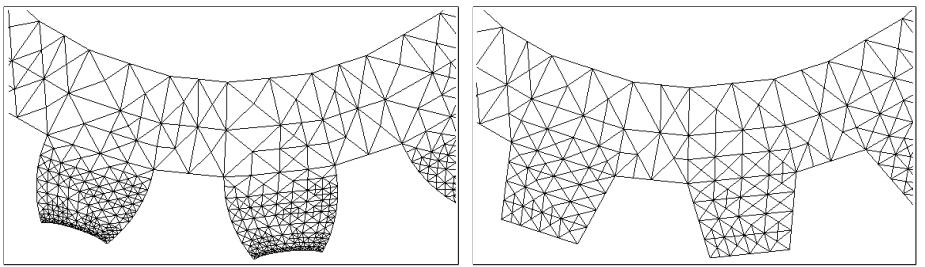
Finite Elemente Methoden
(aus der Sicht des Mathematikers)



Alfred Schmidt

Universität Bremen

Zentrum für Technomathematik

Übersicht:
Partielle Differentialgleichungen, Approximation der Lösung,
Finite Elemente, lineare und höhere Ansatzfunktionen, Dünn besetzte (lineare) Gleichungssysteme,
Fehlerabschätzungen, Fehlerindikatoren und adaptive Methoden

Partielle Differentialgleichungen

Partielle Differentialgleichungen 2-ter Ordnung:

Elliptische Gleichungen (stationär), z.B. Poisson-Problem (skalar)

$$-\Delta u = f \quad \text{in } \Omega, \quad n \cdot \nabla u = g_N \text{ auf } \Gamma_N \subset \partial\Omega, \; u = g_D \text{ auf } \Gamma_D$$

oder (lineare) Elastizität (vektorwertig)

$$-\operatorname{div} \sigma = \vec{f} \quad \text{in } \Omega, \quad \sigma \cdot n = \vec{g}_N \text{ auf } \Gamma_N \subset \partial\Omega, \; u = g_D \text{ auf } \Gamma_D$$

Parabolische Gleichungen, z.B. Wärmeleitungsgleichung:

$$T_t - \operatorname{div}(\kappa \nabla T) = f \quad \text{in } \Omega \times (0, t_{end})$$

mit Anfangs- und Randbedingungen

Hyperbolische Gleichungen, z.B. zeitabhängige Elastizität:

$$\ddot{u} - \operatorname{div} \sigma = \vec{f} \quad \text{in } \Omega \times (0, t_{end}),$$

mit Anfangs- und Randbedingungen

Methoden zur Approximation der Lösungen von partiellen Differentialgleichungen

Finite-Differenzen-Methode:

Approximation von Werten der Lösung in einzelnen Punkten,
Ersetzen der Ableitungen durch Differenzenquotienten.

Finite-Elemente-Methoden:

Approximation der gesamten Lösungsfunktion durch FE-Funktion,

Vermeiden von höheren Ableitungen durch schwache Formulierung

Finite-Volumen-Methoden:

Approximation von lokalen Mittelwerten und Flüssen,
für hyperbolische Probleme 1-ter Ordnung (Erhaltungsgleichungen)
oder konvektionsdominierte Probleme

Randelemente-Methoden:

Darstellung der Lösung durch Randpotentiale u.ä.,
dadurch Einschränkung der Berechnungen auf den Gebietsrand möglich,
Auswertung im Gebietsinneren erfordert Berechnung der Potentialwerte.

Trick: Schwache Formulierung vermeidet höhere Ableitungen:
Beispiel Poisson-Problem:

$$-\Delta u = f \quad \text{in } \Omega, \quad n \cdot \nabla u = g_N \ \text{ auf } \Gamma_N, \quad u = g_D \ \text{ auf } \Gamma_D$$

Multiplikation mit „Testfunktion“ v und Integration über Ω

$$\int_\Omega (-\Delta u) v = \int_\Omega f v \quad \text{für alle } v$$

Partielle Integration führt zu

$$\int_\Omega \nabla u \nabla v = \int_\Omega f v + \int_{\Gamma_N} g_N v \quad \text{für alle } v \text{ mit } v = 0 \text{ auf } \Gamma_D$$

Hier treten nur noch erste Ableitungen auf
(und diese müssen nur integrierbar sein, Ableitungen können springen)

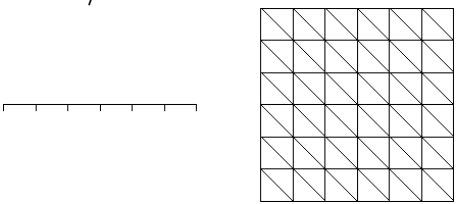
Diese (schwache) Formulierung ist
auch für nur stückweise glatte Funktionen OK!

Finite Elemente

Finite Elemente Ansatz-Räume X_h:

Unterteilung des Gebiets Ω in Gitterelemente $T \in \mathcal{T}_h$

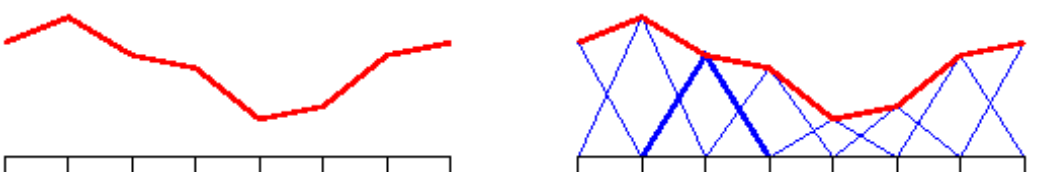
1D: Intervalle, 2D: Dreiecke/Vierecke, 3D: Tetraeder/Prismen/Quader



Auf jedem Gitterelement z. B. polynomialer Ansatz
(mindestens $\mathbb{P}_1$, eventuell höher), stetig über Elementgrenzen.

1D: Polygonzug = Überlagerung von Basisfunktionen φ_j

$$u_h(x) = \sum_{j=1}^{N} u_j \varphi_j(x)$$



Obiger Ansatz jetzt in X_h: Gesucht ist $u_h \in X_h$ mit

$$\int_\Omega \nabla u_h \nabla v_h = \int_\Omega f v_h + \int_{\Gamma_N} g_N v_h \quad \text{für alle } v_h \in X_h$$

Lösung dieses Problems ist (bei symmetr. Operatoren) äquivalent zur Minimierung des zugehörigen Energiefunktionals im endlichdimensionalen Teilraum X_h.

Ansatz $u_h(x) = \sum_{j=1}^{N} u_j \varphi_j(x)$ führt auf lineares Gleichungssystem:

$$\sum_{j=1}^{N} \left(\int_\Omega \nabla \varphi_j \nabla \varphi_i \right) u_j = \int_\Omega f \varphi_i + \int_{\Gamma_N} g_N \varphi_i, \quad i = 1, \ldots, N$$

oder

$$\sum_{j=1}^{N} A_{ij} u_j = b_i, \quad i = 1, \ldots, N$$

Elementmatrizen:

Da $\Omega = \bigcup_{T \in \mathcal{T}_h} T$ lässt sich das Gebietsintegral aufteilen:

$$\int_\Omega \nabla\varphi_j \nabla\varphi_i \, dx = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \int_T \nabla\varphi_j \nabla\varphi_i \, dx$$

Nur für wenige Indizes i, j sind diese Elementintegrale nicht Null, diese entsprechenden Integrale bilden die Elementmatrix

$$(A_T)_{i,j} = \int_T \nabla\varphi_j \nabla\varphi_i, \quad i, j \in N_T.$$

Die Gesamtmatrix ergibt sich dann als Summe aller Elementmatrizen:

$$A = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} A_T.$$

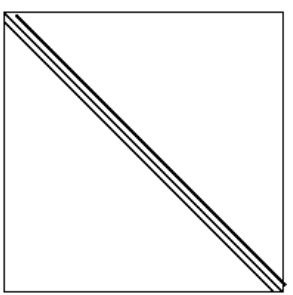
Zugehörige Gleichungssysteme

Matrix (A_{ij}) ist groß (bis $10^6 \times 10^6$), aber nur dünn besetzt:
nur wenige Matrixelemente pro Zeile sind ungleich Null
(weil Träger der Basisfunktionen meist leeren Durchschnitt haben)

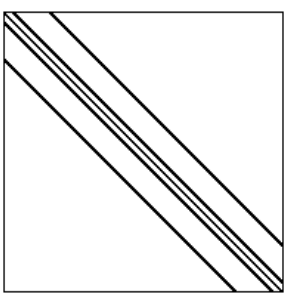
Für $\mathbb{P}_1$-Elemente:
1D: $n-1$ Intervalle, Matrix $n \times n$: 3 Einträge pro Zeile
2D: $2(n-1)^2$ Dreiecke, Matrix $n^2 \times n^2$: max. 9 Einträge pro Zeile
3D: $6(n-1)^3$ Tetraeder, Matrix $n^3 \times n^3$: max. 27 Einträge/Zeile

Achtung:
Bandbreite der Matrix ist bei Standard-Nummerierung relativ gross:

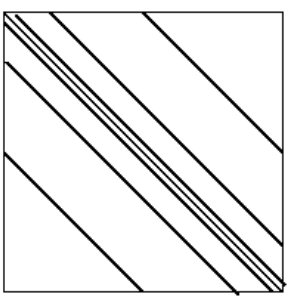
1D: 2



2D: $\approx n$



3D: $\approx n^2$



Lösung des linearen Gleichungssystems:

- direkte Löser (Gauss-Algorithmus, LR-Zerlegung):
  für $N \times N$ Matrix $\approx N^3$ Operationen,
  bei Bandbreite M noch $\approx N \cdot M^2$ Operationen.
  $\Rightarrow$ Bandbreitenminimierung!
- iterative Löser (CG, GMRES, ...):
  $\approx N$ Operationen pro Iteration (1 Matrix-Vektor-Multiplikation)
  konvergieren schnell nur bei guter Vorkonditionierung!
- schnellste Löser: Mehrgitter-Algorithmen
  $\approx N$ Operationen zur (approx.) Lösung des Systems,
  optimal bei „einfachen“ Problemen,
  leider bisher nicht universell einsetzbar

SYSWELD benutzt direkte und iterative Löser.

Approximations-Fehler

Numerische Verfahren können die exakte Lösung nur approximieren

Standard-Fehlerabschätzungen für Finite-Elemente Verfahren:

Bei Verwendung von $\mathbb{P}_k$-Elementen (Polynome vom Grad $\leq k$)

$$\left(\int_\Omega |\nabla u - \nabla u_h|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq c \cdot h^k \left(\int_\Omega |D^{k+1} u|^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

und

$$\left(\int_\Omega |u - u_h|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq c \cdot h^{k+1} \left(\int_\Omega |D^{k+1} u|^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

falls die Lösung u glatt genug ist und die Methode mit $\mathbb{P}_k$-Elementen anwendbar ist.

Dabei ist h die (maximale) Gitterweite,
d.h. Durchmesser des größten Gitterelements
(Abschätzung für gleichmäßig verfeinerte Gitter, $h \approx \frac{1}{n}$)

Lineare oder höhere Elemente ???

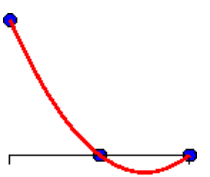
Vorteile höherer Elemente:

bei feinem Gitter deutlich kleinerer Fehler, bessere Approximation
viel schnellere Konvergenz des Fehlers gegen Null
(asymptotisch) viel weniger Rechenaufwand bei gleichem Fehler

Nachteile höherer Elemente:

bei gleichem Gitter größere Matrix
mehr Matrixelemente pro Zeile ungleich Null
nicht immer anwendbar

Höhere Elemente erhalten das Vorzeichen nicht unbedingt:
auch wenn die Werte in allen Knotenpunkten ≥ 0 sind,
hat das Polynom eventuell negative Werte



Spezielle Elemente

Für besondere Anwendungen / Differentialoperatoren sind eine Vielzahl spezieller Elemente in Gebrauch, die nicht einfach alle Polynome vom Grad $\leq k$, sondern typischerweise besondere Teilmengen davon darstellen.

So gibt es in ABAQUS z. B. spezielle Mechanik-„Elemente“ für

- Scheiben, Platten, Balken
- 2D ebener Verzerrungszustand / *plane strain*
- 2D ebener Spannungszustand / *plane stress*
- ...

„Gemischte“ Elasitizitäts-Formulierungen approximieren nicht nur die Verschiebungen, sondern auch direkt die Spannungen. Zur stabilen Diskretisierung sind spezielle Element-Paare notwendig.

Auch für Strömungsprobleme (Navier-Stokes-Gleichungen etc.) gibt es spezielle Kombinationselemente für Druck und Geschwindigkeit.

Lokale Verfeinerung, Adaptive Methoden

Im wesentlichen gilt eine entsprechende lokale Fehlerabschätzung:

$$\|\nabla u - \nabla u_h\|_{lokal} \approx c \cdot (\text{lokale Gitterweite})^k \cdot \|D^{k+1} u\|_{lokal}$$

Bei Problemen mit lokalen Effekten (Randschichten, etc) ist es sinnvoll, das Gitter auch lokal zu verfeinern!

Quasi-optimale Gitter: überall etwa gleich große lokale Fehler

Wenn a-priori Informationen über das Verhalten der Lösung bekannt sind, sollten diese zur lokalen Anpassung der Gitterweite verwendet werden! Insbesondere in 3D !!!

Achtung: für $\mathbb{P}_1$ Elemente ist die Größe der 2-ten Ableitungen wichtig, nicht der Betrag des Gradienten!
(lineare Funktionen können exakt approximiert werden)

Adaptive Methoden:

Schätzung des Fehlers aus den bekannten Daten des Problems und der numerischen Lösung. Fehlerindikatoren sind z.B. lokales Residuum und Sprünge der Flüsse über Elementgrenzen

Für das Poisson-Problem $-\Delta u = f$ z.B.

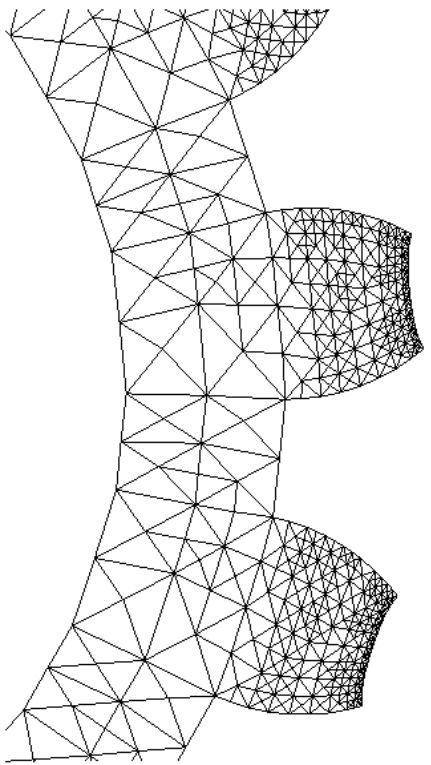
$$\eta_T^2 = c_1\, h_T^2 \int_T |f + \Delta u_h|^2 + c_2\, h_T \int_{\partial T} |[n \cdot \nabla u_h]|^2,$$

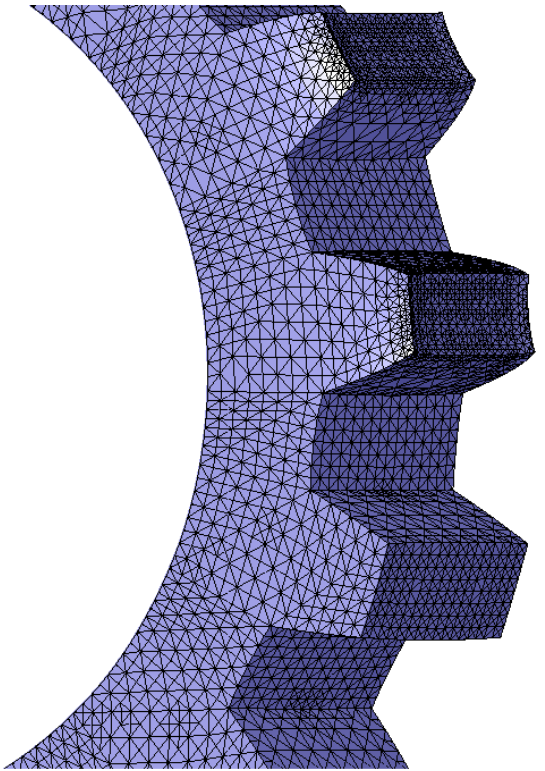
dabei ist h_T der Durchmesser des Gitterelements T und $[\cdot]$ bezeichnet den Sprung über den Rand des Elements.

Man kann beweisen: $$\left(\int_\Omega |\nabla u - \nabla u_h|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq \left(\sum_{T \in \mathcal{T}} \eta_T^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

Adaptive Methode: Lokale Verfeinerung aller Gitterelemente, deren Fehlerindikatoren gross sind

Beispiel: lokal verfeinerte Dreiecks- und Tetraedergitter





Adaptive Methoden können bei vorgegebener Fehlertoleranz automatisch ein quasi-optimales Gitter erzeugen, so dass der Fehler bei etwa minimalem Rechenaufwand unterhalb der Toleranz liegt.

(so einfach leider nur für „relativ einfache“ Probleme,
aber die Mathematiker (und andere) arbeiten dran...)

Auf jeden Fall sollte man versuchen den Fehler eigener Rechnungen abzuschätzen, zum Beispiel durch (Test-) Rechnungen auf verschieden feinen Gittern!

Besser noch: Test des Programms auf verschiedenen Gittern anhand bekannter exakter Lösungen (eventuell durch speziell konstruierte rechte Seite!)