Abb. 6.12f zeigt ein „size-and-shape" Maß von J. Shewchuk ([189]→Fig. 16), das auf dem Reziprokwert einer Schranke für den gradientenbasierten Interpolationsfehler basiert (Gl. (6.11)). Ein extrem flacher „pancake"-Tetraeder (→ Abb. 3.13d, S. 32) mit einem extrem spitzen aber keinem extrem stumpfen Winkel wird von diesem Maß berücksichtigt und positiv bewertet.

Shewchuk macht bei seiner Analyse der gängigen Qualitätsmaße folgende Beobachtungen:

- Ein faires Qualitätsmaß q kann stets so umformuliert werden, dass in 2D die Fläche A bzw. in 3D das Volumen V im Zähler von q steht (z.B. Abb. 6.12e).
- Maße, deren Gradienten für degenerierte Elemente 0 werden, können oft an A^2 oder A^3 bzw. V^2, V^3 oder V^4 im Zähler erkannt werden (z.B. Abb. 6.12c).
- Für den direkten Vergleich von Elementen sind die Maße q und q^c ($c>0$) gleichwertig. Als Zielfunktion bei numerischen Optimierungsalgorithmen sind q und q^c dagegen aufgrund ihrer unterschiedlichen Gradienten mehr oder weniger gut geeignet.
- Sehr viele Qualitätsmaße können in der Form A^c/X bzw. V^c/X dargestellt werden, wobei selbst für die meisten degenerierten Elemente $X\neq 0$ gilt. Wenn $c>1$ ist, hat das Maß dann einen Gradienten von 0, wenn A bzw. V gegen 0 geht (vgl. Abb. 6.12c). Wenn $c<1$ ist, hat das Maß dann einen infiniten Gradienten, wenn A bzw. V gegen 0 geht. Zur numerischen Optimierung sind Maße mit $c=1$ am besten. Maße mit $c\neq 1$ können in die Form $A/X^{1/c}$ *bzw.* $V/X^{1/c}$ verbessert werden. Das trifft z.B für das Maß in Abb. 6.12c [32] zu. Dieses Maß ist für eine numerische Optimierung ungeeignet. Zieht man jedoch die vierte Wurzel, dann erhält man ein Maß, das sich eignet.

Für weitere Informationen zu Qualitätsmaßen für Gitterelemente sei auf [189→Kap.6] verwiesen.

Kapitel 7

Experimente mit Gittern für anisotrope Geoschichtungen

Dieses Kapitel zeigt, dass man mit dem hexaederbasierten Konzept dieser Arbeit und der Methode der vertikalen Kanten Geometrien und Gitter für die projektrelevanten komplexen anisotropen Schichtengebiete der Anwendungsbeispiele aus Kapitel 2 erstellen und in numerischen Simulationen verwenden kann.

Anhand der erzeugten Gitter werden die Anisotropiemaße aus Kapitel 6 ausführlich getestet, verglichen und diskutiert.

Zudem wird gezeigt, dass mit der vorgestellten Methode im Gegensatz zu tetraederbasierten Gittergeneratoren extreme Elementwinkel nahe 0° oder 180° tatsächlich vermieden werden können.

Außerdem bestätigen alle Experimente den gewünschten hohen Hexaederanteil des vorgestellten Verfahrens.

Hinzu kommen Experimente mit den verschiedenen Werkzeugen wie *Create_NxM_Quad_Grid*, *Eval_Volume_Area* sowie *split* und *SurfaceMerge* zur besseren Handhabung und Optimierung der erzeugten Geometrien und Gitter.

Das Verfahren aus Kapitel 4 wurde ursprünglich für Deckgebirge von Salzformationen entwickelt, um dichtegetriebene Grundwasserströmungen und den Radionuklidtransport oberhalb eines Salzstocks simulieren zu können [41, 42]. Geometrien und Gitter für die anisotropen Schichtengebiete WIPP (→Kap. 7.1), *komplex* (→Kap. 7.2), *Layered* (→Kap. 7.3) und Höfer (→Kap. 7.4) sind Beispiele hierfür.

Im Rahmen dieser Arbeit stellte sich jedoch heraus, dass das grundlegende Konzept mit vertikalen Kanten auch für andere anisotrope Schichtengebiete mit anderen Problemstellungen gut geeignet ist. Sowohl für geologische Schichtungen wie bei den Nordseeinseln Norderney (→Kap. 7.5) und Langeoog (→Kap. 7.6), oder dem Grundwasserbecken von Orange County (→Kap. 7.7) aber auch für anisotrope Schichtungen in Horizontalsilos (→Kap. 7.8) oder im Willersinnweiher (→Kap. 7.9) kommt das vorgestellte Geometrie- und Vernetzungskonzept zum Einsatz.

7.1 WIPP (Waste Isolation Pilot Plant)

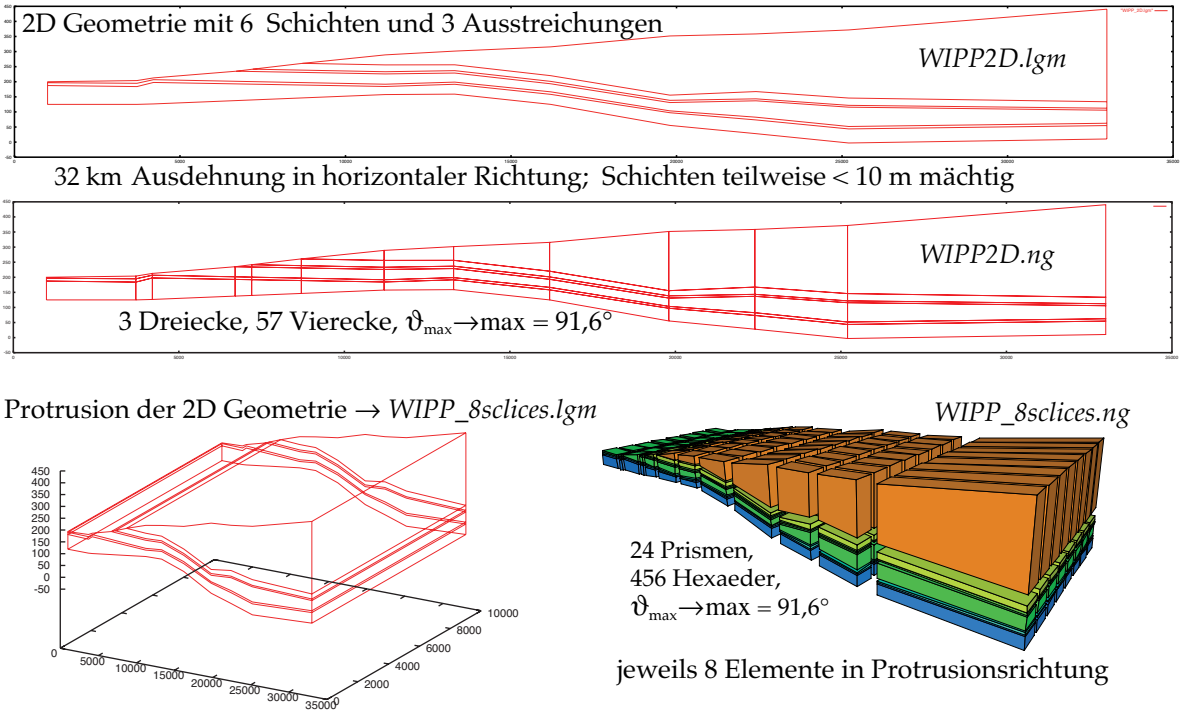


Abb. 7.1 Vernetzung und Protrusion eines 2D-Geometriemodells für das Gebiet WIPP mit *lgm2ng* gemäß Kap. 4.1

In Abb. 7.1 sieht man die 2D *lgm*-Geometrie *WIPP2D.lgm* für das WIPP-Gebiet in Anlehnung an [41, 175, 177]. Die Anisotropie des Gebiets, das in Kap. 2.2 genauer beschrieben wird, ist hier gut ersichtlich. Unter *WIPP2D.lgm* wird das zugehörige 2D-*ng*-Gitter *WIPP2D.ng* dargestellt, das gemäß dem in Kap. 4.1 beschriebenen Ansatz mit der Software *lgm2ng* [44] erzeugt wurde. Das Gitter besteht zu 95% aus Vierecken. Wie in Kap. 4.1 beschrieben, entstehen tatsächlich keine großen Winkel und $\vartheta_{max} \rightarrow \max = 91.6°$.

Unter dem 2D-Gitter sieht man links die 3D *lgm*-Geometrie *WIPP_8sclices.lgm*, die mit *lgm2ng* durch eine Protusion mit $\Delta y = 10$ km erzeugt wird. Außerdem wird mit dem Teilungsparameter $n = 8$ ein zu *WIPP_8sclices.lgm* passendes 3D Gitter mit dem Namen *WIPP_8slices.ng* erzeugt (Abb. 7.1 rechts unten). Es besteht zu 95% aus Hexaedern und besitzt je 2D Element aus *WIPP2D.ng* 8 Gitterelmente in Protrusionsrichtung. Mit $n = 4$ und $\Delta y = 10$ km wird ein zweites Gitter (*WIPP_4sclices.ng*) erzeugt, welches nur 4 Elemente in Protrusionsrichtung besitzt (vgl. Kap. 4.1).

In Tab. 7.1 sind die Anisotropiewerte K, Ψ, P sowie die dihedralen Winkel ϑ_{max} und ϑ_{min} gemäß Kapitel 6 für die Gitter *WIPP_4sclices.ng*, *WIPP_8sclices.ng* berechnet.

Außerdem wird das Gitter *WIPP_2863.ng* mit der Software *ARTE* [62, 63, 64] generiert (→Tab. 7.1), das im Gegensatz zu *lgm2ng* überwiegend Tetraeder erzeugt und lediglich in extrem dünnen Schichten wie *Magenta Dolomit* und *Culebra Dolomit* (vgl. Abb. 2.1, S. 10) vertikal orientierte Prismen vom Typ Abb. 6.1→Pr_1,Pr_2 verwendet. Die Anisotropiewerte K, Ψ, P sowie die dihedralen Winkel ϑ_{max} und ϑ_{min} für *WIPP_2863.ng* sind in Tab. 7.1 rechts zum Vergleich angegeben.

Gittername :	*WIPP_4sclices.ng*	*WIPP_8sclices.ng* (→Abb. 7.1)	*WIPP_2863.ng* [62, 63, 64]
#Elemente (%T, %Py, %Pr, %H)	240 (0.0, 0.0, 5.0, 95.0)	480 (0.0, 0.0, 5.0, 95.0)	2863 (76.04, 0.28, 23.68, 0.0)
$K(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.1)	1278.7, 13.6, 239.8	1278.7, 13.6, 218.6	581.6, 1.5, 50.4
$\Psi(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.2)	12.52, 3.55, 7.31	11.17, 3.27, 6.55	17.69, 2.83, 6.80
$P(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.3)	1196.17, 22.28, 250.11	1145.83 , 18.17, 201.49	1803.01, 11.98, 133.40
$\vartheta_{max}(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.4)	91.6°, 90.0°, 90.4°	91.6°, 90.0°, 90.4°	179.5°, 89.7°, 149.1°
$\vartheta_{min}(E_i)$: min, max, ∅ (→ Kap. 6.4)	0.8°, 89.9°, 85.1°	0.8°, 89.9°, 85.1°	0.05°, 73.6°, 10.6°

Tab. 7.1 Anisotropiewerte K, Ψ und *P*, dihedrale Winkel sowie prozentuale Verteilung nach Elementtypen für 3 verschiedene Gitter zum *WIPP*-Gebiet

Bei den Gittern *WIPP_4sclices.ng* und *WIPP_8sclices.ng* haben 5% der Elemente dihedrale Winkel mit $\vartheta_{min} < 2°$, die aber nie kleiner als $\vartheta_{min} \rightarrow \min = 0.8°$ werden. Bei allen anderen (95%) Elementen liegt ϑ_{min} zwischen 80° und 90° ($\vartheta_{min} \rightarrow \varnothing = 85.1°$). Bei dem Netz *WIPP_2863.ng* [62, 63, 64], welches größtenteils aus Tetraedern besteht, besitzen dagegen 44% der Gitterelemente ein $\vartheta_{min} < 2°$ und $\vartheta_{min} \rightarrow \min = 0.05°$. Auch $\vartheta_{min} \rightarrow \varnothing = 10.6°$ ist bei *WIPP_2863.ng* deutlich kleiner als bei den beiden hexaederbasierten Gittern.

Zieht man die geometriebedingten Winkel in Betracht, erkennt man in einer Untersuchung der 2D-*lgm*-Datei mittels Kosinussatz für die 3 oberen Schichten folgende Winkel an den 3 ausbeissenden Stellen (vgl. Abb. 2.1 in Kap. 2.2): oberste Schicht *Dewey Lake*: 0.75°; zweitoberste Schicht *Forty Niner*: 0.85°; dritte Schicht *Magenta Dolomit*: 0.92°. Damit ist erwiesen, dass die Minimalwinkel $\vartheta_{min} \rightarrow \min$ bei den beiden Gittern aus *lgm2ng* nicht besser sein können und dass beim *ARTE*-Gitter *WIPP_2863.ng* die Minimumwinkel ϑ_{min} durch Verwendung der flachen Tetraeder so klein werden. Wie in Kap. 3.4 erläutert, ist dieses Phänomen kleiner Winkel bei Tetraedernetzen für anisotrope Geometrien typisch.

Bzgl. ϑ_{max} haben die Gitterelemente von *WIPP_4sclices.ng* und *WIPP_8sclices.n* durchweg Winkel, die 90° nur wenig übersteigen und es gilt $\vartheta_{max} \rightarrow \max \cong \vartheta_{max} \rightarrow \min$. Das Netz *WIPP_2863.ng* [62, 63, 64] weist dagegen recht unterschiedliche Maximumwinkel auf. Der Durchschnitt $\vartheta_{max} \rightarrow \varnothing = 149.1°$ ist im Gegensatz zu den *lgm2ng*-Gittern sehr groß und 6.35% der Elemente besitzen sogar ein $\vartheta_{max} \rightarrow \max > 178°$. Das bestätigt die in Kap. 3.4 beschriebene Gefahr großer Winkel bei Tetraedern für anisotrope Gebiete.

Beim Anisotropiemaß *K* fallen die Ergebnisse für die beiden Gitter *WIPP_4sclices.ng* und *WIPP_8sclices.ng* 4 bis 5 mal größer aus wie beim tetraederbasierten Gitter *WIPP_2863.ng* . Dieses Missverhältnis bestätigt die in Kap 6.1 beschriebene Kritik am Maß *K,* das bestimmte Tetraeder viel zu gut bewertet. Bei den neuen Anisotropiemaßen Ψ und *P* ist die Diskrepanz erfreulicherweise viel geringer.

Die gezeigten Geometrien und Gitter *WIPP_4sclices.lgm/ng* und *WIPP_8sclices.lgm/ng* und das in Kap. 4.1 beschriebene Verfahren werden im Präprozess diverser Simulationen des Transports salinen Wassers für das WIPP-Gebiet eingesetzt. Unter anderem besteht das Ziel, mit den Rechnungen die Ergebnisse der Untersuchung [175] möglichst gut nachzuvollziehen. Bezüglich der Simulationen sei auf die Arbeiten [177 und 178] hingewiesen. Neben diesen praktischen Anwendungen dienen die Gitter der Untersuchung moderner numerischer Verfahren wie beispielsweise *Punkt Block ILU* ([103]→6.1).

7.2 komplex

Die Erzeugung der Dateien *komplex_2D.ng*, *komplex_3D.lgm* und *komplex_3D.ng* erfolgt mit der Software *lgm2ng* (siehe Kap. 4.1 und Abb. 4.3 sowie [44]).

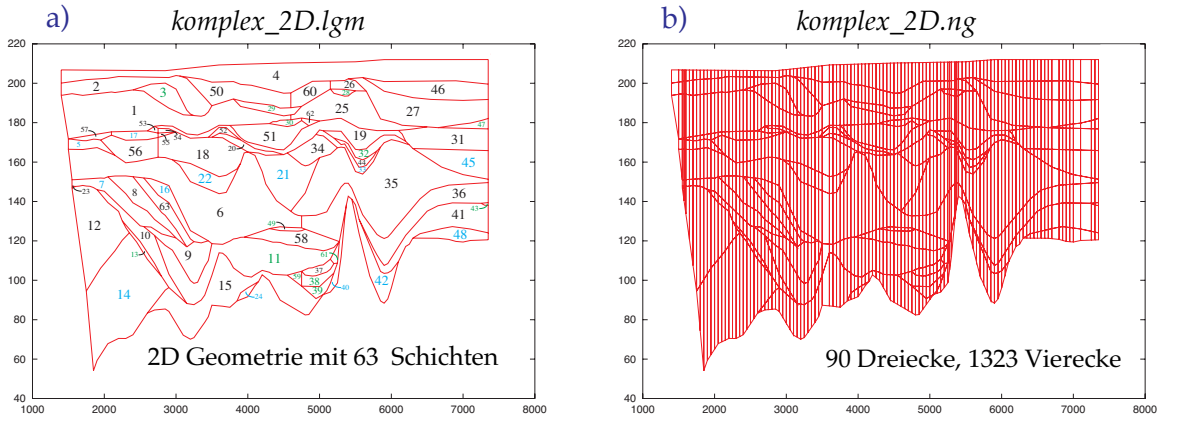


Abb. 7.2 Geometrien und Gitter für das Gebiet *komplex*, 30fach überhöhte Darstellung

Zur besseren Darstellung der anisotropen Schichten sind die Geometrien und Gitter für *komplex* in Abb. 7.2 30-fach überhöht abgebildet.

Abb. 7.2a zeigt das zweidimensionale anisotrope Schichtengebiet *komplex_2D.lgm*, das in Kapitel 2.3 eingeführt wird (→Abb. 2.2).

Rechts daneben zeigt Abb. 7.2b das 2D Gitter *komplex_2D.ng* bestehend aus 90 Dreiecken und 1323 Vierecken gemäß dem Verfahren mit vertikalen Kanten aus Kap. 4.1 (vgl. Abb. 4.1 und Abb. 4.2).

Eine Geometrieprotrusion (vgl. Kap. 4.1 und Abb. 4.4) mit $y_{start} = 0$ und $y_{end} = 7000$ führt zu der „2.5D“ Geometrie *komplex_3D.lgm*, die in Abb. 7.2c mit *GRAPE* [76] visualisiert wird.

Außerdem wird in Abb. 7.2d das 3D Gitter *komplex_3D.ng* mit $n = 16$ erzeugt. Zu jedem 2D Element aus *komplex_2D.ng* werden 16 Gitterelemente in Richtung der dritten Raumdimension erzeugt (vgl. Kap. 4.1 und Abb. 4.5). Es entstehen 1440 Prismen und 21168 Hexaeder.

Gittername :	*komplex_3D.ng* (→Abb. 7.2d)	*WIPP_8sclices.ng* (→Abb. 7.1)
#Elemente (%T, %Py, %Pr, %H)	22608 (0.0, 0.0, 6.37, 93.63)	480 (0.0, 0.0, 5.0, 95.0)
$K(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.1)	1362.22, 8.75, 115.96	1278.7, 13.6, 218.6
$\Psi(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.2)	13.78, 2.94, 4.60	11.17, 3.27, 6.55
$P(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.3)	1395.45, 8.87, 95.64	1145.83, 18.17, 201.49
$\vartheta_{max}(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.4)	113.52°, 90.0°, 91.6°	91.6°, 90.0°, 90.4°
$\vartheta_{min}(E_i)$: min, max, ∅ (→ Kap. 6.4)	0.37°, 89.98°, 82.92°	0.8°, 89.9°, 85.1°

Tab. 7.2 Anisotropiewerte *K*, Ψ und *P*, dihedrale Winkel sowie prozentuale Verteilung nach Elementtypen für *komplex_3d.ng* (zum Vergleich: Werte für *WIPP_8slices.ng* aus Tab. 7.1)

Für das Gitter *komplex_3D.ng* (→Abb. 7.2d) werden in Tab. 7.2 die Anisotropiewerte *K*, Ψ, *P* sowie die dihedralen Winkel ϑ_{max} und ϑ_{min} gemäß Kapitel 6 berechnet. In der rechten Spalte sind zum Vergleich nochmals die Ergebnisse für *WIPP_8sclices.ng* aus Tab. 7.1 angegeben.

Aus Abb. 7.1 und 7.2 bzw. Abb. 2.1 und 2.2 sind die Größenverhältnisse der beiden Gebiete *Domain komplex* und *Domain* WIPP zu entnehmen. Dabei zeigen die Gesamtabmessungen der Gebiete, dass das *Domain komplex* mit ca. 6000 m : 150 m weniger anisotrop ist als das *Domain* WIPP mit ca. 32000 m : 400 m. Zudem besitzt das Gitter *komplex_3D.ng* wesentlich mehr Elemente als *WIPP_8sclices.ng*. Andererseits sind die 63 *Subdomains* des *Domain komplex* viel komplexer angeordnet als beim *Domain* WIPP. Die Schichten beim *Domain komplex* streichen alle aus (bis auf *Subdomain* 4). Teilweise liegen beim *Domain komplex* bis zu 15 Schichten übereinander und einzelne Schichten weisen Mächtigkeiten von lediglich 1 bis 3 Metern auf. Das Verhältnis von Prismen zu Hexaedern der beiden Gitter ist ähnlich.

Entsprechend dieser Betrachtungen sind die Anisotropiewerte *K*, Ψ und *P* bei den Gitterelementen von *komplex_3D.ng* im Durchschnitt (→∅) kleiner als bei *WIPP_8slices.ng*. Die Extremwerte (→max bzw. →min) sind dagegen bei *komplex_3D.ng* größer (→max) bzw. kleiner (→min) als bei *WIPP_8slices.ng*.

Es folgen einige Kommentare und Ergänzungen zu den Anisotropieergebnissen für *komplex_3D*.ng:

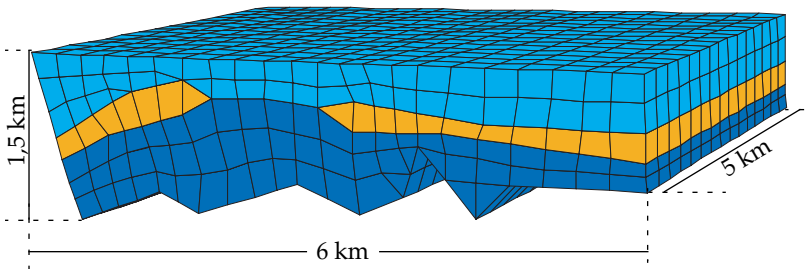
- Bzgl. dem Kantenlängenverhältnis *K* gilt für ~15% der Elemente $K > 200$ und für ~2.5% der Elemente $K > 500$. Für ca. 6% der Elemente ist $K < 20$ und bei ~1.06% der Elemente (240) ist $K < 10$.
- Etwa 1.1% der Elemente (256) haben ein $\Psi(E_i) > 10$. Etwa 1.8% der Elemente (400) haben ein $\Psi(E_i) < 3$.
- Die extrem kleinen Werte für $P \rightarrow \min$ treten insbesondere bei den Hexaedern auf. Über 7% der Hexaeder haben ein $P \rightarrow \min < 20$. Für ~1.2% der Hexaeder (256) ist $P \rightarrow \min < 10$. Im Gegensatz dazu ist bei den Prismen $P \rightarrow \min = 22.36$. Die extremen Werte für $P \rightarrow \max$ treten insbesondere bei den Prismen auf. 3.3% der Prismen (48) haben ein $P \rightarrow \max > 1000$ und 2.2% der Prismen (32) haben ein $P \rightarrow \max > 1300$. Im Gegensatz dazu ist bei den Hexaedern $P \rightarrow \max = 646.85$.

Bezüglich der Elementwinkel gilt, dass beim Gebiet *komplex* $\vartheta_{max} \rightarrow$max größer und $\vartheta_{min} \rightarrow$min kleiner ist als beim WIPP-Gebiet. Dies ist mit der höheren Komplexität der anisotropen Schichtenfolge beim Gebiet *komplex* zu begründen.

Die Elementwinkel für *komplex* sind aber dennoch gut geeignet. Es ist $\vartheta_{max} \rightarrow \varnothing = 91.6°$. Für 99.15% der Elemente gilt $\vartheta_{max} < 100°$. Der größte Winkel ist $\vartheta_{max} \rightarrow$max $= 113.52°$ und tritt im Teilgebiet 40 auf (→Abb. 7.2a und besser in Abb. 2.2, S. 11). Aufgrund der zahlreichen Ausstreichungen der *Domain komplex* besitzen ungefähr 6% der Elemente geometriebedingt ein $\vartheta_{min} < 10°$. Der Großteil der Elemente (ca. 93%) weist jedoch ein ϑ_{min} zwischen 80° und 90° auf und es gilt $\vartheta_{min} \rightarrow \varnothing = 82.92°$. Die Winkel von *komplex_3D*.ng sind für numerische Simulationen also bestens geeignet.

Mit Erzeugung der *lgm*-Geometrien und *ng*-Gitter für das Gebiet *komplex* ist die Tauglichkeit der Software *lgm2ng* [44] bzw. des in Kap. 4.1 vorgestellten Verfahrens auch für ein Gebiet mit realistischer Komplexität gezeigt. Die Gitter können für numerische Simulationen von dichtegetriebenen Grundwasserströmungen [41, 103] sowie für Simulationen von Transport und Reaktion von radionukliden Schadstoffen [42, 61] auf diesem komplexen anisotropen Schichtengebiet in *UG* verwendet werden.

7.3 *Layered*



#Elemente(%Pr, %H)	1890 (7.9, 92.1)
$K(E_i)$: max, min, ∅	2.86, 1.07, 1.60
$\Psi(E_i)$: max, min, ∅	2.84, 2.45, 2.49
$P(E_i)$: max, min, ∅	4.25, 1.80, 2.36
$\vartheta_{max}(E_i)$: max, min, ∅	119.9°, 90.0°,100.50°
$\vartheta_{min}(E_i)$: min, max, ∅	23.5°, 88.0°, 76.0°

Abb. 7.3 Gitter *Layered_1890.ng* mit Ergebnissen für Elementanzahl, K, Ψ, P, ϑ_{max} und ϑ_{min}

Zusätzlich zu einer sehr komplexen Schichtenfolge wie beim Gebiet *komplex* (→Kap. 7.2) besteht zur numerischen Untersuchung der Gorlebener Rinne der Wunsch nach einem wesentlich einfacheren Modellgebiet. Das Ziel ist, auf einem vereinfachten 3D Gebiet aus grundwasserleitenden und grundwasserhemmenden Schichten folgendes zu untersuchen: Numerische Fragestellungen zu Dichteströmungen oberhalb eines Salzstockes [41, 103], den Radionuklidtransport von mehreren Komponenten [42, 61] und Aspekte der Parallelisierung [61, 121].

Dazu wird der synthetische Testfall *Layered* konzipiert, der die Überströmung eines Salzstokkes in einem Deckgebirge aus 3 Einheiten beschreibt. *Layered* besitzt einen sehr gut leitfähigen Aquifer (in Abb. 7.3 dunkelblau) unmittelbar über dem Salzstock. Dieser Aquifer ist durch ein Fenster in der schwach durchlässigen Trennschicht (die beiden hellbraunen „Zungen“ in Abb. 7.3) mit einem weiteren sehr gut leitfähigen Aquifer (in Abb. 7.3 hellblau) verbunden. Außerdem wird das Gebiet *Layered* im Vergleich zum realitätsnahen Gebiet *komplex* um Faktor 10 in Z-Richtung skaliert (1.5 km anstatt 150 m; vgl. Abb. 7.3 mit Abb. 7.2).

Für dieses Gebiet ist ganz bewusst ein annähernd isotropes Gitter gesucht. So besteht hier die Möglichkeit, zu sehen, wie sich die Parameter K, Ψ und P für isotrope Elemente verhalten.

Während bei der Vernetzung von *komplex* die Methode aus Kap. 4.1 verwendet wird, kommt beim Gebiet *Layered* (→ Abb. 7.3) das Verfahren gemäß Kap. 4.2 ff. zum Einsatz. Die Mächtigkeitsdateien sind so gewählt, dass keine Pyramiden und keine Tetraeder entstehen (vgl. Abb. 4.20). Das erzeugte Gitter *Layered_1890.ng* besteht ausschließlich aus Hexaedern (92.1%) und Prismen (7.9%). Man beachte, dass bei diesem Gitter die Knoten der übereinander angeordneten Trennflächen nicht exakt übereinanderliegen. Die Software *CLDM* [207] kann solche Trennflächen dennoch verarbeiten. Die beiden Aquifere werden gemäß der Vorgehensweise aus Kap. 4.5 so unterteilt, dass isotrope Elemente entstehen.

Die Resultate der Anisotropiewerte K, Ψ und P für *Layered_1890.ng* (Abb. 7.3 → rechts) kommen den Ergebnissen für Einheitselemente ziemlich nahe (vgl. Kap. 6.1, 6.2, 6.3.4 u. Abb. 6.10). Auch die Winkeleigenschaften sind vorteilhaft. Es sind ϑ_{min}→min = 23.5°, ϑ_{max}→max = 119.9° und ϑ_{max}→∅ = 100.50°. Das Gitter *Layered_1890.ng* hat also nahezu perfekte Elemente und ist für numerische Untersuchungen wie z.B. in [61] bestens geeignet.

7.4 Höfer

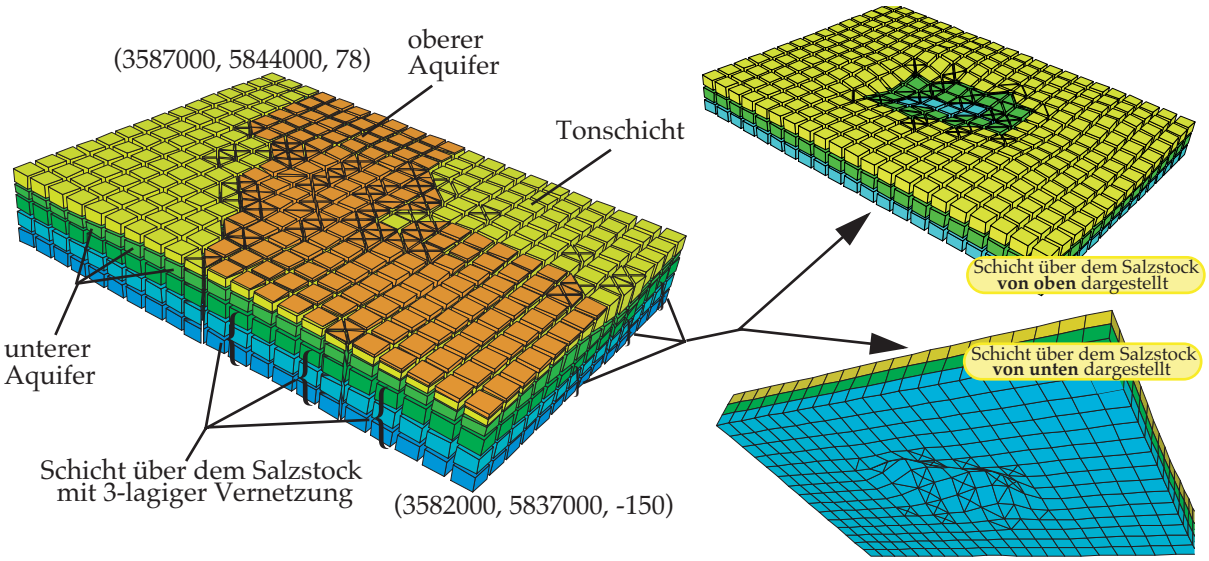


Abb. 7.4 Hybrides Gitter aus 2421 Elementen für das Deckgebirge über dem Salzstock Höfer

In Kapitel 3 werden die Lage, Entstehung, Ausdehnung und Art der anisotropen Schichten oberhalb des Salzstocks Höfer beschrieben.

Für dieses Deckgebirge wird ein Gebiet von 5 km Breite, 7 km Länge und bis zu 230 m Höhe modelliert. Aus dem Archiv des Niedersächsischen Landesamtes für Bodenschutz werden die Ergebnisse von 33 Bohrungen unterschiedlicher Tiefe und einige zusätzliche Stützstellen verwendet. Leider gibt es wenig tiefe Bohrungen und zudem konzentrieren sich diese Bohrungen nur auf wenige Teilbereiche. Man kann allerdings von einer relativ gleichmäßigen Struktur des Deckgebirges auszugehen und in Gebieten geringer Datendichte Stützstellen hinzuzufügen [177]. Außerdem können geostatistische Verfahren eingesetzt werden (siehe Kap. 4.2).

Ausgehend von diesem Datenmaterial werden gemäß der in den Kapiteln 4.2 bis 4.7 beschriebenen Vorgehensweise mehrere *lgm*-Geometrien und *ng*-Gitter für das „Höfer-Gebiet“ erzeugt (→ Abb. 7.4 und Tab. 7.3).

Bei Betrachtung des Gitters von unten (→ Abb. 7.4 rechts unten) erkennt man sogar den „Abdruck“ des Salzstocks (vgl. Kap. 2.4 auf S. 12, 2ter Absatz). Die Basisschicht unmittelbar über dem Salzstock weist daher eine stark variierende Mächtigkeit auf (vgl. Abb. 2.3).

Bei den Gittern *Höfer_2421.ng* und *Höfer_1962*.ng wird die Basisschicht daher gemäß der in Kapitel 4.5 beschriebenen Methode in bis zu 3 Lagen aufgeteilt (→ Abb. 7.4, Tab. 7.3).

In Tab. 7.3 sind in der zweiten Zeile die prozentualen Aufteilungen nach Elementtypen für 4 hybride Gitter des „Höfer-Gebiets“ aufgeführt. Es zeigt sich, wie in Kap. 4.6 angekündigt, dass der Hexaederanteil deutlich überwiegt.

Gittername :	*Höfer_1346.ng*	*Höfer_2421.ng* (→Abb. 7.4)	*Höfer_1962.ng*	*Höfer_3471.ng* [62, 63, 64]
#Elemente (%T, %Py, %Pr, %H)	983 (1.4, 1.5, 25.0, 72.1)	2421 (2.0, 3.1, 36.7, 58.2)	1962 (1.6, 3.5, 21.8, 73.1)	3471 (78.7, 1.0, 20.3, 0.0)
$K(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.1)	113.8, 2.2, 15.8	113.8, 4.9, 14.0	115.0, 5.0, 14.8	188.2, 1.2, 10.6
$\Psi(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.2)	7.58, 2.54, 3.34	7.85, 2.68, 3.28	7.44, 2.71, 3.37	18.84, 2.61, 3.90
$P(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.3)	89.98, 3.74, 16.64	93.52, 6.26, 14.87	89.55, 6.72, 16.15	908.64, 3.42, 23.46
$\vartheta_{max}(E_i)$: max, min, ∅ (→Kap.6.4)	101.1°, 90.1°, 91.2°	101.1°, 90.0°, 91.4°	101.4°, 90.0°, 91.2°	179.8°, 78.8°, 126.3°
$\vartheta_{min}(E_i)$: min, max, ∅ (→Kap.6.4)	0.9°, 89.9°, 75.2°	0.9°, 90.0°, 69.2°	0.9°, 90.0°, 75.8°	0.15°, 71.9°, 20.5°

Tab. 7.3 Anisotropiewerte K, Ψ und P, dihedrale Winkel sowie prozentuale Verteilung nach Elementtypen für 4 hybride Gitter zum Deckgebirge über dem Salzstock Höfer

Außerdem wird in Tab. 7.3 deutlich, dass die in Kapitel 4 vorgestellten Methoden in der Tat keine zu großen Winkel für $\vartheta_{max}(E_i)$ erzeugen. So haben 99,9% der Elemente des Gitters „*Höfer_2421.ng*" ein $\vartheta_{max}(E_i) < 100°$ und es gilt $\vartheta_{max}(E_i) \rightarrow \max = 101.1°$.

Zum Vergleich wird das Gitter *Höfer_3471.ng* mit *ARTE* [62, 63, 64] erzeugt, das größtenteils aus Tetraedern, einigen wenigen Pyramiden (als Abschlusselemente) und in dünnen Schichten aus Prismen besteht. Dieses Gitter hat 20 Elemente mit einem $\vartheta_{max}(E_i) > 177°$ und 3 Elemente mit einem $\vartheta_{max}(E_i) > 179°$.

Vergleicht man die 3 hexaederbasierten Gitter in Tab. 7.3 miteinander, liefert *Höfer_2421.ng* bzgl. Ψ, P und K im Durchschnitt die kleinsten Werte. Eine Erklärung hierfür ist, dass bei *Höfer_2421.ng* prozentual die meisten Prismen (36.7%) vorkommen. Davon sind 95% vertikal ausgerichtet, d.h. vom Typ Pr_2 (→ Abb. 6.1 auf S. 77). Solche Prismen liefern für Ψ und P vergleichsweise etwas kleinere Werte. (siehe Tab. 6.1 auf S.77 → $\Psi(Pr_2) = 2.94 < \Psi(H_1) = 3.07 < \Psi(Py_3) = 3.17 < \Psi(Pr_3) = 3.66 < \Psi(T_2) = 3.74$ und $P(Pr_2) = 10.00 <= P(H_1) = 10.00 < P(Py_3) = 10.87 < P(Pr_3) = 10.87 < P(T_2) = 11.63$).

Die verschiedenen Gitter werden in Simulationen beim Kooperationspartner eingesetzt [177]. Es werden dichteabhängige Grundwasserströmungen simuliert (vgl. Einleitung Kapitel 2 und Kapitel 2.4). Für die maximale Salzkonzentration wird $c_{abs} = 0.260$ kg/kg angenommen. Am oberen Rand wird für Druck und Konzentration die Dirichlet-0-Randbedingung verwendet. An den seitlichen Rändern wird ein hydrostatischer Druck und für die Konzentration ebenfalls die Dirichlet-Bedingung $c = 0$ vorgegeben. Auf der unteren Randfläche wird im Bereich des Salzstocks die Konzentration $c = 1$ gesetzt, für den übrigen Bereich gilt die Neumann-0-Randbedingung.

Die Lösung des zeitabhängigen Problems erfolgt durch das implizite Euler-Verfahren. Mit dem ILU_β-Glättungsverfahren [220] im Mehrgitteralgorithmus werden die besten Konvergenzraten erzielt.

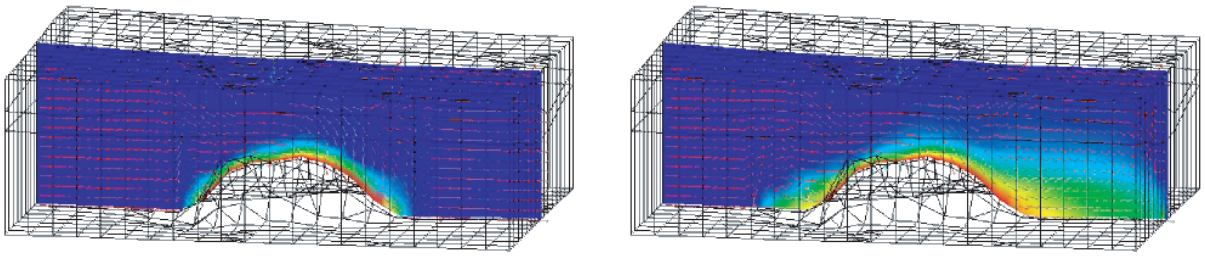


Abb. 7.5 Simulation der Dichteströmung oberhalb des Salzstocks Höfer mit d^3f [41]

Als Ergebnis der Modellrechnungen stellte sich erwartungsgemäß ein Strömungsfeld ein, das dem Gefälle in den Grundwasserständen folgt. Man erkennt die Ausbildung einer Laugenfahne in Strömungsrichtung. In entgegengesetzter Richtung kommt es zu einem dichtebedingten Abstrom am Salzstockrand und es entsteht eine Konvektionswalze ([177] → S.71).

Die Ausbreitung von Salzwasser als Folge der Grundwasserbewegung wird in mehreren seriellen und parallelen Rechnungen mit bis zu einer Mio. Knoten simuliert.

Obwohl die Konzentrationsfront in der Simulation sehr nahe an den unteren Aquifer heranreicht, überschreitet die relative Salzkonzentration den Wert von c=0,002 in keinem Punkt. Dies entspricht den realen Verhältnissen. Der Aquifer führt durchgängig Wasser mit Trinkwasserqualität. Dies ist der Tatsache zu verdanken, dass die Geschwindigkeiten im Aquifer um zwei bis drei Größenordnungen über denen in der tertiären Basisschicht liegen.

Neben der Verwendung für numerische Simulationen [177], eignen sich die Gitter für das „Höfer-Gebiet“ auch als komplexe Gitterbeispiele zum Vergleich der unterschiedlichen Radienberechnungsverfahren (→ Kap. 6.3.5, *Höfer_2421.ng* in Tab. 6.3, Kooperation mit der TU München [21, 46, 80]).

Auch für das Zusammenfassen der zahlreichen kleinen „Einzel-*Surfaces*“ zu sinnvollen großen Randflächen (→ Kap. 4.7) in *lgm*-Geometrien sind die erzeugten Höfer-Dateien eindrückliche Beispiele aus der Praxis. Abb. 4.23 auf S. 52 zeigt diesen Effekt sehr schön für die *lgm*-Datei des Gitters *Höfer_1962.ng* .

7.5 Norderney

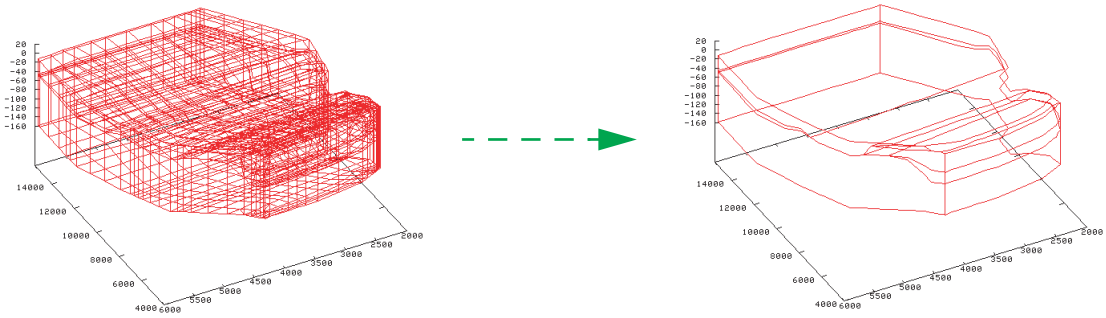


Abb. 7.6 Anwendung von *SurfaceMerge* (→ Kap. 4.7 u. [88]) mit einer *lgm*-Geometrie für Norderney

Anhand des Beispiels Norderney kann man in Abb. 7.6 die Effizienz des in Kapitel 4.7 beschriebenen Verfahrens bzw. der Software *SurfaceMerge* [88] zum Zusammenfassen von Randflächen erkennen. Die 1744 *Surfaces* einer *CLDM* Ausgabedatei [207] können durch Anwendung von *SurfaceMerge* [88] auf 30 signifikante *Surfaces* reduziert werden. Wie Abb. 7.6 zeigt, wird das Gebiet damit viel übersichtlicher. Außerdem verbessern sich die Laufzeiten und die Handhabung im *UG*-Simulationsprozess.

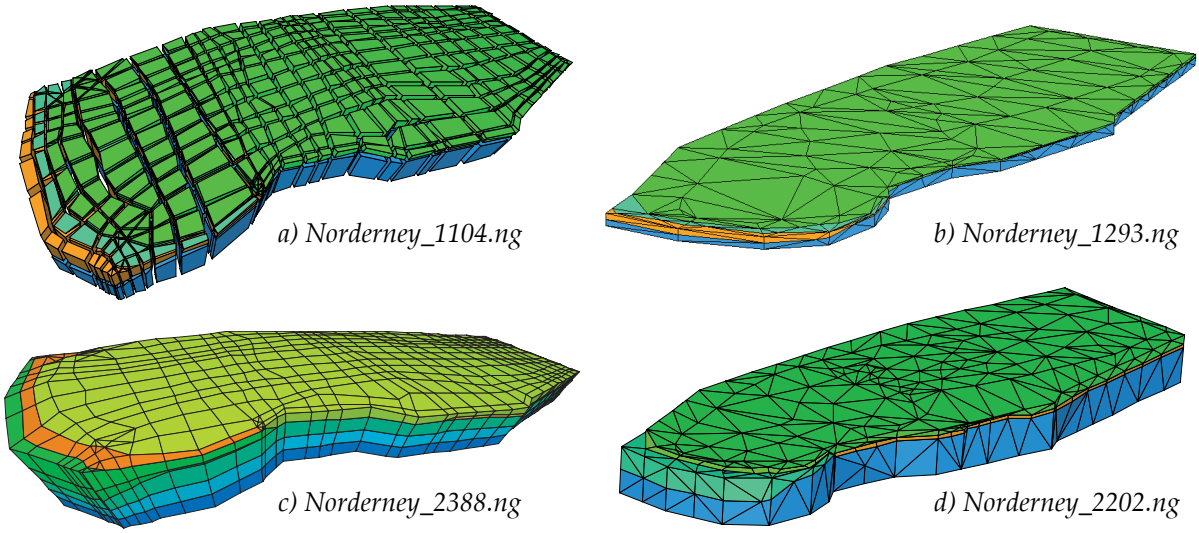


Abb. 7.7 Vier Gitter für das Gebiet Norderney mit hexaederbasiertem (→ Kap. 4.2 bis 4.7) und tetraederbasiertem (→ [62, 63, 64]) Ansatz

Für das Modellgebiet der Insel Norderney (→Kap. 2.5) werden unter anderem die beiden Gitter *Norderney_1104.ng* (→ Abb. 7.7 a) und *Norderney_2388.ng* (→ Abb. 7.7 c) mit der hexaederbasierten Methode aus den Kapiteln 4.2 ff. erstellt.

Im Gegensatz zu vielen anderen Beispielen ist das zugrundeliegende zweidimensionale *N*x*M* Gitter für Norderney nicht kartesisch. Diese Thematik wird in Kap. 4.3 und [105] behandelt.

Beim feineren Gitter *Norderney_2388.ng* wird das Pliozän (siehe Abb. 2.5) in 3 Subschichten und das Pleistozän in 2 Subschichten gemäß dem Verfahren aus Kapitel 4.5 aufgeteilt.

Gittername :	*Norderney_1104.ng* (→ Abb. 7.7 a)	*Norderney_1293.ng* (→ Abb. 7.7 b)	*Norderney_2388.ng* (→ Abb. 7.7 c)	*Norderney_2202.ng* (→ Abb. 7.7 d)
#Elemente(%T, %Py, %Pr, %H)	1104(1.3, 1.5, 16.1, 81.1)	1293(100, 0.0, 0.0, 0.0)	2388(0.6, 0.6 , 12.8 , 86.0)	2202(85.4, 0.5, 14.0, 0.0)
$K(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.1)	221.57, 1.23, 28.59	247.81, 1.57, 5.88	99.32, 1.39, 18.57	239.30, 1.48, 13.60
$\Psi(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.2)	8.60, 2.46, 3.57	15.39, 2.86, 5.77	7.08, 2.51, 3.45	39.22, 2.80, 4.72
$P(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.3)	269.06, 1.93, 26.98	1288.03, 4.77, 86.83	115.65, 2.27, 20.14	108473.6, 4.36, 112.47
$\vartheta_{max}(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.4)	127.91°, 89.98°, 100.19°	179.53°, 89.94°, 159.72°	131.82°, 89.98°, 99.77°	179.98°, 89.78°, 144.74°
$\vartheta_{min}(E_i)$: min, max, ∅ (→ Kap. 6.4)	0.55°, 89.95°, 69.08°	0.11°, 43.85°, 6.73°	0.67°, 90.0°, 72.6°	0.03°, 59.01°, 14.86°

Tab. 7.4 Anisotropiewerte *K*, Ψ und *P*, dihedrale Winkel sowie prozentuale Verteilung nach Elementtypen für 4 hybride Gitter zum Gebiet Norderney

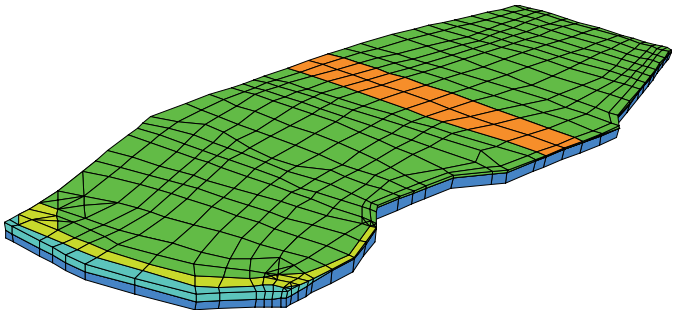
In Tab. 7.4 sind die Anisotropiewerte K, Ψ, *P*, die dihedralen Winkel ϑ_{min} und ϑ_{max} sowie die Elementanzahl für die beiden nach Kapitel 4 erstellten Gitter *Norderney_1104.ng* (→ Abb. 7.7 a) und *Norderney_2388.ng* (→ Abb. 7.7c) angegeben. Zum Vergleich werden mit *Norderney_1293.ng* (→ Abb. 7.7 b) und *Norderney_2202.ng* (→ Abb. 7.7 d) zwei tetraederbasierte Gitter betrachtet, die mit den Verfahren aus [62, 63, 64] erstellt sind.

Die Übersicht „#Elemente (%T, %Py, %Pr, %H)“ zeigt die unterschiedlichen Elementverteilungen mit den großen Hexaederanteilen von ca. 81% bei *Norderney_1104.ng* und 86% bei *Norderney_2388.ng* sowie den großen Tetraederanteilen von 100% bei *Norderney_1293.ng* und ca. 85% bei *Norderney_2202.ng* .

Ähnlich den Experimenten zu WIPP (→Kap. 7.1) und zu Höfer (→Kap. 7.4) sind auch für das Modellgebiet Norderney die Winkel bei den Gittern mit dem hexaederbasierten Ansatz deutlich besser als bei den Gittern mit dem tetraederbasierten Ansatz:

Bei den Minimumwinkeln gelten für die beiden groben Gitter ϑ_{min}→∅(*Norderney_1104.ng*) >> ϑ_{min}→∅(*Norderney_1293.ng*) und für die beiden feinen Gitter ϑ_{min}→∅(*Norderney_2388.ng*) >> ϑ_{min}→∅(*Norderney_2202.ng*). Ähnlich gelten bei den Maximumwinkeln für die beiden groben Gitter ϑ_{max}→∅(*Norderney_1104.ng*) << ϑ_{max}→∅(*Norderney_1293.ng*) und für die beiden feinen Gitter ϑ_{max}→∅(*Norderney_2388.ng*) << ϑ_{max}→∅(*Norderney_2202.ng*). Bei *Norderney_1293.ng* haben 8.5% der Elemente ein $\vartheta_{max} > 178°$ und 1.1% (14 Elemente) haben sogar ein $\vartheta_{max} > 179°$. Im Gegensatz dazu gilt bei *Norderney_1104.ng* $\vartheta_{max} < 128°$ und lediglich für 2.81% der Elemente ist $\vartheta_{max} > 120°$. Beim Gitter *Norderney_2202.ng* haben 1.8% der Elemente ein $\vartheta_{max} > 178°$ und 0.77% (17 Elemente) haben sogar ein $\vartheta_{max} > 179°$. Im Gegensatz dazu gilt bei *Norderney_2388.ng* $\vartheta_{max} < 132°$ und nur für 3.14% der Elemente ist $\vartheta_{max} > 120°$.

Die extremen Winkelverhältnisse bei *Norderney_1293.ng* und *Norderney_2202.ng* sollten sich auch in den Anisotropiebeschreibungen wiederspiegeln. Dies ist für das Kantenverhältnis *K* aber nicht der Fall und es gelten sogar *K*→∅(*Norderney_1104.ng*) >> *K*→∅(*Norderney_1293.ng*) sowie *K*→∅(*Norderney_2388.ng*) > *K*→∅(*Norderney_2202.ng*). Hier bestätigt sich einmal mehr die Kritik am Anisotropiemaß *K* bzgl. Tetraedern und Pyramiden (vgl. Kap. 6.1 ff.). Im Gegensatz zum Kantenverhältnis *K* sind die Ergebnisse mit den Anisotropiemaßen Ψ und *P* bei den hexaederbasierten Gittern kleiner als bei den tetraederbasierten Gittern.



#Elemente(%T, %Py, %Pr, %H)	1376(1.0, 1.2, 15.0, 82.8)
$K(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.1)	99.32, 1.23, 22.25
$\Psi(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.2)	7.08, 2.46, 3.55
$P(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.3)	115.73, 1.93, 23.61
$\vartheta_{max}(E_i)$: max, min, ∅ (→Kap.6.4)	131.82°, 89.98°, 99.48°
$\vartheta_{min}(E_i)$: min, max, ∅ (→Kap.6.4)	0.67°, 89.95°, 70.17°

Abb. 7.8 Gitter *Norderney_1376.ng* mit Ergebnissen für Elementverteilung, K, Ψ, P, ϑ_{min} und ϑ_{max}

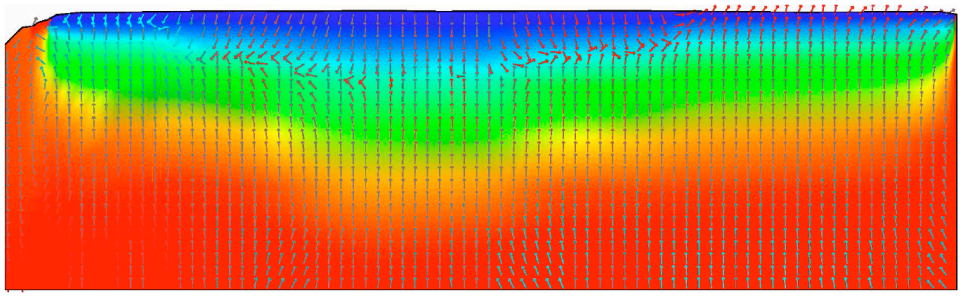


Abb. 7.9 Konzentrationsverteilung und Geschwindigkeitsfeld im stationären Zustand; Rechnung mit *Norderney_1376.ng* (→Abb. 7.8) auf 89087 Knoten nach zweifacher Verfeinerung ([177] → S. 57)

Die gemäß Kap. 4.2 ff. erzeugten Geometrien und Gitter werden in mehreren Simulationen beim Kooperationspartner GRS [178, 177] eingesetzt (siehe zum Beispiel in Abb. 7.9 aus [177]) und den tetraederbasierten Gittern [→ 62, 63] vorgezogen ([177] → S. 57/58).

Bei diesen Simulationen wird im Holozän eine weitere geringmächtige Tonschicht in der Mitte der Insel eingefügt. In Abb. 7.8 sieht man das hierfür erzeugte Gitter *Norderney_1376.ng*. Die Ergebnisse für K, Ψ, P, ϑ_{max} , ϑ_{min} und „#Elemente“ (Abb. 7.8→rechts) sind den Resultaten für *Norderney_1104.ng* und *Norderney_2388.ng* sehr ähnlich (vgl. mit Tab. 7.4).

In mehreren dreidimensionalen Rechnungen [177] kann die Entstehung einer Süßwasserlinse auf der Insel Norderney nachvollzogen werden. Nach einer Modellzeit von ca. 500 Jahren sind Geschwindigkeitsfeld und Konzentrationsverteilung stationär. Die Form der errechneten Süßwasserlinse entspricht tendenziell den Messwerten aus geoelektrischen Erkundungen [224]. Für eine genaue Nachbildung der Süßwasserlinse sind jedoch Rechnungen auf feineren Gittern notwendig.

Ausgehend von der modellierten Süßwasserlinse im stationären Zustand werden die Auswirkungen der Trinkwassergewinnung einbezogen. Dazu werden die Brunnen als Senken modelliert. Die Gesamtfördermenge wird gleichmäßig auf 43 Brunnen verteilt. Nach einer Förderzeit von 50 Jahren steigt die Süßwassergrenze in den Gebieten der beiden Wasserwerke um je 3m [177→5.5] (vgl. Kap. 2.5).

7.6 Langeoog

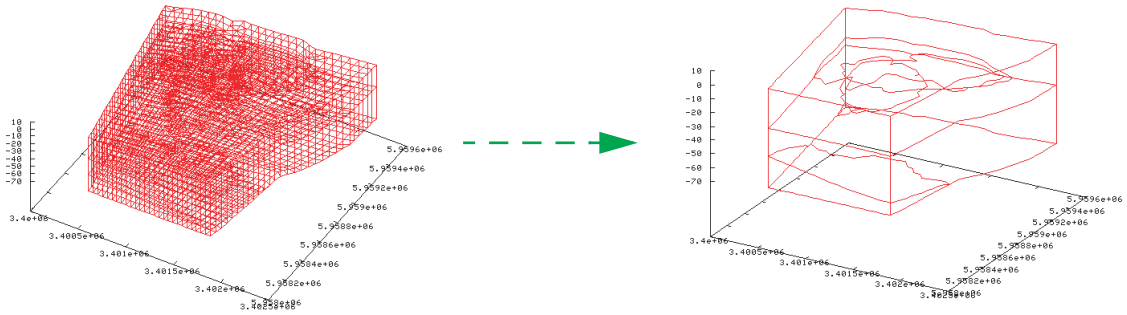


Abb. 7.10 Anwendung von *SurfaceMerge* [88] mit einer *lgm*-Geometriedatei für Langeoog

Für die Insel Langeoog (vgl. Kap. 2.5) wird mit *CLDM* [207] zunächst eine *lgm*-Datei mit 5733 *Surfaces* (→ Abb. 7.10 links) erzeugt. Durch Zusammenfassung gemäß Kap. 4.7 bzw. Verwendung der Software *SurfaceMerge* [88] kann die *Surface*-Anzahl auf 36 (!) reduziert werden. Damit sind die einzelnen Geoschichten des Modellgebiets gut erkennbar und die Geometrie wird viel übersichtlicher (→ Abb. 7.10 rechts, vgl. Abb. 2.5 rechts). Außerdem verbessern sich dadurch die Laufzeiten und Handhabungen im Simulationsprozess mit *UG* [9, 10].

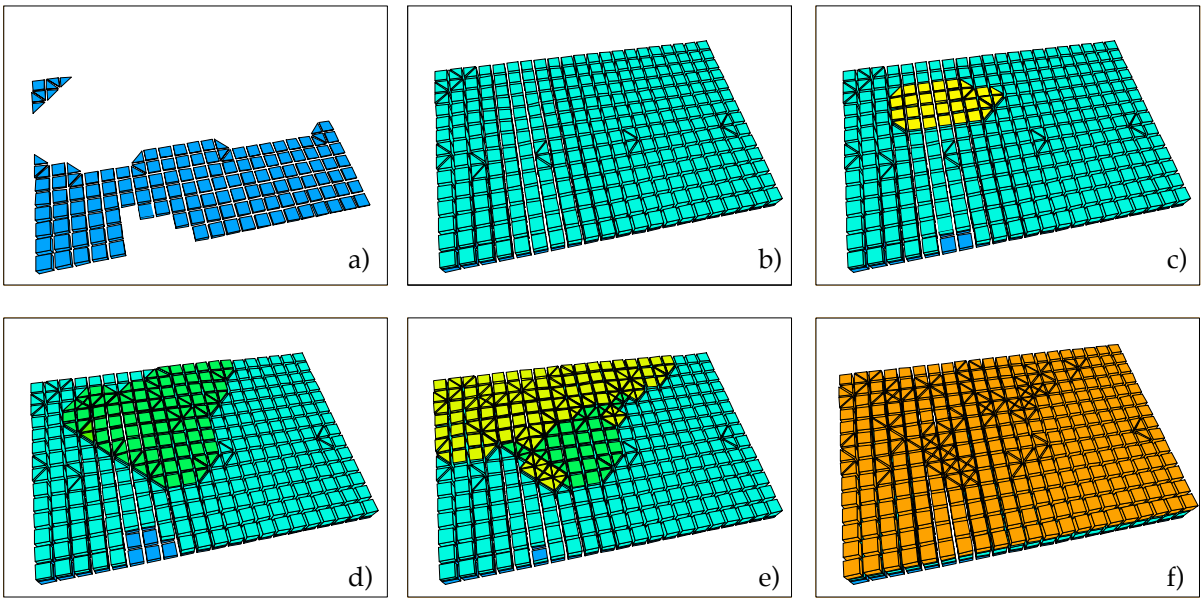


Abb. 7.11 Gitter aus *CLDM* [207] für das Modellgebiet Langeoog und dessen Schichten: a) Lauenburger Ton, b) Glazifluviatil, c) Wattschlick_2, d) Wattsand_2, e) Wattschlick_1, f) Wattsand_1; Gitter mit insgesamt 1266 Elementen (2.86% Tetraeder, 4.58% Pyramiden, 25.32% Prismen und 67.22% Hexaeder)

Für das Modellgebiet zu Langeoog wurde u. a. das Gitter *Langeoog_1266.ng* (Abb. 7.11f) gemäß dem Verfahren aus Kap. 4.2 ff. erzeugt. Von Abb. 7.11a bis Abb. 7.11f kommen die einzelnen Schichten zur Veranschaulichung sukzessive hinzu: a) Lauenburger Ton, b) Glazifluviatil, c) Wattschlick_2, d) Wattsand_2, e) Wattschlick_1, f) Wattsand_1 (vgl. schematische Darstellung in Abb. 2.5 rechts).

Gittername :	*Langeoog_1266.ng* (→ Abb. 7.11 f)	*Norderney_2388.ng* (→ Abb. 7.7 c)
#Elemente(%T, %Py, %Pr, %H)	1266(6.95, 5.85, 36.65, 50.55)	2388(0.6, 0.6 , 12.8 , 86.0)
$K(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.1)	70.58, 2.18, 16.79	99.32, 1.39, 18.57
$\Psi(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.2)	6.76, 2.53, 3.39	7.08, 2.51, 3.45
$P(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.3)	122.34, 2.71, 19.28	115.65, 2.27, 20.14
$\vartheta_{max}(E_i)$: max, min, ∅ (→Kap.6.4)	96.02°, 90.00°, 90.84°	131.82°, 89.98°, 99.77°
$\vartheta_{min}(E_i)$: min, max, ∅ (→Kap.6.4)	1.15°, 89.99°, 63.09°	0.67°, 90.0°, 72.6°

Tab. 7.5 Anisotropiewerte K, Ψ und *P*, dihedrale Winkel sowie prozentuale Verteilung nach Elementtypen für das Gitter *Langeoog_1266.ng*; zum Vergleich Wiederholung der Ergebnisse für das Gitter *Norderney_2388.ng* aus Tab. 7.4

In Tab. 7.5 sind gemäß Kapitel 6 die Anisotropiewerte *K*, Ψ und *P*, die dihedralen Winkel ϑ_{min} und ϑ_{max} sowie die Elementverteilungen für das Gitter *Langeoog_1266.ng* berechnet. Zum Vergleich werden Ergebnisse für das Gitter *Norderney_2388.ng* (Abb. 7.7 c) aus Tab. 7.4 wiederholt.

Es stellt sich die Frage, ob bei diesem Vergleich Anisotropiewerte der selben Größenordnung zu erwarten sind. Im folgenden Absatz wird diese Frage diskutiert:

Bei den Gesamtabmessungen (vgl. Blockschemata Abb. 2.5, S. 14) ist das Modellgebiet für Norderney in horizontaler Richtung 4 bis 5 mal stärker ausgedehnt als das Modellgebiet für Langeoog (10km x 4km > 2km x 1.5km). Bezüglich der vertikalen Richtung ist dagegen das Langeoog-Modellgebiet nur halb so mächtig in Z-Richtung (70m < 150m). Zusammen betrachtet ist das Norderneygebiet aber dennoch „anisotroper" bezüglich der Gesamtabmessungen. Andererseits wird für *Norderney_2388.ng* eine feinere *N*x*M*-Aufteilung (vgl. Kap. 4.3) in 13 Reihen und 32 Spalten gewählt. Bei *Langeoog_1266.ng* sind es 14 Reihen und 21 Spalten.

Aufgrund dieser Überlegungen sind Anisotropieergebnisse der selben Größenordnung zu erwarten, vermutlich mit etwas stärkerer Anisotropie beim Norderney-Modell.

Die Ergebnisse der Maximal- und Durchschnittswerte von *K*, Ψ und *P* in Tab. 7.5 sind für die beiden Gitter *Langeoog_1266.ng* und *Norderney_2388.ng* tatsächlich ähnlich: Es sind $K \rightarrow \varnothing$(*Langeoog_1266.ng*) =16.79; $K \rightarrow \varnothing$(*Norderney_2388.ng*) = 18.57; $\Psi \rightarrow \varnothing$(*Langeoog_1266.ng*) = 3.39; $\Psi \rightarrow \varnothing$(*Norderney_2388.ng*) = 3.45; $P \rightarrow \varnothing$(*Langeoog_1266.ng*) = 19.28; $P \rightarrow \varnothing$(*Norderney_2388.ng*) = 20.14 . Diese Ergebnisse bestätigen die obige Abschätzung. Die Resultate von Norderney sind etwas größer, was sich mit der großen Diskrepanz in horizontaler Richtung erklären lässt.

Die Komplexität der Überlappungen von Schichten ist beim Modellgebiet für Langeoog (Abb. 7.10 rechts und Abb. 7.11) größer als beim Modellgebiet für Norderney (Abb. 7.6 rechts). Bei Langeoog kommt es folglich zu mehr Fallunterscheidungen gemäß Kap. 4.6. Das erklärt den niedrigeren Hexaederanteil und höheren Anteil an Tetraedern, Pyramiden und Prismen bei *Langeoog_1266.ng* im Vergleich zu *Norderney_2388.ng* in Tab. 7.5.

Bei den Minimumwinkeln ϑ_{min} sind *Langeoog_1266.ng* und *Norderney_2388.ng* ähnlich. Bei den Maximumwinkeln ϑ_{max} ist *Langeoog_1266.ng* etwas besser und es gelten $\vartheta_{max} \rightarrow \varnothing = 90.84°$ und $\vartheta_{max} \rightarrow \max <= 96.02°$ für *Langeoog_1266.ng*. Diese Winkeleigenschaften sind erfreulich und werden bei Verwendung in numerischen Simulationen keine Schwierigkeiten bereiten.

7.7 Orange County

Die Grundwasserproblematik und die Größenverhältnisse des anisotropen Schichtengebiets in Orange County werden in Kapitel 2.6 eingeführt. Das Gesamtgebiet besteht aus 3 grundwasserleitenden und 2 grundwasserhemmenden Schichten (vgl. Abb. 2.7, S. 16).

Für dieses Gebiet hat Ralf Wahner mit der Software *CLDM* bzw. mit der hexaederbasierten Methode (Kap. 4.4 bis 4.6) zahlreiche Geometrien und Gitter erzeugt. Einige Gitter aus seiner Arbeit [207] sind in Abb. 7.12 dargestellt und werden nun besprochen.

Abb. 7.12→*a* zeigt ein Gitter für das gesamte Grundwasserbecken bei einer Rasterung von 80x70, bzw. einer horizontalen Maschenweite von 2000ft. Die braunen Gitterelemente beschreiben den oberen Grundwasserleiter („SHALLOW AQUIFER"), die grünen Elemente den mittleren Grundwasserleiter („MAIN PRODUCTION AQUIFER") und die blauen Elemente den unteren Grundwasserleiter („LOWER AQUIFER") (→ vgl. Abb. 2.7, S. 16).

Der mittlere Grundwasserleiter wird in 3 und der untere Grundwasserleiter in 5 Elementschichten mit dem Verfahren aus Kap. 4.5 (*split*) unterteilt. In Abb. 7.12→*d1,d2* ist diese Unterteilung vergrößert dargestellt. Es besteht also die Möglichkeit, die Gitter bei variierenden Mächtigkeiten anzupassen.

In der vergrößerten Darstellung Abb. 7.12→*d1,d2* kann man bei genauer Betrachtung auch die beiden geringmächtigen Toneinschlüsse zwischen den Aquiferen erkennen (vgl. Abb. 2.7, S. 16).

In Abb. 7.12→*a1-a5* wird für jede der 5 Schichten des Gesamtgebiets noch ein eigenes Gitter erzeugt. Die Einzelgitter für den mittleren (Abb. 7.12→*a3*) und unteren (Abb. 7.12→*a5*) Aquifer sind ebenfalls mit $n=3$ bzw. $n=5$ gesplittet.

In Abb. 7.12→*b* ist ein Gitter für das Muttergestein (bedrock) dargestellt. Hiefür wird das Muttergestein mit *split* in 10 Elementschichten aufgeteilt (farblich unterschieden). Die Abmessungen dieses Gitters sind 160000ft x 140000ft x 4500ft.

Das Gitter in Abb. 7.12→*c* zeigt, dass sich das Verfahren aus Kap. 4.4-4.6 auch bei einem nichtkartesischen Grundraster anwenden lässt. Das für den Grundriss von Orange County angepasste *N*x*M*-Viereckgitter besteht aus 21 Spalten und 15 Reihen und wird mit der Vorgehensweise aus Kap. 4.3 erzeugt (vgl. Abb. 4.14).

Zur besseren Anschauung sind die meisten Darstellungen in Abb. 7.12 fünffach in *Z*-Richtung skaliert. Im Gegensatz dazu zeigt Abb. 7.12→*e* das Gesamtgitter (Abb. 7.12→*a*) im tatsächlichen Höhen-Breitenverhältnis (in Seitenansicht). Damit wird die Anisotropie des Gebiets veranschaulicht. Diese Anisotropie wird auch in den Anisotropiewerten der Gitterelemente in Tab. 7.7 ersichtlich. Die Gitter der beiden Tonlinsen *a2.ng* und *a4.ng* weisen dabei im Durchschnitt (→ ∅) die größten Anisotropiewerte auf, da diese Schichten lediglich eine Mächtigkeit von 50 m bzw. 100m besitzen (vgl. S. 16).

Der Hexaederanteil des Gitters aus Abb. 7.12→*a* ist mit 49.2% vergleichsweise klein (→ Tab. 7.7). Das liegt an den komplexen Ausstreichungen und Überlappungen der Schichten sowie der zusätzlichen Verfeinerung des mittleren und unteren Aquifers mit der Software *split* (Kap. 4.5, [207]). Deshalb treten sehr viele Spezialfälle auf, für die Tetraeder, Pyramiden und Prismen benötigt werden (→ Abb. 4.20, S. 50). Bei den Gittern für die Einzelschichtungen *a1.ng* bis *a5.ng* sind die Hexaederanteile dagegen sehr groß.

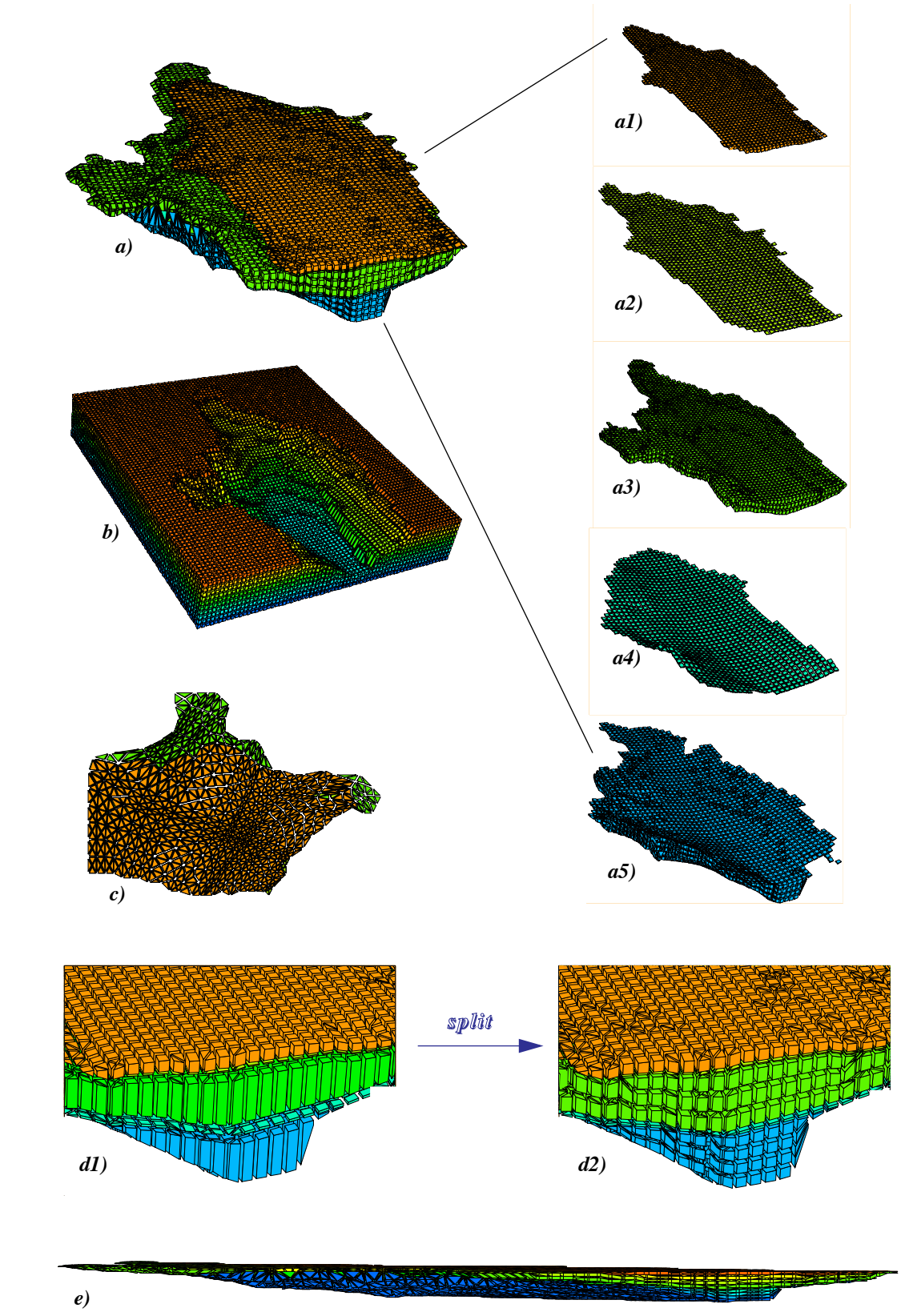


Abb. 7.12 Gitter für das Grundwasserbecken in Orange County; aus [207]

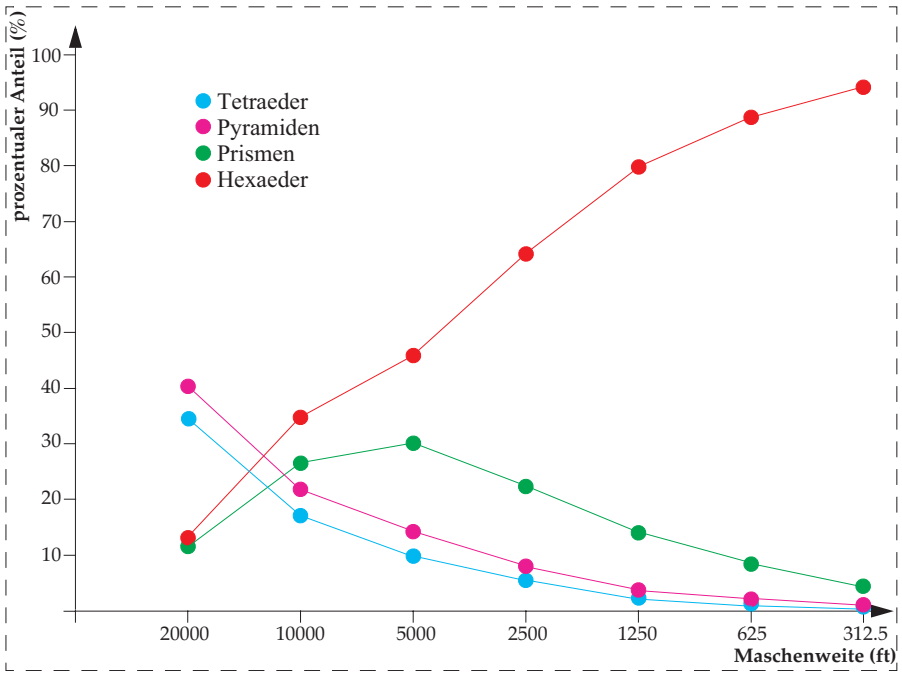


Abb. 7.13 Grafik zu Tab. 7.6

Maschenweite (ft) (Auflösung)	20000 (8 x 7)	10000 (16 x 14)	5000 (32 x 28)	2500 (64 x 56)	1250 (128 x 112)	625 (256 x 224)	312.5 (512 x 448)
#Elemente	136	489	1844	6534	23659	90518	352055
Tetraeder (%)	34.55	16.97	9.86	5.43	2.27	1.05	0.48
Pyramiden (%)	40.44	21.67	14.20	8.06	3.81	1.89	0.88
Prismen (%)	11.76	26.58	30.15	22.37	13.96	8.24	4.39
Hexaeder (%)	**13.23**	**34.76**	**45.77**	**64.12**	**79.94**	**88.80**	**94.24**

Tab. 7.6 Elementverteilung in Abhängigkeit von der Maschenweite; aus [207]→Tabelle 5.3

In Abb. 7.13 bzw. Tab. 7.6 wird das Verhalten des Hexaederanteils in Abhängigkeit von der Maschenweite systematisch untersucht. Die dazu verwendeten Orange County Gitter besitzen für jede *Subdomain* nur eine Elementschicht (d.h. so wie in Abb. 7.12→*d1*). Das Experiment beginnt bei einer Maschenweite von 20000 ft bzw. einer Rasterung von 8x7. Die Maschenweite wird danach sukzessive halbiert bis hin zu einer Maschenweite von 312.5 ft. Der Hexaederanteil nimmt dabei von 13.23% auf 94.24% zu. Im Gegensatz dazu wird der prozentuale Anteil an Tetraedern, Pyramiden und Prismen mit zunehmender Feinheit des Rasters geringer. Dies liegt daran, dass die Anzahl und die Form der Ausstreichungen unabhängig von der gewählten Rasterweite sind. Der prozentuale Anteil derjenigen Elemente, die für Ausstreichungen benötigt werden (→Tetraeder, Pyramiden und Prismen) nimmt bei feinerer Maschenweite folglich ab. Damit erweist sich die vorgestellte Vernetzungsmethode, wie in Kap. 4.6 angekündigt, für projektrelevante Beispiele tatsächlich als „hexaederbasiert“ (vgl. Kap. 3.4, 4.3 u. 4.7).

In Tab. 7.8 wird die Anzahl der erzeugten *Surfaces* der Anzahl der zusammengefassten *Surfaces* gegenübergestellt. Die *Surfaces* lassen sich mit der Methode *SurfaceMerge* zusammenfassen (Kap. 4.7 und [88]). Es werden wieder die *lgm*/*ng*-Beispiele aus Tab. 7.6 verwendet. Bei Halbie-

Gitter:	*a.ng* Abb. 7.12 → *a*)
#Elemente(%T, %Py, %Pr, %H)	17995 (5.0, 7.2, 38.6, 49.2)
$K(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.1)	616.71 3.17 14.53
$\Psi(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.2)	13.79 2.62 3.32
$P(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.3)	631.04 1.44 15.71
$\vartheta_{max}(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.4)	135.70° 89.97° 93.58°
$\vartheta_{min}(E_i)$: min, max, ∅ (→ Kap. 6.4)	0.19° 89.99° 62.75°

Gitter:	*a1.ng* Abb. 7.12 → *a1*	*a2.ng* Abb. 7.12 → *a2*	*a3.ng* Abb. 7.12 → *a3*	*a4.ng* Abb. 7.12 → *a4*	*a5.ng* Abb. 7.12 → *a5*
#El.	1465 (0.0, 0.8, 0.6, 98.6)	1371 (0.0, 0.0, 0.0, 100.0)	4594 (1.7, 3.2, 12.7, 82.4)	1279 (0.0, 0.0, 0.0, 100.0)	4700 (3.2, 6.2, 24.9, 65.7)
$K(E_i)$	56.92 4.18 10.42	40.69 40.56 40.60	49.88 3.17 5.10	21.32 20.28 20.32	43.04 4.49 7.11
$\Psi(E_i)$	5.44 2.74 3.23	5.70 4.20 4.98	4.17 2.64 2.81	4.57 3.28 4.05	4.53 2.70 2.96
$P(E_i)$	46.92 5.45 11.80	57.50 1.42 53.21	24.31 4.45 5.94	28.95 1.43 27.10	34.35 5.00 7.67
$\vartheta_{max}(E_i)$	95.72° 90.06° 90.88°	94.20° 90.01° 90.74°	111.06° 90.00° 93.15°	107.80° 90.11° 92.44°	134.65° 90.00° 95.44°
$\vartheta_{min}(E_i)$	1.63° 89.94° 88.31°	85.80° 89.99° 89.26°	9.04° 89.92° 78.45°	72.20° 89.89° 87.56°	6.46° 89.86° 69.46°

Tab. 7.7 Anisotropiewerte *K*, Ψ und *P*, dihedrale Winkel sowie prozentuale Verteilung nach Elementtypen; oben: für das gesamte Grundwasserleitersystem; unten: für Gitter der einzelnen Schichten

Maschenweite (ft) (Auflösung)	200000 (8 x 7)	10000 (16 x 14)	5000 (32 x 28)	2500 (64 x 56)	1250 (128 x 112)	625 (256 x 224)
#*Surfaces*	189	655	2419	8465	30363	115530
#merged*Surfaces*	17	26	42	57	74	158
$\frac{\#\text{merged}Surfaces}{\#Surfaces \cdot 0.01}$	8.99	3.97	1.74	0.67	0.24	0.14

Tab. 7.8 *Surface*-Verhältnis in Abhängigkeit von der Maschenweite; aus [207]→Tabelle 5.3, erweitert

rung der Maschenweite vervielfacht sich die *Surface*-Anzahl („#*Surfaces*“) um den Faktor 3.5 bis 3.8. Die Anzahl der zusammengefassten *Surfaces* („#merged*Surfaces*“) wächst dagegen lediglich mit dem Faktor 1.3 bis 2.1. Die Reduktion der *Surface*-Anzahl durch *SurfaceMerge* ist gravierend. Bei einer Maschenweite von 625 ft entstehen z.B. 115530 *Surfaces*. Mit *SurfaceMerge* kann diese große *Surface*-Anzahl auf 0.14% (158) reduziert werden. Die Geometriebeschreibung wird dabei viel übersichtlicher und kann deutlich schneller in *UG* eingelesen werden.

Mit zunehmender Rasterfeinheit werden die Unebenheiten der Geometrie aber auch detaillierter aufgelöst und durch zusätzliche *Surfaces* beschrieben. Das erklärt, warum die Anzahl der zusammengefassten *Surfaces* in Tab. 7.8 (→ merged *Surfaces*) überhaupt zunimmt.

Für die geplanten numerischen Simulationen auf dem Orange County Grundwasserbecken steht nunmehr eine breite Palette an brauchbaren *lgm*-Geometrien und *ng*-Gittern zu Verfügung [207].

7.8 Horizontalsilos

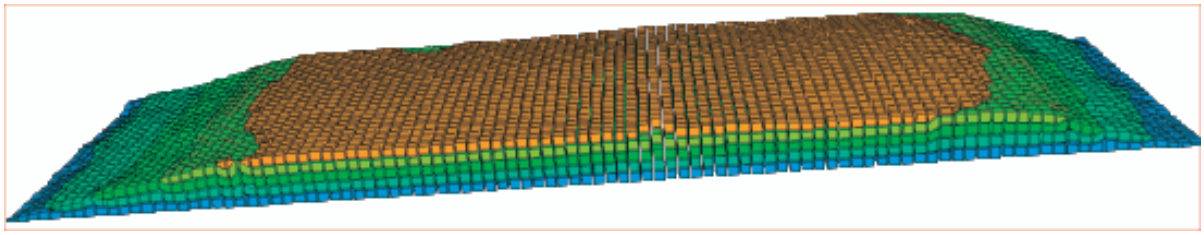


Abb. 7.14 Hybrides *UG*-Gitter für das Silo bei Golzow bestehend aus 10670 Gitterelementen; 92.3% Hexaeder, 6.5% Prismen, 0.8% Pyramiden und 0.4% Tetraeder; Darstellung mit realen Seitenverhältnissen

In Kapitel 2.7 wird das Horizontalsilo als anisotropes Schichtengebiet eingeführt. Der Verdichtungsprozess im Horizontalsilo soll simuliert werden [89, 205]. Eine wichtige Voraussetzung hierfür ist die Möglichkeit, das Volumen des Silos bzw. seiner einzelnen Schichten berechnen zu können.

In einem Experiment im Rahmen des BCN [11, 83] wurde von der LGF [126], einem Projektpartner an der Humboldt-Universität Berlin, die Oberfläche eines gefüllten Horizontalsilos bei Golzow in Brandenburg mit Lasertheodolit und Spiegel an 705 Positionen von Hand vermessen. Die Gesamtabmessungen des Horizontalsilos betragen ca. 80 m x 20 m x 4.5 m.

Gemäß der Vorgehensweise in Kap. 4.2.2 wurde an der LGF mit der Software *Surfer* [194] und dem *Kriging* Verfahren [Kap. 4.2.2, 194 → Chapter 4→ Gridding Methods] die Silooberfläche approximiert (z.B. Abb. 7.15). Das Gesamtvolumen unter dieser Oberfläche wurde mit mehreren Methoden [194 → Chapter 19] in *Surfer* berechnet (Tab. 7.9: *Surfer*→...). Die Abweichungen der Ergebnisse liegen lediglich im dm^3-Bereich.

Außerdem dient eine *Surfer*-Ausgabedatei, die die Silooberfläche beschreibt, als Inputdatei für die in Kap. 4.5 beschriebene Software *split*. Mit dem Teilungsparameter $n = 5$ entstehen 5 Trennflächendateien als Eingabedateien für *CLDM* [207] bzw. das in Kap. 4.4 und Kap 4.5 beschriebene Verfahren zur Geometrie- und Gittererzeugung mit Mächtigkeiten. Es entsteht ein Gitter aus 10670 Elementen. Das erzeugte *„lgm,ng*-Dateipaar" lässt sich in das Simulationssystem *UG* [9, 10] einlesen (siehe Abb. 7.14).

Mit dem Volumenberechnungsverfahren aus Kap. 6.2.1 bzw. der Software *Eval_Volume_Area* [50] können die Volumina der einzelnen Gitterelemente berechnet und zum Gesamtvolumen addiert werden. Je nachdem, ob die Hexaederberechnung mit Gl. (7.1) oder mit Gl. (6.4) (S. 81) nach Zerlegung in 5 bzw. 6 Tetraeder durchgeführt wird, ergeben sich mehrere Gesamtvolumina (Tab. 7.9: *Eval_Volume*→...). Ähnlich wie bei den *Surfer*-Methoden (s.o.) liegen die Abweichungen auch hier erfreulicherweise nur im dm^3-Bereich.

Diese Ergebnisse bilden eine gute Voraussetzung, um die Verdichtung der zu detektierenden Schichten bei der Simulation des Einlagerungsprozesses berechnen zu können [89].

$$\frac{\Delta x \cdot \Delta y}{4}\left(\sum_{i=5}^{7} z_i \; - \sum_{i=0}^{3} z_i\right) \tag{7.1}$$

Volumen für Silo bei Golzow	*Surfer*→ *Trapezoidal*	*Surfer*→ *Simpson*	*Surfer*→ *Simpson 3/8*	*Surfer*→ *Pos. Volume*	*Eval_Volume*→ 6 Tet. für Hex.	*Eval_Volume*→ 5 Tet. für Hex.	*Eval_Volume*→ Gl. (7.1)
	5367.56 m^3	5367.59 m^3	5367.58 m^3	5367.55 m^3	5367.52 m^3	5367.56 m^3	5367.53 m^3

Tab. 7.9 Volumenberechnung für das Silo bei Golzow mit verschiedenen Methoden

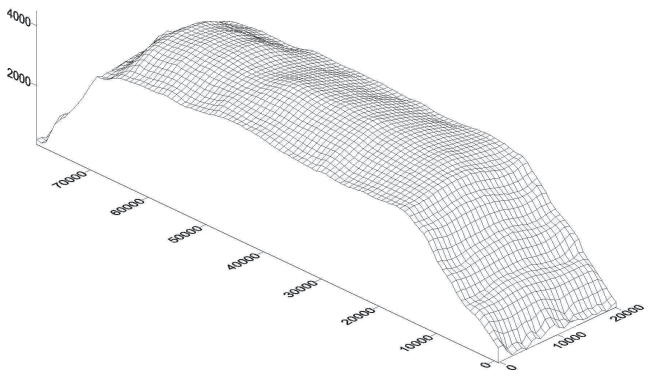


Abb. 7.15 Oberfläche für das Silo bei Golzow, erzeugt mit *Kriging* in *Surfer* [194] bei 705 gegebenen Messpunkten; Darstellung 5-fach in Z-Richtung überhöht

Es besteht der Wunsch, realistische Bahnverfolgungsdaten vom Projektpartner [11, 126] in das Verdichtungsvisualisierungssystem *VVS* [205] einzulesen, zu bearbeiten und Mächtigkeitsdateien einzelner Siloschichten auszugeben (vgl. Kap. 2.7). Die Detektion von Trennflächen einzelner Schichten aus den unregelmäßigen Fahrdaten ist allerdings eine komplexe Aufgabenstellung, die in der Masterarbeit von S. Handel [89] untersucht wird.

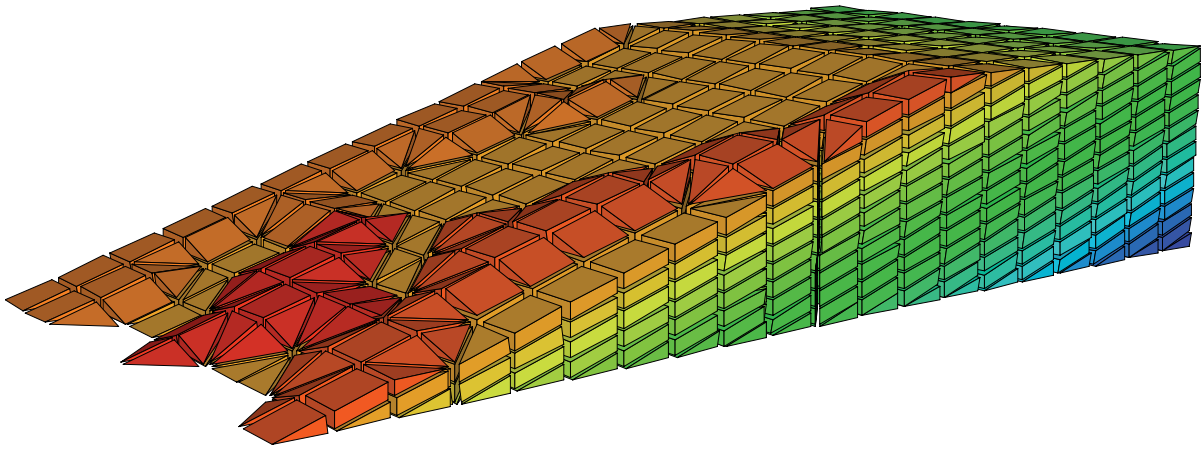


Abb. 7.16 Hybrides *UG*-Gitter aus 2141 Elementen für ein Horizontalsilo bestehend aus 3 unregelmäßigen Schichten sowie 19 Schichten in progressiver Keiltechnik [145, 203]

Zur Veranschaulichung der sogenannten „progressiven Keiltechnik“ (vgl. Kap. 2.7, [145, 203]) werden exemplarisch 22 Mächtigkeitsdateien konstruiert, die an die Größenverhältnisse eines realen Horizontalsilos angelehnt sind (20m lang, 10m breit, 4m hoch). Mit diesen Dateien und den Methoden aus Kap. 4.4 und Kap. 4.5 wird eine *lgm*-Geometrie und ein *ng*-Gitter mit 20 Spalten und 10 Reihen erzeugt. Das entspricht einer Maschenweite von 1 m für das zugrunde liegende kartesische *NxM* Rechtecksgitter. Die verwendete Schichtdicke wird nach Erfahrungswerten der LGF [126] in einem Beispiel mit 30 cm und in einem anderen mit 10 cm angenommen. Abb. 7.16 zeigt für den „30 cm-Fall“ eine Visualisierung der Schichten und des Gitters im Simulationssystem *UG*.

Für die Hexaeder der beiden beschriebenen Beispiele sind in Tab. 7.10 die Anisotropiewerte K, Ψ, P sowie die dihedralen Winkel ϑ_{max} und ϑ_{min} gemäß Kapitel 6 berechnet.

Schichtdicke	K	Ψ	P	ϑ_{max}	ϑ_{min}
30 cm (→ Abb. 7.16)	3.48	2.71	5.35	106.70°	73.30°
10 cm	10.44	3.40	15.34	106.70°	73.30°

Tab. 7.10 Anisotropiewerte K, Ψ, P und dihedrale Winkel für einen Hexaeder eines Horizontalsilogitters gemäß obiger Beschreibung

Die erzeugten Geometrien und Gitter für Horizontalsilos (z. B. in Abb. 7.14 und Abb. 7.16) können in das Simulationssystem *UG* [10] eingelesen und für numerische Berechnungen verwendet werden. Außerdem können die Geometrien bzw. Gitter von den Programmen *Radiana* [47], *Eval_Volume_Area* [50], *SurfaceMerge* [88] usw. genutzt werden.

7.9 Willersinnweiher

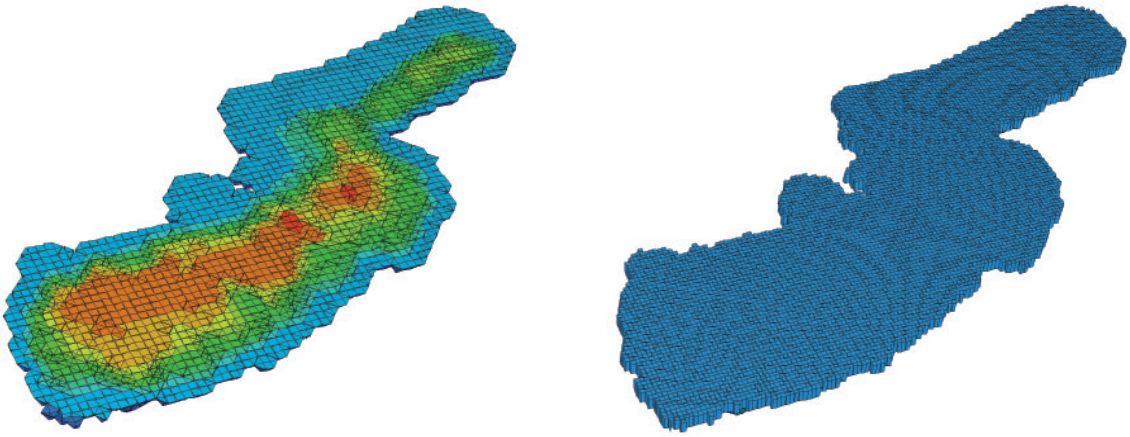


Abb. 7.17 Gitter für den Willersinnweiher: links: hybrides Gitter aus 25390 Elementen, 14 Teilschichten, *willersinnweiher.mixgrid-split-14fold.86x56.ng* ; rechts: reines Hexaedergitter *willersinnweiher.pure-hexgrid.nosplit.171x111.ng* mit 7179 Elementen, nur eine Elementschicht; beide Gitter mit *CLDM* [207]

Zur Ermöglichung numerischer Simulationen hydrodynamischer Phänomene für den Willersinnweiher (vgl. Kap. 2.8, S. 18) werden im Rahmen der Diplomarbeit von Ralf Wahner mit der Software *CLDM* [207] mehrere Gitter mit den Verfahren aus Kap. 4.4 bis 4.6 erzeugt.

Für das Gitter in Abb. 7.17 links wird der Willersinnweiher mit der Software *split* und $N = 14$ aufgeteilt (→ Kap. 4.5). So entstehen 15 Trennflächen und 14 Schichten, d.h. im Gitter liegen je nach lokaler Tiefe des Sees bis zu 14 Elemente übereinander. Die Unebenheit des Seegrunds und der große Wert für N führen zu zahlreichen Fallunterscheidungen gemäß Abb. 4.20 und damit zu einem vergleichsweise geringen Hexaederanteil (Tab. 7.11→#Elemente). In diesem Fall basieren die Gitterelemente auf einer horizontalen Rastermaschenweite von 10 m x 10 m und einer vertikalen Maschenweite von ungefähr 18 m / 14 ≅ 1.3 m. Die einzelnen Schichten sind farblich unterschieden und lassen im „Gitterplot“ in Abb. 7.17 die tiefsten (rot) bzw. seichtesten (blau) Stellen des Sees gut erkennen. Die Anisotropien der Gitterelemente werden mit den Ergebnissen für die Anisotropiewerte K, Ψ und P in Tab. 7.11 (mittlere Spalte) beschrieben.

Das Gitter in Abb. 7.17 rechts wird lediglich von zwei Trennflächen (Seeoberfläche und Seeboden) begrenzt und weist somit nur eine Elementschicht auf. Die Anisotropiewerte K, Ψ und P fallen dementsprechend kleiner aus (siehe in der rechten Spalte von Tab. 7.11) Das Gitter besteht ausschließlich aus Hexaedern (Tab. 7.11 → #Elemente). Sie besitzen in horizontaler Richtung eine halb so feine Abmessung von 5 m x 5 m und in vertikaler Richtung je nach Lokalisation eine Mächtigkeit zwischen 0 m und 18 m.

Erfreulicherweise besitzen die Elemente beider Gitter in Abb. 7.17 keine extremen Winkel (Tab. 7.11 → ϑ_{max} und ϑ_{min}). Diese Winkeleigenschaften sind notwendig für erfolgreiche numerische Simulationen (vgl. Kap. 3.4, 4.1, 6.4 und 6.5).

Das rechte Gitter aus Abb. 7.17 wird in Simulationsrechnungen von Andreas Hauser et al. [173] als Grobgitter einer anisotrop verfeinerten Mehrgitterhierarchie verwendet. Bei einer anisotropen Verfeinerung werden die Hexaeder lediglich in vertikaler Richtung halbiert. Man benötigt eine solche Verfeinerungsstrategie für die oberflächennahe Schicht, da dort hohe Strömungsgeschwindigkeiten auftreten.

Bei den Simulationsrechungen wird eine Navier-Stokes Gleichung für ein inkompressibles Fluid berechnet (erweitert mit einer thermischen Energiegleichung). Um physikalisch sinnvolle Ergebnisse zu erzielen, kommen moderne numerische Methoden auf massiv parallelen MIMD Maschinen (z.B auf 128 Knoten des HELICS (HEidelberg LInux Cluster System)) zum Einsatz [173].

Gittername :	*willersinnweiher.mixgrid-split-14fold.86x56.ng* (→ Abb. 7.17 links)	*willersinnweiher.pure-hexgrid.nosplit.171x111.ng* (→ Abb. 7.17 rechts)
#Elemente(%T, %Py, %Pr, %H)	25390 (7.5, 9.7, 60.5, 22.3)	7179(0.0, 0.0, 0.0, 100.0)
$K(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.1)	21.29 7.76 10.34	3.64 1.09 2.11
$\Psi(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.2)	4.50 2.84 3.15	2.64 2.45 2.52
$P(E_i)$: max, min, ∅ (→ Kap. 6.3)	20.73 7.91 11.14	3.91 1.77 2.67
$\vartheta_{max}(E_i)$: max, min, ∅ (→Kap.6.4)	128.68° 90.00° 98.99°	129.65° 90.00° 96.87°
$\vartheta_{min}(E_i)$: min, max, ∅ (→Kap.6.4)	5.39° 90.00° 50.36°	50.35° 90.00° 83.13°

Tab. 7.11 Anisotropiewerte K, Ψ und P, dihedrale Winkel sowie prozentuale Verteilung nach Elementtypen für die beiden Gitter aus Abb. 7.17

Kapitel 8

Experimente mit Gittern für das Stratum corneum

In Kapitel 8 werden verschiedene Experimente mit Gittern für das Stratum corneum durchgeführt. Die Geometriemodellierung und Vernetzung dieses anisotropen Schichtengebiets erfolgt mit dem Verfahren aus Kapitel 5.

Zunächst werden einige Gitter mit Messergebnissen und Bildern von mikroskopischen Untersuchungen verglichen (→ Kap. 8.1). Danach erfolgt für ausgewählte Gitterbeispiele die Berechnung der Anisotropiewerte und der dihedralen Winkel (→ Kap. 8.2).

Nach Beschreibung der Grundlagen für die mathematische Modellierung (→ Kap. 8.3) werden erste Simulationsrechungen für die simple Modellmembran Ω_{sSC} (→ Kap. 8.4) und die realitätsnahe Modellmembran Ω_{rSC} (→ Kap. 8.5) durchgeführt.

8.1 Vergleich mit mikroskopischen Ergebnissen

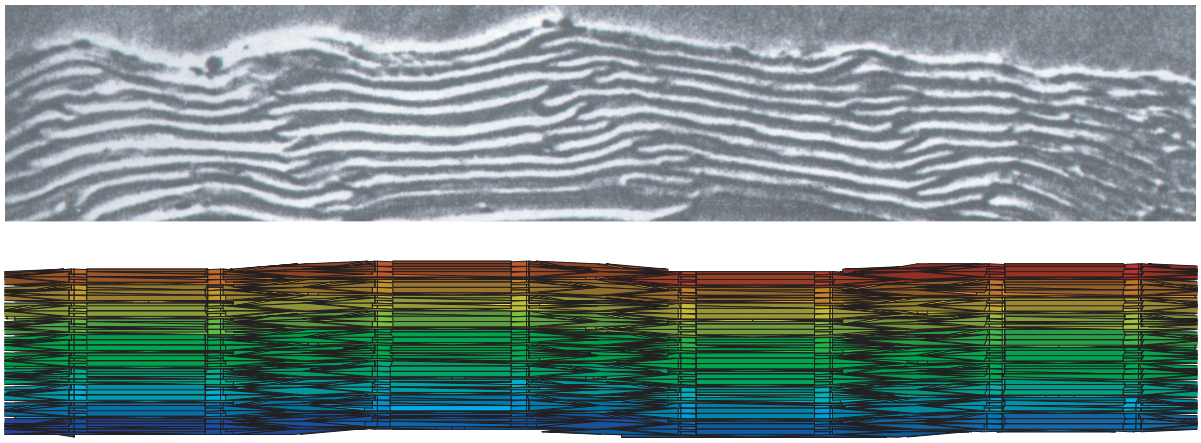


Abb. 8.1 Oben: Lichtmikroskopische Aufnahme des Stratum corneum; aus [142]
Unten: eine ähnliche SC-Modellmembran mit den Methoden aus Kapitel 5

Abb. 8.1 zeigt oben eine lichtmikroskopische Aufnahme einer Stratum corneum Probe (vom männlichen Oberkörper, [142]). Darunter ist eine dazu ähnliche Modellmembran aus 60 zusammengebauten Tetrakaidekaedern in entsprechender Perspektive dargestellt. Dabei werden folgende Werte verwendet: $n_{row} = 3$, $n_{col} = 2$, $n_{high} = 10$, $a = 10$, $w = 30$, $h = 1, \Theta_L = 0.1$ (Parameterdefinitionen siehe in Kap. 5.3.1 ff.). Mit diesen Eingabewerten erzeugt der *Tkd_Modeler* [48] eine *lgm*-Geometrie mit 61 *Subdomains* sowie ein *ng*-Gitter mit 7020 Elementen.

Wie der Vergleich in Abb. 8.1 zeigt, lassen sich mit dem Geometriekonzept aus Kapitel 5 bei entsprechender Einstellung der Parameter realitätsnahe SC-Modellmembranen erstellen.

Im Folgenden sollen mikroskopisch gemessene Volumina und Oberflächen von realen Korneozyten mit berechneten Werten von Tetrakaidekaedermodellen verglichen werden.

In der Arbeit von T. Richter, R. Wiesendanger et al. [171] findet man Messergebnisse mit einem Rasterkraftmikroskop (Nanoscope IIIa) für einzelne Korneozyten. Die Forscher bestimmten die durchschnittliche Höhe, die Basisfläche sowie das Volumen von einzelnen herausgelösten Korneozyten. Das Lipidgewebe war zuvor mit *Triton X100* abgelöst worden. Die einzelnen Korneozyten wurden zuerst in der Luft und später nach Anschwellung in destilliertem Wasser vermessen (siehe [171, 172] und Abb. 5.2→b1).

Dabei nahmen Höhe und Volumen der Korneozyten um ca. 50% zu, wohingegen ihre seitliche Ausdehnung nahezu unverändert blieb (siehe Tab. 8.1).

Angelehnt an diese Ergebnisse für reale Korneozyten werden mit den Methoden aus Kapitel 5 ähnliche „Korneozyten“ K_i in Tetrakaidekaederform erzeugt. Für den Parameter h werden die selben Höhenwerte gewählt, die Richter et al. in ihren Experimenten mit vier unterschiedlichen Korneozyten vor und nach der Anschwellung gemessen haben, [171→Table 1]. Um ähnliche Resultate für das Volumen und die Basisfläche zu erhalten, werden $a = 19$ und $w = 39$ gewählt. Dieser Wert für die horizontale Ausdehnung w liegt im Größenbereich der von Richter experimentell untersuchten Korneozyten (vgl. [171]→Fig. 1, Fig. 2 u. Fig. 5 sowie Abb. 5.2→b1).

#	∅ Höhe Luft [nm]	∅ Höhe dest. H_2O [nm]	%	Basisfläche Luft [μm^2]	Basisfläche dest. H_2O [μm^2]	%	Volumen Luft [μm^3]	Volumen dest. H_2O [μm^3]	%
1	341(341)	506(506)	48(48)	1005(830)	1005(802)	0(-3)	331(283)	491(406)	48(43)
2	211(211)	330(330)	56(56)	1005(982)	1005(967)	0(-2)	205(207)	320(319)	56(54)
3	213(213)	345(345)	62(62)	1005(1055)	1005(1050)	0(-1)	207(225)	335(362)	62(61)
4	335(335)	480(480)	43(43)	1005(1112)	1005(1130)	0(2)	325(373)	466(542)	43(46)

Tab. 8.1 Vergleich der Werte für Volumen und Basisfläche von acht (4·2)Tetrakaidekaedergeometriemodellen mit den Messungen von T. Richter an realen Korneozyten; Ergebnisse von T. Richter, hier in Klammern, sind übernommen aus „Table 1" der Arbeit [171]

Die $4 \cdot 2 = 8$ erzeugten „Korneozyten-Vergleichsgitter" im *ng*-Format können vom Softwarewerkzeug *Eval_Volume_Area* [50] eingelesen werden. Dieses Programm kann mit den Formeln und Zerlegungen aus Kap 6.2.1 und Kap. 6.2.2 das Volumen V, die Oberfläche A_o und die Basisfläche A_b eines beliebigen Gitters $G(K_i)$ berechnen.

So liefert *Eval_Volume_Area* bspw. für einen Einheitstetrakaidekaeder K_I mit konstanter Kantenlänge $a = 1$ (→Abb. 5.7 u. Abb. 5.14) die Ergebnisse $V(G(K_I)) = 11.31$, $A_o(G(K_I)) = 26.78$ und $A_b(G(K_I)) = 6.92$. Diese Ergebnisse für K_I können mit den Formeln aus Tab. 5.1 (S. 57) validiert werden.

In Tab. 8.1 sind die Volumen- und Flächenresultate von *Eval_Volume_Area* für die 8 oben erwähnten „Korneozyten-Vergleichsgitter" angegeben. Hinter jedem Messwert befindet sich in Klammern Richters Messergebnis [171] des jeweils zugehörigen realen Korneozyten. Die Angabe der proportionalen Größenänderungen nach der Anschwellung im destillierten Wasser erfolgt in Prozent.

Die Volumen- und Flächenergebnisse der „Korneozyten-Vergleichsgitter" in Tab. 8.1 haben alle dieselbe Größenordnung wie die Messwerte der realen Zellen bei T. Richter [171]. Dies bekräftigt die Vorgehensweise aus Kapitel 5, Korneozyten mit Tetrakaidekaedern zu modellieren.

8.2 Anisotropiewerte und dihedrale Winkel einiger Gitterbeispiele für $T_i = K_i \cup l_i$

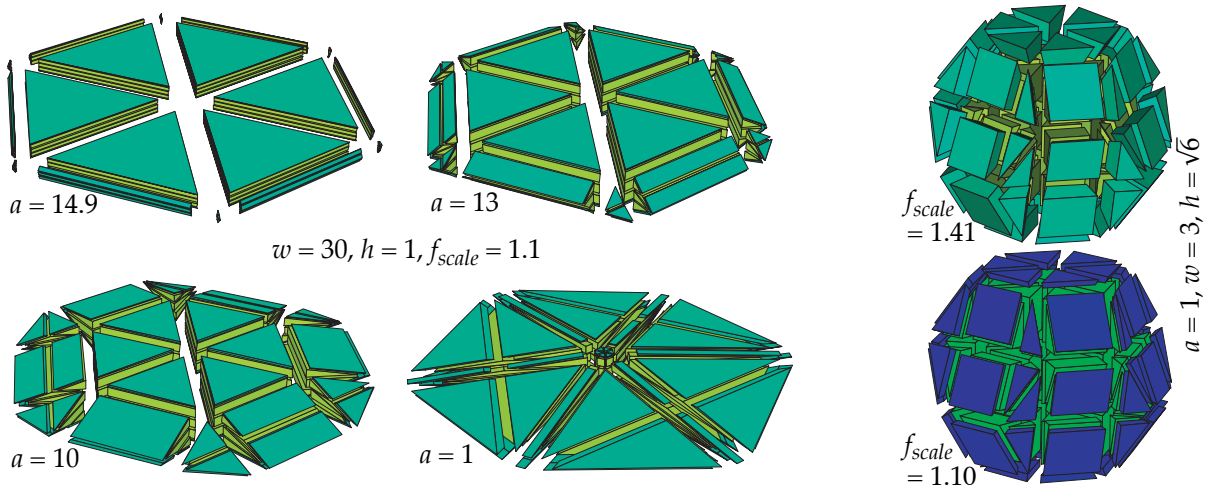


Abb. 8.2 Einige Gitterbeispiele für $T_i = K_i \cup l_i$

Im Rahmen dieser Arbeit werden zahlreiche Tetrakaidekaeder T_i gemäß dem Konzept aus Kap. 5.2 ff. erzeugt und vernetzt und zu Modellmembranen zusammengesetzt. Neben einigen T_i mit einheitlichen Kantenlängen werden insbesondere T_i mit realitätsnahen Größenverhältnissen erzeugt und vernetzt (→Abb. 8.2).

Zu den erzeugten Gittern $G(T_i) = G(K_i \cup l_i) = G(K_i) \cup G(l_i)$ sind in Tab. 8.2 die Anisotropiewerte K, Ψ, P und die dihedralen Winkel berechnet. Zusätzlich erfolgt die Berechnung jeweils für die Teilgitter $G(K_i)$ (→„Korneozyt“) und $G(l_i)$ (→„Lipidanteil“). Eine Darstellung der Elementverteilung wie in den Tabellen von Kapitel 7 ist hier redundant, da unabhängig von der Anzahl der zusammengesetzten T_i immer 17.95% Hexaeder, 61.54% Prismen, 5.13% Pyramiden und 15.38% Tetraeder entstehen (vgl. Kap. 5.4.3).

Für die 4 realitätsnahen Gitter ist $w = 30$, $h = 1$, $f_{scale} = 1.1$ konstant gewählt und a wird variiert. Für die beiden isotropen Gitter ist $a = 1$, $w = 3$, $h = \sqrt{6}$, konstant gewählt und f_{scale} wird zwischen $(h+h/10)/h = 1.1$ und $(h+a)/h \cong 1.408$ variiert. Die Lipidkanaldicke beträgt bei den 4 realitätsnahen Beispielen Θ_L=0.1 und bei den T_i mit einheitlichen Kantenlängen gilt oben Θ_L=a und unten Θ_L=$h/10$.

Das Beispiel mit dem blaugefärbten Lipidanteil entstammt der SC-Modellmembran Ω_{sSC} (vgl. Abb. 5.9b auf S. 67), die bei den Simulationsrechnungen in Kap. 8.4 zum Einsatz kommt. Das Gitter mit a =14.9 wird in den Simulationsrechnungen mit Ω_{rSC} in Kap. 8.5 verwendet.

Bei den 4 realitätsnahen Beispielen ergeben sich hohe Anisotropiewerte für die Gitterelemente (→ Tab. 8.2). Für die „Korneozyten“ errechnet man bspw. für $\Psi(E_i)\rightarrow\varnothing$ Ergebniswerte zwischen 4.19 und 4.64. Im Vergleich dazu gilt bspw. für das Gitter beim anisotropen Schichtengebiet *komplex* $\Psi(E_i)\rightarrow\varnothing = 4.6$ (Kap 7.2→Tab. 7.2).

Wie zu erwarten, sind die Anisotropieergebnisse für die „Lipidkanäle“ noch größer. Hier berechnet man für $\Psi(E_i)\rightarrow\varnothing$ Werte zwischen 5.0 und 6.72. Diese Ergebnisse sind größer als bei allen Gitterbeispielen aus Kapitel 7 mit Ausnahme der Gitter für das extrem anisotrope Schichtengebiet WIPP mit $\Psi(E_i)\rightarrow\varnothing\{WIPP_4sclices.ng\}$=7.32 (→Kap. 7.1).

Die Maximalwerte $\Psi(E_i)\rightarrow$max liegen für die 4 realitätsnahen Beispiele zwischen 7.8 und 8.7 . Diese Ergebnisse sind den Werten bei den Gittern für das Gebiet Norderney ähnlich mit $\Psi(E_i)\rightarrow\max\{Norderney_2388.ng\} = 7.08$ und $\Psi(E_i)\rightarrow\max\{Norderney_1104.ng\} = 8.60$ (→Kap. 7.5).

Gitter:	$K(E_i)$ (→ Kap. 6.1) max,	min,	∅	$\Psi(E_i)$ (→ Kap. 6.2) max,	min,	∅	$P(E_i)$: (→ Kap. 6.3) max,	min,	∅	$\vartheta_{max}(E_i)$: (→ Kap. 6.4) max,	min,	∅	$\vartheta_{min}(E_i)$: (→ Kap. 6.4) min,	max,	∅
T_i_a14.9.ng	298.90	6.11	119.11	8.27	2.98	4.67	345.40	6.12	131.54	132.33°	90.00°	108.55°	9.28°	80.17°	36.38°
K_i_a14.9.ng	258.08	6.11	82.69	6.39	3.00	4.38	290.36	6.12	87.62	118.61°	90.00°	94.60°	9.28°	80.17°	35.50°
l_i_a14.9.ng	298.90	7.37	161.61	8.27	2.98	5.00	345.40	8.32	182.75	132.33°	118.13°	124.82°	15.58°	61.87°	37.40°
T_i_a13.ng	260.12	2.02	79.48	7.90	3.27	5.01	300.40	8.82	99.97	167.93°	90.00°	127.94°	7.89°	60.00°	26.89°
K_i_a13.ng	39.00	2.02	25.01	5.77	3.27	4.19	80.53	8.82	33.21	163.90°	90.00°	111.11°	7.89°	60.00°	26.71°
l_i_a13.ng	260.12	21.04	143.02	7.90	4.36	5.97	300.40	51.85	177.84	167.93°	96.08°	147.58°	12.07°	60.00°	27.11°
T_i_a10.ng	200.05	2.00	70.14	7.82	4.04	5.60	236.96	19.17	101.28	175.06°	90.00°	132.78°	3.28°	60.00°	20.10°
K_i_a10.ng	30.00	2.00	22.46	6.40	4.04	4.63	69.56	19.17	32.65	173.41°	90.00°	113.83°	3.28°	60.00°	21.05°
l_i_a10.ng	200.05	21.84	125.76	7.82	5.76	6.72	236.96	127.48	181.33	175.06°	92.47°	154.89°	4.94°	60.00°	18.99°
T_i_a1.ng	355.68	2.00	83.38	8.69	2.60	5.52	356.42	3.61	136.24	178.23°	90.00°	134.95°	1.18°	60.00°	17.08°
K_i_a1.ng	48.51	2.00	27.23	8.18	2.60	4.64	113.60	3.61	43.32	177.64°	90.00°	115.00°	1.18°	60.00°	18.54°
l_i_a1.ng	355.68	11.00	148.88	8.69	3.62	6.54	356.42	23.14	244.64	178.23°	90.89°	158.17°	1.77°	60.00°	15.36°
T_i_$a_c f_{scale}$1.4.ng	3.94	1.21	2.85	3.21	2.58	2.78	6.94	2.46	4.13	129.93°	90.00°	108.87°	14.49°	72.92°	41.33°
K_i_$a_c f_{scale}$1.4.ng	3.94	1.21	2.83	3.21	2.58	2.84	6.94	2.46	4.45	116.19°	90.00°	95.75°	14.49°	72.92°	39.44°
l_i_$a_c f_{scale}$1.4.ng	3.09	2.36	2.87	2.80	2.59	2.70	4.05	3.34	3.77	129.93°	115.44°	124.17°	26.43°	64.56°	43.53°
T_i_$a f_{scale}$1.1.ng	9.19	1.22	5.50	3.26	2.55	2.93	12.96	2.45	7.26	129.05°	90.00°	108.96°	15.79°	70.53°	42.83°
K_i_$a_c f_{scale}$1.1.ng	3.46	1.22	2.58	3.15	2.55	2.81	6.47	2.45	4.17	115.24°	90.00°	96.11°	15.79°	70.53°	40.67°
l_i_$a_c f_{scale}$1.1.ng	9.19	7.56	8.91	3.26	2.97	3.07	12.96	9.88	10.87	129.05°	113.25°	123.94°	29.76°	66.75°	45.35°

Tab. 8.2 Anisotropiewerte K, Ψ, P und dihedrale Winkel für die Gitterbeispiele aus Abb. 8.2

Die durchschnittlichen minimalen Winkelwerte $\vartheta_{min}(E_i)\rightarrow\varnothing$ liegen für die „Korneozyten“ bei den 4 realitätsnahen Beispielen zwischen 18° und 36° und für die „Lipidkanäle“ zwischen 15° und 38°, die durchschnittlichen maximalen Winkelwerte $\vartheta_{max}(E_i)\rightarrow\varnothing$ liegen für die Korneozyten zwischen 94° und 115 ° und für die „Lipidkanäle“ zwischen 124° und 159°.

Die meisten Winkel der Gitter $G(T_i) = G(K_i \cup l_i)$ sind weit entfernt von 0° oder 180° und selbst die Extrema der Winkelergebnisse $\vartheta_{max}(E_i)\rightarrow$max und $\vartheta_{min}(E_i)\rightarrow$min liegen noch in vertretbarem Rahmen: Für a=14.9, ist $\vartheta_{min}(E_i)\rightarrow$min = 9.28° und $\vartheta_{max}(E_i)\rightarrow$max = 132.33°. Für a=13, ist $\vartheta_{min}(E_i)\rightarrow$min = 7.89° und $\vartheta_{max}(E_i)\rightarrow$max = 167.93°. Für a=10, ist $\vartheta_{min}(E_i)\rightarrow$min = 3.28° und $\vartheta_{max}(E_i)\rightarrow$max = 175.06°. Für a=1, d.h. bei nahezu maximaler Überlappung der „Korneozyten“ ist $\vartheta_{min}(E_i)\rightarrow$min = 1.18° und $\vartheta_{max}(E_i)\rightarrow$max = 178.23°.

Für die isotropen Gitterbeispiele (→ Abb. 8.2 rechts) fallen die Anisotropiewerte klein aus. Für f_{scale} =1.41 ist bspw. $\Psi(E_i)\rightarrow\varnothing$ = 2.78. Das ist fast so klein wie $\Psi(E_i)\rightarrow\varnothing${*Layered_1890.ng*}= 2.49 beim isotropen Gitterbeispiel aus Kap. 7.3 .

Die Winkel bei den isotropen Gitterbeispielen sind alle weit entfernt von 180° und 0° und es gelten $\vartheta_{min}(E_i)\rightarrow\varnothing \cong 42°$, $\vartheta_{max}(E_i)\rightarrow\varnothing \cong 109°$, $\vartheta_{min}(E_i)\rightarrow$min > 14° und $\vartheta_{max}(E_i)\rightarrow$max < 130°.

8.3 Modellgleichungen und numerische Verfahren

Die Grundlage für die Modellierung der Arzneimitteldiffusion durch das Stratum corneum bildet das Prinzip der Massenerhaltung:

$$\frac{\mathrm{d}c(x,t)}{\mathrm{d}t} = -\mathrm{div}\ j(x,t) \tag{8.1}$$

Dabei beschreibt $c(x,t)$ die Arzneimittelkonzentration und $j(x,t)$ die Teilchenstromdichte* im Gebiet Ω_{SC}. Nach dem Fick'schen Gesetz (8.2) ist die Teilchenstromdichte proportional zum Diffusionskoeffizienten und dem Konzentrationsgradienten.

$$j(x,t) = -D\ \nabla c(x,t) \tag{8.2}$$

Der Permeabilitätstensor $D = D(x)$ wird stückweise konstant gewählt und entspricht je nach Ort dem Diffusionskoeffizienten der Korneozyten oder der Lipidschicht:

$$D(x) = \begin{cases} \mathrm{D}_{Lip} & x \in \mathrm{Lipid} \\ \mathrm{D}_{Kor} & x \in \mathrm{Korneozyt} \end{cases} \tag{8.3}$$

Sowohl die Lipidphase als auch die Korneozytphase werden jeweils als homogen und permeabel angenommen. Die Diffusionsgeschwindigkeiten in beiden Phasen lassen sich beliebig einstellen und den lipophilen und hydrophilen Eigenschaften eines Stoffes anpassen.

Durch Einsetzen von Gl. (8.2) in Gl. (8.1) erhält man die partielle Differentialgleichung, die den Diffusionsprozess für Ω_{SC} beschreibt.

$$\frac{\mathrm{d}c(x,t)}{\mathrm{d}t} = \mathrm{div}\,(D\nabla c(x,t)) \tag{8.4}$$

* Die Teilchenstromdichte bezeichnet die Anzahl der Atome, die in einer bestimmten Zeit durch eine bestimmte Fläche, die senkrecht zum Diffusionsstrom steht, diffundiert.

Um den Fluss an den seitlichen Rändern zu verhindern werden an Γ_l, Γ_r, Γ_v und Γ_h zunächst homogene Neumann Randbedingungen $\partial c / \partial n = 0$ gewählt (siehe in Abb. 8.5). In einer späteren Arbeit wird dann mit periodischer Randfortsetzung gerechnet [150, 151]. Dies ist mit den Tetrakaidekaedermodellen aus Kapitel 5 möglich.

Die Diffusion des Arzneimittels durch die heterogene SC-Modellmembran soll vom unteren Rand Γ_u zum oberen Rand Γ_o erfolgen. Es werden perfekte Quell- und Senkenbedingungen angenommen, d.h. die Arzneimittelkonzentration c ist immer 1 bei Γ_u und 0 bei Γ_o.

Die Anfangsbedingung zum Zeitpunkt t =0 lautet $c(x,0) = 0$, d.h. es befindet sich zu Beginn kein Arzneimittel in Ω_{SC}.

Die relative Permeabilität der Korneozyt- und Lipidphasen ist gegeben durch den Quotienten $\varepsilon = D_{Kor} / D_{Lip}$. Damit beschreibt ε die Größe der Barriereeigenschaft der Modellmembran. Typischerweise ist ε immer kleiner als 1, da die Korneozyten weniger permeabel sind als die Lipidkanäle.

Die Gleichungen werden zuerst durch ein diagonal implizites Runge-Kutta-Verfahren (DIRK) 2. Ordnung in der Zeit diskretisiert. Man erhält in jedem Zeitschritt eine elliptische partielle Differentialgleichung. Diese PDG wird mit einer baryzentrischen Finite-Volumen-Methode, [8, 85, 100→S. 44 ff., 204] im dreidimensionalen Raum diskretisiert.

Es ist eine große Anzahl an Gitterknoten erforderlich, um die komplexe Struktur von Ω_{SC} und die großen Permeabilitätssprünge an den Lipid-Korneozyt-Grenzen zu berücksichtigen. So entstehen große lineare Gleichungssysteme. Zur Lösung werden Mehrgitterverfahren eingesetzt [84, 220, 222]. Um einen robusten Löser zu erhalten, wird der ILU_β-Glätter aus [220] verwendet und β optimal eingestellt.

Als Ergebnis erhält man Arzneimittelkonzentrationsprofile innerhalb der heterogenen SC-Modellmembran Ω_{SC}, die für verschiedene Werte von ε das ganze Spektrum von völlig permeablen bis zu hoch impermeablen Korneozyten repräsentieren (→ Kap. 8.4 u. 8.5). Der stationäre Zustand sieht in den betrachteten Fällen immer gleich aus. Er gibt daher keinen Aufschluss über die genauen Transportwege im Gewebe. Für ein genaueres Verständnis der Transportwege sind somit eine zeitliche Auflösung bzw. zeitabhängige Arzneimittelkonzentrationsprofile unerlässlich.

8.4 Erste Simulationsrechnungen mit der Modellmembran Ω_{sSC}

Die heterogene Modellmembran Ω_{sSC} wird bereits in Abb. 5.9 auf S. 67 in verschiedenen Ansichten dargestellt. Ω_{sSC} besteht aus 5 Reihen, 4 Spalten und 3 Schichten mit insgesamt 60 „Korneozyten“ in Einheitstetrakaidekaederform. Die „Korneozytenhöhe“ h in Ω_{sSC} ist wie im realen Stratum corneum zehn mal so groß wie die „Lipidkanaldicke“ Θ_L gewählt [93]. Die Geometrieparameter aus Kap. 5.3 sind folgendermaßen eingestellt: $a = 1$, $w = 3$, $h = \sqrt{6}$, $\Theta_L = \sqrt{6}/10$, $n_{row} = 5$, $n_{col} = 4$ und $n_{high} = 3$. Gemäß Kapitel 5.2 entsteht eine *lgm*-Geometrie aus $5 \cdot 4 \cdot 3 + 1 = 61$ *Subdomains* sowie gemäß Kapitel 5.4 ein Grobgitter im *ng*-Format mit $60 \cdot 117 = 7020$ Elementen. Die Ergebnisse für die Anisotropiebeschreibungen K, Ψ, P und die dihedralen Winkel der Gitterelemente können in Tab. 8.2 den letzten 3 Zeilen entnommen werden.

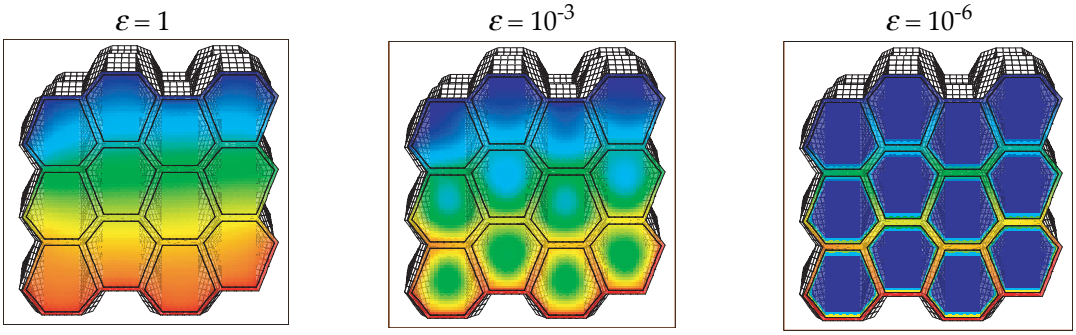


Abb. 8.3 Konzentrationsprofile nach t = 190 sec bei unterschiedlicher relativer Permeabilität ε

Mit der erzeugten Geometrie und dem erzeugten Gitter für Ω_{sSC} werden Simulationsrechnungen durchgeführt. Dabei wird das Grobgitter zweimal regulär verfeinert, so dass 245289 Knoten entstehen.

Bei den Experimenten zu Abb. 8.3 und Abb. 8.4 wird die relative Permeabilität $\varepsilon = D_{cor} / D_{lip}$ variiert (→Kap. 8.3) und Konzentrationsprofile zu verschiedenen Zeitpunkten betrachtet.

In Abb. 8.3 werden für $\varepsilon \in \{1, 10^{-3}, 10^{-6}\}$ drei Konzentrationsprofile zum Zeitpunkt $t = 190$ sec dargestellt. Es wird deutlich, dass die Konzentrationsprofile von ε abhängen. Für $\varepsilon = 1$ beziehungsweise $D_{cor} = D_{lip}$ sind die „Korneozyten“ völlig permeabel und es entsteht eine homogene Modellmembran. Je kleiner ε wird, desto deutlicher wird der interzelluläre Diffusionsweg sichtbar.

In Abb. 8.4 werden für $\varepsilon \in \{1, 10^{-1}, 10^{-3}\}$ Konzentrationsprofile zu verschiedenen Zeitpunkten dargestellt. In der rechten Spalte sieht man für jedes ε ein Konzentrationsprofil nach einer Zeit ϑ_ε nahe des stationären Zustands. Die Bilder der mittleren Spalte zeigen Konzentrationsprofile nach $t = \vartheta_\varepsilon / 14$. In der linken Spalte sind Konzentrationsprofile nach $t = \vartheta_\varepsilon / 300$ dargestellt, d.h. zu Beginn des Diffusionsprozesses.

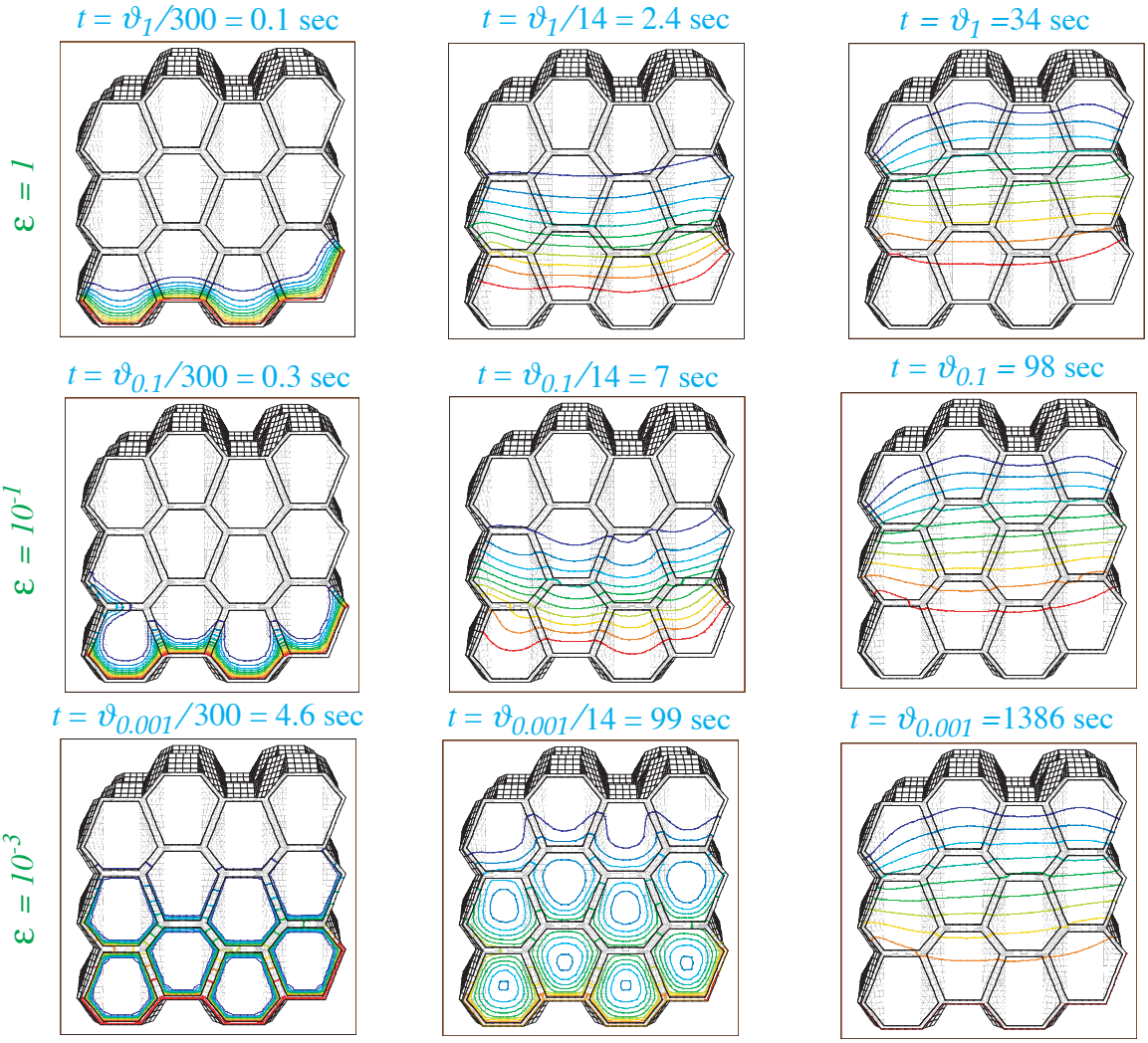


Abb. 8.4 Konzentrationsprofile in Abh. der relativen Permeabilität ε und der verstrichenen Zeit t. Es werden Konturlinien für die Konzentration zwischen Γ_u=1 and Γ_o=0 angezeigt. Die Konzentration nimmt von der blauen Konturlinie zur roten Konturlinie in gleichen Abständen zu.

Für $\varepsilon = 1$ sind Korneozyt- und Lipidphase gleich permeabel und Ω_{sSC} reduziert sich auf eine homogene Membran [34]. Als Ergebnis erhält man glatte horizontale Konturlinien, die kontinuierlich durch beide Phasen laufen (Abb. 8.4, obere Zeile).

Mit einer Reduktion der Korneozytenpermeabilität um Faktor 10 wird $\varepsilon = D_{kor}/D_{lip} = 10^{-1}$. So erhält man eine heterogene Modellmembran. Das führt zu wellenförmigen Konturlinien (siehe Abb. 8.4, mittlere Zeile). Die Wellengipfel liegen in den „Lipidkanälen“, da die Diffusionsgeschwindigkeit dort größer ist als in den „Korneozyten“.

Wenn die relative Permeabilität auf $\varepsilon = 10^{-3}$ verkleinert wird, sieht man geschlossene Konturen innerhalb jedes „Korneozyten“ (Abb. 8.4, untere Zeile). Da die „Korneozyten“ jetzt 10^3 mal weniger permeabel sind als das Lipid, umströmt das Arzneimittel zu Beginn die „Korneozyten“, bevor es vertikal und horizontal hindurchdiffundiert.

Selbst bei noch kleineren Werte der relativen Permeabilität ε ergibt sich in der Simulation neben der Diffusion durch die „Lipidphase“ immer auch eine intrazelluläre Arzneimitteldiffusion durch die Korneozyten.

8.5 Erste Simulationsrechnungen mit der Modellmembran Ω_{rSC}

Die realitätsnahe SC Modellmembran Ω_{rSC} besteht aus 3 Reihen, 2 Spalten und 10 Schichten mit insgesamt 60 Tetrakaidekaedern. Angelehnt an die 2D-Arbeiten von M. Heisig [93] besitzt jeder „Korneozyt" eine horizontale Ausdehnung von 30 μm, eine vertikale Ausdehnung von 1 μm und die „Lipidkanäle" haben eine Dicke von 0.1 μm.

Die Geometrieparameter aus Kapitel 5.3 sind folgendermaßen eingestellt: $a = 14.9$, $w = 30$, $h = 1$, $\Theta_L = 0.1$, $n_{row} = 3$, $n_{col} = 2$ und $n_{high} = 10$. Gemäß Kapitel 5.2 entsteht eine *lgm*-Geometrie aus $3 \cdot 2 \cdot 10 + 1 = 61$ *Subdomains* sowie gemäß Kapitel 5.4 ein Grobgitter im *ng*-Format mit $60 \cdot 117 = 7020$ Elementen. Die Ergebnisse für die Anisotropiebeschreibungen K, Ψ, P und die dihedralen Winkel der Gitterelemente können in Tab. 8.2 den ersten 3 Zeilen entnommen werden. Bei den Rechnungen werden nach 2facher Gitterverfeinerung 246749 Knoten verwendet.

Abb. 8.5 zeigt links die Modellmembran Ω_{rSC} und die verwendeten Randbedingungen, die in Kap 8.3 eingeführt werden. In dem vergrößerten Ausschnitt rechts daneben sind die charakteristischen Abmessungen eingetragen. Die „Lipidmatrix" wird in Abb. 8.5 nur zwischen den „Korneozyten" dargestellt und ansonsten zur besseren Anschauung weggelassen (vgl. Abb. 5.9).

Die Barriereeigenschaft des Stratum corneum lässt sich durch die Lagzeit τ charakterisieren. Für ein homogenes Medium, d.h. $\varepsilon = 1$, kann die Lagzeit mit $\tau = l^2/(6D)$ analytisch berechnet werden [34].

Dabei ist l die Dicke der Membran. Für Ω_{rSC} gilt $l = 10 \cdot 1.0\mu\text{m} + 10 \cdot 0.1\mu\text{m} = 11\mu\text{m}$. Für eine homogene Membran gilt $D_{Kor} = D_{Lip}$. In diesem Fall kann für D der aus der Literatur bekannte Wert für $D_{Lip} = 10^{-8}$ cm^2/sec [132] verwendet werden. Der analytische Wert für τ ergibt bei Ω_{rSC} für ein homogenes Medium somit $\tau = (11\mu\text{m})^2/(6 \cdot (10^{-8}\,\text{cm}^2/\text{sec})) = 20.167$ sec. Dieser Wert wird zur Validierung des Simulationsprogramms verwendet.

Wenn man die Permeabilität der „Korneozyten" verringert, d.h. $D_{Kor} < D_{Lip}$ setzt, wird die relative Permeabiltät ε kleiner als 1 und es entsteht eine heterogene Membran. Für impermeabler werdende Korneozyten bzw. für ε gegen 0 nimmt die Lagzeit τ zu und nähert sich einem asymptotischen Grenzwert [93].

Abb. 8.6 zeigt einige Ergebnisse der numerischen Simulationen mit Ω_{rSC}. Es sind vier Konzentrationsprofile mit verschiedenen relativen Permeabiltiäten $\varepsilon \in \{1, 10^{-3}, 10^{-6}\}$ zu unterschiedlichen Zeiten t dargestellt.

Ganz oben in Abb. 8.6 ist $\varepsilon = 1$. Die Korneozyt- und Lipidphase sind gleich permeabel und Ω_{rSC} wird zu einer homogenen Membran. Das Ergebnis zeigt parallele, horizontale Konturen, die kontinuierlich durch beide Phasen gehen.

Reduziert man die relative Permeabilität um Faktor 1000 zu $\varepsilon = 10^{-3}$, dann erhält man wellenförmige Konturen (siehe zweites Bild in Abb. 8.6 für $t = 224$ sec zu Beginn des Diffusionsprozesses). Die Wellengipfel befinden sich in den „Lipidkanälen", da dort die Diffusionsgeschwindigkeit größer ist als in den „Korneozyten".

Für $\varepsilon = 10^{-3}$ sieht man in der numerischen Simulation im stationären Zustand nach $t = 3$h 47min, dass die Arzneistoffe nicht nur durch die „Lipidphasen" (interzellulär) sondern auch durch die „Korneozyten" dringen (intrazellulär), selbst wenn letztere 1000 mal weniger permeabel sind (siehe 3. Teilbild von Abb. 8.6).

Ganz unten in Abb. 8.6 ist $\varepsilon = 10^{-6}$, d.h. dass die Permeabilität der „Korneozyten" nochmals um Faktor 1000 geringer ist. In diesem Fall verläuft der Diffusionsweg vorwiegend interzellulär in den „Lipidkanälen".

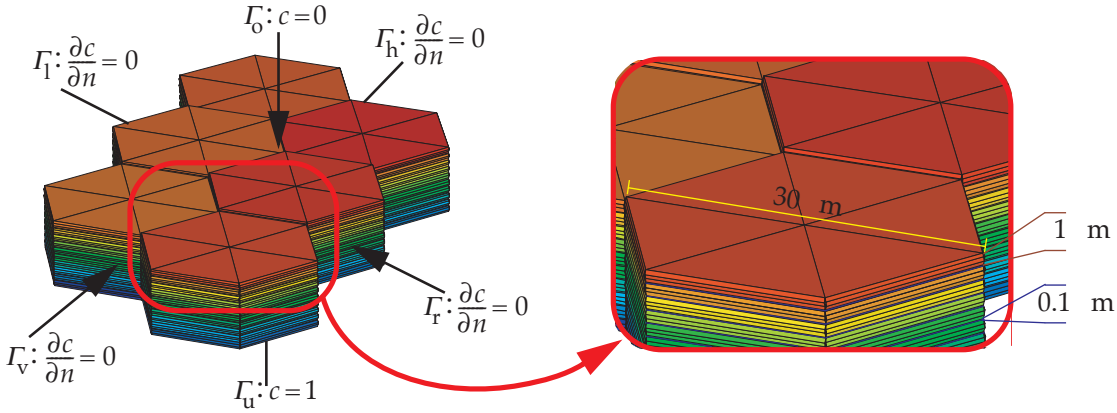


Abb. 8.5 SC Modellmembran Ω_{rSC} mit Randbedingungen (links) und Abmessungen (rechts)

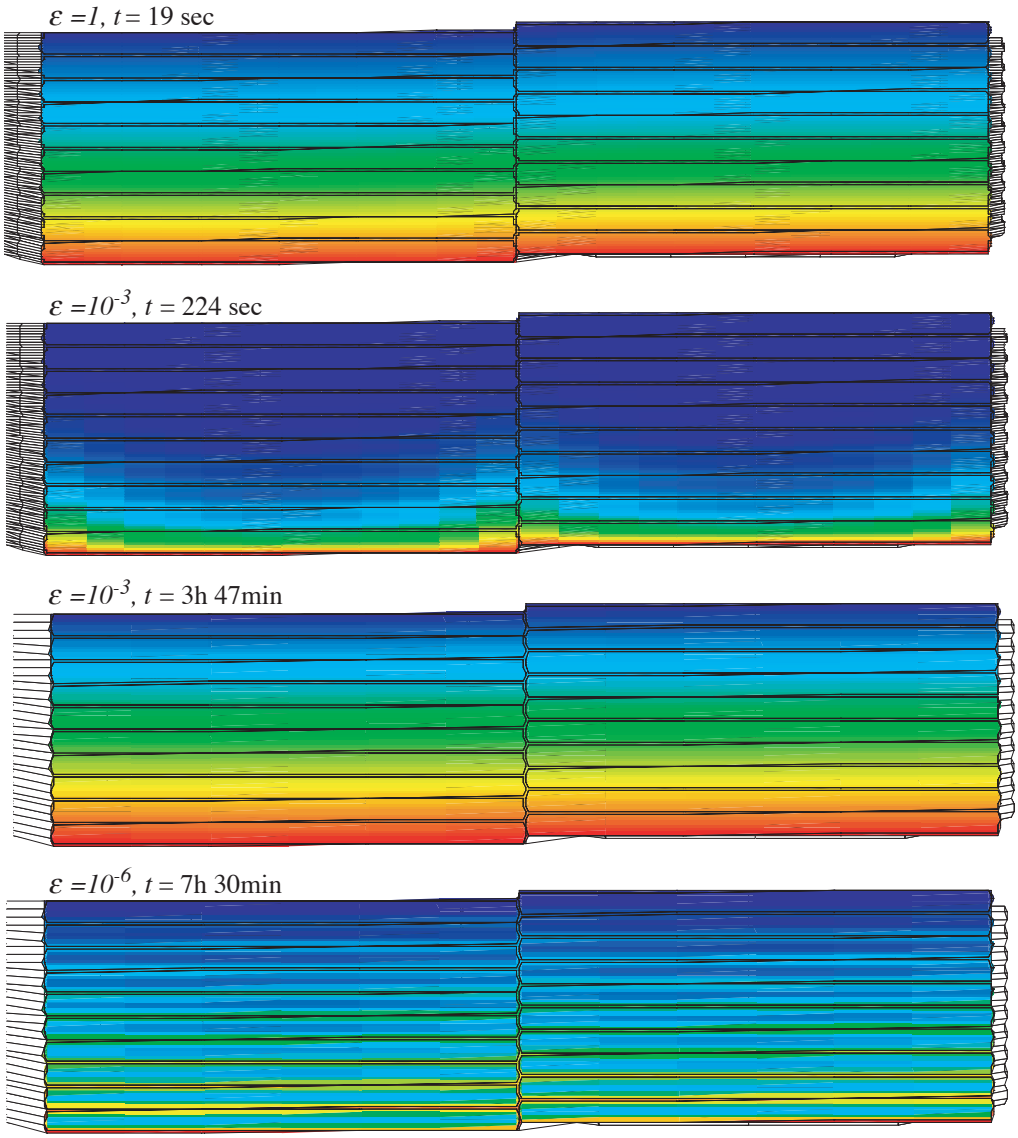


Abb. 8.6 Konzentrationsprofile in Ω_{rSC} für verschiedene Permeabilitäten ε zu unterschiedlichen Zeitpunkten t

Kapitel 9

Schlussbetrachtung und Ausblick

Motiviert durch ein Projekt [41, 42] über dichtegetriebene Grundwasserströmungen und Radionuklidtransporte oberhalb von Salzstöcken wurde ein Geometrie- und Gittergenerierungskonzept entwickelt. Durch die Verwendung von Mächtigkeiten anstelle von absoluten Höhenwerten wird ein Geometriemodell ohne unerwünschte Schnitte realisiert. Eine Vernetzungsmethode mit vertikalen Elementkanten, die senkrecht zu den horizontal liegenden anisotropen Deckgebirgsschichten verlaufen, führt zu hybriden *UG*-Gittern, die aus Tetraedern, Pyramiden, Prismen und größtenteils Hexaedern bestehen.

Es stellte sich heraus, dass sich diese Vorgehensweise auch für andere Geoschichtungen (Nordseeinseln, Orange County) sowie anisotrope Schichtengebiete im landwirtschaftlichen Bereich (Horizontalsilos) und limnologischen Bereich (Willersinnweiher) bewährt.

Auch für die oberste Schichtenfolge der menschlichen Epidermis (Stratum corneum) wurde die Grundidee vertikaler Gitterkanten bei horizontal verlaufenden Schichtungen verwendet. Um dem Entstehungsprozess und dem komplexen Aufbau des Stratum corneum gerecht zu werden, wurde hier allerdings ein spezielles Verfahren entwickelt, das auf einem Modell in-sich-geschachtelter Tetrakaidekaeder basiert. Diese ermöglichen ein flexibles Geometriemodell für die oberflächensparende Anordnung ineinandergreifender Zellstapel. Auch hier erfolgt eine hybride Vernetzung mit den 4 *UG*-Elementtypen.

Die vorgestellten Methoden ermöglichen es, für realitätsnahe anisotrope Schichtengebiete aus unterschiedlichen aktuellen Forschungsbereichen *lgm*-Geometriebeschreibungen und geeignete *ng*-Gitter mit möglichst vielen Hexaedern bzw. Elementen ohne extreme Winkeleigenschaften zu erzeugen.

Der hohe Hexaederanteil ist erfreulich, da Hexaeder besser angepasst und ausgerichtet werden können und bessere Approximationseigenschaften bieten als Tetraeder. Außerdem benötigt man mit Hexaedernetzen weniger Knoten und damit weniger Freiheitsgrade.

Gute Winkel sind wichtig, da extrem stumpfe Winkel nahe 180° den Interpolations- und Diskretisierungsfehler und extrem spitze Winkel nahe 0° die Kondition der Steifigkeitsmatrix beeinträchtigen können.

Neben guten Winkeleigenschaften ist auch eine bestimmte Elementausdehnung, typischerweise senkrecht zur Richtung des Gradienten der Lösung, von großem Vorteil. In diesem Zusammenhang wurden die beiden neuen Maße Ψ und P zur Beschreibung der Anisotropie von Gitterelementen vorgestellt.

Somit bildet diese Arbeit eine gute Basis, bei numerischen Simulationen den Aspekt der Gitterelementqualität in besonderer Weise zu berücksichtigen.

Mit Hilfe der neuen Methoden konnten bereits verschiedene numerische Simulationen (z.B. von dichtegetriebenen Grundwasserströmungen, Entstehung von Süßwasserlinsen, Arzneimitteldiffusionen) auf **praxisrelevanten** Geometrien und Gittern ermöglicht werden. Neben den vorgestellten Simulationen sind auch in Zukunft weitere Projekte geplant, bei denen die vorgestellten Geometrie- und Gitterkonzepte zum Einsatz kommen sollen. Zum Beispiel soll die Grundwassermigration im Grundwasserbecken von Orange County oder die Veränderung von Süßwasserlinsen in Nordseeinseln bei erhöhter Brunnenförderung simuliert werden.

Darüberhinaus ist angedacht, verschiedene Teilaspekte dieser Arbeit weiterzuentwickeln:

Durch die erweiterten Möglichkeiten der periodischen Randfortsetzung innerhalb des Simulationssystems *UG* ist eine Optimierung des Tetrakaidekaedermodells mit einer Reduktion der benötigten Gitterelementzahl denkbar.

Für komplexere Grundrisse als Orange County stößt die Erzeugungsmethode von *N*x*M* Viereckgittern an ihre Grenzen. Deshalb besteht die Überlegung, bei einem entsprechenden Grundriss ein unstrukturiertes Dreiecksgitter zu verwenden und die in Kapitel 4 beschriebenen Methoden hierfür anzupassen, was allerdings zu 3D-Gittern aus Tetraedern, Pyramiden und überwiegend Prismen aber keinen Hexaedern führt.

Durch das Zusammenfassen von Randflächen (→ Kap. 4.7) konnte die Handhabung komplexer Geometrien und Gitter in *UG* stark vereinfacht und beschleunigt werden. Durch Löschen von *Lines* wurden *Surfaces* miteinander „verschmolzen“. Ähnlich dazu wäre es im Rahmen der Geometrieaufbereitung denkbar, *Subdomains* durch Löschen von *Surfaces* zusammenzufassen. Dabei könnte man auf die bestehenden Konzepte zurückgreifen.

Insgesamt leistet diese Arbeit über die Geometriemodellierung und Gittererzeugung für anisotrope Schichtengebiete einen interdisziplinären Beitrag an der Schnittstelle zwischen Angewandter Informatik, Numerischer Simulation und verschiedenen wissenschaftlichen Anwendungsgebieten.

10 Literaturverzeichnis

1 Albery W., Hadgraft J.: Percutaneous absorption: in vivo experiments. J. Pharm. Pharmacol. 31, 140-147, 1978.

2 Ahlmann J.: Qualitäts-Metriken und Optimierung von Tetraeder-Netzen. Seminararbeit, Institut für Rechnerentwurf und Fehlertoleranz (IRF), Prof. Dr.-Ing. R. Dillmann, Fakultät für Informatik, Universität Karlsruhe, 2003.

3 Ashby S. F., Falgout R. D.: A parallel multigrid preconditioned conjugate gradient algorithm for groundwater flow simulations, Nucl. Sci. Eng., 124(1), 145-159, 1996.

4 Babuska I., Aziz A. K.: On the angle condition in the finite element method. SIAM Journal on Numerical Analysis 13(2):214-226, April 1976.

5 Baierl R.: Natürliche konvexe Polyeder, *http://www.tfh-berlin.de/~baierl/* , 2000.

6 Baker T. J.: Automatic Mesh Generation for Complex Three-Dimensional Regions Using a Constrained Delaunay Triangulation. Engineering with Computers, 5, 161-175. 1989.

7 Bastian P.: Die Frequenzzerlegungsmethode als robustes Mehrgitterverfahren: Implementierung und Parallelisierung. Technical Report 10, Uni Erlangen, Erlangen, 1989.

8 Bastian P., Wittum G.: On robust and adaptive multi-grid methods. in: Hemker P., Wesseling P.(eds): Multigrid methods. Proceedings of the fourth European Multigrid Conference, Amsterdam, July 1993, Birkhäuser, Basel, 1994.

9 Bastian P., Birken K., Johannsen K., Lang S., Neuss N., Rentz-Reichert H., Wieners C.: *UG* - A Flexible Software Toolbox for Solving Partial Differential Equations. Computing and Visualization in Science 1, 27-40, 1997.

10 Bastian P., Birken K., Johannsen K., Lang S., Reichenberger V., Wieners C., Wittum G., Wrobel C.: A parallel software-platform for solving problems of partial differential equations, in: High performance computing in science and engineering, Krause E., Jäger W. (eds.), Springer pp 326-339, 1999.

11 BCN, Biogas Crops Betwork, *http://www.biogas-network.de/index.html*

12 Benzley S. E., Perry E., Merkley K., Clark B., Sjaardema G.: A comparison of all-hexahedral and all-tetrahedral finite element meshes for elastic and elasto-plastic analysis. Proceedings, 4th International Meshing Roundtable, 179-191, 1995.

13 BFS, Bundesamt für Strahlenschutz, Salzstock Gorleben - Als Endlager geeignet?, 1995.

14 Bill R., Fritsch D.: Grundlagen der Geo-Informationssysteme Band 2; Herbert Wichmann Verlag, Hüthig GmbH, Heidelberg, 2003.

15 Blacker T. D., Myers R. J.: Seams and Wedges in Plastering: A 3D Hexahedral Mesh Generation Algorithm. Engineering With Computers, 2, 83-93, 1993.

16 Boderke P., Schittkowski K., Wolf M., Merkle H.-P.: Modeling of diffusion and concurrent metabolism in cutaneous tissue. J. of Theor. Biol. 204, 393-407, 2000.

17 Bonanni P.: Ricreatione dell'ochico e della mente, nell'Osservatione delle Chiocciole, Rom, 1681.

18 Brakke K.: *http://www.susqu.edu/facstaff/b/brakke/kelvin/kelvin.html*

19 Bramble J. H., Zlamal M.: Triangular elements in the finite element method. Math. Comp., 24, pp 809-810, 1970.

20 Brandenberg R.: Radii of convex bodies. Ph.D. thesis, Dept. of Mathematics, TU München, 2002.

21 Brandenberg R., Rittsteiger S., Roth L.: Seminarvortrag und Abschlussbericht zum SW-Praktikum, 2004.

22 Brewer M., Diachin L., Knupp P., Leurent T., Melander D.: The Mesquite Mesh Quality Improvement Toolkit, Proceedings, 12th International Meshing Roundtable, pp.239-250, Sept. 2003. → *http://www.cs.sandia.gov/optimization/knupp/Mesquite.html*

23 Canann S. A.: Plastering and Optismoothing: New Approaches to Automated, 3D Hexahedral Mesh Generation and Mesh Smoothing. Ph.D. Dissertation, Brigham Young University, Provo, UT, 1991.

24 Carle S. F.: A transition probability-based approach to geostatistical characterization of hydrostratigraphic architecture, Ph.D. dissertation, Univ. of Calif., Davis, 238 pp., 1996.

25 Chen L., Xu L.: Optimal Delaunay triangulations. Journal of Comutational Mathematics, Vol. 22, 299-308, 2004.

26 Chen L., Sun P., Xu L.: Multilevel homotopic adaptive finite element methods for convection dominated problems. Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Volume 40, 459-468, April 2006.

27 Chen L., Sun P., Xu L.: Optimal anisotropic meshes for minimizing interpolation errors in L^p-norm. Mathematics of computation, Sept. 2006.

28 Christophers E., Kligman A. M.: Visualization of the cell layers of the stratum corneum. J. Invest. Dermatol. 42, 407-409, 1964.

29 Christophers, E.: Die epidermale Columnärstruktur - Voraussetzungen und möglicher Entstehungsmechanismus, Z. Zellforsch. 114, 441-450, Springer, 1971.

30 Cifuentes A., O., Kalbag A.: A performance study of tetrahedral and hexahedral elements in 3-D finite element structural analysis. Finite Elements in Analysis and Design, 12, 313-318, 1992.

31 Coexter H. S. M.: Regular Polytopes, Dover, New York, 1973.

32 de Cougny H. L., Shephard M. S. and Georges M. K.: Explicit Node Point Smoothing Within Octree. Technical Report 10-1990, Scientific Computation Research Center, Rensselaer Polytechnic Institute , Troy, New York, 1990.

33 Craig P. H., Roth G.: Bunker Silo Density Study Summary Report 2004-2005. Pennstate University, 2005.

34 Crank J.: The Mathematics of Diffusion. 2nd ed., Oxford University Press, Oxford, pp 49-53, 1975.

35 Cressie N.: The origins of Kriging, Mathematical Geology, v. 22, No 3, 1990.

36 Cressie N.: Statistiscs for Spatial Data, Wiley, New York, 1991.

37 Delaunay B. N.: Sur la sphere vide. In: Bulletin of Academy of Sciences of the USSR 7, Nr. 6, S. 793-800, 1934.

38 Drenckhan W.: Ireland beats Scotland by 0.3%. europhysics news, 2005.

39 Dörr R., Feuchter D.: Modellierung und Simulation von oberflächenminimalen Zellanordnungen, Berufs- und Studienorientierung an Gymnasien, BOGY-Praktikum am Lehrstuhl Technische Simulation, Universität Heidelberg, 5.-9.11.2007 .

40 Elias, P. M.: Epidermal lipids, barrier function, and desquamation. J. Invest. Dermatol. 80, 44-49, 1983.

41 Fein, E. Schneider A.: d^3f - Ein Programmpaket zur Modellierung von Dichteströmungen, 1999.

42 Fein E.: Software Package r^3t - Model for Transport and Retention in Porous Media, 2004.

43 Feuchter D.: Optimierung eines Gittergenerators zur Lösung partieller Differentialgleichungen auf allgemeinen Gebieten mit Hilfe von Mehrgitterverfahren. Diplomarbeit, Institut für Computeranwendungen der Universität Stuttgart und Fachbereich Informatik der Fachhochschule Karlsruhe, 1995.

44 Feuchter D., Stemmermann U., Wittum G: Description and generation of geometries and grids for layered domains, 17th GAMM Seminar Leipzig on Construction of Grid Generation Algorithms, *http://www.mis.mpg.de/conferences/gamm/2001/* , ISBN 3-00-007753-7, pp 29-54, 2001.

45 Feuchter D., Heppner I., Sauter S. A., Wittum G.: Bridging the gap between geometric and algebraic multi-grid methods,Vol. 6, Computing and Visualization in Science (CVS), Nr. 1, Springer-Verlag, 2003.

46 Feuchter D.: Radienberechnung im Rahmen der Geometriemodellierung und Gittergenerierung für anisotrope Schichtengebiete, Gastvortrag im WS 2003/04 bei R. Brandenberg im *Seminar über Optimierung (Computational Convexity)*, das sich u.a. mit Radien beschäftigt, Lehrstuhl Angewandte Geometrie und Diskrete Mathematik von P. Gritzmann , TU München, Nov. 2003.
→ *http://www-m9.ma.tum.de/dm/homepages/brandenberg/seminarWS0304.de.html*

47 Feuchter D., Föhner M., Handel S.: *Radiana*, ein Analysewerkzeug zur iterativen Berechnung der Inkugelradien und Umkugelradien von *UG*-Gitterelmenten. Softwarepraktikum am Lehrstuhl Technische Simulation, IWR, IfI, Universität Heidelberg, Februar, 2004.

48 Feuchter D., Heisig M., Liu Y., Wittum G.: Simulation der Arzneimitteldiffusion durch das Stratum corneum - 1. Geometrie- und Gittererzeugung mit Tetrakaidekaedern, WiR Preprint 04/04, Universität Heidelberg, 2004.

49 Feuchter D.: Suitable grids for anisotropic layered domains, WiR-BaWü Workshop on Modeling and Computation in Environmental Science MCES 04, Hohenwart Forum , Germany, October 10th - 13 th , 2004.

50 Feuchter D.,Wäcker L., Wahner R.: *Eval_Volume_Area*, ein Softwarewerkzeug zur Berechnung von Volumina und Seitenflächen von Tetrakaidekaedern zum Vergleich mit realisitschen Mikroskopierergebnissen für Korneozyten, Schülerpraktikum am Lehrstuhl Technische Simulation, IWR, IfI, Universität Heidelberg, Februar 2005.

51 Feuchter D.: 3D-geometries and grids for the numerical simulation of drug diffusion through the stratum corneum. Third M.I.T Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics, Special Session Localized Drug Delivery at the Massachusetts Institute of Technology Cambridge (MIT), MA 02139 U.S.A., June 14 - 17, 2005.

52 Feuchter D.: Appropriate Geometries and Grids for Anisotropic Layered Domains in Applications of PDE's. Workshop on Delaunay Grid Generation for Numerical Computations, WIAS, Berlin, October 13 - 14, 2005.

53 Feuchter D., Heisig M., Wittum G.: A geometry model for the simulation of drug diffusion through the stratum corneum. Computing and Visualization in Science , DOI 10.1007/s00791-006-0017-x, ISSN: 1432-9360 (Paper) 1433-0369 (Online), Pages 1 - 14, Springer, Jan. 2006.

54 Feuchter D.: Geometrie- und Gittererzeugung sowie Volumenberechnung für Horizontalsilos, 2. Netzwerktreffen des Biogas-Crops-Network , Berlin, März, 2006.

55 Field D.: Qualitative measures for initial meshes. International Journal for Numerical Methods in Engineering 47, 887-906, 2000.

56 Frasch H. F.: A random walk model of skin permeation. Risk Analysis 22, 265-276, 2002.

57 Frasch H. F., Barbero A. M.: Steady-state flux and lag time in the stratum corneum lipid pathway: Results from Finite Element Models. J. Pharm. Sci. 92, 2196-2207, 2003.

58 Freitag L. A., Olivier-Gooch C.: Tetrahedral Mesh Improvement using swapping and smoothing. International Journal for Numerical Methods in Engineering 40: 3979-4002, 1997.

59 Fried I.: Condition of Finite Element Matrices Generated from Nonuniform Meshes. AIAA Journal 10(2): 219-221, February, 1972.

60 Fritsch, P.: Dermatologie Venerologie - Grundlagen Klink Atlas. Springer Heidelberg, 2004.

61 Frolkovic P., Lampe M., Wittum G.: r^3t - software package for numerical simulations of radioactive contaminant transport in groundwater, WiR-Preprint 08/05, Heidelberg, 2005.

62 Fuchs A.: Optimierte Delaunay-Triangulierungen zur Vernetzung getrimmter NURBS-Körper, ISBN 3-8265-6757-9, Shaker Verlag Aachen, pp 55-58, 1999.

63 Fuchs A., Wittum G.: Grid Generation for Domains with Thin Layers. WiR-Preprint, 02/03, Heidelberg, 2003.

64 Fuchs, A.: *ARTE* - Grid Generator - Manual, 2004.

65 Gable C. W., Trease H., Cherry T.: Automated Grid Generation From Models of Complex Geologic Structure and Stratigraphy, Santa Barbara: National Center for Geographic Information and Analysis, proceedings paper LA-UR-96-1083, 1996.

66 Gable C., W : Meshing for Geological Applications, Los Alamos National Laboratory, → *http://meshing.lanl.gov/*

67 Garcke J.: Berechnung von Eigenwerten der stationären Schrödingergleichung mit der Kombinationstechnik. Diplomarbeit, Institut für Angewandte Mathematik (Prof. M. Griebel), Universität Bonn, 1998.

68 George P. L., Hecht F., Saltel E.: Automatic Mesh Generator with Specified Boundary, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 92, 269-288, 1991.

69 Gienger G., Knoch A., Merkle H. P.: Modelling and Numerical Computation of Drug Transport in Laminates: Model Case Evaluation of Transdermal Delivery System. J. Pharm. Sci. 75, 9-15, 1986.

70 Goldberg, M.: The Isoperimetric Problem for Polyhedra. Tohoku Mathematical Journal vol. 40, 226-236, 1935.

71 Goldberg, M.: A class of multi-symmetric polyhedra. Tohoku Mathematical Journal vol. 43, 104 - 108, 1937.

72 Golub M., Ortega J. M.: Scientific Computing - Eine Einführung in das wissenschaftliche Rechnen und Parallele Numerik. Teubner, 1996.

73 Goodyer C. E., Wood J. D., Berzins M., work with Bunge A.: Mathematical Modelling of Chemical Diffusion through Skin, HPSCHanoi 2006, 3rd International Conference in High Performance Scientific Computing Modeling, Simulation and Optimization of Complex Processes, Hanoi, Vietnam, March 6 - 10, 2006.

74 Goodyer C. E.: The effects of hexagonal corneocytes, School of Computing, University of Leeds → *http://www.comp.leeds.ac.uk/ceg/skinperiodichex.html*

75 Göppert-Meyer, M.: Über Elementarakte mit zwei Quantensprüngen, Göttingen, Dissertation, Annalen der Physik. Folge 5, Bd. 9, 273-294, 1931.

76 GRAPE, GRAphics Programming Environment, *http://www.iam.uni-bonn.de/grape/*

77 Gritzmann P., Klee V.: Computational complexity of inner and outer j-radii of polytopes in finite-dimensional normed spaces. Mathematical Programming 59, 1993.

78 Gritzmann P., Klee V.: Mathematical programming and convex geometry. In Gruber P. M. and Wills J. M. (editors), Handbook of Convex Geometry, volume A, pages 627-674, Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1993.

79 Gritzmann P., Klee V.: Computational convexity. In Goodman J. E. and O'Rourke J. (editors), Handbook of Discrete and Computational Geometry, pages 491-516, CRC Press, Boca Raton, New York, 1997.

80 Gritzmann P.: Internetbeschreibung des Forschungsschwerpunkts „Computational Convexity“ (Lehrstuhl „Angewandte Geometrie und Diskrete Mathematik“ der TU München)
→ *http://www-m9.ma.tum.de/dm/coco*

81 Guy R. H., Hadgraft J.: Prediction of Drug Disposition Kinetics in Skin and Plasma following Topical Administration. J. Pharm. Sci. 73, 883-887, 1984.

82 Guy R. H., Hadgraft J.: Physicochemical Aspects of Percutaneous Penetration and its Enhancement. Pharm. Res. 5, 753-758, 1988.

83 Habermann B., Köhler S., Sensel K.: Grundlagenforschung zur Monovergärung von Biogas-Pflanzen, Tagungsband zur Jahresversammlung des Biogas-Fachverbandes 2007.
→ *http://fachverband-biogas.de/*

84 Hackbusch W.: Multi-grid methods and applications. Springer, Berlin, Heidelberg, 1985.

85 Hackbusch W.: On first and second order box schemes. Computing 41, 277-296, 1989.

86 Hackbusch W.: Iterative Lösung großer schwachbesetzter Gleichungssysteme. Teubner, Stuttgart, 1991.

87 Hales T.: *http://www.math.pitt.edu/~thales/flyspeck*, *http://www.math.lsa.umich.edu/~hales/kepler.html*

88 Handel S.: *SurfaceMerge*, Ein Postprozessor für die Geometrie- und Gitterdateien zum Simulationssystem *UG*, Bachelor-Arbeit, Lehrstuhl Technische Simulation, IWR, IfI, Universität Heidelberg, April-Juni 2005.

89 Handel S.: Simulation des Einlagerungsprozesses in Horizontalsilos, Masterarbeit Informatik, Lehrstuhl Technische Simulation, IWR, IfI, Universität Heidelberg, SS 2007.

90 Hanke-Bourgeois M.: Grundlagen der Numerischen Mathematik und des Wissenschaftlichen Rechnens. Teubner, 2002.

91 Hebisch U.: *http://www.mathe.tu-freiberg.de/~hebisch/cafe/platonische.html*

92 Heisig M., Lieckfeldt R., Wittum G., Mazurkevich G., Lee G.: A non steady-state, biphasic model for solute permeation through stratum corneum. ICA-Berichte 95/3, Universität Stuttgart, 1995.

93 Heisig M., Lieckfeldt R., Wittum G., Mazurkevich G., Lee G.: Non-Steady-state Descriptions of Drug Permeation Through Stratum Corneum. I. The Biphasic Brick-and-Mortar Model. Pharm. Res. 13, 421-426, 1996.

94 Heisig M., Feuchter D., Liu Y., Wagner C., Wittum G.: A three-dimensional non-steady-state, biphasic model of drug permeation through stratum corneum. AAPS Annual Meeting and Exposition, Baltimore, USA, November 7-11, 2004.

95 Heisig M., Feuchter D., Nägel A., Wittum G.: Numerical simulation of drug diffusion through a three-dimensional model stratum corneum membrane. 32nd Annual Meeting &Exposition of the Controlled Release Society, Poster Session Drug Delivery Into and Across the Skin, Miami Beach, Florida, June 18 - 22, 2005.

96 Houlding S. W.: 3D geoscience modeling : computer techniques for geological characterization. Springer, 1994.
http://mmc.igeofcu.unam.mx/cursos/gest/Libros%20electronicos/Practical%20Geostatistics/geotext/geo0405.htm

97 Huurdeman B.: Numerische Simulation inkompressibler turbulenter Strömungen mit Mehrgitterverfahren auf unstrukturierten Gittern. Dissertation, Institut für Computeranwendungen der Universität Stuttgart, September, 1999.

98 Jansen K. E., Shepard M. S., Beall M. W.: On anisotropic mesh generation and quality control in complex flow problems. Tenth International Meshing Roundtable (Newport Beach, California), p. 341-349. Sandia National Laboratories, 2001.

99 Johannsen K.: *mail.joe*, eine Beschreibung des *ng*-Formats, 1998.

100 Johannsen K.: Robust Multigrid Methods for the Convection-Diffusion Equation with non-vanishing Vorticity (in German), ISBN: 3-519-02747-X, Teubner, 2000.

101 Johannsen K., Gernert H., Juling W., Wittum G.: Numerische Simulation dichtegetriebener Strömung in porösen Medien. in: RZ-News des Rechenzentrums der Universität Karlsruhe, Nummer 2000/9,10, ISSN 1432-7015, 2000.

102 Johannsen K.: Vorlesung zum Software-Praktikum Numerische Simulation, SS 2001.

103 Johannsen K.: Numerische Aspekte dichtegetriebener Strömung in porösen Medien, Habilitationsschrift der Fakultät für Mathematik und Informatik, Universität Heidelberg, 2004.

104 Johnson M.E., Blankschtein D., Langer R.: Evaluation of Solute Permeation through the Stratum corneum: Lateral Bilayer Diffusion as the Primary Transport Mechanism. J. Pharm. Sci. 86, 1162-1172, 1997.

105 Jung M., Lächelt U., Lübbert D., Feuchter D.: *Create_NxM_Quad_Grid*, ein halbautomatischer Viereckgittergenerator, der ein nicht konvexes zweidimensionales polygonales Gebiet mit möglichst gleich großen und möglichst rechtwinkligen Vierecken vernetzt, die in *n* Reihen und *m* Spalten angeordnet sein müssen. Softwarepraktikum am Lehrstuhl Technische Simulation, IWR, IfI, Universität Heidelberg, März 2005.

106 Kaiser W., Garret C.: Two-photon excitation in CaF_2:Eu^{2+}. Phys. Rev. Lett. 7, 229-231, 1961.

107 Kelvin W. T.: On the division of space with minimal partitional area. Philadelphia Magazine 24:503-514, 1887.

108 Kelvin W. T.: On the homgeneous division of space. Proc R Soc 55, 1-16, 1894.

109 Kepler J.: Strena seu de nive sexangula, „Vom sechseckigen Schnee", Neujahrsfestschrift, 1611. → *http://www.thelatinlibrary.com/kepler/strena.html*

110 Kley K. L.: Positionierungslösung für Straßenwalzen - Grundlage für eine kontinuierliche Qualitätskontrolle und Dokumentation der Verdichtungsarbeit im Asphaltbau, Dissertation, Universität Fridericiana Karlsruhe, Institut für Technologie und Mangement im Baubetrieb, Prof. F. Gehbauer, *http://www.ubka.uni-karlsruhe.de/indexer-vvv/2004/bau-geo/1* , 2004.

111 Knupp P. M.: The Fundamentals of Grid Generation, CRC Press, Boca Raton, 1993.

112 Knupp P. M.: Matrix Norms & The Condition Number: A General Framework to Improve Mesh Quality Via Node-Movement, Proceedings, 8th International Meshing Roundtable, South Lake Tahoe, CA, U.S.A., pp.13-22, October 1999.

113 Knupp P. M.: Achieving finite element mesh quality via optimization of the Jacobian matrix norm and associated quantities. Part II--A framework for volume mesh optimization and the coni. International Journal for Numerical Methods in Engineering, John Wiley & Sons, Ltd., Vol 48, Num 8, pp.1165 - 1185, July 2000.

114 Knupp P. M.: Algebraic mesh quality metrics, SIAM Journal on Scientific Computing, Vol 23, pp.193 - 218, Jan. 2002.

115 Knupp P. M.: A method for hexahedral mesh shape optimization. International Journal for Numerical Methods in Engineering, John Wiley & Sons, Ltd., Vol 58, Num 2, pp. 319-332, July 2003.

116 Knupp P. M.: → *http://www.cs.sandia.gov/optimization/knupp/* → many publications on mesh generation & optimization

117 König K.: Multiphoton microscopy in life sciences. Journal of Microscopy, Vol. 200 (Pt 2), 83-104, 2000.

118 König K., Riemann I.: High-resolution multiphoton tomography of human skin with subcellular spatial resolution and picosecond time resolution. Journal of Biomedical Optics 8. 432-439, 2003.

119 Krige D. G.: A statistical approach to some basic mine valuation problems on the Witwatersrand. J. Chem. Metal. Min. Soc. South Africa, v. 52, p. 119-139, 1951.

120 Lang S.: Parallele Numerische Simulation instationärer Probleme mit adaptiven Methoden auf unstrukturierten Gittern, Dissertation, Universität Stuttgart, 2001.

121 Lang S., Wittum G.: Large-scale density-driven flow simulations using parallel unstructured Grid adaptation and local multigrid methods. Concurrency and Computation: Practice and Experience Volume 17, Issue 11, Pages: 1415-1440, September 2005.

122 Lawson C. L.: Software for C1 Surface Interpolation, Mathematical Software III, 161-194, 1977.

123 Lee A. J., King J. R., Barrett D. A.: Percutaneous Absorption: a multiple pathway model. J. Control. Release 45, 141-151, 1997.

124 Lewis F. T.: The typical shape of polyhedral cells in vegetable parenchyma and in the restoration of the shape following cell-division. Proc. Amer. Acad. Arts Sci. 58, 537-552, 1923.

125 Lewis F. T.: The shape of cork cells: a simple demonstration that they are tetrakaidecahedral. Science 68; 625-626, 1928.

126 LGF (Landwirtschaftlich-Gärtnerische Fakultät) → Fachgebiet Agrartechnik an der Humboldt-Universität Berlin → *http://paradies.agrar.hu-berlin.de/pflanzenbau/agrartech*

127 Li T. S., McKeag R. M., Armstrong C. G.: Hexahedral Meshing Using Midpoint Subdivision and Integer Programming, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 124, 171-193, 1995.

128 Liu A., Joe B.: Relationship between tetrahedron shape measures. BIT 34, 268-287, 1994.

129 Leppmaier M.: Kugelpackungen von Kepler bis heute, Vieweg 1997.

130 Lieckfeldt R.: Bedeutung von Lipidzusammensetzung und interner Morphologie des Stratum corneums für seine Barriereeigenschaften, Universität Heidelberg, Dissertation, 1993.

131 Lieckfeldt R., Lee G. W. J., Wittum G., Heisig M.: Diffusant concentration profiles within corneocytes and lipid phase of stratum corneum. Proceed. Intern. Symp. Control. Rel. Bioact. Mater., Washington, 1993.

132 Lieckfeldt R., Villalaín J., Gómes-Fernándes J., Lee G.: Diffusivity and structural polymorphism in some model stratum corneum lipid systems. Biochem. Biophys. Acta 1151, 182-188, 1993.

133 Limnophysik, Arbeitsgruppe an der Fakultät für Geoökologie der Universität Heidelberg. → *http://www.iup.uni-heidelberg.de/institut/forschung/groups/limno/*

134 Lo S. H.: Volume Discretization into Tetrahedra - I. Verification and Orientation of Boundary Surfaces. Computers and Structures, 39(5), 493-500, 1991.

135 Lo S. H.: Volume Discretization into Tetrahedra - II. 3D Triangulation by Advancing Front Approach. Computers and Structures, 39(5), 501-511, 1991.

136 Lohner R., Parikh P., Gumbert C.: Interactive Generation of Unstructured Grids for Three Dimensional Problems. Numerical Grid Generation in Computational Fluid Mechanics '88, Pineridge Press, 687-697, 1988.

137 Lohner R.: Progress in Grid Generation via the Advancing Front Technique. Engineering with Computers, 12, 186-210, 1996.

138 Manitz R., Lucht W., Strehmel K., Weiner R., Neubert R.: On Mathematical Modeling of Dermal and Transdermal Drug Delivery. J. Pharm. Sci. 87, 873-879, 1998.

139 Marvin J. W.: The shape of compressed lead-shot, etc. . Amer. J. Bot. 26, 280-288, Cell-shape studies in the pith of Eupatorium, ibid. 487-504, 1939.

140 Matheron G.: Principles of geostatisctics; Economic Geology, 58: 1246-1266, 1963.

141 Menton D.N., Eisen A.Z.: Structure and Organization of Mammalian Stratum corneum. J. Ultrastructure Research 35, 247-264, 1971.

142 Menton D. N.: A Minimum-surface Mechanism to Account for the Organization of Cells into Columns in the Mammalian Epidermis. Am. J. Anat., 145: 1-22. , 1975.

143 Menton D. N.: A liquid film model of tetrakaidecahedral packing to account for the establishment of epidermal cell columns, The Journal of Investigative Dermatology, Vol. 66, No. 5, 283-291, 1976.

144 Min W.: Generating Hexahedron-Dominant Mesh Based on Shrinking-Mapping Method. Proceedings, 6th International Meshing Roundtable, 171-182, 1997.

145 Muck R., Holmes B.: Factors affecting bunker silo densities. Applied Agriculture in Engineering 16(6): 613-619, 2000.

146 Mues V.: GIS-gestützte Regionalisierung von Klima- und Depositionsdaten in Niedersachsen. Dissertation der Fak. für Forstwissenschaften und Waldökologie, Georg-August-Universität Göttingen, 2000.

147 Müller-Hannemann M.: Hexahedral mesh generation by successive dual cycle elimination, Engineering with Computers 15, 269–279, 1999.

148 Müller-Hannemann M.: Recent Advances in Hexahedral Mesh Generation. Progress in Engineering Computational Technology, Edited by B.H.V. Topping and C.A. Mota Soares, Saxe-Coburg Publications, pp. 19-42, 2004.

149 Murdoch P., Benzley S. E.: The Spatial Twist Continuum. Proceedings, 4th International Meshing Roundtable, 243-251, 1995.

150 Nägel A., Hansen S., Neumann D., Lehr C.-M., Schäfer U. F., Wittum G., Heisig M.: In-silico model of skin penetration based on experimentally determined input parameters. Part II: Mathematical modelling of 5 in-vitro diffusion experiments. Identification of critical input parameters, Article in press, Eur. J. Pharm. Biopharm., doi:10.1016/j.ejpb.2007.05.018, 2007.

151 Nägel A., Algebraische Mehrgitterverfahren, Dissertation , Universität Heidelberg, in Vorbereitung

152 Naumann K.: Eine hydrogeologische Systemanalyse von Süßwasserlinsen als Grundlage einer umweltschonenden Grundwasserbewirtschaftung, Dissertation, TU Braunschweig, 2005.

153 NGEE, Netzwerke Grundlagenforschung erneuerbare Energien und rationelle Energieanwendung, → *http://ptjapps.fz-juelich.de/ngee/home*

154 Norlen L., Emilson A., Forslind B.: Stratum corneum swelling: Biophysical and computer assisted quantitative assessments. Arch. Dermatol. Res. 289, 506-513, 1997.

155 Oosterom A. V., Strackee J.: The solid angle of a plane triangle. In IEEE Transactions on Biomedical Engineering, vol. 30, 125-126, 1983.

156 Owen S. J.: Non-Simplicial Unstructured Mesh Generation. Dissertation, Department of Civil and Environmental Engineering, Carnegie Mellon University, April 1999.

157 Owen S. J.:Meshing Research Corner. *http://www.andrew.cmu.edu/user/sowen/mesh.html*

158 Paoletti S.: Polyhedral Mesh Optimization Using the Interpolation Tensor. 11th International Meshing Roundtable, Ithaca, New York, USA, September 15-18, 2002.

159 Pebay P.: Planar Quadrangle Quality Measures: Is There Really A Choice ? 11th International Meshing Roundtable, Ithaca, New York, USA, September 15-18, 2002.

160 Peck K.D., Higuchi W.I.: Characterization of the Passive Transdermal Diffusional Route of Polar/Ionic Permeants. in "Mechanisms of Transdermal Drug Delivery", Edited by R.O. Potts and R.H. Guy, Marcel Dekker, Inc., New York, 1997.

161 Peuckert C.: Anwendung von Femtosekunden-Laserpulsen im NIR-Spektralbereich für Untersuchungen an humaner Haut; Diplomarbeit Friedrich-Schiller Universität Jena, 2001.

162 Plateau Joseph., A., F.: Statique expérimentale et théorique des liquides soumis aux seules forces moléculaires. Gauthier-Villars, Paris, 1873.

163 Plewig G., Marples R.: Regional differences of cell sizes in the human stratum corneum. Part I. The Journal of Investigative Dermatology, Vol. 54, No.1, 13-18, The Williams & Wilkins Co, 1970.

164 *PORTA*, POlyhedron Representation Transformation Algorithm, Softwaresystem, → *http://www.zib.de/Optimization/Software/Porta/*

165 Preparata F. P., Shamos M. I.: Computational Geometry: An Introduction. Springer, New–York, 6. corr. print., Springer 1996.

166 Press F., Siever R.: Allgemeine Geologie - Einführung in das System Erde; Spektrum Heidelberg, 2001.

167 Press W., Teukolsky S., Vetterling W., Flannery B., Numerical recipes in C, Cambridge University Press, 1992.

168 Price M. A., Armstrong C. G.: Hexahedral Mesh Generation by Medial Surface Subdivision: Part I. International Journal for Numerical Methods in Engineering. 38(19), 3335-3359, 1995.

169 Price M. A., Armstrong C. G.: Hexahedral Mesh Generation by Medial Surface Subdivision: Part II. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 40, 111-136, 1997.

170 *Qhull*, Softwaresystem, → *http://www.qhull.org*

171 Richter T., Müller J. H., Schwarz U. D., Wepf R., Wiesendanger R.: Investigation of the swelling of human skin cells in liquid media by tapping mode scanning force microscopy. Appl. Phys. A 72, 125-128, 2001.

172 Richter T., Peuckert C., Sattler M., König K., Riemann I., Hintze U., Wittern K.-P., Wiesendanger R., Wepf R.: Dead but Highly Dynamic - The Stratum corneum is Divided into Three Hydration Zones. Skin Pharmacol Physiol. 17, 246-257, 2004.

173 von Rohden C., Hauser A., Wunderle K., Ilmberger J., Wittum G., Roth K.: Lake Dynamics: Observation and High-Resolution Numerical Simulation, In Reactive Flows, Diffusion and Transport: 599-619, Springer, 2007.

174 Schätzlein A., Cevc G.: Non-uniform cellular packing of the stratum corneum and permeability barrier function of intact skin: a high-resolution confocal laser scanning microscopy study using highly deformable vesicles (Transfersomes). Br. J. Dermatol. 138, 583-592, 1998.

175 Schelkes K. et al.: Modelluntersuchungen zur Bewegung des Grundwassers bei vom Salzgehalt abhängiger Wasserdichte - Fallstudien und Modellvalidierung im Hinblick auf die Langzeitsicherheit von Endlagern für radioaktive Abfälle. Abschlussbericht. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Archiv-Nr. 114 249, Dezember 1995.
http://www.bgr.bund.de/cln_029/nn_670864/DE/Themen/Wasser/Projekte/Berat__Info/Salzwasser/salzwasser__projektbeschr.html

176 Schmauder M.: Diffusion through the Human Skin - An Unexpected Application of a PDE-Black-Box-Solver. ZAMM 75, 707-708, 1995.

177 Schneider A., Birthler H.: Modellrechnungen zur großräumigen dichteabhängigen Grundwasserbewegung. GRS-191, ISBN 3-931995-59-3, 2004.

178 Schneider A.: GRS Jahresbericht 2004/2005, Kapitel 6.2 Modellrechnungen zur großräumigen dichteabhängigen Grundwasserbewegung mit d^3f, 2005.

179 Schneiders R.: A Grid-Based Algorithm for the Generation of Hexahedral Element Meshes. Engineering With Computers, 12, 168-177, 1996.

180 Schneiders R.: An Algorithm for the Generation of Hexahedral Element Meshes Based On An Octree Technique. Proceedings, 6th International Meshing Roundtable,195-196, 1997.

181 Schneiders R.: Mesh Generation & Grid Generation on the Web.
→ *http://www-users.informatik.rwth-aachen.de/~roberts/meshgeneration.html*

182 Schöberl J.: *NETGEN* - An advancing front 2D/3D-mesh generator based on abstract rules. Computing and Visualization in Science, 1(1), pages 41-52, 1997.

183 Schwarz H. R.: Numerische Mathematik. Teubner, 2004.

184 *SeDuMi*, Softwaresystem, → *http://sedumi.mcmaster.ca/*

185 Seliger A.: Methoden zur Erfassung des regionalen Wasserhaushalts im niedersächsischen Küstengebiet am Beispiel der Insel Langeoog, Diplomarbeit, Technische Universität Braunschweig, Fachbereich Physik und Geowissenschaften, 2002.

186 Shephard M. S., Georges M. K.: Three-Dimensional Mesh Generation by Finite Octree Technique, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 32, 709-749, 1991.

187 Shewchuk J.: What is a Good Linear Element? Interpolation, Conditioning and Quality Measures. Proceedings, 11th International Meshing Roundtable, Sandia National Laboratories, pp.115-126, September 15-18, 2002.

188 Shewchuk J.: *http://www.cs.cmu.edu/~jrs/jrspapers.html*

189 Shewchuk J.: What is a Good Linear Finite Element? Interpolation, Conditioning, Anisotropy and Quality Measures, Preprint, 2002.

190 Springer M.: Spektrum der Wissenschaft, Seite 13, September 2003.

191 Stemmermann U.: Modellierung von dreidimensionalen Schichtengeometrien und Erzeugung einer Schnittstelle zum Numeriksimulationssystem *UG*, Diplomarbeit am Lehrstuhl Technische Simulation, IWR, IfI, Universität Heidelberg, 2001.

192 Suhara J., Fukuda J.: Automatic mesh generation for finite element analysis. In Advances in Computational Methods in Structural Mechanics and Design, Oden J. T., Clough R. W., Yamamoto Y., (eds.), University of Alabama Press: Tuscaloosa, AL, 607-624, 1972.

193 Summ G.: Quantitative Interpolationsfehlerabschätzungen für Triangulierungen mit allgemeinen Tetraeder- oder Hexaederelementen, Diplomarbeit am Institut für Angewandte Mathematik der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, 1996.

194 *Surfer* User's Guide, Golden Software, Inc., 809 14th Street, Golden,Colorado 80401-1866, USA .

195 Synge J. L.: The hypercircle in mathematical physics. Cambridge University Press, New York, 1957.

196 Talreja P. S., Kasting G. B., Kleene N. K., Pickens W. L., Wang T.-F.: Visualization of the Lipid Barrier and Measurement of Lipid Pathlength in Human Stratum Corneum. AAPS PharmSci. 3(2), 1-9, 2001.

197 Tautges T. J., Blacker T., Mitchell S.: The Whisker-Weaving Algorithm: A Connectivity Based Method for Constructing All-Hexahedral Finite Element Meshes. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 39, 3327-3349, 1996.

198 Thompson D'A. W.: Über Wachstum und Form. Orginalausg.: „On Growth and Form". In gekürzter Fassung neu herausgegeben von Bonner J. T., Suhrkamp, 1983.

199 Thomson W. = Lord Kelvin: On the division of space with minimum partional area. Phil- Mag. 24, 503 (1887)

200 Tompson A. F. B., Rosenberg N. D., Bosl W. J., Falgout R. D., Smith S. G., Shumaker D. E., Ashby S. F. : On the Use of High-Performance Simulation in the Management of Groundwater Resources in Large Aquifer Systems. 27th IAHR Congress, San Francisco CA, August 10-15, 1997.

201 Tompson A. F. B., Carle S. F., Rosenberg N. D., Maxwell R. M.: Analysis of groundwater migration from artificial recharge in a large urban aquifer: A simulation perspective. Water Resources Research, Vol. 35, No. 10, pages 2981-2998, Oct. 1999.

202 Tuchinsky P., Clark B. W.: The Hex-Tet, Hex-Dominant Automesher: An Interim Progress Report. Proceedings, 6th International Meshing Roundtable, 183-193, 1997.

203 Tyson J., Graves R., Buckmaster D.: Horizontal Silos, College of Agricultural Sciences, Agricultural and Biological Engineering, Pennsylvania State University, 1996.

204 Voßen C.: Passive Signalleitung in Nervenzellen, Universität Heidelberg, Diplomarbeit, 2006.

205 *VVS* (Verdichtungs-Visualisierungs-System), Softwaresystem zur Simulation des Einlagerungsprozesses von Horizontalsilos. Konzeption und Beginn der Realisierung durch Föhner M., Handel S., Lenz H. und Feuchter D. im Softwarepraktikum für Fortgeschrittene im Rahmen des Bachelor- und Masterstudiengangs "Anwendungsorientierte Informatik", 15.05. - 06.10.2006.

206 Wagner C.: Dreidimensionale digitale Rekonstruktion des humanen Stratum corneum der Haut in Kombination mit substantieller Diffusion durch das Stratum corneum, Tierärztliche Hochschule Hannover, Anatomisches Institut , Prof. Dr. W. Meyer, 2007.

207 Wahner R.: *Complex Layered Domain Modeler*, Ein 3D Gitter- und Geometriegenerator für das Numeriksimulationssystem *UG*, Diplomarbeit, Lehrstuhl Technische Simulation, IWR, IfI, Universität Heidelberg, SS 2005.

208 Waldron S.: The error in linear interpolation at the vertices of a simplex. SIAM Journal on Numerical Analysis 35(3), 1191-1200, 1998.

209 Warner RR, Stone KJ, Boissy YL: Hydration disrupts human stratum corneum ultrastructure. J. Invest. Dermatol, 120, 275-284, 2003.

210 Watson D., F.: Computing the Delaunay Tesselation with Application to Voronoi Polytopes. The Computer Journal, 24(2) 167-172, 1981.

211 Weaire D., Phelan R.: A counterexample to Kelvin‘s conjecture on minimal surfaces, Phil. Mag. Lett. vol. 69, 107-110, 1994.

212 Weaire D.: The Kelvin Problem: Foam structures of minimal Surface Area, Taylor & Francis, London 1997.

213 Weaire D., Hutzler S.: The Physics of Foams. ISBN 0-19-850551-5978-0-19-850551-8, Clarendon Press, Oxford, 1999.

214 Weatherill N. P., Hassan O.: Efficient Three-dimensional Delaunay Triangulation with Automatic Point Creation and Imposed Boundary Constraints. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 37, 2005-2039, 1994.

215 Weiler F., Schindler R., Schneiders R.: Automatic Geometry-Adaptive Generation of Quadrilateral and Hexahedral Element Meshes for the FEM. Proceedings, 5th International Conference on Numerical Grid Generation in Computational Field Simmulations, Mississippi State University, 689-697, 1996.

216 Wesseling P.: An introduction to multigrid methods. John Wiley & Sons, Chichester, 1991.

217 Wilschut A., ten Berge W. F., Robinson P. J., McKone, T. E.: Estimating skin permeation. The validation of five mathematical skin permeation models. Chemosphere 30, 1275-1296, 1995.

218 Wilson F. W., Goodrich R. K., Spratte W.: Lawson‘s triangulation is nearly optimal for controlling error bounds. Journal on Numerical Analysis, ISSN:0036-1429, SIAM 1990; 27: 190-197, 1990.

219 WIPP, Waste Isolation Pilot Plant, *http://www.wipp.energy.gov/*

220 Wittum G.: On the robustness of ILU-smoothing. SIAM J. Sci. Stat. Comput. 10, 699-717, 1989.

221 Wittum G.: Mehrgitterverfahren. Spektrum der Wissenschaft, 78-90, April 1990.

222 Wittum G.: Filternde Zerlegungen – Schnelle Löser für große Gleichungssysteme. Teubner Skripten zur Numerik Band 1, Teubner, Stuttgart, 1992.

223 Wolf M.: Mathematisch-physikalische Berechnungs- und Simulationsmodelle zur Beschreibung und Entwicklung therapeutischer Systeme. Habilitationsschrift, Rheinische Friedrich-Schiller-Universität zu Bonn, 1993.

224 Wolff J., Müller H.: Pilotprojekt „Ermittlung einer schonenden Bewirtschaftung der Süßwasserlinsen auf den osfrisischen Inseln am Beispiel der Insel Norderney". Endbericht, TU Braunschweig, Mai 1998.

225 *Xpress^{MP}*, Software Suite, → *http://www.dashoptimization.com*

226 Yerry M. A., Shephard M. S.: Three-Dimensional Mesh Generation by Modified Octree Technique, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 20, p. 1965-1990, 1984.

227 Yu B., Dong C.-Y., So P. T. C., Blankschtein D., Langer R.: In vitro Visualization and Quantification of Oleic Acid-induced changes in Transdermal Transport Using Two-photon Fluorescence Microscopy. J. Invest. Dermatol. 117, 16-25, 2001.

228 Yu B., Kim K. H., So P. T. C., Blankschtein D., Langer R.: Topographic Heterogeneity in Transdermal Transport revealed by high-speed Two-photon Fluorescence Microscopy. Determination of representative skin sample sizes. J. Invest. Dermatol. 118, 1085-1088, 2002.

229 Yu B., Kim K. H., So P. T. C., Blankschtein D., Langer R.: Visualization of Oleic Acid induced Transdermal Diffusion Pathways Using Two-photon Fluorescence Microscopy. J. Invest. Dermatol. 120, 448-455 ,2003.

230 Ziherl P., Kamien D.: Maximizing entropy by minimizing area: towards a new principle of self-organization. Department of Physics and Astronomy, University of Pennsylvania, Philadelphia, 2001.