

§ 13 Details der Implementierung

Die Lösung einer (linearen) PDE mit der FEM gliedert sich in folgende Unterpunkte:

- (1) Modellierung des Gebietes (z. B. mit CAD) und Erzeugung eines Gitters (mit einem Gittergenerator)
- (2) Entscheidung für einen FE-Typ
- (3) Choose a (global) finite element space, cf. [Definition 12.4](#)
- (4) Organisation der globalen Freiheitsgrade, cf. [Definition 12.6](#)
- (5) Assemblierung der Steifigkeitsmatrix und des Lastvektors
- (6) Einarbeiten von Dirichlet-Randbedingungen und evtl. weiterer Bedingungen
- (7) Lösen des linearen Gleichungssystems
- (8) Abschätzung des Fehlers
- (9) ggf. Gitterverfeinerung und zurück zu (4)
- (10) Postprocessing und Darstellung der Lösung

Verschiedene FE-Bibliotheken setzen diese Schritte sehr unterschiedlich um. Manchmal sind z. B. (2) und (3) untrennbar verbunden, etwa bei Auswahl von Lagrange-Elementen \mathbb{P}_k oder \mathbb{Q}_k immer die Standard- \mathbb{P}_k -Räume bzw. Standard- \mathbb{Q}_k -Räume verwendet werden, also H^1 -konforme (stetige) globale Basisfunktionen, vgl. [Lemma 12.5](#). Bei nichtlinearen Aufgaben (PDEs) sind die Schritte (5)–(7) noch in eine Newton-Schleife eingeschlossen.

In what follows, we give some details concerning steps (5) and (6).

Vorab einige Bezeichnungen:

- $S := S$ Anzahl der globalen Freiheitsgrade
- s Anzahl der lokalen Freiheitsgrade auf jeder Zelle

§ 13.1 Assemblierung der schwachen Form

Es liege aus Schritt (1)–(4) bereits ein (nicht notwendig konformes) Gitter \mathcal{T} und (für die Vereinfachung der folgenden Beschreibung) eine affine Familie $\{(K, P_K, \Sigma_K)\}_{K \in \mathcal{T}}$ von Elementen auf Simplex-Zellen vor (z. B. \mathbb{P}_k -Elemente). Es sei $V_{\mathcal{T}}$ ein FE-Raum wie in [Definition 12.4](#). Further, suppose that we have chosen a collection of global degrees of freedom as in [Definition 12.6](#). In particular, we already have the vectors $c^{K,i}$, which link the global degrees of freedom with the local degrees of freedom.

Wir betrachten nun Punkt (5) genauer. Im Fall der Poisson-Gleichung lautet die Steifigkeitsmatrix (vgl. [§ 7.2](#))

$$(A)_{ij} = a[\varphi_j, \varphi_i] = \int_{\Omega} \nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i \, dx,$$

wobei $\{\varphi_i\}_{i=1}^S$ die globalen Formfunktionen (Basisfunktionen von $V_{\mathcal{T}}$) sind. Similar to [§ 7.4](#), these integrals will be evaluated on the reference element. The key is that

any global basis function is a linear combination of local basis functions on each cell, see (12.2).

We have

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i \, dx &= \sum_{K \in \mathcal{T}} \int_K \nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i \, dx \\ &= \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{m,n=1}^s c_i^{K,m} c_j^{K,n} \underbrace{\int_K \nabla p_{K,n} \cdot \nabla p_{K,m} \, dx}_{=:(A_K)_{m,n}}. \end{aligned}$$

Here, $A_K \in \mathbb{R}^{s \times s}$ denotes the **lokale Steifigkeitsmatrix**, with entries

$$(A_K)_{m,n} = \int_K \nabla p_{K,n} \cdot \nabla p_{K,m} \, dx. \quad (13.1)$$

Now, it will be convenient to introduce the matrix⁵⁹ $C_K \in \mathbb{R}^{S \times s}$,

$$(C_K)_{i,m} = c_i^{K,m}.$$

Recall that C_K encodes the relation of the local and global dofs, cf. Definition 12.6, as well as the coupling of the local and global shape functions, cf. Lemma 12.8.

Now, the above calculation yields

$$A = \sum_{K \in \mathcal{T}} C_K A_K C_K^T. \quad (13.2)$$

Analog gilt für den **lokalen Lastvektor (Elementlastvektor)** $F_K \in \mathbb{R}^s$

$$(F_K)_k = \int_K f p_{K,k} \, dx, \quad (13.3)$$

den man zum globalen Lastvektor addiert:

$$F = \sum_{K \in \mathcal{T}} C_K F_K. \quad (13.4)$$

Frage: Wie berechnet man die elementweisen Beiträge (13.1) und (13.3)?

Es sei $T_K : \hat{K} \ni \hat{x} \mapsto B_K \hat{x} + b_K \in K$ wieder eine bijektive affine Abbildung. Aufgrund der Substitutionsregel gilt

$$\int_K g(x) \, dx = \int_{\hat{K}} g(T_K(\hat{x})) |\det T'_K(\hat{x})| \, d\hat{x} = |\det B_K| \int_{\hat{K}} g(T_K(\hat{x})) \, d\hat{x} \quad (13.5)$$

⁵⁹Sometimes called the connectivity matrix.

für integrierbare Funktionen g . Die Anwendung auf (13.1) ergibt⁶⁰

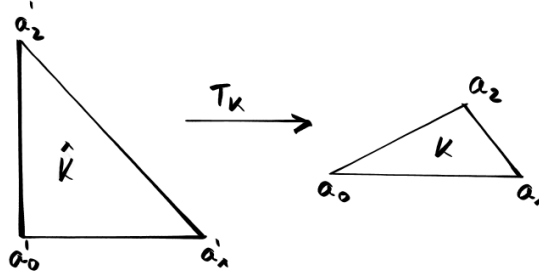
$$\begin{aligned}
& \int_K \nabla p_{K,n}(x) \cdot \nabla p_{K,m}(x) \, dx \\
&= \int_K \nabla(\hat{p}_n \circ T_K^{-1})(x) \cdot \nabla(\hat{p}_m \circ T_K^{-1})(x) \, dx && \text{Konstruktion der } p_k, \text{ (11.4e)} \\
&= \int_K [B_K^{-\top} \hat{\nabla} \hat{p}_n(T_K^{-1}(x))] \cdot [B_K^{-\top} \hat{\nabla} \hat{p}_m(T_K^{-1}(x))] \, dx && \text{Kettenregel} \\
&= |\det B_K| \int_{\hat{K}} [B_K^{-\top} \hat{\nabla} \hat{p}_n(\hat{x})] \cdot [B_K^{-\top} \hat{\nabla} \hat{p}_m(\hat{x})] \, d\hat{x} && \text{Substitutionsregel.}
\end{aligned}$$

Der besseren Unterscheidung wegen bezeichnen wir den Gradienten einer Funktion auf der Referenzzelle \hat{K} mit $\hat{\nabla}$. Die Transformationsmatrix B_K auf das Einheitssimplex \hat{K} wird für jede (Simplex-)Zelle K wie folgt bestimmt: Ist

$$K = \text{conv}\{v_0, v_1, \dots, v_d\} \subset \mathbb{R}^d, \quad v_i \in \mathbb{R}^d$$

dann gilt

$$B_K = [v_1 - v_0, v_2 - v_0, \dots, v_d - v_0] \in \mathbb{R}^{d \times d}, \quad b_K = v_0 \in \mathbb{R}^d.$$



Aufgrund der (häufig anzutreffenden) Polynomeigenschaft von \hat{p}_i kann das obige Integral exakt berechnet werden. Bei Operatoren mit nicht-konstanten Koeffizienten, etwa

$$a[u, v] = \int_{\Omega} \nabla v(x)^{\top} A(x) \nabla u(x) \, dx, \quad (*)$$

ist das aber i. d. R. nicht möglich. Deshalb setzt man eine **Quadraturformel (Q-Formel)**

$$\int_{\hat{K}} \hat{g}(\hat{x}) \, d\hat{x} \approx \sum_{\ell=1}^q \omega_{\hat{K},\ell} \hat{g}(\xi_{\hat{K},\ell})$$

auf \hat{K} ein mit **Gewichten** $\omega_{\hat{K},\ell}$ und **Stützstellen** $\xi_{\hat{K},\ell}$. Die **Exaktheitsordnung** $r \in \mathbb{N}$ der Formel ist der maximale Grad, sodass für alle Polynome $\hat{g} \in P_r(\hat{K})$ Gleichheit gilt (analog für Randintegrale).

⁶⁰**Beachte:** Die Ableitung (Jacobimatrix) ist $J(\hat{p}_k \circ T_K^{-1})(x) = J(\hat{p}_k)(T_K^{-1}(x)) B_K^{-1}$. Der Gradient ist die Transposition davon.

Die Anwendung auf (*) ergibt:

$$\begin{aligned}
 \int_K \nabla p_{K,n}(x)^\top A(x) \nabla p_{K,m}(x) dx &= \dots \\
 &= |\det B_K| \int_{\widehat{K}} [B_K^{-\top} \widehat{\nabla} \widehat{p}_n(\widehat{x})]^\top A(T_K(\widehat{x})) [B_K^{-\top} \widehat{\nabla} \widehat{p}_m(\widehat{x})] d\widehat{x} \\
 &\approx |\det B_K| \sum_{\ell=1}^q \omega_{\widehat{K},\ell} [B_K^{-\top} \widehat{\nabla} \widehat{p}_n(\xi_{\widehat{K},\ell})]^\top A(T_K(\xi_{\widehat{K},\ell})) [B_K^{-\top} \widehat{\nabla} \widehat{p}_m(\xi_{\widehat{K},\ell})].
 \end{aligned}$$

schwache Form	lokale Beiträge der Zelle K
$\int_{\Omega} \nabla \varphi_j^\top A \nabla \varphi_i dx$	$ \det B_K \sum_{\ell=1}^q \omega_{\widehat{K},\ell} [B_K^{-\top} \widehat{\nabla} \widehat{p}_n(\xi_{\widehat{K},\ell})]^\top A(T_K(\xi_{\widehat{K},\ell})) [B_K^{-\top} \widehat{\nabla} \widehat{p}_m(\xi_{\widehat{K},\ell})]$
$\int_{\Omega} \nabla \varphi_j \cdot \beta \varphi_i dx$	$ \det B_K \sum_{\ell=1}^q \omega_{\widehat{K},\ell} [B_K^{-\top} \widehat{\nabla} \widehat{p}_n(\xi_{\widehat{K},\ell})] \cdot \beta(T_K(\xi_{\widehat{K},\ell})) \widehat{p}_m(\xi_{\widehat{K},\ell})$
$\int_{\Omega} \varphi_j c_0 \varphi_i dx$	$ \det B_K \sum_{\ell=1}^q \omega_{\widehat{K},\ell} \widehat{p}_n(\xi_{\widehat{K},\ell}) c_0(T_K(\xi_{\widehat{K},\ell})) \widehat{p}_m(\xi_{\widehat{K},\ell})$
$\int_{\Omega} f \varphi_i dx$	$ \det B_K \sum_{\ell=1}^q \omega_{\widehat{K},\ell} f(T_K(\xi_{\widehat{K},\ell})) \widehat{p}_m(\xi_{\widehat{K},\ell})$

Beachte: Es gilt

$$|\det B_K| = \frac{|K|}{|\widehat{K}|}, \quad \text{denn} \quad \int_K 1 dx = \int_{\widehat{K}} 1 |\det B_K| d\widehat{x}. \quad (13.6)$$

Folgende Daten können tabelliert (vorberechnet) werden:

- Transformationsmatrix B_K und Vektor b_K für jede Zelle sowie $B_K^{-\top} \in \mathbb{R}^{d \times d}$ und evtl. $\det B_K$ (gehören zum Gitter)

Speicheraufwand: $N_{\text{cells}} \times (2d + 1)$ Vektoren des \mathbb{R}^d

- die Funktionswerte $\widehat{p}_k(\xi_{\widehat{K},m})$ und $\widehat{\nabla} \widehat{p}_k(\xi_{\widehat{K},m})$ der lokalen Formfunktionen *auf der Referenzzelle* \widehat{K} , $k = 1, \dots, s$ und $m = 1, \dots, q$ (gehört zum FE bzw. zur Q-Formel)

Speicheraufwand: $q \times s$ Skalare und $q \times s$ Vektoren des \mathbb{R}^d

Beachte: Es bietet sich nicht an, $B_K^{-\top} \widehat{\nabla} \widehat{p}_k(\xi_{\widehat{K},m})$ zu speichern, denn dies sind $N_{\text{cells}} \times q \times s$ Vektoren des \mathbb{R}^d ! (Ersparnisse ergeben sich nur, wenn viele Zellen nur Translate voneinander sind.)

Die Randintegrale in der schwachen Formulierung werden analog berechnet. Wir betrachten als Beispiel

$$\int_{\Gamma} \varphi_j(s) \alpha(s) \varphi_i(s) ds = \sum_{K \in \mathcal{T}} \underbrace{\int_{\partial K \cap \Gamma} \varphi_j(s) \alpha(s) \varphi_i(s) ds}_{a_{i,j}}.$$

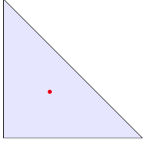
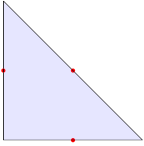
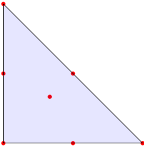
r	q		Koordinaten	Anzahl	Gewichte
1	1		$(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3})$	1	$ \widehat{K} $
2	3		$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	3	$\frac{1}{3} \widehat{K} $
3	7		$(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3})$ $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ $(1, 0, 0)$	1 3 3	$\frac{9}{20} \widehat{K} $ $\frac{2}{15} \widehat{K} $ $\frac{1}{20} \widehat{K} $

TABELLE 13.1. Quadraturformeln auf Dreiecken mit baryzentrischen Koordinaten. Bei Anzahlen > 1 ergeben sich die Koordinaten der weiteren Quadraturpunkte durch zyklische Vertauschung.

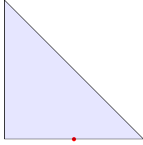
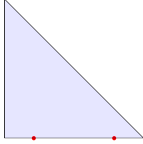
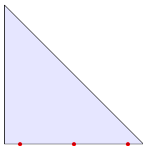
r	q		Koordinaten	Anzahl	Gewichte
1	1		$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	1	$ \widehat{F}_j $
3	2		$(\frac{1}{2} + \frac{1}{6}\sqrt{3}, \frac{1}{2} - \frac{1}{6}\sqrt{3}, 0)$ $(\frac{1}{2} - \frac{1}{6}\sqrt{3}, \frac{1}{2} + \frac{1}{6}\sqrt{3}, 0)$	1 1	$\frac{1}{2} \widehat{F}_j $ $\frac{1}{2} \widehat{F}_j $
5	3		$(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{5}}, \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{5}}, 0)$ $(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{5}}, \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{5}}, 0)$ $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	1 1 1	$\frac{5}{18} \widehat{F}_j $ $\frac{5}{18} \widehat{F}_j $ $\frac{8}{18} \widehat{F}_j $

TABELLE 13.2. Quadraturformeln auf Dreiecksseiten mit baryzentrischen Koordinaten. Formeln für die anderen Kanten entstehen jeweils durch zyklisches Vertauschen der Koordinaten.

Man berechnet wieder die lokalen Beiträge $a_{i,j}$ auf der Zelle K ⁶¹ **Beachte:** $\partial K \cap \Gamma$ ist entweder \emptyset oder besteht aus einer (oder mehreren) Facetten F_j von K . Dies muss ebenfalls in einer zum Gitter gehörenden Datenstruktur festgehalten werden.

⁶¹Man könnte hier auch facettenweise vorgehen.

Man transformiert das Integral (z. B. mittels T_K) auf eine Facette des Referenzelements und setzt eine Q-Formel⁶² ein:

$$\begin{aligned} \int_{F_j} p_{K,n}(s) \alpha(s) p_{K,m}(s) \, ds &= \frac{|F_j|}{|\widehat{F}_j|} \int_{\widehat{F}_j} \widehat{p}_n(\widehat{s}) \alpha(T_K(\widehat{s})) \widehat{p}_m(\widehat{s}) \, d\widehat{s} \\ &\approx \frac{|F_j|}{|\widehat{F}_j|} \sum_{\ell=1}^{q'} \omega_{\widehat{F}_j,\ell} \widehat{p}_n(\xi_{\widehat{F}_j,\ell}) \alpha(T_K(\xi_{\widehat{F}_j,\ell})) \widehat{p}_m(\xi_{\widehat{F}_j,\ell}), \end{aligned}$$

wobei $|F_j|$ bzw. $|\widehat{F}_j|$ die $(d-1)$ -dimensionalen Volumina der Facetten bezeichnen.

schwache Form	lokale Beiträge der Zelle K
$\int_{\Gamma} \varphi_j \alpha(s) \varphi_i \, ds$	$\frac{ F_j }{ \widehat{F}_j } \sum_{\ell=1}^{q'} \omega_{\widehat{F}_j,\ell} \widehat{p}_n(\xi_{\widehat{F}_j,\ell}) \alpha(T_K(s)) \widehat{p}_m(\xi_{\widehat{F}_j,\ell})$
$\int_{\Gamma} g(s) \varphi_i \, ds$	$\frac{ F_j }{ \widehat{F}_j } \sum_{\ell=1}^{q'} \omega_{\widehat{F}_j,\ell} g(T_K(s)) \widehat{p}_m(\xi_{\widehat{F}_j,\ell})$

Wie bereits in § 7.2 gesehen, führt die Assemblierung auf ein LGS⁶³

$$AU = F \tag{13.7}$$

mit

$$\begin{cases} A = (a[\varphi_j, \varphi_i])_{i,j=1}^S, & F = F(\varphi_i) \big|_{i=1}^S & \text{ohne Q-Fehler} \\ A = (a_{\mathbf{h}}[\varphi_j, \varphi_i])_{i,j=1}^S, & F = F_{\mathbf{h}}(\varphi_i) \big|_{i=1}^S & \text{mit Q-Fehler.} \end{cases}$$

⁶²Man benötigt mehrere Q-Formeln pro Zelle, für jede Facette eine.

⁶³Implementation für \mathbb{P}_1 - und \mathbb{P}_2 -Elemente mit verschiedenen Q-Formeln in der Übung