TECHNISCHE UNIVERSITÄT
BERGAKADEMIE FREIBERG
Die Ressourcenuniversität. Seit 1765.

Numerische Simulation mit finiten Elementen

O. Rheinbach

INHALT

INHALT II

FINITE DIFFERENZEN

DIE LAPLACE-GLEICHUNG IM EINHEITSQUADRAT: DIE DIRICHLETSCHE RANDWERTAUFGABE

Wir betrachten folgende Randwertaufgabe (RWA) für die Laplace-Gleichung:

$$\Delta u = u_{xx} + u_{yy} = 0 \qquad \text{auf } \Omega := (0,1)^2, \tag{1a}$$

$$u = g \qquad \text{auf } \Gamma := \partial\Omega, \tag{1b}$$

mit einer gegebenen auf Γ definierten Randfunktion $g = g(x, y)$.

Wie bei gewöhnlichen DGLn werden bei der Diskretisierung von (1) mittels Differenzenverfahren Approximationen an die Lösung $u = u(x, y)$ nicht an allen Punkten von Ω gesucht, sondern lediglich an endlich vielen Gitterpunkten.

Finite Differenzen in 2D

Betrachte jede Koordinate separat: mit den Zerlegeungen

$$
\begin{aligned}
0 = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_{n_x} < x_{n_x+1} = 1, \\
0 = y_0 < y_1 < y_2 < \cdots < y_{n_y} < y_{n_y+1} = 1
\end{aligned}
$$

von $[0, 1]$ definieren wir das Gitter (Tensorprodukt-Gitter)

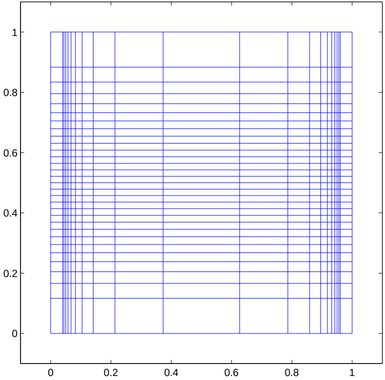
$$
\Omega_h := \big\{(x_i, y_j) : 0 \le i \le n_x + 1,\ 0 \le j \le n_y + 1\big\}
$$

bestehend aus $(n_x + 2)(n_y + 2)$ Punkten.
Von einem (in jeder Richtung) gleichmäßigen (äquidistanten) Gitter spricht man im Fall

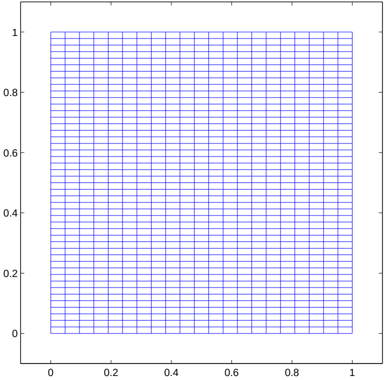
$$
\begin{aligned}
x_i &= i\Delta x, \qquad & i &= 0, 1, \ldots, n_x + 1, \qquad & \Delta x &= 1/(n_x + 1), \\
y_j &= j\Delta y, \qquad & j &= 0, 1, \ldots, n_y + 1, \qquad & \Delta y &= 1/(n_y + 1)
\end{aligned}
$$

Bei gleichen Abständen (uniformes Gitter) setzen wir $h := \Delta x = \Delta y$.

Finite Differenzen in 2D

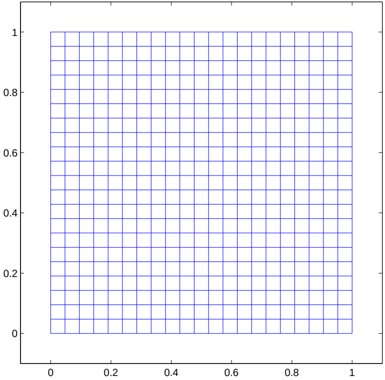


Tensorprodukt-Gitter



äquidistantes Gitter

Finite Differenzen in 2D



uniformes Gitter

Wir betrachten zunächst ausschließlich den uniformen Fall $\Delta x = \Delta y = h$.

Finite Differenzen in 2D

Bezeichnungen:

$u_{i,j} := u(x_i, y_j)$ Funktionswert der exakten Lösung im Punkt (x_i, y_j)

$U_{i,j} \approx u_{i,j}$ Approximation an $u(x_i, y_j)$.

Taylor-Entwicklung im Punkt (x_i, y_j):

$$u_{i+1,j} = u_{i,j} + \left(\quad h u_x + \frac{h^2}{2} u_{xx} + \frac{h^3}{6} u_{xxx} + \frac{h^4}{24} u_{xxxx} \right)_{i,j} + O(h^5),$$

$$u_{i-1,j} = u_{i,j} + \left(-h u_x + \frac{h^2}{2} u_{xx} - \frac{h^3}{6} u_{xxx} + \frac{h^4}{24} u_{xxxx} \right)_{i,j} + O(h^5),$$

Aufsummieren liefert (die Terme für h^5 heben sich ebenfalls auf)

$$u_{i+1,j} + u_{i-1,j} = 2u_{i,j} + \left(h^2 u_{xx} + \frac{h^4}{12} u_{xxxx} \right)_{i,j} + O(h^6).$$

Finite Differenzen in 2D

Analog erhält man in y-Richtung

$$u_{i,j+1} + u_{i,j-1} = 2u_{i,j} + \left(h^2 u_{yy} + \frac{h^4}{12} u_{yyyy} \right)_{i,j} + O(h^6)$$

und, nach Aufsummieren aller 4 Entwicklungen und Division durch h^2,

$$\underbrace{\frac{u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{i,j}}{h^2}}_{=:(\Delta_h u)_{i,j}} = \left(\Delta u + \frac{h^2}{12}(u_{xxxx} + u_{yyyy}) \right)_{i,j} + O(h^4).$$

Die Differenzenformel Δ_h wird als 5-Punkte-Stern (engl. 5-point stencil) bzw. 5-Punkte Laplace-Approximation bezeichnet.

Fazit: Δ_h approximiert den Laplace-Operator an jedem Punkt mit einem lokalen Diskretisierungsfehler der Ordnung $O(h^2)$ für $h \to 0$.

Beachte: Voraussetzung für unsere Überlegung ist hinreichende Glattheit der Lösung, hier etwa $u \in C^4(\Omega)$.

Finite Differenzen in 2D

Analog zur Differentialgleichung (1a) fordern wir für die Approximationen $U_{i,j}$ die Gültigkeit der Beziehungen

$$\Delta_h U_{i,j} := (\Delta_h U)_{i,j} = 0, \qquad 1 \le i \le n_x,\ 1 \le j \le n_y. \tag{2a}$$

(2a) stellt $n_x n_y$ Gleichungen für $(n_x + 2)(n_y + 2)$ Unbekannte dar, da der 5-Punkte-Stern in Randpunkten nicht anwendbar ist. Hier liefern die Randbedingungen die fehlenden Vorgaben:

$$U_{i,j} = g(x_i, y_j) \qquad \text{falls } (x_i, y_j) \in \partial\Omega. \tag{2b}$$

(2b) lautet ausgeschrieben

$$\begin{aligned} U_{0,j} &= g(0, y_j), & U_{n_x+1,j} &= g(1, y_j), & 0 &\le j \le n_y + 1, \\ U_{i,0} &= g(x_i, 0), & U_{i,n_y+1} &= g(x_i, 1), & 0 &\le i \le n_x + 1. \end{aligned}$$

Finite Differenzen in 2D

Die Gleichungen (2) stellen ein lineares Gleichungssystem

$$A\boldsymbol{u} = \boldsymbol{f} \tag{3}$$

dar für die Unbekannten Approximationen $U_{i,j}$ an den inneren Gitterpunkten. Zur Bestimmung der Koeffizientenmatrix A und der rechten Seite müssen wir eine Nummerierung der Unbekannten festlegen. Üblich ist hier die lexicographische Ordnung:

$$\boldsymbol{u} = [U_{1,1}, U_{2,1}, \dots, U_{n_x,1}, U_{1,2}, \dots, U_{n_x,2}, \dots, U_{1,n_y}, \dots, U_{nx,ny}]^\top$$

bzw.

$$\boldsymbol{u} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{u}_1 \\ \boldsymbol{u}_2 \\ \vdots \\ \boldsymbol{u}_{n_y} \end{bmatrix}, \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{u}_j = \begin{bmatrix} U_{1,j} \\ U_{2,j} \\ \vdots \\ U_{n_x,j} \end{bmatrix}, \quad j = 1, 2, \dots, n_y.$$

Finite Differenzen in 2D

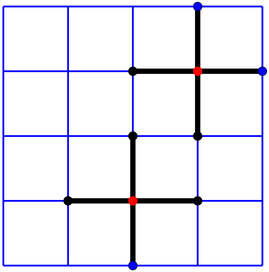
Die Matrix A besitzt die Blockstruktur

$$A = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} T & I & & & \\ I & T & I & & \\ & I & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & & I \\ & & & I & T \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n_x n_y \times n_x n_y},$$

wobei I die $n_x \times n_x$ Einheitsmatrix bezeichnet und T die Tridiagonalmatrix

$$T = \begin{bmatrix} -4 & 1 & & & \\ 1 & -4 & 1 & & \\ & 1 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & & 1 \\ & & & 1 & -4 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n_x \times n_x}.$$

Finite Differenzen in 2D



Für Unbekannte $U_{i,j}$ in Randnähe, d.h. $i = 1, n_x$ oder $j = 1, n_y$, treten in der Differenzenformel (2a) Approximationswerte auf, welche durch die Dirichlet-Randbedingung (2b) bereits festgelegt sind. Bringt man diese auf die rechte Seite der jeweiligen Gleichung, so erhalten wir für die Einträge des Vektors $\boldsymbol{f}$ aus (3) in dem gezeichneten Beispiel

$$f_{3,3} = -\frac{1}{h^2}\big(g(x_3, y_4) + g(x_4, y_3)\big) \quad \text{bzw.} \quad f_{2,1} = -\frac{1}{h^2} g(x_2, y_0).$$

Finite Differenzen in 2D

Durch die einfache Geometrie von Ω, die einfache Gestalt des Laplace-Operators und den einheitlichen Randbedingungen besitzt die Blocktridiagonalmatrix A zusätzliche Struktur: man kann sie gewissermassen aus Diskretisierungsmatritzen für eindimensionale RWA aufbauen.
Wir betrachten daher zunächst die Diskretisierung der (gewöhnlichen) eindimensionalen RWA

$$u''(x) = 0, \qquad u(0) = g_0, \quad u(1) = g_1$$

mittels zentraler Differenzen mit konstanter Maschenweite $h = 1/(n+1)$.

Finite Differenzen in 2D

Die diskretisierte Gleichung ist gegeben durch das lineare Gleichungssystem

$$A_1 \boldsymbol{u} = \boldsymbol{f}, \qquad A \in \mathbb{R}^{n\times n},\ \boldsymbol{f} \in \mathbb{R}^n,$$

mit

$$A_1 = \frac{1}{h^2}\,\mathrm{tridiag}(1,-2,1) := \frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} -2 & 1 & & \\ 1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & & 1 \\ & & 1 & -2 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{f} = -\frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} g_0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ g_1 \end{bmatrix}$$

und dem Vektor aus Unbekannten

$$U = [U_1, U_2, \dots, U_n]^\top, \qquad U_i \approx u(x_i), \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Finite Differenzen in 2D

Die Diskretisierung der zweidimensionalen RWA ist nun gegeben durch

$$A = T_1 \otimes I + I \otimes T_1 \tag{4}$$

mit $T_1 = \frac{1}{h^2}\,\mathrm{tridiag}(-1, 2, -1)$.
Hierbei ist das Kronecker-Produkt $M \otimes N$ zweier Matrizen $M \in \mathbb{R}^{p\times q}$ und $N \in \mathbb{R}^{r\times s}$ definiert durch

$$M \otimes N = \begin{bmatrix} m_{1,1}N & \dots & m_{1,q}N \\ \vdots & & \vdots \\ m_{p,1}N & \dots & m_{p,q}N \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{pr\times qs}$$

und I die Einheitsmatrix in $\mathbb{R}^n$.

DIE NEUMANNSCHE RANDWERTAUFGABE

Wir betrachten den Fall, dass die Dirichlet-Randbedingung (1b) durch die Neumann-Randbedingung

$$\frac{\partial u}{\partial n} = h(x), \qquad x \in \Gamma \tag{5}$$

ersetzt wird. Da in diesem Modellproblem die Gebietsränder (bis auf die vier Ecken) stets senkrecht zu den Gitterlinien verlaufen, ist die Diskretisierung von (5) auch nicht schwer: beispielsweise an den Randpunkten (x_0, y_j):

$$\frac{U_{0,j} - U_{1,j}}{h} = h(x_0, y_j), \qquad \text{(Rückwärtsdifferenz)},$$

$$\frac{U_{-1,j} - U_{1,j}}{2h} = h(x_0, y_j) \qquad \text{(zentrale Differenz)}$$

und analog an den übrigen Randpunkten.

DIE NEUMANNSCHE RANDWERTAUFGABE

DISKRETISIERUNG DER RANDBEDINGUNG

Beachte:

- Bei der zentralen Differenzenformel wurden sogenannte Hilfspunkte (ghost points) eingeführt, die mittels der im Punkt (x_0, y_j) zentrierten 5-Punkteformel wieder eliminiert werden können.
- Im Gegensatz zur Diskretisierung der Laplace-Gleichung mit gleicher Maschenweite h sind neben den inneren Unbekannten auch die zu Randpunkten gehörenden Näherungen $U_{i,j}$ zu bestimmen. Die diskrete RWA besitzt demnach $(n_x + 2) \cdot (n_y + 2)$ Unbekannte.

DIE NEUMANNSCHE RANDWERTAUFGABE

DISKRETISIERUNGSMATRIX

Als Diskretisierungsmatrix erhält man das Kronecker-Produkt

$$A = \tilde{T}_1 \otimes I + I \otimes \tilde{T}_1$$

mit

$$\tilde{T}_1 = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} -1 & 1 & & & \\ 1 & -2 & \ddots & & \\ & & \ddots & & \\ & & \ddots & -2 & 1 \\ & & & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

EIGENWERTE UND EIGENVEKTOREN

DIRICHLET-RBEN

Einer der Gründe, welhalb (1) oft als Modellproblem herangezogen wird, ist dass man die Spektralzerlegung der Diskretisierungsmatrix geschlossen darstellen kann.
Für die $n \times n$ Matrix $T_1 = \frac{1}{h^2}\,\mathrm{tridiag}(1, -2, 1)$ gilt zunächst

$$T_1 \boldsymbol{v}_j = \lambda_j \boldsymbol{v}_j, \qquad j = 1, 2, \ldots, n,$$

mit den Eigenwerten

$$\lambda_j = \frac{2}{h^2}[\cos(j\pi h) - 1] = -\frac{4}{h^2}\sin^2(j\pi h/2) \tag{6}$$

und (orthonormalen) Eigenvektoren

$$[\boldsymbol{v}_j]_k = \sqrt{\frac{2}{n+1}}\sin(jk\pi h), \qquad k = 1, 2, \ldots, n;\ j = 1, 2, \ldots, n.$$

EIGENWERTE UND EIGENVEKTOREN

KRONECKER-TRICK

Aufgrund von Eigenschaften von Kronecker-Produkten lassen sich die Eigenwerte und -vektoren des 2D-Problems aus den ensprechenden aus 1D aufbauen: die Eigenwerte von A aus (4) sind gegeben durch

$$\lambda_{i,j} = \lambda_i + \lambda_j, \qquad 1 \leq i, j \leq n, \tag{7}$$

und die Eigenvektoren durch

$$\boldsymbol{v}_{i,j} = \boldsymbol{v}_i \otimes \boldsymbol{v}_j, \qquad 1 \leq i, j \leq n.$$

STABILITÄT UND KONVERGENZ

Wir haben bereits bei der Herleitung der 5-Punkte-Approximation Δ_h des Laplace-Operators gezeigt:

$$\Delta_h u_{i,j} = \Delta u_{i,j} + \frac{h^2}{12}\left(u_{xxxx} + u_{yyyy}\right)_{i,j} + O(h^4).$$

Setzt man

$$\begin{aligned} [\boldsymbol{d}_h]_{i,j} &:= \Delta_h u_{i,j} - \Delta u_{i,j} && \text{(lokaler Diskretisierungsfehler)} \\ [\boldsymbol{e}_h]_{i,j} &:= u_{i,j} - U_{i,j} && \text{(globaler Diskretisierungsfehler)} \end{aligned}$$

so erfüllt $\boldsymbol{e}_h$ wegen $\Delta u = 0$ das lineare Gleichungssystem

$$A_h \boldsymbol{e}_h = \boldsymbol{d}_h = O(h^2)$$

mit $A_h = A$ der Matrix aus (4).

STABILITÄT UND KONVERGENZ

Folglich gilt $\boldsymbol{e}_h = A_h^{-1}\boldsymbol{d}_h$ und wegen

$$\|\boldsymbol{e}_h\| = \|A_h^{-1}\boldsymbol{d}_h\| \le \|A_h^{-1}\|\|\boldsymbol{d}_h\|$$

Überträgt sich das $O(h^2)$-Verhalten für $h \to 0$ vom lokalen auf den globalen Diskretisierungsfehler, wenn $\|A_h^{-1}\|$ für alle hinreichend kleinen $h > 0$ gleichmäßig beschränkt bleibt.

Betrachten wir die Euklid-Norm $\|\cdot\| = \|\cdot\|_2$, so gilt

$$\|A_h^{-1}\| = \frac{1}{|\lambda_{\min}(A_h)|}.$$

Die gleichmäßige Beschränktheit folgt nun aus (6) und (7), da

$$|\lambda_{\min}(A_h)| = \frac{4}{h^2} \cdot 2\sin\frac{\pi h}{2} = 2\pi^2 + O(h^2).$$

STABILITÄT UND KONVERGENZ

FAZIT

Bei der Diskretisierung des Modellproblems (1) mit zentralen Differenzen und uniformer Maschenweite h verhält sich der (globale) Diskretisierungsfehler wie $O(h^2)$ für $h \to 0$, sofern die Lösung u viermal stetig differenzierbar ist.

Die Beschränktheit von $\|A_h^{-1}\|$ für $h \to 0$ nennt man in diesem Zusammenhang Stabilität des Differenzenschemas.

DIE POISSON-GLEICHUNG

Ersetzt man in der RWA (1) die Differentialgleichung (1a) durch die inhomogene Gleichung

$$-\Delta u = f \qquad \text{(Poisson-Gleichung)}, \tag{8}$$

mit einer gegebenen, auf Ω definierten Funktion $f = f(x, y)$, so wird die dieskrete Gleichung (2a) zu

$$-\Delta_h U_{i,j} = f_{i,j}, \quad \text{mit} \quad f_{i,j} = f(x_i, y_j), \qquad 1 \leq i \leq n_x,\ 1 \leq j \leq n_y.$$

Auf die Dirichlet-Randwerte auf der rechten Seite des resultierenden linearen Gleichungssystems (3) werden entsprechend die Funktionswerte $f_{i,j}$ addiert.

DER 9-PUNKTE-STERN

Da die Formeln für Differenzenschemata wie $\Delta_h u$, vor allem in 2 und 3 Raumdimensionen, schnell unhandlich werden, wird oft als Kurzschreibweise das Schema der Gewichte entsprechend ihrer Gitteranordnung verwendet:

$$\Delta_h \triangleq \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Eine weitere Approximation des Laplace-Operators besitzt das Schema

$$\Delta_h^{(9)} \triangleq \frac{1}{6h^2} \begin{bmatrix} 1 & 4 & 1 \\ 4 & -20 & 4 \\ 1 & 4 & 1 \end{bmatrix}$$

und wird als 9-Punkte-Stern bezeichnet.

DER 9-PUNKTE-STERN

KONSISTENZ

Ein Taylor-Abgleich analog zum 5-Punktestern ergibt

$$\Delta_h^{(9)} u = \Delta u + \frac{h^2}{12}(u_{xxxx} + 2u_{xxyy} + u_{yyyy}) + O(h^4).$$

Die Konsistenzordnung ist somit dieselbe wie die von Δ_h. Der führende Fehlerterm ist jedoch gegeben durch den biharmonischen Operator

$$u_{xxxx} + 2u_{xxyy} + u_{yyyy} = \Delta(u_{xx} + u_{yy}) = \Delta(\Delta u) = \Delta^2 u.$$

DER 9-PUNKTE-STERN

KONSISTENZ

Man kann sich dies beim Lösen der Poisson-Gleichung $-\Delta u = f$ wie folgt zunutze machen: der lokale Diskretisierungsfehler der diskreten Gleichung

$$-\Delta_h^{(9)} U_{i,j} = \tilde{f}_{i,j}, \qquad 1 \leq i \leq n_x,\ 1 \leq j \leq n_y,$$

mit der modifizierten rechten Seite

$$\tilde{f}_{i,j} := f(x_i, y_j) + \frac{h^2}{12} \Delta f(x, y)$$

ist von der Ordnung $O(h^4)$.