Einführung in die Finite-Elemente-Methode

Christopher Albert

27. April 2017

Poisson-Gleichung als Beispiel für ein Randwertproblem

Mit der Finite-Elemente-Methode (FEM) lassen sich Randwertprobleme partieller Differentialgleichungen (PDEs) auf nahezu beliebig geformten, endlichen Geometrien numerisch lösen. Als Beispiel betrachten wir die Potentialgleichung (Poissongleichung, per Konvention mit negativem Vorzeichen) in zwei Dimensionen $\boldsymbol{r} = (x, y)$,

$$-\Delta u(\mathbf{r}) = q(\mathbf{r}). \tag{1}$$

Sie tritt z.B. in Elektrostatik und Elastizitätstheorie auf und besitzt typische Merkmale eines Randwertproblems:

- Elliptische partielle Differentialgleichung 2. Ordnung
- Mögliche Randbedingungen (pro Randstück immer nur eine auf einmal):
  - 1. Randwertproblem (Dirichlet): Die Werte $u(\mathbf{r})$ werden am Rand vorgegeben. In der Elektrostatik (Potential $u(\mathbf{r}) := \phi(\mathbf{r})$ und $q(\mathbf{r}) = -\rho(\mathbf{r})/\varepsilon$) wird am Rand eine Spannung (Randpotential) angelegt.
  - 2. Randwertproblem (Neumann): Die Normalableitungen $\frac{\partial u(\mathbf{r})}{\partial n} = \mathbf{n} \cdot \nabla u(\mathbf{r})$ werden vorgegeben. In der Elektrostatik entspricht das der Normalkomponente des elektrischen Feldes $\mathbf{E} = -\nabla\phi$ und damit einer Randladungsdichte.
  - Gemischtes Randwertproblem (Robin): Eine Linearkombination aus Dirichlet- und Neumann-Problem $a(\mathbf{r})u(\mathbf{r}) + b(\mathbf{r})\frac{\partial u(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{n}} = c(\mathbf{r})$ wird am Rand vorgegeben.

Schwache Form der Poisson-Gleichung

Für die numerische Behandlung muss die Gleichung in Integralform gebracht werden. Das geschieht, indem man in (1) alles auf die linke Seite bringt, mit einer beliebigen Testfunktion $v(\mathbf{r})$ multipliziert und über das betrachtete Gebiet Ω integriert,

$$-\int_\Omega v(\boldsymbol{r})\Delta u(\mathbf{r})\, d\Omega - \int_\Omega v(\boldsymbol{r})q(\mathbf{r})\, d\Omega = 0. \tag{2}$$

Das 2-dimensionale Volumenelement ist hier $d\Omega = dx\, dy$. Da wir $v(\boldsymbol{r})$ beliebig wählen können, ist es naheliegend, dass diese Form äquivalent zu Gleichung (1) ist. Das kann unter entsprechenden Voraussetzungen an die Funktionen u und v bewiesen werden, wobei auf die mathematische Literatur zu dem Thema verwiesen sei. Die Anwendung der ersten Greenschen Identität (mehrdimensionale partielle Integration),

$$\int_\Omega v\Delta u(\mathbf{r}) + \nabla v(\mathbf{r}) \cdot \nabla u(\mathbf{r})\, d\Omega = \int_\Gamma v(\mathbf{r})\frac{\partial u(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{n}}\, d\Gamma \tag{3}$$

führt zur Reduktion auf 1. Ableitungen und zur automatischen Berücksichtigung von Neumann-Randwerten auf dem Rand des Gebietes Γ. Die schwache Form kann nach Vorzeichenwechsel schließlich als

$$\int_\Omega \nabla v(\mathbf{r}) \cdot \nabla u(\mathbf{r})\, d\Omega - \int_\Omega v(\boldsymbol{r})q(\mathbf{r})\, d\Omega + \int_\Gamma v(\mathbf{r})\frac{\partial u(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{n}}\, d\Gamma = 0 \tag{4}$$

geschrieben werden. Wird der letzte Term nicht angegeben, entspricht die schwache Form einem homogenen Neumann-Problem mit verschwindender Normalableitung $\frac{\partial u(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{n}} = 0$ am Rand. Achtung: Bei Neumann-Problemen muss immer (auch in der ursprünglichen Form) zusätzlich noch eine Kompatibilitätsbedingung

$$-\int_\Gamma \frac{\partial u(\mathbf{r})}{\partial n} d\Gamma = \int_\Omega q(\mathbf{r}) d\Omega \tag{5}$$

erfüllen, die mit der Poisson-Gleichung aus dem Satz von Gauß folgt (entsprechend *elektrischer Fluss = Gesamtladung im Inneren*). Dirichlet-Randwerte werden gesondert behandelt (z.B. Penalty-Methode).

Da sie auf anderem Weg auch aus dem Variationsproblem der Minimierung eines Energiefunktionals folgt, wird die schwache Form auch Variationsform genannt. In diesem Sinn kann $v(\boldsymbol{r}) = \delta u(\boldsymbol{r})$ auch als Variation der Funktion $u(\boldsymbol{r})$ gesehen werden (siehe Literatur für Details). Bei der Poisson-Gleichung wird beispielsweise tatsächlich die physikalische Gesamtenergie minimal, das Konzept lässt sich aber auch verallgemeinern. Die "starke" Form, also die ursprünglichen partielle Differentialgleichung ist im Bezug auf diese Form analog zu sehen zu den Euler-Lagrange-Gleichungen eines Variationsproblems im Rahmen der Theorie der gewöhnlichen Differentialgleichungen ($\rightarrow$ klassische Mechanik).

Diskretisierung mit dem Ritz-Galerkin-Verfahren

Die schwache Form war der erste Schritt auf dem Weg zur numerischen Behandlung der PDE. Auf den ersten Blick erscheint das widersinnig, da wir jetzt ja sogar zwei Funktionen $u(\boldsymbol{r})$ und $v(\boldsymbol{r})$ haben, die wir jeweils aus einem unendlichdimensionalen Funktionenraum wählen können. Um das Problem behandelbar zu machen, wählen wir einen endlichdimensionalen Unterraum, in dem wir die Funktionen näherungsweise darstellen. Das kann z.B. der Raum der Funktionen $\sin(k_x x + k_y y)$ mit diskreten und nach oben begrenzten k_x, k_y, oder wie im Fall der klassischen FEM der Raum der lokalen Polynomfunktionen, z.B. $a_{0i} + a_{1i}x + a_{2i}y$, wobei die Koeffizienten a auf jedem Element i (z.B. Dreiecke in 2D) des Rechengitters verschieden sein können, aber Übergangsbedingungen erfüllt sein müssen.

Die Darstellung von Funktionen erfolgt als Linearkombination über Basisfunktionen $\varphi_k(\boldsymbol{r})$, also

$$u(\boldsymbol{r}) \approx \sum_{k=1}^{N} u_k \varphi_k(\boldsymbol{r}), \tag{6}$$

Wobei N die Dimension des Unterraums ist. Werden auch die Testfunktion $v(\boldsymbol{r})$ aus diesem Raum gewählt, nennt man die Methode *Ritz-Galerkin-Verfahren.*[1] Um den kompletten Unterraum aufspannen, genügen N Testfunktionen, die wir direkt mit den Basisfunktionen gleichsetzen, $v_j(\boldsymbol{r}) = \varphi_j(\boldsymbol{r})$.

Mit diesem Ansatz verwandelt sich die schwache Form der Poisson-Gleichung in

$$\sum_{k=1}^{N} \int_\Omega \nabla\varphi_j(\mathbf{r}) \cdot (u_k \nabla\varphi_k(\mathbf{r}))\, d\Omega - \sum_{k=1}^{N} \int_\Omega \varphi_j(\mathbf{r}) q_k \varphi_k(\mathbf{r})\, d\Omega + \sum_{k}^{\text{Rand}} \int_\Gamma \varphi_j(\mathbf{r}) u_k \frac{\partial\varphi_k(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{n}}\, d\Gamma = 0, \tag{7}$$

wobei wir Konstanten u_k und q_k aus Ableitungen und Integralen herausziehen können. Die verbleibenden Integralausdrücke sind nur über die $\varphi_j(\mathbf{r})$, $\varphi_k(\mathbf{r})$

$$\sum_{k=1}^{N} A_{jk} u_k = \sum_{k=1}^{N} M_{jk}\, q_k - \sum_{k}^{\text{Rand}} D_{jk} u_k = b_j \tag{8}$$

mit Matrizen

$$A_{jk} = \int_\Omega \nabla\varphi_j(\mathbf{r}) \cdot \nabla\varphi_k(\mathbf{r})\, d\Omega, \qquad M_{jk} = \int_\Omega \varphi_j(\mathbf{r})\varphi_k(\mathbf{r})\, d\Omega, \qquad D_{jk} = \int_\Gamma \varphi_j(\mathbf{r}) \frac{\partial\varphi_k(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{n}}\, d\Gamma. \tag{9}$$

Das ist ein N-dimentionales lineares Gleichungssystem $A\boldsymbol{u} = \boldsymbol{b}$ für den unbekanntem Vektor $\boldsymbol{u}$ und bekanntem Vektor $\boldsymbol{q}$ bzw. bekannten $D_{jk}u_k$ aus Neumann-Randwerten im Vektor $\boldsymbol{b}$ auf der rechten Seite. Entsprechend dem Ursprung der FEM in der Elastomechanik wird A die Steifigkeitsmatrix, und M die Massenmatrix genannt. Da die Funktionen $\varphi_j(\mathbf{r})$, $\varphi_k(\mathbf{r})$ nur an Elementgrenzen im Gitter lokal überlappen, sind diese Matrizen dünn besetzt (*sparse*) und das lineare System kann numerisch (Direkte, z.B. LU-Zerlegung, für kleine Systeme, iterative Verfahren wie GMRES für große) effizient gelöst werden.

Vektorwertige Gleichungen

Um in Elektrodynamik, Fluidmechanik und Elastodynamik auftretende Gleichungen der Form

$$\text{z.B.} \quad \nabla \times \nabla \times \boldsymbol{A} = \boldsymbol{J} \quad \text{oder} \quad \nabla \cdot \boldsymbol{v} = 0 \tag{10}$$

zu lösen, ist es nicht ideal, Vektorfelder kompenentenweise in A_x, A_y, A_z mit gewöhnlichen Ansatzfunktionen zu behandeln. Stattdessen sind vektorwertige Ansatzfunktionen geeignet, welche die Stetigkeitsbedingung von Parallel- bzw. Normalkomponenten von Vektorfeldern korrekt wiedergeben. Stichworte hierzu sind *Edge Elements, Vector Finite Elements* insbesondere Elemente benannt nach *Raviart-Thomas, Nédélec* und *Brezzi-Douglas-Marini.* Die Sprache *FreeFEM++* verfügt über Implementierungen solcher Elemente in 2D und 3D in erster und teilweise zweiter Ordnung (RT0, RT0Ortho, RT1, BDM0).

[1] Nach Walter Ritz und Борис Григорьевич Галёркин, dessen Nachname eigentlich *Galjorkin* ausgesprochen wird.