RUB

## Vertiefung Numerische Mathematik für den Masterstudiengang UTRM

R. Verfürth

Fakultät für Mathematik Ruhr-Universität Bochum

www.ruhr-uni-bochum.de/num1

Vorlesung / Bochum / Sommersemester 2010

1/264



Vertiefung Numerische Mathematik

RUB

## Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen

- ► Anfangswertprobleme
- ▶ Numerische Verfahren für Anfangswertprobleme
- ▶ Randwertprobleme
- ► Schießverfahren
- ▶ Mehrzielmethode
- Differenzenverfahren
- Variationsmethoden



#### Inhalt

Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen Partielle Differentialgleichungen Differenzenverfahren für partielle Differentialgleichungen Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen A posteriori Fehlerschätzung und Adaptivität Effiziente Löser Parabolische Differentialgleichungen Finite-Volumen-Methoden



Vertiefung Numerische Mathematik └─Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen └─Anfangswertprobleme

RUB

## Anfangswertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen erster Ordnung

- ► Gegeben:
  - ► *I* Intervall
  - ▶  $D \subset \mathbb{R}^d$  Menge
  - $f(t,y): I \times D \to \mathbb{R}^d$  Function
  - ▶  $t_0 \in I$  Anfangszeit
  - ▶  $y_0 \in D$  Anfangswert
- ► Gesucht:

Differencierbare Funktion  $y(t) : I \to D$  mit y'(t) = f(t, y(t)) für alle  $t \in I$  (Differentialgleichung) und  $y(t_0) = y_0$  (Anfangsbedingung)



### Beispiel: Konstante Wachstums- oder Sterberate

- $\blacktriangleright y'(t) = \lambda y(t), \, y(0) = c$
- ► Entspricht:
  - $\blacktriangleright I = \mathbb{R},$
  - $\blacktriangleright D = \mathbb{R},$
  - $\blacktriangleright f(t,y) = \lambda y,$
  - $\bullet t_0 = 0,$
  - ▶  $y_0 = c$
- ► Lösung:

 $y(t) = ce^{\lambda t}$ 



RUB

5/264

Vertiefung Numerische Mathematik —Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen —Anfangswertprobleme

## Beispiel: Gedämpfte Schwingung

- $y'(t) = \begin{pmatrix} \lambda & -\omega \\ \omega & \lambda \end{pmatrix} y(t), \ y(0) = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$
- ► Entspricht:
  - $\blacktriangleright I = \mathbb{R},$
  - $D = \mathbb{R}^2,$   $f(t, y) = (\lambda \omega) y,$

$$f(t,y) = \begin{pmatrix} \lambda & -\omega \\ \omega & \lambda \end{pmatrix} y$$

$$\bullet t_0 = 0,$$
$$\bullet y_0 = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

•  $y_0 = (\frac{c_1}{c_2})$ 

► Lösung:

$$y(t) = e^{\lambda t} \left( \begin{array}{c} c_1 \cos(\omega t) - c_2 \sin(\omega t) \\ c_1 \sin(\omega t) + c_2 \cos(\omega t) \end{array} \right)$$

6/ 264





8/ 264



## Differentialgleichungen höherer Ordnung

- Differentialgleichungen höherer Ordnung können durch Einführen neuer Unbekannter in Differentialgleichungen erster Ordnung transformiert werden.
- ▶ Beispiel: mechanisches System
  - $Mx''(t) + Rx'(t) + Kx(t) = F(t), x(0) = x_0, x'(0) = v_0$
  - Einführen von v(t) = x'(t) führt auf x'(t) = v(t),  $v'(t) = M^{-1}F(t) - M^{-1}Rv(t) - M^{-1}Kx(t),$  $x(0) = x_0, v(0) = v_0$
  - Dies entspricht

$$\begin{aligned} y(t) &= \begin{pmatrix} x(t) \\ v(t) \end{pmatrix}, \\ f(t,y) &= \begin{pmatrix} 0 \\ M^{-1}F(t) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -M^{-1}K & -M^{-1}R \end{pmatrix} y \end{aligned}$$

9/ 264

RUE

RU



## Abhängigkeit von den Anfangswerten

- ▶ Falls f zweimal stetig differenzierbar ist bzgl. der Variablen y, hängt die Lösung y des Anfangswertproblems  $y'(t) = f(t, y(t)), y(t_0) = y_0$  differenzierbar vom Anfangswert  $y_0$  ab, d.h.  $y(t) = y(t; y_0)$ .
- ▶ Die Ableitung Z(t) der Funktion  $y_0 \mapsto y(t; y_0)$  löst das Anfangswertproblem

 $Z'(t) = D_y f(t, y(t; y_0)) Z(t), Z(t_0) = I.$ 

Dabei ist  $D_y f(t, y)$  die Jacobi-Matrix von f bzgl. der Variablen y und I die Einheitsmatrix.

Vertiefung Numerische Mathematik Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen Anfangswertprobleme

## Eindeutige Lösbarkeit

- ▶ Falls f stetig differenzierbar ist bzgl. der Variablen y, gibt es ein Intervall  $J = (t_-, t_+) \subset I$  mit  $t_0 \in J$  und eine eindeutige auf J stetig differenzierbare Funktion y, die das Anfangswertproblem  $y'(t) = f(t, y(t)), y(t_0) = y_0$  löst.
- ► Es ist J = I oder y(t) strebt für  $t \to t_{\pm}$  gegen den Rand von D.
- ► Ist die Ableitung von f bzgl. der Variablen y auf  $I \times D$  beschränkt, so ist J = I.

10/ 264

RUF

Vertiefung Numerische Mathematik └─Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen └─Anfangswertprobleme

## Beispiel: Gedämpfte Schwingung

- $y'(t) = \begin{pmatrix} \lambda & -\omega \\ \omega & \lambda \end{pmatrix} y(t), \ y(0) = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ •  $y(t) = e^{\lambda t} \begin{pmatrix} c_1 \cos(\omega t) - c_2 \sin(\omega t) \\ c_1 \sin(\omega t) + c_2 \cos(\omega t) \end{pmatrix}$
- $D_y f(t, y) = \begin{pmatrix} \lambda & -\omega \\ \omega & \lambda \end{pmatrix}$  $Z(t) = \begin{pmatrix} z_{1,1}(t) & z_{1,2}(t) \\ z_{2,1}(t) & z_{2,2}(t) \end{pmatrix}$
- $Z(t) = \left( \begin{array}{c} z_{2,1}(t) & z_{2,2}(t) \end{array} \right)$

$$\blacktriangleright Z'(t) = \begin{pmatrix} \lambda & -\omega \\ \omega & \lambda \end{pmatrix} Z(t), \ Z(0) = I$$

- $z'_{1,1}(t) = \lambda z_{1,1}(t) \omega z_{2,1}(t), \ z_{1,1}(0) = 1$
- $z_{1,2}'(t) = \lambda z_{1,2}(t) \omega z_{2,2}(t), \ z_{1,2}(0) = 0$
- $z_{2,1}'(t) = \omega z_{1,1}(t) + \lambda z_{2,1}(t), \ z_{2,1}(0) = 0$
- $z_{2,2}'(t) = \omega z_{1,2}(t) + \lambda z_{2,2}(t), \ z_{2,2}(0) = 1$

#### Vertiefung Numerische Mathematik

└─Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen └─Numerische Verfahren für Anfangswertprobleme

## Grundidee

- ▶ Approximiere die Lösung y des Anfangswertproblems zu Zeiten  $t_0 < t_1 < t_2 < \dots$
- ▶ Bezeichne mit  $h_i = t_{i+1} t_i$  die *i*-te Schrittweite.
- ▶ Im einfachsten Fall ist  $h_i = h$  für alle *i*, d.h.  $t_i = t_0 + ih$ .
- Bezeichne mit  $\eta_i$  die Approximation für  $y(t_i)$ .
- Berechne  $\eta_{i+1}$  aus f und  $\eta_i$  (Einschrittverfahren) oder aus f und  $\eta_i, \ldots, \eta_{i-m}$  (Mehrschrittverfahren).
- Viele Verfahren, insbesondere Runge-Kutta-Verfahren, erhält man durch Anwenden einer Quadraturformel auf das Integral in der Identität

$$\eta_{i+1} - \eta_i \approx y(t_{i+1}) - y(t_i) = \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(s, y(s)) ds.$$

13/264

RU

RU

	Vertiefung Numerische Mathematik
	Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen
	Numerische Verfahren für Anfangswertprobleme

## Runge-Kutta-Verfahren

$$\eta_{0} = y_{0}$$

$$\eta_{i,j} = \eta_{i} + h_{i} \sum_{k=1}^{r} a_{jk} f(t_{i} + c_{k}h, \eta_{i,k}) \text{ für } j = 1, \dots, n$$

$$\eta_{i+1} = \eta_{i} + h_{i} \sum_{k=1}^{r} b_{k} f(t_{i} + c_{k}h, \eta_{i,k})$$

$$t_{i+1} = t_{i} + h_{i}$$

- ►  $0 \le c_1 \le \ldots \le c_r \le 1$
- $\blacktriangleright r$ heißt Stufe des Runge-Kutta-Verfahrens.
- ► Das Verfahren heißt explizit, wenn  $a_{jk} = 0$  ist für alle  $k \ge j$ .
- ▶ Das Verfahren heißt implizit, wenn  $a_{j,k} \neq 0$  ist für mindestens ein  $k \geq j$ .



Vertiefung Numerische Mathematik └─Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen └─Numerische Verfahren für Anfangswertprobleme

## Die einfachsten Verfahren

• Explicites Euler-Verfahren:  $\eta_0 = y_0,$  $\eta_{i+1} = \eta_i + h_i f(t_i, \eta_i),$ 

$$t_{i+1} = t_i + h_i$$

• Implizites Euler-Verfahren:  $\eta_0 = y_0,$   $\eta_{i+1} = \eta_i + h_i f(t_{i+1}, \eta_{i+1}),$  $t_{i+1} = t_i + h_i$ 



► Trapezregel oder Verfahren von Crank-Nicolson:  $\eta_0 = y_0,$   $\eta_{i+1} = \eta_i + \frac{h_i}{2} [f(t_i, \eta_i) + f(t_{i+1}, \eta_{i+1})],$  $t_{i+1} = t_i + h_i$ 

14/264

RUF



Vertiefung Numerische Mathematik └─Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen └─Numerische Verfahren für Anfangswertprobleme

## Ordnung

- ► Ein Einschrittverfahren hat die Ordnung p > 0, wenn gilt  $|y(t_1) \eta_1| = O(h_1^{p+1}).$
- Die Ordnung ist ein Maß f
  ür den Fehler eines einzelnen Schrittes des Verfahrens.
- ► Hat das Einschrittverfahren die Ordnung *p* und ist *f* bzgl. der Variablen *y* stetig differenzierbar mit beschränkter Ableitung, gilt  $|y(t_i) - \eta_i| = O\left(\left(\max_{1 \le j \le i} h_j\right)^p\right)$  für alle *i*.
- ▶ Die beiden Euler-Verfahren haben die Ordnung 1.
- ▶ Das Verfahren von Crank-Nicolson hat die Ordnung 2.

Vertiefung Numerische Mathematik

Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen -Numerische Verfahren für Anfangswertprobleme

## RUE

#### **Stabilität**

- ▶ Das numerische Verfahren sollte für einen möglichst großen Bereich von Schrittweiten eine Näherungslösung liefern, die das gleiche qualitative Verhalten hat wie die exakte Lösung des Anfangswertproblems.
- ▶ Für das Anfangswertproblem y'(t) = -100y(t), y(0) = 1mit exakter Lösung  $y(t) = e^{-100t}$  gilt:
  - ▶ Das explizite Euler-Verfahren liefert nur dann eine abklingende Lösung, wenn  $h_i \leq \frac{1}{50}$  ist für alle *i*.
  - ▶ Das implizite Euler-Verfahren und das Verfahren von Crank-Nicolson liefern für jede Schrittweite eine abklingende Lösung.
- ▶ Explizite Verfahren können nicht stabil sein.
- ▶ Es gibt stabile implizite Runge-Kutta-Verfahren beliebig hoher Ordnung.

17/264



Vertiefung Numerische Mathematik Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen -Numerische Verfahren für Anfangswertprobleme



## Beispiel: Ungedämpfte Schwingung

- $y'(t) = \begin{pmatrix} 0 & -6.3 \\ 6.3 & 0 \end{pmatrix} y(t)$  $y(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$
- ► Lösung:  $y(t) = \begin{pmatrix} \cos(6.3t) \\ \sin(6.3t) \end{pmatrix}$
- ▶ 100 Schritte expliziter Euler, impliziter Euler, Crank-Nicolson, klassischer Runge-Kutta, SDIRK Ordnung 3, SDIRK Ordnung 4 mit  $h_i = 0.1$  für alle *i*





Vertiefung Numerische Mathematik Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen -Numerische Verfahren für Anfangswertprobleme

## **Beispiel:** Gedämpfte Schwingung

- ►  $y'(t) = \begin{pmatrix} -0.9 & -6.3 \\ 6.3 & -0.9 \end{pmatrix} y(t)$  $y(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$
- ► Lösung:  $y(t) = e^{-0.9t} \left( \frac{\cos(6.3t)}{\sin(6.3t)} \right)$
- ▶ 100 Schritte expliziter Euler, impliziter Euler, Crank-Nicolson. klassischer Runge-Kutta. SDIRK Ordnung 3, SDIRK Ordnung 4 mit  $h_i = 0.1$  für alle *i*



18/ 264



Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen **Randwertprobleme** 

RUF

## Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen erster Ordnung

- ► Gegeben:
  - ▶ *I* Intervall
  - ▶  $a, b \in I$  zwei verschiedene Punkte
  - ▶  $D \subset \mathbb{R}^d$  Menge
  - $f(t,y): I \times D \to \mathbb{R}^d$  Function
  - $r(u, v) : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$  Function
- ► Gesucht:

Differenzierbare Function  $y(t): I \to D$  mit y'(t) = f(t, y(t)) für alle  $t \in I$  (Differentialgleichung) und r(y(a), y(b)) = 0 (Randbedingung)



## Beispiel: Gedämpfte Schwingung

• 
$$y'(t) = \begin{pmatrix} \lambda & -\omega \\ \omega & \lambda \end{pmatrix} y(t), \ y_1(0) = 1, \ y_1(\frac{\pi}{2\omega}) = 0$$

- ► Entspricht:
  - ▶  $I = \mathbb{R}$ ,
  - $D = \mathbb{R}^2$ ,

• 
$$f(t,y) = \begin{pmatrix} \lambda & -\omega \\ \omega & \lambda \end{pmatrix} y$$

- $\blacktriangleright a = 0,$
- $\blacktriangleright$   $b = \frac{\pi}{2\omega}$ ,

• 
$$r(u, \overline{v}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} u + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} v - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

► Lösung:

$$y(t) = e^{\lambda t} \left( \begin{array}{c} \cos(\omega t) \\ \sin(\omega t) \end{array} \right)$$

21/264

RUE



Vertiefung Numerische Mathematik Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen Randwertprobleme





• Gesucht sind  $u: [a, b] \to \mathbb{R}$  und  $\lambda \in \mathbb{R}$  mit

 $u'(t) = q(t, u(t)), \rho(u(a), u(b), \lambda) = 0$ 

► Entspricht:

• 
$$y(t) = \begin{pmatrix} u(t) \\ \lambda \end{pmatrix}$$

$$\bullet f(t,y) = \begin{pmatrix} g(t,y_1) \\ 0 \end{pmatrix}$$

•  $r(u,v) = \rho(u_1,v_1,v_2)$ 



Vertiefung Numerische Mathematik Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen **Randwertprobleme** 

## **Beispiel:** Mechanisches System

- $Mx''(t) + Rx'(t) + Kx(t) = F(t), x(0) = x_0, x(L) = x_L$
- ▶ Einführen von v(t) = x'(t) führt auf x'(t) = v(t),
  - $v'(t) = M^{-1}F(t) M^{-1}Rv(t) M^{-1}Kx(t),$

$$x(0) = x_0, x(L) = x_L$$

▶ Dies entspricht

$$y(t) = \begin{pmatrix} x(t) \\ v(t) \end{pmatrix},$$
  

$$f(t,y) = \begin{pmatrix} 0 \\ M^{-1}F(t) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -M^{-1}K & -M^{-1}R \end{pmatrix} y,$$
  

$$r(u,v) = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} u + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ I & 0 \end{pmatrix} v - \begin{pmatrix} x_0 \\ x_L \end{pmatrix}$$

22/264

RUE

RUE



Vertiefung Numerische Mathematik Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen Randwertprobleme

## **Beispiel: Freies Randwertproblem**

• Gesucht sind  $\beta > 0$  und  $u : [0, \beta] \to \mathbb{R}$  mit

$$u'(s) = g(s, u(s)), \, \rho(u(0), u(\beta)) = 0$$

► Entspricht:

• 
$$y(t) = \begin{pmatrix} u(t\beta) \\ \beta \end{pmatrix},$$

$$t = \frac{3}{y_2},$$

 $\blacktriangleright f(t,y) = \begin{pmatrix} y_2g(ty_2,y_1) \\ 0 \end{pmatrix},$ 

$$r(u,v) = \rho(u_1,v_1)$$

#### Vertiefung Numerische Mathematik

 $\square$ Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen  $\square$ Randwertprobleme

## Eindeutige Lösbarkeit

- Für Randwertprobleme gibt es keine allgemeine Existenzund Eindeutigkeitsaussage wie für Anfangswertprobleme.
- Die Lösbarkeit und die Zahl allfälliger Lösungen hängt von dem konkreten Beispiel und dem Zusammenspiel von Differentialgleichung und Randbedingung ab.
- ► Beispiel: Schwingung
  - $\bullet y'(t) = \begin{pmatrix} 0 & -\omega \\ \omega & 0 \end{pmatrix} y(t), \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} y(0) + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} y(L) = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$
  - Allgemeine Lösung der Differentialgleichung:

 $y(t) = \begin{pmatrix} c_1 \cos(\omega t) - c_2 \sin(\omega t) \\ c_1 \sin(\omega t) + c_2 \cos(\omega t) \end{pmatrix}$ 

- $L = \frac{2\pi}{\omega}, \alpha = 0, \beta = 1$  führt auf die widersprüchlichen Bedingungen  $c_1 = 0$  und  $c_1 = 1$ .
- $L = \frac{2\pi}{\omega}, \alpha = 0, \beta = 0$  führt auf die einzige Bedingung  $c_1 = 0$ , so dass  $c_2$  beliebig ist.

25/264

RUE

27/264

RU

Vertiefung Numerische Mathematik
Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichunger
Schießverfahren

## Schießverfahren

- **0.** Gegeben sei ein Startwert  $s^{(0)} \in \mathbb{R}^d$ . Setze i = 0.
- 1. Berechne mit einem numerischen Verfahren für Anfangswertprobleme eine Näherung  $\eta^{(i)}(t)$  für die Lösung  $y^{(i)}$  des Anfangswertproblems  $y^{(i)'}(t) = f(t, y^{(i)}(t)),$  $y^{(i)}(a) = s^{(i)}$ . Setze  $F^{(i)} = r(s^{(i)}, \eta^{(i)}(b)).$
- 2. Berechne mit dem gleichen Verfahren wie in Schritt 1 und den gleichen Gitterpunkten eine Näherung  $\zeta^{(i)}(t)$  für die Lösung  $Z^{(i)}$  des Anfangswertproblems  $Z^{(i)'}(t) = D_y f(t, \eta^{(i)}(t)) Z^{(i)}(t), Z^{(i)}(a) = I.$  Setze  $D^{(i)} = D_u r(s^{(i)}, \eta^{(i)}(b)) + D_v r(s^{(i)}, \eta^{(i)}(b)) \zeta^{(i)}(b).$
- **3.** Löse das lineare Gleichungssystem  $D^{(i)}\Delta s^{(i)} = -F^{(i)}$ . Setze  $s^{(i+1)} = s^{(i)} + \Delta s^{(i)}$ , erhöhe *i* um 1 und gehe zu Schritt **1** zurück.



Vertiefung Numerische Mathematik └─Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen └─Schießverfahren

#### Idee

- ► Bezeichne mit y(t;s) die Lösung des Anfangswertproblems y'(t) = f(t, y(t)), y(a; s) = s.
- ▶ Dann löst y(t; s) das Randwertproblem y'(t) = f(t, y(t)),r(y(a), y(b)) = 0 genau dann, wenn gilt r(s, y(b; s)) = 0.
- ▶ Bestimme mit dem Newton-Verfahren eine Nullstelle der Funktion F(s) = r(s, y(b; s)).
- ▶ Die Ableitung DF(s) von F an der Stelle s ist gegeben durch DF(s) = D<sub>u</sub>r(s, y(b; s)) + D<sub>v</sub>r(s, y(b; s))Z(b; s), wobei Z das Anfangswertproblem Z'(t; s) = D<sub>u</sub>f(t, y(t; s))Z(t; s), Z(a; s) = I löst.
- Löse die beiden Anfangswertprobleme für y(t; s) und Z(t; s) näherungsweise mit einem numerischen Verfahren für Anfangswertprobleme, wobei beide Male die gleichen Gitterpunkte  $t_i$  benutzt werden.

26/264

RUF



Vertiefung Numerische Mathematik └─Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen └─Schießverfahren

## Eigenschaften

- $\blacktriangleright$  Die Anfangswertprobleme in Schritt 1 haben <br/> d Unbekannte.
- Die Anfangswertprobleme in Schritt 2 haben d<sup>2</sup> Unbekannte.
- ▶ Die Anfangswertprobleme in Schritt 2 sind linear.
- Die linearen Gleichungssysteme in Schritt 2 haben d Gleichungen und Unbekannte.
- ▶ Das Newton-Verfahren sollte gedämpft werden.
- Falls das Newton-Verfahren konvergiert, ist die Konvergenz quadratisch.



## Ein warnendes Beispiel

▶ Randwertproblem:

$$y'(t) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 110 & 1 \end{pmatrix} y(t), \ y_1(0) = 1, \ y_1(10) = 1$$

► Lösung:

$$y(t) = c_1 e^{-10t} \begin{pmatrix} 1 \\ -10 \end{pmatrix} + c_2 e^{11t} \begin{pmatrix} 1 \\ 11 \end{pmatrix}$$
  
mit  $c_1 = \frac{e^{110} - 1}{e^{110} - e^{-100}}, c_2 = \frac{1 - e^{-100}}{e^{110} - e^{-100}}$ 

► Lösung des Anfangswertproblems zum Anfangswert *s*:  $y(t;s) = \frac{11s_1 - s_2}{21} e^{-10t} \begin{pmatrix} 1 \\ -10 \end{pmatrix} + \frac{10s_1 + s_2}{21} e^{11t} \begin{pmatrix} 1 \\ 11 \end{pmatrix}$ 

• Exakter Anfangswert: 
$$(-10)$$

$$s^* = \begin{pmatrix} 1 \\ -10 + 21 \cdot \frac{1 - e^{-100}}{e^{110} - e^{-100}} \end{pmatrix}$$

▶ Der falsche Anfangswert  $\tilde{s} = \begin{pmatrix} 1 \\ -10+10^{-9} \end{pmatrix}$  mit einem relativen Fehler von  $10^{-10}$  liefert  $y_1(10; \tilde{s}) \approx 10^{37}$ .

29/264

RUE

RU

Vertiefung Numerische Mathematik └Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen └Mehrzielmethode

### Idee

- ► Unterteile das Intervall [a, b] durch Zwischenpunkte  $a = \tau_1 < \tau_2 < \ldots < \tau_m = b.$
- ► Für  $s_1, \ldots, s_m \in \mathbb{R}^d$  bezeichne mit  $y(t; \tau_k, s_k)$  die Lösung des Anfangswertproblems  $y'(t) = f(t, y(t)), y(\tau_k; s_k) = s_k$ .
- ► Definiere die stückweise Funktion  $\tilde{y}$  durch  $\tilde{y}(t) = y(t; \tau_k, s_k)$ für  $\tau_k \leq t < \tau_{k+1}$  und  $1 \leq k \leq m-1$  und  $\tilde{y}(\tau_m) = s_m$ .
- ▶ Dann löst  $\tilde{y}$  das Randwertproblem y'(t) = f(t, y(t)),r(y(a), y(b)) = 0 genau dann, wenn gilt  $y(\tau_{k+1}; \tau_k, s_k) = s_{k+1}$  für  $1 \le k \le m - 1$  und  $r(s_1, s_m) = 0$ .
- ▶ Dies definiert ein Gleichungssystem  $F(s_1, \ldots, s_m) = 0$ , das mit dem Newton-Verfahren gelöst werden kann.
- ▶ Die Berechnung der Ableitung von F erfordert das Lösen von Anfangswertproblemen auf den Intervallen  $[\tau_k, \tau_{k+1}]$ .



Vertiefung Numerische Mathematik └─Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen └─Mehrzielmethode

## Beobachtung

- Das Schie
  ßverfahren versagt, weil Lösungen zu verschiedenen Anfangswerten exponentiell auseinander laufen können.
- Man kann diesen Effekt vermeiden, indem man Anfangswertprobleme nur auf kleinen Intervallen löst.

30/ 264

RUF



Vertiefung Numerische Mathematik └─Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen └─Mehrzielmethode

## Struktur von DF

 $\blacktriangleright$  DF hat die Struktur

$$\begin{pmatrix} G_1 & -I & & \\ & G_2 & -I & & 0 \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & G_{m-1} & -I \\ A & 0 & & 0 & B \end{pmatrix}$$

 Daher ist in jedem Newton-Schritt ein System zu lösen, das die Form hat:

$$G_1 \Delta s_1 - \Delta s_2 = -F_1, \dots, G_{m-1} \Delta s_{m-1} - \Delta s_m = -F_{m-1},$$
  
 $A \Delta s_1 + B \Delta s_m = -F_m$ 

▶ Sukzessive Elimination von  $\Delta s_2, \ldots, \Delta s_m$  führt auf

$$(A + BG_{m-1} \dots G_1)\Delta s_1 = -F_m - B\sum_{j=1}^{m-1} (\prod_{i=j+1}^{m-1} G_i)F_j$$



#### Mehrzielmethode I

- **0.** Gegeben seien m Punkte  $a = \tau_1 < \ldots < \tau_m = b$  und mVektoren  $s_1^{(0)}, \ldots, s_m^{(0)} \in \mathbb{R}^d$ . Setze i = 0.
- 1. Bestimme mit einem numerischen Verfahren für Anfangswertprobleme Näherungen  $\eta^{(i,j)}(t)$ ,  $1 \le j \le m-1$ , für die Lösungen  $y^{(i,j)}$  der Anfangswertprobleme  $y^{(i,j)'}(t) = f(t, y^{(i,j)}(t)), y^{(i,j)}(\tau_j) = s_j^{(i)}$  für  $1 \le j \le m-1$ . Setze  $F_j^{(i)} = \eta^{(i,j)}(\tau_{j+1}) - s_{j+1}^{(i)}$  für  $1 \le j \le m-1$ und  $F_m^{(i)} = r(s_1^{(i)}, s_m^{(i)})$ .

33/264

RU



Vertiefung Numerische Mathematik Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen Mehrzielmethode

## RUB

## Mehrzielmethode III

3. Berechne die Matrix  $H^{(i)} = A^{(i)} + B^{(i)}G^{(i)}_{m-1} \cdot \ldots \cdot G^{(i)}_1$ und den Vektor  $\varphi^{(i)} = -F^{(i)}_m - B^{(i)} \sum_{j=1}^{m-1} (\prod_{l=j+1}^{m-1} G^{(i)}_l)F^{(i)}_j$ . Löse das lineare Gleichungssystem  $H^{(i)}\Delta s^{(i)}_1 = \varphi^{(i)}$ und berechne rekursiv die Vektoren  $\Delta s^{(i)}_{k+1} = G^{(i)}_k \Delta s^{(i)}_k + F^{(i)}_k \text{ für } 1 \le k \le m-1.$ Setze  $s^{(i+1)}_k = s^{(i)}_k + \Delta s^{(i)}_k$  für  $1 \le k \le m$ , erhöhe i um 1 und gehe zu Schritt 1 zurück. Vertiefung Numerische Mathematik └─Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen └─Mehrzielmethode

### Mehrzielmethode II

2. Bestimme mit dem gleichen Verfahren wie in Schritt 1 und den gleichen Gitterpunkten Näherungen  $\zeta^{(i,j)}(t)$  für die Lösungen  $Z^{(i,j)'}(t) = D_y f(t, \eta^{(i,j)}(t)) Z^{(i,j)}(t), Z^{(i,j)}(\tau_j) = I$  für  $1 \le j \le m - 1$ . Setze  $G_j^{(i)} = \zeta^{(i,j)}(\tau_{j+1})$  für  $1 \le j \le m - 1$ und  $A^{(i)} = D_u r(s_1^{(i)}, s_m^{(i)}),$  $B^{(i)} = D_v r(s_1^{(i)}, s_m^{(i)}).$ 

RUF



Vertiefung Numerische Mathematik └─Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen └─Mehrzielmethode

#### Eigenschaften

- Bei gleicher Zahl von Gitterpunkten auf dem gesamten Intervall [a, b] erfordern die Anfangswertprobleme beim Schießverfahren und bei der Mehrzielmethode den gleichen Aufwand.
- Die Anfangswertprobleme auf den Teilintervallen können parallel gelöst werden.
- ▶ Wenn keine zusätzlichen Informationen bekannt sind, können die Punkte  $\tau_1, \ldots, \tau_m$  äquidistant gewählt werden.



## ${\bf Sturm-Liouville-Problem}$

- ► Gegeben:
  - ▶  $p: [0,1] \to \mathbb{R}$  stetig differenzierbare Funktion mit  $\underline{p} = \min_{0 \le x \le 1} p(x) > 0$
  - $q: [0,1] \rightarrow \mathbb{R}$  stetige Funktion mit  $\underline{q} = \min_{0 \le x \le 1} q(x) > 0$
- ► Gesucht:

Zweimal stetig differenzierbare Funktion  $u: [0,1] \to \mathbb{R}$  mit -(pu')' + qu = f in (0,1) (Differentialgleichung) und u(0) = 0, u(1) = 0 (Randbedingung)

37/264

RUE

RUE



Vertiefung Numerische Mathematik Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen Differenzenverfahren



▶ Der symmetrische Differenzenquotient ist definiert durch

 $\partial_h \varphi(x) = \frac{1}{h} \left[ \varphi(x + \frac{h}{2}) - \varphi(x - \frac{h}{2}) \right].$ 

 Taylor-Entwicklung liefert f
ür jede dreimal stetig differenzierbare Funktion:

 $\partial_h \varphi(x) = \varphi'(x) + \frac{h^2}{24} \varphi'''(x + \theta h)$ mit einem geeigneten  $\theta \in (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}).$ 



Vertiefung Numerische Mathematik Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen Differenzenverfahren

## Verallgemeinerung

Jedes Sturm-Liouville-Problem der Form

-(pu')' + qu = f in  $(a, b), u(a) = \alpha, u(b) = \beta$ 

kann transformiert werden in ein äquivalentes Problem mit:

 $a = 0, b = 1, \alpha = 0, \beta = 0.$ 

• Suche dazu u in der Form

$$\iota(x) = \alpha + \frac{\beta - \alpha}{b - a}(x - a) + \boldsymbol{v}(x)$$

$$nit \ v(0) = 0, \ v(1) = 0$$

und führe eine neue Variable ein durch

$$t = \frac{x-a}{b-a}.$$

38/264

RUE



Vertiefung Numerische Mathematik Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen Differenzenverfahren

#### Idee

 $\blacktriangleright$ Ersetze Ableitungen durch Differenzenquotienten  $\partial_h$ 

$$\begin{aligned} &(-(pu')')(x) \\ &\approx (-\partial_h(pu'))(x) \\ &= \frac{1}{h} \Big[ p(x - \frac{h}{2}) u'(x - \frac{h}{2}) - p(x + \frac{h}{2}) u'(x + \frac{h}{2}) \Big] \\ &\approx \frac{1}{h} \Big[ p(x - \frac{h}{2}) \partial_h u(x - \frac{h}{2}) - p(x + \frac{h}{2}) \partial_h u(x + \frac{h}{2}) \Big] \\ &= \frac{1}{h^2} \Big[ p(x - \frac{h}{2}) (u(x) - u(x - h)) - p(x + \frac{h}{2}) (u(x + h) - u(x)) \Big] \end{aligned}$$

► Fordere die resultierenden Gleichungen nur in Gitterpunkten ih mit  $h = \frac{1}{n+1}$  und  $1 \le i \le n$ .



Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen

## Differenzendiskretisierung

- ▶ Wähle eine Gitterweite  $h = \frac{1}{n+1}$ .
- <br/> Für  $1 \leq i \leq n$  setze $f_i = f(ih), \, q_i = q(ih), \, p_{i\pm\frac{1}{2}} = p(ih\pm\frac{h}{2})$
- Bestimme  $u_0, \ldots, u_{n+1}$  so dass

 $u_0 = 0, u_{n+1} = 0$ 

und für  $1 \le i \le n$ 

 $f_{i} = -\frac{1}{h^{2}}p_{i-\frac{1}{2}}u_{i-1} + \left(\frac{1}{h^{2}}\left[p_{i-\frac{1}{2}} + p_{i+\frac{1}{2}}\right] + q_{i}\right)u_{i} - \frac{1}{h^{2}}p_{i+\frac{1}{2}}u_{i+1}$ 

• Bezeichne mit  $u_h$  die stetige, stückweise lineare Funktion, die an den Stellen *ih* mit  $u_i$  übereinstimmt.

41/264

RUE

RU



Vertiefung Numerische Mathematik Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen Differenzenverfahren

## Fehlerabschätzung

- ► Es gelte:
  - $\blacktriangleright p$  ist dreimal stetig differenzierbar.
  - Die Lösung u des Sturm-Liouville-Problems ist viermal stetig differenzierbar.
- ► Dann gilt die Fehlerabschätzung

 $\max_{0 \le x \le 1} |u(x) - u_h(x)| \le ch^2.$ 

 Die Konstante c hängt von der unteren Schranke <u>q</u> für q, den Ableitungen bis zur Ordnung 3 von p und den Ableitungen bis zur Ordnung 4 von u ab.



Vertiefung Numerische Mathematik Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen Differenzenverfahren

## Eigenschaften

- ▶ Die Differenzendiskretisierung führt auf ein lineares Gleichungssystem mit n Gleichungen für die nUnbekannten  $u_1, \ldots, u_n$ .
- Die Matrix des Gleichungssystems ist symmetrisch, positiv definit und tridiagonal mit positiven Diagonalelementen und negativen Nebendiagonalelementen.
- ▶ Das Gleichungssystem hat eine eindeutige Lösung.
- Die Lösung des Gleichungssystems mit dem Gaußschen Eliminationsverfahren oder der Cholesky-Zerlegung erfordert O(n) Operationen.

#### 42/ 264

RUF

Vertiefung Numerische Mathematik Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen Variationsmethoden

## Idee der Variationsformulierung

- ▶ Multipliziere die Differentialgleichung mit einer stetig differenzierbaren Funktion v mit v(0) = 0, v(1) = 0
  - $-(pu')'(x)v(x) + q(x)u(x)v(x) = f(x)v(x) \text{ für } 0 \le x \le 1.$
- ▶ Integriere das Ergebnis von 0 bis 1

$$\int_{0}^{1} \left[ -(pu')'(x)v(x) + q(x)u(x)v(x) \right] dx = \int_{0}^{1} f(x)v(x)dx.$$

► Integriere den Ableitungsterm partiell

$$-\int_0^1 (pu')'(x)v(x)dx$$
  
=  $p(0)u'(0)v(0) - p(1)u'(1)v(1) + \int_0^1 p(x)u'(x)v'(x)dx$   
=  $\int_0^1 p(x)u'(x)v'(x)dx$ 



Vertiefung Numerische Mathematik └─Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen └─Variationsmethoden

#### Probleme

- Für eine sinnvolle Variationsformulierung müssen die Eigenschaften der Funktionen u und v präziser gefasst werden.
- Klassische Eigenschaften wie stetige Differenzierbarkeit sind zu restriktiv.
- Der Begriff der Ableitung muss daher geeignet verallgemeinert werden.
- In Hinblick auf die Diskretisierung sollten insbesondere stückweise differenzierbare Funktionen im erweiterten Sinn differenzierbar sein.

45/264

RUE



Vertiefung Numerische Mathematik Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen Variationsmethoden

#### Beispiele

- Jede stetig differenzierbare Funktion ist schwach differenzierbar und die schwache Ableitung stimmt mit der klassischen Ableitung überein.
- Jede stetige, stückweise stetig differenzierbare Funktion ist schwach differenzierbar und die schwache Ableitung stimmt mit der stückweisen klassischen Ableitung überein.
- u(x) = 1 |2x 1| ist schwach differenzierbar mit

schwacher Ableitung  $w(x) = \begin{cases} 2 & \text{für } 0 < x < \frac{1}{2} \\ -2 & \text{für } \frac{1}{2} < x < 1 \end{cases}$ 

(Beachte: Der Wert  $w(\frac{1}{2})$  ist beliebig.).



Vertiefung Numerische Mathematik Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen Variationsmethoden

### Schwache Ableitung

▶ Partielle Integration liefert für stetig differenzierbare Funktionen u und v mit v(0) = 0, v(1) = 0:

$$\int_0^1 u'(x)v(x)dx = u(1)v(1) - u(0)v(0) - \int_0^1 u(x)v'(x)dx$$
$$= -\int_0^1 u(x)v'(x)dx$$

► Die Funktion u heißt schwach differenzierbar mit schwacher Ableitung w, wenn für jede stetig differenzierbare Funktion v mit v(0) = 0, v(1) = 0 gilt

$$\int_0^1 w(x)v(x)dx = -\int_0^1 u(x)v'(x)dx$$

46/264

RUF



Vertiefung Numerische Mathematik └─Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen └─Variationsmethoden

#### Sobolev-Räume

- $||v|| = \left\{ \int_0^1 |v(x)|^2 dx \right\}^{\frac{1}{2}}$  ist die  $L^2$ -Norm.
- ▶  $L^2(0,1)$  ist der Lebesgue-Raum aller Funktionen v mit endlicher  $L^2$ -Norm ||v||.
- ▶  $H^1(0, 1)$  ist der Sobolev-Raum aller Funktionen v in  $L^2(0, 1)$ , deren schwache Ableitung existiert und ebenfalls in  $L^2(0, 1)$  ist.
- ▶  $H_0^1(0,1)$  ist der Sobolev-Raum aller Funktionen v in  $H^1(0,1)$  mit v(0) = 0 und v(1) = 0.



 $\hfill \hfill \hfill$ 

## Beispiele

- ▶ Jede beschränkte Funktion ist in  $L^2(0,1)$ .
- ▶  $v(x) = \frac{1}{\sqrt{x}}$  ist nicht in  $L^2(0, 1)$ , da das Integral von  $\frac{1}{x} = v(x)^2$  nicht endlich ist.
- ▶ Jede stetig differenzierbare Funktion ist in  $H^1(0,1)$ .
- ▶ Jede stetige, stückweise stetig differenzierbare Funktion ist in  $H^1(0,1)$ .
- v(x) = 1 |2x 1| ist in  $H_0^1(0, 1)$ .
- ►  $v(x) = 2\sqrt{x}$  ist nicht in  $H^1(0, 1)$ , da das Integral von  $\frac{1}{x} = (v'(x))^2$  nicht endlich ist.
- Im Gegensatz zu mehrdimensionalen Problemen sind Funktionen in  $H^1(0, 1)$  immer stetig.

49/264

RUE



Vertiefung Numerische Mathematik Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen Variationsmethoden



- ▶ Das Variationsproblem hat eine eindeutige Lösung.
- Die Lösung des Variationsproblems ist das eindeutige Minimum in H<sup>1</sup><sub>0</sub>(0,1) der Energiefunktion

$$\frac{1}{2}\int_0^1 \left[ p(x)u'(x)^2 + q(x)u(x)^2 \right] dx - \int_0^1 f(x)u(x)dx$$

RU

Vertiefung Numerische Mathematik Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen Variationsmethoden

## Variationsproblem

Finde  $\mathbf{u} \in H_0^1(0,1)$  so, dass für alle  $\mathbf{v} \in H_0^1(0,1)$  gilt

$$\int_0^1 [p(x)u'(x)v'(x) + q(x)u(x)v(x)]dx = \int_0^1 f(x)v(x)dx$$

50/ 264

RUF



Vertiefung Numerische Mathematik └─Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen └─Variationsmethoden

## Finite-Element-Räume

- ➤ T bezeichnet eine beliebige Unterteilung des Intervalls (0,1) in nicht überlappende Teilintervalle.
- ▶  $k \ge 1$  bezeichnet einen beliebigen Polynomgrad.
- ▶  $S^{k,0}(\mathcal{T})$  ist der Finite-Element-Raum aller stetigen Funktionen, die stückweise auf den Intervallen von  $\mathcal{T}$ Polynome vom Grad höchstens k sind.
- $S_0^{k,0}(\mathcal{T})$  ist der Finite-Element-Raum aller Funktionen v in  $S^{k,0}(\mathcal{T})$  mit v(0) = 0 und v(1) = 0.



Vertiefung Numerische Mathematik Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen Variationsmethoden

# RUB

#### Finite-Element-Problem

Finde  $u_{\mathcal{T}} \in S_0^{k,0}(\mathcal{T})$  (Ansatzfunktion) so, dass für alle  $v_{\mathcal{T}} \in S_0^{k,0}(\mathcal{T})$  (Testfunktion) gilt

$$\int_0^1 \left[ p(x) u_{\mathcal{T}}'(x) v_{\mathcal{T}}'(x) + q(x) u_{\mathcal{T}}(x) v_{\mathcal{T}}(x) \right] dx = \int_0^1 f(x) v_{\mathcal{T}}(x) dx$$

53/264

RUE



Vertiefung Numerische Mathematik Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen Variationsmethoden

## Nodale Basisfunktionen

- Lineare Elemente: Die Funktionen, die in genau einem Intervall-Endpunkt den Wert 1 annehmen und an allen anderen Intervall-Endpunkten den Wert 0 haben.
- Quadratische Elemente: Die Funktionen, die in genau einem Intervall-End- oder -Mittelpunkt den Wert 1 annehmen und an allen anderen Intervall-End- oder Mittelpunkten den Wert 0 haben.



Vertiefung Numerische Mathematik └─Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen └─Variationsmethoden

#### Eigenschaften des Finite-Element-Problems

- ▶ Das Finite-Element-Problem hat eine eindeutige Lösung.
- ▶ Die Lösung des Finite-Element-Problems ist das eindeutige Minimum in  $S_0^{k,0}(\mathcal{T})$  der Energiefunktion.
- Nach Wahl einer Basis für S<sub>0</sub><sup>k,0</sup>(*T*) führt das Finite-Element-Problem auf ein lineares Gleichungssystem mit k ⋅ #*T* − 1 Unbekannten und einer symmetrischen, positiv definiten, tridiagonalen Matrix (Steifigkeitsmatrix).
- Meistens werden die Integrale durch Quadraturformeln angenähert.
- Meistens wird k gleich 1 (lineare Elemente) oder 2 (quadratische Elemente) gewählt.
- ▶ In der Regel wird eine nodale Basis für  $S_0^{k,0}(\mathcal{T})$  benutzt.

54/264



Vertiefung Numerische Mathematik Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen Variationsmethoden

RUE

#### A priori Fehlerabschätzung

- Bezeichne mit  $h_{\mathcal{T}}$  die maximale Länge der Intervalle in  $\mathcal{T}$ .
- Dann gelten folgende a priori Fehlerabschätzungen für die Lösungen u des Variationsproblems und u<sub>T</sub> des Finite-Element-Problems:
  - $\|u' u_{\mathcal{T}}'\| \le c_1 h_{\mathcal{T}}$  $\|u u_{\mathcal{T}}\| \le c_2 h_{\mathcal{T}}^2$
- Die Konstanten c<sub>1</sub> und c<sub>2</sub> hängen nur von der unteren Schranke <u>p</u> für p, Ableitungen bis zur Ordnung 1 von p, dem Maximum von q und Ableitungen bis zur Ordnung 2 von u ab.



### Grenzen der a priori Fehlerabschätzung

- ▶ Sie trifft nur eine Aussage über das asymptotische Verhalten des Fehlers für  $h_{\mathcal{T}} \rightarrow 0$  d.h. für immer feiner werdende Unterteilungen.
- Sie gibt keine Information über die tatsächliche Größe des Fehlers.
- Sie erlaubt keine Information über die räumliche Verteilung des Fehlers, die benötigt wird, um zusätzliche Gitterpunkte dort zu platzieren, wo der Fehler groß ist.

57/264

RUE



Vertiefung Numerische Mathematik Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen Variationsmethoden

#### Eigenschaften

- ►  $f + (pu'_{\mathcal{T}})' qu_{\mathcal{T}}$  ist das intervallweise Residuum der Finite-Element-Lösung bzgl. der Differentialgleichung.
- Der Aufwand zur Berechnung der Fehlerindikatoren ist vernachlässigbar.
- Die a posteriori Fehlerabschätzung gibt zuverlässige Informationen über die tatsächliche Größe des Fehlers und seine räumliche Verteilung.
- Die a posteriori Fehlerabschätzung kann für eine adaptive Gitterverfeinerung genutzt werden, so dass jede vorgegebene Genauigkeit mit (nahezu) minimaler Anzahl an Unbekannten erreicht werden kann.



## A posteriori Fehlerabschätzung

► Für jedes Intervall K in  $\mathcal{T}$  bezeichne mit  $h_K$  seine Länge und definiere den Fehlerindikator  $\eta_K$  durch

$$\eta_K = h_K \Big\{ \int_K \left| f + (p u_{\mathcal{T}}')' - q u_{\mathcal{T}} \right|^2 dx \Big\}^{rac{1}{2}}.$$

▶ Dann gelten die a posteriori Fehlerabschätzungen:

$$\begin{aligned} \|u' - u_{\mathcal{T}}'\| &\leq \left(\underline{p}\right)^{-1} \left\{ \sum_{K \in \mathcal{T}} \eta_K^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \\ \eta_K &\leq c \left\{ \int_K |u' - u_{\mathcal{T}}'|^2 dx \right\}^{\frac{1}{2}} \text{ für jedes } K \text{ in } \end{aligned}$$

58/ 264

RUF



Vertiefung Numerische Mathematik └─Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen └─Variationsmethoden

## Adaptive Gitterverfeinerung

- 0. Gegeben: eine Toleranz  $\varepsilon$ . Gesucht: Eine Finite-Element-Lösung mit Fehler  $\leq \varepsilon$ .
- 1. Wähle eine grobe Unterteilung  $\mathcal{T}_0$  und setze k = 0.
- 2. Löse das Finite-Element-Problem zu  $\mathcal{T}_k$ .
- 3. Für jedes Intervall K in  $\mathcal{T}_k$  bestimme den Fehlerindikator  $\eta_K$  und den Maximalwert  $\eta_k = \max_{K \in \mathcal{T}_k} \eta_K$ .
- 4. Falls  $\eta_k \leq \varepsilon$  ist, stopp.
- 5. Für jedes K in  $\mathcal{T}_k$  prüfe, ob  $\eta_K \geq \frac{1}{2}\eta_k$  ist. Falls dies der Fall ist, halbiere K, sonst lasse K unverändert. Dies bestimmt die neue Unterteilung  $\mathcal{T}_{k+1}$ . Erhöhe k um 1 und gehe zu Schritt **2** zurück.

## Partielle Differentialgleichungen

- ► Beispiele
- ► Typen
- ► Lösungseigenschaften
- Überblick über Diskretisierungsmethoden

61/264

RU



Vertiefung Numerische Mathematik Partielle Differentialgleichungen Beispiele

# RUE

## **Poisson-Gleichung II**

- Die Randbedingungen können in dem Sinne gemischt werden, dass auf einem Teil des Randes die Dirichlet- und auf einem anderen, dazu disjunkten Teil die Neumann-Bedingung gelten soll.
- ▶ In jedem Punkt des Randes muss genau eine der Bedingungen gefordert werden.
- ▶ Die rechten Seiten 0 der Randbedingungen können durch beliebige gegebene Funktionen ersetzt werden.
- $\blacktriangleright$  Die Auslenkung *u* minimiert die Energiefunktion

 $\frac{1}{2}\int_{\Omega} |\nabla u|^2 dx - \int_{\Omega} f u dx$  in einer geeigneten Menge zulässiger Auslenkungen.



Vertiefung Numerische Mathematik Partielle Differentialgleichungen Beispiele

## Poisson-Gleichung I

▶ Die vertikale Auslenkung  $u: \Omega \to \mathbb{R}$  einer elastischen, nicht dehnbaren Membran mit Querschnittsfläche  $\Omega$  in der (x, y)-Ebene unter Einfluss einer vertikalen Last  $f: \Omega \to \mathbb{R}$ wird durch die Membran- oder Poisson-Gleichung beschrieben:

$$-\Delta u = -\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f$$
 in  $\Omega$ 

- Auf dem Rand  $\Gamma$  von  $\Omega$  muss die Auslenkung eine der folgenden Randbedingungen erfüllen:
  - Dirichlet-Randbedingung u = 0 für eine eingespannte Membran,
  - ▶ Neumann-Randbedingung  $\mathbf{n} \cdot \nabla u = \frac{\partial u}{\partial n} = 0$  für eine frei bewegliche Membran.

RUF

Vertiefung Numerische Mathematik Beispiele

Partielle Differentialgleichungen

## Biharmonische Gleichung I

▶ Die vertikale Auslenkung  $u: \Omega \to \mathbb{R}$  der Mittelebene  $\Omega$ einer dünnen, starren Platte unter Einfluss einer vertikalen Last  $f: \Omega \to \mathbb{R}$  wird durch die Platten- oder biharmonische Gleichung beschrieben:

$$\Delta^2 u = \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + 2\frac{\partial^4 u}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4 u}{\partial y^4} = f \text{ in } \Omega.$$

- Auf dem Rand  $\Gamma$  von  $\Omega$  muss die Auslenkung eine der folgenden Randbedingungen erfüllen:
  - u = 0 und ∂u/∂n = 0 für eine eingespannte Platte,
     u = 0 und Δu = 0 für eine frei bewegliche Platte.



Vertiefung Numerische Mathematik Partielle Differentialgleichungen Beispiele

RUE

### Biharmonische Gleichung II

- ▶ Die Randbedingungen können in dem Sinne gemischt werden, dass auf einem Teil des Randes die Platte fest und auf einem anderen, dazu disjunkten Teil frei sein soll.
- ▶ In jedem Punkt des Randes muss genau eine der Bedingungen gefordert werden.
- Die rechten Seiten 0 der Randbedingungen können durch beliebige gegebene Funktionen ersetzt werden.
- $\blacktriangleright$  Die Auslenkung *u* minimiert die Energiefunktion

 $\frac{1}{2}\int_{\Omega} |\Delta u|^2 dx - \int_{\Omega} f u dx$  in einer geeigneten Menge zulässiger Auslenkungen.

65/264

Vertiefung Numerische Mathe
Partielle Differentialgleichu
Beispiele

matik ngen

RUE

## Lineare Elastizitätstheorie II

- $\triangleright \varepsilon$  heißt Verzerrung (engl. strain).
- $\blacktriangleright \sigma$  heißt Spannung (engl. stress).
- $\blacktriangleright$  C beschreibt das Materialgesetz.
- Ein wichtiger Spezialfall ist  $\sigma = 2\mu\varepsilon + \lambda(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33})I$ mit den sog. Lamé-Parametern  $\lambda$  und  $\mu$ .
- Auf dem Rand  $\Gamma$  von  $\Omega$  muss eine der Randbedingungen  $\mathbf{u} = 0$  oder  $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0$  gefordert werden.
- ▶ Die Poisson- und biharmonische Gleichung entstehen aus den Gleichungen der Elastizitätstheorie durch zusätzliche vereinfachende Modellannahmen.
- ▶ Die Verschiebung **u** minimiert die Energiefunktion  $\frac{1}{2}\int_{\Omega}\varepsilon:\sigma dx-\int_{\Omega}\mathbf{f}\cdot\mathbf{u}dx$  in einer geeigneten Menge zulässiger Verformungen.



Vertiefung Numerische Mathematik Partielle Differentialgleichungen Beispiele

#### Lineare Elastizitätstheorie I

• Die Verformung  $\mathbf{u}: \Omega \to \mathbb{R}^3$  eines Körpers  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  unter dem Einfluss äußerer Kräfte  $\mathbf{f}: \Omega \to \mathbb{R}^3$  wird durch die Gleichungen der linearen Elastizitätstheorie beschrieben:

 $-\operatorname{div} \sigma = \mathbf{f}$  in  $\Omega$ .

Dabei ist.

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \sigma &= \begin{pmatrix} \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{21}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{31}}{\partial z} \\ \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{22}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{32}}{\partial z} \\ \frac{\partial \sigma_{13}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{23}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{33}}{\partial z} \end{pmatrix} \\ \bullet \sigma &= C\varepsilon \\ \bullet \varepsilon &= \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^t) = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x} & \frac{1}{2} \frac{\partial u_1}{\partial y} + \frac{1}{2} \frac{\partial u_2}{\partial x} & \frac{1}{2} \frac{\partial u_1}{\partial z} + \frac{1}{2} \frac{\partial u_3}{\partial x} \\ \frac{1}{2} \frac{\partial u_1}{\partial y} + \frac{1}{2} \frac{\partial u_2}{\partial x} & \frac{\partial u_2}{\partial y} & \frac{1}{2} \frac{\partial u_2}{\partial z} + \frac{1}{2} \frac{\partial u_3}{\partial y} \\ \frac{1}{2} \frac{\partial u_1}{\partial z} + \frac{1}{2} \frac{\partial u_3}{\partial x} & \frac{1}{2} \frac{\partial u_2}{\partial y} + \frac{1}{2} \frac{\partial u_2}{\partial z} & \frac{\partial u_3}{\partial y} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

66/ 264

RUF



Vertiefung Numerische Mathematik Partielle Differentialgleichungen

## Minimalflächen

 $\triangleright$  Zu einer gegebenen Menge  $\Omega$  in der (x, y)-Ebene und einer gegebenen Funktion  $u_0: \Gamma \to \mathbb{R}$  auf dem Rand  $\Gamma$  von  $\Omega$ wird eine Fläche der Form

#### $S = \{ (x, y, u(x, y)) : (x, y) \in \Omega, u(x, y) = u_0(x, y) \text{ auf } \Gamma \}$ mit minimalem Flächeninhalt gesucht.

▶ Dann ist  $u: \Omega \to \mathbb{R}$  Lösung der Minimalflächengleichung  $-\operatorname{div}(\{1+|\nabla u|^2\}^{-\frac{1}{2}}\nabla u)=0 \text{ in } \Omega$ 

 $u = u_0$  auf  $\Gamma$ .



Vertiefung Numerische Mathematik LPartielle Differentialgleichungen Beispiele

#### Gasgleichung

- ▶ Betrachte die rotationsfreie Strömung eines idealen, kompressiblen Gases.
- $\blacktriangleright$  Dann gibt es ein skalares Potential u, so dass für die Geschwindigkeit **v** des Gases gilt  $\mathbf{v} = \nabla u$ .
- Aus der Massenerhaltung folgt  $\operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0$ , wobei  $\rho = \rho(\mathbf{v})$ die Dichte des Gases ist.
- ▶ Da das Gas ideal ist, gilt die Zustandsgleichung  $\rho(\mathbf{v}) = \left[1 - \frac{\gamma - 1}{2} |\mathbf{v}|^2\right]^{\frac{1}{\gamma - 1}}$ , wobei  $\gamma > 1$  der spezifische Wärmekoeffizient ist.
- $\blacktriangleright$  Daher erfüllt das Potential <u>u</u> die Gasgleichung

$$-\operatorname{div}\left(\left[1-\frac{\gamma-1}{2}|\nabla u|^2\right]^{\frac{1}{\gamma-1}}\nabla u\right) = 0 \text{ in } \Omega$$
$$u = u_0 \text{ auf } \Gamma.$$

69/264

RUE

RUE

Vertiefung Numerische Mathematik
Partielle Differentialgleichungen
Beispiele
Despicie
- Beispiele



- ▶ Die Randbedingungen können wie üblich gemischt werden.
- ▶ Die rechten Seiten 0 in den Randbedingungen können durch gegebene Funktionen ersetzt werden.
- ► Die Energie  $\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} u(x,t)^2 dx$  ist eine monoton fallende Funktion der Zeit.



Vertiefung Numerische Mathematik Partielle Differentialgleichungen Beispiele

#### Wärmeleitungsgleichung I

► Die Temperatur u(x,t) im Punkt x eines Körpers  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ zur Zeit t > 0 wird unter dem Einfluss einer äußeren Wärmequelle f(x,t) durch die Wärmeleitungsgleichung beschrieben:

 $\frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u = f \text{ in } \Omega \times (0, \infty).$ 

▶ Die anfängliche Temperaturverteilung wird beschrieben durch die Anfangsbedingung

 $u(x,0) = u_0(x)$  für alle  $x \in \Omega$ .

- $\triangleright$  Zusätzlich ist auf dem Rand  $\Gamma$  des Körpers eine der folgenden Randbedingungen zu erfüllen:
  - u(x,t) = 0 für alle  $x \in \Gamma$  und t > 0 (feste Temperatur),
  - $\frac{\partial}{\partial x}u(x,t) = 0$  für alle  $x \in \Gamma$  und t > 0 (Isolation).

70/264

RUF

RUF



Vertiefung Numerische Mathematik Partielle Differentialgleichungen Beispiele

## Grundwasserströmung I

▶ Die räumliche und zeitliche Verteilung u(x,t) einer Flüssigkeit wie Grundwasser in einem Medium wie Erde wird durch die Transport-Diffusions-Gleichung beschrieben:

 $\frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(D(x, u)\nabla u) + \mathbf{k}(x, u) \cdot \nabla u = f \text{ in } \Omega \times (0, \infty).$ 

- $\blacktriangleright$  Dabei beschreibt der Quellterm f die Zufuhr (Quelle) bzw. Entnahme (Brunnen) von Flüssigkeit.
- ▶ Die Diffusivität  $D(x, u) \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$  und die Konduktivität  $\mathbf{k}(x, u) \in \mathbb{R}^3$  beschreiben spezifische Eigenschaften des Mediums (Ton, Lehm, Sand usw.).
- ▶ Wie bei der Wärmeleitungsgleichung ist die Transport-Diffusions-Gleichung durch Anfangs- und Randbedingungen zu ergänzen.



Vertiefung Numerische Mathematik Partielle Differentialgleichungen Beispiele

## Grundwasserströmung II

- ▶ Falls der Quellterm ab einem gewissen Zeitpunkt zeitlich konstant ist, strebt die Lösung u der Transport-Diffusions-Gleichung für  $t \to \infty$  gegen einen zeitlich konstanten stationären Zustand v.
- $\triangleright$  Der stationäre Zustand v wird durch die Konvektions-Diffusions-Gleichung beschrieben:
  - $-\operatorname{div}(D(x,v)\nabla v) + \mathbf{k}(x,v) \cdot \nabla v = f \text{ in } \Omega.$
- ▶ Diese ist wie die Poisson-Gleichung durch Randbedingungen zu ergänzen.

73/ 264

RUB

Vertiefung Numerische Mathematik
Partielle Differentialgleichungen
L <sub>Typen</sub>

## Ordnung

- ▶ Die Ordnung einer partiellen Differentialgleichung ist die höchste Differentiationsstufe der in der Gleichung auftretenden partiellen Ableitungen.
- ▶ Die biharmonische Gleichung hat die Ordnung 4.
- ▶ Alle anderen Beispiele haben die Ordnung 2.
- $\blacktriangleright$  Bei einer Differentialgleichung der Ordnung 2k sind typischerweise k Randbedingungen zu fordern.



Vertiefung Numerische Mathematik Partielle Differentialgleichungen Beispiele

## Wellengleichung

 $\blacktriangleright$  Die zeitlich veränderliche vertikale Auslenkung u einer elastischen, nicht dehnbaren Membran unter Einfluss einer vertikalen, zeitlich veränderlichen Last f wird durch die Wellen-Gleichung beschrieben:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \Delta u = f \text{ in } \Omega \times (0, \infty).$$

▶ Der Anfangszustand wird beschrieben durch die zwei Anfangsbedingungen:

 $u(x,0) = u_0(x)$  und  $\frac{\partial}{\partial t}u(x,0) = u_1(x)$  für alle x in  $\Omega$ .

- ▶ Die Wellengleichung ist durch Randbedingungen zu ergänzen.
- Die Energie  $\frac{1}{2} \int_{\Omega} \left\{ \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 + |\nabla u|^2 \right\} dx$  ist zeitlich konstant.

```
74/264
```

Vertiefung Numerische Mathematik

Partielle Differentialgleichungen Typen

RUF

#### Lineare und nichtlineare Gleichungen

- ▶ Eine partielle Differentialgleichung heißt linear, wenn eine Überlagerung oder Skalierung der Last zu einer entsprechenden Überlagerung bzw. Skalierung der Lösung führt, d.h. die Zuordnung Last  $\rightarrow$  Lösung ist eine lineare Funktion.
- ▶ Die Poisson-Gleichung, die biharmonische Gleichung, die Gleichungen der linearen Elastizitätstheorie, die Wärmeleitungsgleichung und die Wellengleichung sind linear, alle anderen Beispiele sind nichtlinear.
- ▶ Die Transport-Diffusions- und die Konvektions-Diffusions-Gleichung sind linear, wenn die Diffusivität und die Konduktivität nicht von der Lösung uabhängen.

Elliptisch, parabolisch, hyperbolisch I

- ▶ Die allgemeine Form einer linearen partiellen Differentialgleichung zweiter Ordnung ist
  - $A(x): D^2u + \mathbf{a}(x) \cdot \nabla u + \alpha(x)u = f.$
- $\blacktriangleright$  Wegen der Symmetrie der Hesse-Matrix  $D^2 u$  kann die Matrix A(x) als symmetrisch vorausgesetzt werden.
- ► Die Differentialgleichung heißt
  - elliptisch, wenn für alle x alle Eigenwerte von A(x) ungleich Null sind und gleiches Vorzeichen haben,
  - parabolisch, wenn für alle x genau ein Eigenwert von A(x)gleich Null ist und alle anderen Eigenwerte gleiches Vorzeichen haben.
  - hyperbolisch, wenn für alle x alle Eigenwerte von A(x)ungleich Null sind und genau ein Eigenwert anderes Vorzeichen hat als die restlichen Eigenwerte.

77/264

RU

Vertiefung Nu	
$\_$ Partielle Dif	
Lösungseig	

nerische Mathematik ferentialgleichungen enschaften

RUE

## Existenz-, Eindeutigkeit und Regularität

- ▶ Lineare Differentialgleichungen haben in der Regel eine eindeutige Lösung.
- ▶ Nichtlineare Differentialgleichungen können mehrere Lösungen zulassen, insbesondere können Verzweigungen und Umkehrpunkte auftreten.



• Anders als bei gewöhnlichen Differentialgleichungen hängt die Regularität (Differenzierbarkeit) der Lösung einer partiellen Differentialgleichung von Eigenschaften des Randes  $\Gamma$  ab. Einspringende Ecken führen zu einem Regularitätsverlust.



Vertiefung Numerische Mathematik Partielle Differentialgleichungen Typen

## Elliptisch, parabolisch, hyperbolisch II

- ▶ Die Wellengleichung ist hyperbolisch.
- ▶ Die Wärmeleitungsgleichung und die Transport-Diffusions-Gleichung sind parabolisch.
- ▶ Die Gasgleichung ist elliptisch, falls der Gradient des Potentials hinreichend klein ist (Unterschallströmung).
- ▶ Alle anderen Beispiele sind elliptisch.
- Elliptische Gleichungen beschreiben häufig ein Variationsoder Minimierungsproblem.
- ▶ Parabolische Gleichungen beschreiben häufig ein Dissipationsphänomen, bei dem eine Energie monoton fällt.
- ▶ Hyperbolische Gleichungen beschreiben häufig einen Erhaltungssatz.

78/ 264

RUF

Vertiefung Numerische Mathematik Partielle Differentialgleichungen Lösungseigenschaften

## **Beispiel**

- ▶ Betrachte die Poisson-Gleichung  $-\Delta u = 0$  auf dem Kreissegment  $\Omega = \{ (r \cos \varphi, r \sin \varphi) : 0 \le r < 1,$  $0 \leq \varphi \leq \frac{3\pi}{2}$  mit Randbedingung  $u = \sin(\frac{2}{3}\varphi)$  auf dem Kreisbogen und u = 0 auf den geraden Randstücken.
- Die Lösung ist  $u = r^{\frac{2}{3}} \sin(\frac{2}{3}\varphi)$ .
- ▶ Die Lösung hat in der Nähe der einspringenden Ecke (0,0) keine beschränkte Ableitung.



Vertiefung Numerische Mathematik

Überblick über Diskretisierungsmethoden

#### Diskretisierungsmethoden

- Differenzenverfahren ersetzen Ableitungen durch Differenzenquotienten und fordern die resultierenden Gleichungen nur in den Punkten eines (regelmäßigen) Gitters.
- Finite-Element-Methoden basieren auf einer Variationsformulierung der Differentialgleichung und approximieren die dabei auftretenden Funktionen durch stetige, stückweise Polynome auf einer Unterteilung des Gebietes Ω in einfache Teilgebiete wie Dreiecke oder Vierecke.
- Finite-Volumen-Methoden basieren auf einer Erhaltungsgleichung und erfüllen diese für stückweise konstante Funktionen auf einfachen Teilgebieten von Ω, den sog. Kontrollvolumina.

81/264

RUE



Vertiefung Numerische Mathematik Differenzenverfahren für partielle Differentialgleichungen Elliptische Differentialgleichungen



## **Reaktions-Diffusions-Gleichung**

 $-\operatorname{div}(A\nabla u) + \alpha u = f \quad \text{in } \Omega$ u = 0 auf  $\Gamma$ 

- $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  mit d = 2 oder d = 3
- A(x) eine symmetrische, positiv definite,  $d \times d$  Matrix für jedes x in  $\Omega$
- $\alpha(x)$  eine nicht-negative Zahl für jedes x in  $\Omega$



## Differenzenverfahren für partielle Differentialgleichungen

- ▶ Elliptische Differentialgleichungen
- Parabolische Differentialgleichungen
- Hyperbolische Differentialgleichungen

RUF



Idee

- Ersetze alle partiellen Ableitungen durch Differenzenquotienten.



#### Vertiefung Numerische Mathematik Differenzenverfahren für partielle Differentialgleichungen Elliptische Differentialgleichungen

RUE

#### Gitter





diskreter Rand

•  $\Omega_h = \overline{\Omega}_h \setminus \Gamma_h$  diskretes Gebiet

85/264



Vertiefung Numerische Mathematik Differenzenverfahren für partielle Differentialgleichungen Elliptische Differentialgleichungen

RUB

## Differenzenquotienten

 $\blacktriangleright e_i$  *i*-te Einheitsvektor

(*i*-te Komponente gleich 1, alle anderen Komponenten 0)

- $\partial_{h,i}^+ u(x) = \frac{1}{h} \left[ u(x+he_i) u(x) \right]$ *i-te* vorwärts Differenzenquotient
- ►  $\partial_{h,i}^{-}u(x) = \frac{1}{h} [u(x) u(x he_i)]$  *i*-te rückwärts Differenzenquotient
- ► Taylor-Entwicklung liefert mit geeignetem  $\theta \in (0, 1)$ :

$$\begin{aligned} \partial_{h,i}^{\pm} u(x) &= \frac{\partial}{\partial x_i} u(x) \pm \frac{1}{2} h \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} u(x \pm \theta h e_i) \\ \partial_{h,i}^{+} (\partial_{h,i}^{-} u)(x) &= \partial_{h,i}^{-} (\partial_{h,i}^{+} u)(x) \\ &= \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} u(x) + \frac{1}{12} h^2 \frac{\partial^4}{\partial x_i^4} u(x \pm \theta h e_i) \end{aligned}$$

Vertiefung Numerische Mathematik Differenzenverfahren für partielle Differentialgleichungen LElliptische Differentialgleichungen

## Nummerierung

- ►  $N_h = \sharp \Omega_h$  Zahl der Punkte im diskreten Gebiet
- $\overline{N}_h = \sharp \overline{\Omega}_h$  Zahl aller Gitterpunkte
- $\blacktriangleright \overline{N}_h N_h$  Zahl der diskreten Randpunkte
- Nummeriere zuerst die Punkte in  $\Omega_h$  lexikographisch, d.h. zeilenweise von links nach rechts beginnend mit der obersten Zeile.
- ▶ Nummeriere dann fortlaufend die Punkte in  $\Gamma_h$ .
- Es ist  $N_h \approx h^{-d}$  und  $\overline{N}_h N_h \approx h^{-(d-1)} \approx N_h^{\frac{d-1}{d}}$ .

86/264

RUF

Vertiefung Numerische Mathematik Differenzenverfahren für partielle Differentialgleichungen LElliptische Differentialgleichungen

RUE

## Differenzendiskretisierung

Bestimme den Vektor  $u_h = (u_h(x))_{x \in \overline{\Omega}_h}$  so, dass gilt:

►  $u_h(x) = 0$ 

für alle Punkte x auf dem diskreten Rand  $\Gamma_h$ 

$$\blacktriangleright -\sum_{i=1}^{d} \sum_{j=1}^{d} \partial_{h,i}^{-} (A_{i,j} \partial_{h,j}^{+} u)(x) + \alpha(x) u(x) = f(x)$$

für alle Punkte x im diskreten Gebiet  $\Omega_h$ 





Differenzenverfahren für partielle Differentialgleichungen Elliptische Differentialgleichungen

## RU

#### Eigenschaften

- ▶ Die Differenzendiskretisierung führt auf ein lineares Gleichungssystem mit  $N_h$  Gleichungen für die  $N_h$ Unbekannten  $u_h(x), x \in \Omega_h$ .
- Die Matrix  $L_h$  ist symmetrisch, positiv definit.
- $\blacktriangleright$  Die Matrix ist dünn besetzt, pro Zeile sind höchstens  $3^d$ Elemente von Null verschieden.
- ▶ Die Diagonalelemente sind positiv.
- ▶ Die Elemente außerhalb der Diagonalen verschwinden oder sind negativ.
- Die Matrix hat Bandstruktur, die Bandbreite ist  $\approx N_h^{1-\frac{1}{d}}$ .
- ▶ Die Lösung mit Gauß-Elimination oder Cholesky-Zerlegung
- erfordert  $\approx N_h^{3-\frac{2}{d}}$  Operationen und  $\approx N_h^{2-\frac{1}{d}}$ Speicherplätze.

89/264



Vertiefung Numerische Mathematik Differenzenverfahren für partielle Differentialgleichungen Elliptische Differentialgleichungen

RUE

## Fehlerabschätzung

 $\blacktriangleright$  Für beliebige Diffusion A gilt

```
\max_{x \in \Omega_h} |u(x) - u_h(x)| \le c_1 h.
```

Die Konstante  $c_1$  hängt von Ableitungen bis zur Ordnung 2 von A und von Ableitungen von u bis zur Ordnung 3 ab.

 $\blacktriangleright$  Ist die Diffusion A eine konstante Diagonalmatrix, so gilt  $\max_{x \in \Omega_h} |u(x) - u_h(x)| \le c_2 h^2.$ 

Die Konstante  $c_2$  hängt von Ableitungen von u bis zur Ordnung 4 ab.



Vertiefung Numerische Mathematik Differenzenverfahren für partielle Differentialgleichungen LElliptische Differentialgleichungen

## **Beispiel**

nd
)8
$)^{10}$
$)^{12}$
$)^{14}$

90/264

RUF



Differenzenverfahren für partielle Differentialgleichungen Elliptische Differentialgleichungen

#### Grenzen

- $\blacktriangleright$  Die Differenzierbarkeitsanforderungen an die Lösung u der Differentialgleichung sind unrealistisch.
- $\blacktriangleright$  In der Praxis variiert die Lösung u in weiten Teilen des Gebietes kaum, während sie sich in relativ kleinen Teilen stark ändert.
  - ▶ Ein gleichmäßiges Gitter vergeudet die Unbekannten in den uninteressanten Teilen des Gebietes.
  - ▶ Die Gitterpunkte sollten in den Teilen des Gebietes konzentriert werden, in denen sich die Lösung stark ändert.
  - ▶ Problem: Die relevanten Bereiche des Gebietes sind Teil der Lösung und nicht von vornherein bekannt.





Vertiefung Numerische Mathematik Differenzenverfahren für partielle Differentialgleichungen

Elliptische Differentialgleichungen

## Neumann-Randbedingung

- $\blacktriangleright$  Gegeben seien ein diskreter Randpunkt x und ein Einheitsvektor  $\boldsymbol{\nu}$ .
- Gesucht ist eine Approximation  $\partial_{h,\nu} u(x)$  für  $\nu \cdot \nabla u(x)$ .
- $\blacktriangleright$  Bestimme den Schnittpunkt u der Geraden durch x in Richtung  $\nu$  mit dem Rand  $\gamma_{\pi}$  des Quadrates mit Mittelpunkt x und Kantenlänge 2h.
- $\blacktriangleright$  Bestimme den am dichtesten an y liegenden Gitterpunkt z auf  $\gamma_r$ .
- $\bullet \ \partial_{h,\nu}u(x) = \frac{1}{|x-z|} \big[ u(x) u(z) \big]$

93/ 264

RUE

RU



Vertiefung Numerische Mathematik Differenzenverfahren für partielle Differentialgleichungen Elliptische Differentialgleichungen

## Konvektionsterm II

- ▶ Falls die Péclet-Zahl  $\frac{a_i h}{v}$  ( $\nu$  kleinster Eigenwert der Diffusionsmatrix A(x) größer ist als 1, kann jede Wahl zu unphysikalischen Oszillationen der numerischen Lösung führen.
- ▶ Die Oszillationen treten auf, wenn die Matrix der Differenzendiskretisierung negative Diagonalelemente und positive Nicht-Diagonalelemente aufweist.
- $\blacktriangleright$  Daher ist je nach Vorzeichen von  $a_i$  der rückwärts- oder vorwärts Differenzenquotient zu wählen (upwinding):

$$a_i \partial_{h,i}^{\boldsymbol{u}} u(x) = \begin{cases} a_i \frac{1}{h} \left[ u(x) - u(x - he_i) \right] & \text{falls } a_i > 0\\ a_i \frac{1}{h} \left[ u(x + he_i) - u(x) \right] & \text{falls } a_i < 0 \end{cases}$$



Vertiefung Numerische Mathematik Differenzenverfahren für partielle Differentialgleichungen Elliptische Differentialgleichungen

## Konvektionsterm I

- $\blacktriangleright$  Gegeben seien ein Punkt x im diskreten Gebiet und ein Vektor  $\mathbf{a} \neq 0$ .
- Gesucht ist eine Approximation für den Konvektionsterm  $\mathbf{a} \cdot \nabla u(x) = a_1 \frac{\partial u}{\partial x_1}(x) + \dots + a_d \frac{\partial u}{\partial x_d}(x).$
- ▶ Für die Diskretisierung von  $a_i \frac{\partial u}{\partial r_i}(x)$  stehen zur Auswahl:
  - ▶ vorwärts Differenzenquotient  $a_i \partial^+_{h,i} u(x) = a_i \frac{1}{h} \left[ u(x + he_i) - u(x) \right]$   $\blacktriangleright$  rückwärts Differenzenquotient

  - $a_i \partial_{h,i}^- u(x) = a_i \frac{1}{h} [u(x) u(x he_i)]$  symmetrischer Differenzenquotient
  - $a_{i}\frac{1}{2}\left[\partial_{h,i}^{+}u(x) + \partial_{h,i}^{-}u(x)\right] = a_{i}\frac{1}{2h}\left[u(x+he_{i}) u(x-he_{i})\right]$

94/264

RUF



Vertiefung Numerische Mathematik Differenzenverfahren für partielle Differentialgleichungen Parabolische Differentialgleichungen

## Wärmeleitungsgleichung

$$\begin{split} \frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(A\nabla u) + \alpha u &= f & \text{ in } \Omega \times (0,\infty) \\ u &= 0 & \text{ auf } \Gamma \times (0,\infty) \\ u(x,0) &= u_0(x) & \text{ in } \Omega \end{split}$$

- $\triangleright \Omega \subset \mathbb{R}^d$  mit d = 2 oder d = 3
- $\blacktriangleright$  A(x) eine zeitlich konstante, symmetrische, positiv definite,  $d \times d$  Matrix für jedes x in  $\Omega$
- $\triangleright \alpha(x)$  eine zeitlich konstante, nicht-negative Zahl für jedes x in  $\Omega$



Vertiefung Numerische Mathematik Differenzenverfahren für partielle Differentialgleichungen Parabolische Differentialgleichungen

RUB

#### Idee

- Diskretisiere die Ortsableitungen wie bei der Reaktions-Diffusions-Gleichung.
- Dies führt auf ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen der Form

 $\dot{u}_h(t) = f_h(t) - L_h u_h(t) \text{ für } t > 0,$ 

```
u_h(0) = u_{0,h}.
```

• Ersetze die Zeitableitung durch einen rückwärtigen Differenzenquotienten und setze diesen gleich einer Konvexkombination der rechten Seite zu den entsprechenden Zeiten ( $\theta$ -Schema).

97/264

RUE



Vertiefung Numerische Mathematik
Differenzenverfahren für partielle Differentialgleichungen
Parabolische Differentialgleichungen

#### Eigenschaften

- ▶  $\theta = 0$  entspricht dem expliziten Euler-Verfahren,  $\theta = 1$  dem impliziten Euler-Verfahren und  $\theta = \frac{1}{2}$  dem Verfahren von Crank-Nicolson.
- ► Für  $\theta = 0$  erfordert die Berechnung von  $u_h^n$  lediglich eine Matrix-Vektor-Multiplikation.
- ► Für  $\theta > 0$  erfordert die Berechnung von  $u_h^n$  das Lösen eines linearen Gleichungssystems mit symmetrisch, positiv definiter Matrix  $\frac{1}{\tau}I + L_h$ .
- ► Für  $\theta < \frac{1}{2}$  muss für Orts- und Zeitschritt die CFL-Bedingung  $\tau \leq h^2$  erfüllt sein.
- ► Für  $\theta \ge \frac{1}{2}$  können Orts- und Zeitschritt unabhängig voneinander gewählt werden.



Vertiefung Numerische Mathematik Differenzenverfahren für partielle Differentialgleichungen Parabolische Differentialgleichungen

## Differenzendiskretisierung

- ► Wähle eine Ortsschrittweite h > 0, eine Zeitschrittweite  $\tau > 0$  und einen Parameter  $\theta \in [0, 1]$ .
- ► Bezeichne mit  $L_h$  die Matrix der Differenzendiskretisierung der Reaktion-Diffusions-Gleichung und setze  $f_h^n = f(x, n\tau)$ für alle  $x \in \Omega_h$ .
- Setze  $u_h^0 = u_0(x)$  für alle  $x \in \overline{\Omega}_h$ .
- ▶ Bestimme  $u_h^n$  für n = 1, 2, ... sukzessive durch

$$\frac{1}{\tau} (u_h^n - u_h^{n-1}) = \theta (f_h^n - L_h u_h^n) + (1 - \theta) (f_h^{n-1} - L_h u_h^{n-1}).$$

98/ 264

RUF



Vertiefung Numerische Mathematik Differenzenverfahren für partielle Differentialgleichungen Parabolische Differentialgleichungen

## Fehlerabschätzung

- Setze  $\gamma = \begin{cases} 1 & \text{für } \theta \neq \frac{1}{2} \\ 2 & \text{für } \theta = \frac{1}{2} \end{cases}$
- $\blacktriangleright$  Für beliebige Diffusion A gilt

 $\max_{x\in\Omega_h,n\geq 0} |u(x,n\tau) - u_h^n(x)| \le c_1(\tau^\gamma + h).$ 

Die Konstante  $c_1$  hängt von Ableitungen bis zur Ordnung 2 von A und von Ableitungen von u bis zur Ordnung 3 ab.

► Ist die Diffusion A eine konstante Diagonalmatrix, so gilt  $\max_{x \in \Omega_h, n \ge 0} |u(x, n\tau) - u_h^n(x)| \le c_2 (\tau^{\gamma} + h^2).$ 

Die Konstante  $c_2$  hängt von Ableitungen von u bis zur Ordnung 4 ab.



Vertiefung Numerische Mathematik Differenzenverfahren für partielle Differentialgleichungen Hyperbolische Differentialgleichungen

RUB

#### Wellengleichung

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \operatorname{div}(A\nabla u) + \alpha u = f \quad \text{in } \Omega \times (0, \infty)$$
$$u = 0 \quad \text{auf } \Gamma \times (0, \infty)$$
$$u(x, 0) = u_0(x) \quad \text{in } \Omega$$
$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) = u_1(x) \quad \text{in } \Omega$$

- $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  mit d = 2 oder d = 3
- A(x) eine zeitlich konstante, symmetrische, positiv definite,  $d \times d$  Matrix für jedes x in  $\Omega$
- $\alpha(x)$  eine zeitlich konstante, nicht-negative Zahl für jedes x in Ω

101/264



Vertiefung Numerische Mathematik Differenzenverfahren für partielle Differentialgleichungen Hyperbolische Differentialgleichungen

## RUB

## Differenzendiskretisierung

- ► Wähle eine Ortsschrittweite h > 0 und eine Zeitschrittweite  $\tau > 0$ .
- ► Bezeichne mit  $L_h$  die Matrix der Differenzendiskretisierung der Reaktion-Diffusions-Gleichung und setze  $f_h^n = f(x, n\tau)$  für alle  $x \in \Omega_h$ .
- Setze  $u_h^0 = u_0(x)$  für alle  $x \in \overline{\Omega}_h$ .
- Setze  $u_h^1 = u_h^0(x) + \tau u_1(x)$  für alle  $x \in \overline{\Omega}_h$ .
- Bestimme  $u_h^n$  für  $n = 2, 3, \ldots$  sukzessive durch

$$\frac{1}{\tau^2} \left( u_h^n - 2u_h^{n-1} + u_h^{n-2} \right) = \left( f_h^{n-1} - L_h u_h^{n-1} \right)$$



Vertiefung Numerische Mathematik Differenzenverfahren für partielle Differentialgleichungen Hyperbolische Differentialgleichungen

#### Idee

- Diskretisiere die Ortsableitungen wie bei der Reaktions-Diffusions-Gleichung.
- Dies führt auf ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen der Form

 $\ddot{u}_h(t) = f_h(t) - L_h u_h(t) \text{ für } t > 0,$ 

 $u_h(0) = u_{0,h},$ 

 $\dot{u}_h(0) = u_{1,h}.$ 

 Ersetze die Zeitableitung durch einen symmetrischen Differenzenquotienten und setze diesen gleich der rechten Seite zur mittleren Zeit.

102/ 264

RUF



Vertiefung Numerische Mathematik Differenzenverfahren für partielle Differentialgleichungen Hyperbolische Differentialgleichungen

## Eigenschaften

- Die Berechnung von u<sup>n</sup><sub>h</sub> erfordert lediglich eine Matrix-Vektor-Multiplikation.
- $\blacktriangleright$  Für Orts- und Zeitschritt muss die CFL-Bedingung  $\tau \lesssim h$ erfüllt sein.

RUB



Vertiefung Numerische Mathematik Differenzenverfahren für partielle Differentialgleichungen Hyperbolische Differentialgleichungen

## Fehlerabschätzung

 $\blacktriangleright$  Für beliebige Diffusion A gilt

 $\max_{x\in\Omega_h, n\ge 0} |u(x, n\tau) - u_h^n(x)| \le c_1(\tau+h).$ 

Die Konstante  $c_1$  hängt von Ableitungen bis zur Ordnung 2 von A und von Ableitungen von u bis zur Ordnung 3 ab.

► Ist die Diffusion A eine konstante Diagonalmatrix, so gilt  $\max_{x \in \Omega_h, n \ge 0} |u(x, n\tau) - u_h^n(x)| \le c_2 (\tau^2 + h^2).$ 

Die Konstante  $c_2$  hängt von Ableitungen von u bis zur Ordnung 4 ab.

105/264

RU



Vertiefung Numerische Mathematik - Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen

## RUB

## Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen

- ► Variationsformulierung
- ▶ Finite-Element-Diskretisierung
- Praktische Aspekte
- ▶ Upwind und Petrov-Galerkin-Verfahren
- ▶ Gemischte Finite-Element-Methoden



Vertiefung Numerische Mathematik
Differenzenverfahren für partielle Differentialgleichungen
Hyperbolische Differentialgleichungen

## Ergänzungen

- Zeitabhängige Diffusions- und Reaktionskoeffizienten werden bei parabolischen und hyperbolischen Gleichungen zu den gleichen diskreten Zeiten ausgewertet wie die entsprechenden u<sub>h</sub>-Terme.
- Konvektionsterme und Neumann-Randbedingungen werden bei parabolischen und hyperbolischen Gleichungen diskretisiert wie bei elliptischen Gleichungen; die Matrix L<sub>h</sub> ändert sich entsprechend.

#### 106/ 264

RUF

Vertiefung Finite-Ei Voriati

Vertiefung Numerische Mathematik - Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen - Variationsformulierung

## **Reaktions-Diffusions-Gleichung**

 $-\operatorname{div}(A\nabla u) + \alpha u = f \quad \text{in } \Omega$  $u = 0 \quad \text{auf } \Gamma$ 

- $\Omega$  ein Polyeder in  $\mathbb{R}^d$  mit d = 2 oder d = 3
- ► A(x) eine symmetrische, positiv definite,  $d \times d$  Matrix für jedes x in  $\Omega$
- $\alpha(x)$  eine nicht-negative Zahl für jedes x in  $\Omega$



Vertiefung Numerische Mathematik — Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen — Variationsformulierung

RUB

## Satz von Gauß

► Divergenz:

div 
$$\mathbf{w} = \sum_{i=1}^{d} \frac{\partial w_i}{\partial x_i}$$

► Satz von Gauß:  $\int_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{w} dx = \int_{\Gamma} \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} dS$ 

## Mehrdimensionale partielle Integration I

Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen

Vertiefung Numerische Mathematik

└─Variationsformulierung

110/ 264

RUE



Vertiefung Numerische Mathematik - Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen - Variationsformulierung



Multipliziere die Differentialgleichung mit einer stetig

differenzierbaren Funktion v mit v = 0 auf  $\Gamma$ .

$$-\operatorname{div}(A\nabla u)(x)v(x) + \alpha(x)u(x)v(x) = f(x)v(x) \text{ für } x \in \Omega.$$

 $\blacktriangleright$  Integriere das Ergebnis über $\Omega$ 

$$\int_{\Omega} \left[ -\operatorname{div}(A\nabla u)v + \alpha uv \right] dx = \int_{\Omega} f v dx.$$

▶ Integriere den Ableitungsterm partiell

$$-\int_{\Omega} \operatorname{div}(A\nabla u)v dx = \int_{\Omega} \nabla v \cdot A\nabla u dx$$

109/264

RUB

Vertiefung Numerische Mathematik └Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen └Variationsformulierung

#### Probleme

- Für eine sinnvolle Variationsformulierung müssen die Eigenschaften der Funktionen u und v präziser gefasst werden.
- Klassische Eigenschaften wie stetige Differenzierbarkeit sind zu restriktiv.
- Der Begriff der Ableitung muss daher geeignet verallgemeinert werden.
- In Hinblick auf die Diskretisierung sollten insbesondere stückweise differenzierbare Funktionen im erweiterten Sinn differenzierbar sein.



 $\_$ Variationsformulierung

## Mehrdimensionale partielle Integration II

▶ Satz von Gauß angewandt auf  $\mathbf{w} = uv\mathbf{e}_i$  ( $\mathbf{e}_i$  *i*-te Einheitsvektor mit *i*-ter Komponente 1 und restlichen Komponenten 0) liefert

$$\int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial x_{i}} v dx + \int_{\Omega} u \frac{\partial v}{\partial x_{i}} dx$$

$$= \int_{\Omega} \frac{\partial (uv)}{\partial x_{i}} dx = \int_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{w} dx = \int_{\Gamma} \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} dS$$

$$= \int_{\Gamma} uv \mathbf{n}_{i} dS$$
• Falls  $u = 0$  oder  $v = 0$  auf  $\Gamma$  ist, folgt
$$\int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial x_{i}} v dx = -\int_{\Omega} u \frac{\partial v}{\partial x_{i}} dx$$

113/264

RUE

RU

Vertiefung Numerische Mathematik Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen
variationsformation ang

#### Beispiele

- ▶ Jede stetig differenzierbare Funktion ist schwach differenzierbar und die schwache Ableitung  $\nabla u$  stimmt mit dem klassischen Gradienten überein.
- Eine stückweise stetig differenzierbare Funktion ist genau dann schwach differenzierbar, wenn sie global stetig ist; dann stimmt die schwache Ableitung  $\nabla u$  mit dem stückweise definierten klassischen Gradienten überein.





Vertiefung Numerische Mathematik └─Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen └─Variationsformulierung

## Schwache Ableitung

► Die Funktion u heißt schwach differenzierbar (bzgl.  $x_i$ ) mit schwacher Ableitung  $w_i$ , wenn für jede stetig differenzierbare Funktion v mit v = 0 auf  $\Gamma$  gilt

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{w}_{i} v dx = -\int_{\Omega} u \frac{\partial v}{\partial x_{i}} dx$$

▶ Ist u bzgl. jeder der Variablen  $x_1, \ldots, x_d$  schwach differenzierbar, so nennt man u schwach differenzierbar und schreibt  $\nabla u$  für den Vektor  $(w_1, \ldots, w_d)$  der schwachen Ableitungen.

RUF



Vertiefung Numerische Mathematik Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen Variationsformulierung

#### Sobolev-Räume

- $\|v\| = \left\{ \int_{\Omega} |v|^2 dx \right\}^{\frac{1}{2}}$  ist die  $L^2$ -Norm.
- ►  $L^2(\Omega)$  ist der Lebesgue-Raum aller Funktionen v mit endlicher  $L^2$ -Norm ||v||.
- ►  $H^1(\Omega)$  ist der Sobolev-Raum aller Funktionen v in  $L^2(\Omega)$ , die schwach differenzierbar sind und für die  $|\nabla v|$ , die euklidische Norm von  $\nabla v$ , in  $L^2(\Omega)$  ist.
- $H_0^1(\Omega)$  ist der Sobolev-Raum aller Funktionen v in  $H^1(\Omega)$ mit v = 0 auf  $\Gamma$ .



Vertiefung Numerische Mathematik Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen └─Variationsformulierung

#### **Beispiele**

- ▶ Jede beschränkte Funktion ist in  $L^2(\Omega)$ .
- $v(x) = \frac{1}{\sqrt{x^2 + u^2}}$  ist nicht in  $L^2(B(0,1))$  (B(0,1) Kreis mit Radius 1 und Mittelpunkt im Ursprung), da

$$\int_{B(0,1)} |v(x)|^2 dx = 2\pi \int_0^1 \frac{1}{r} dr \text{ nicht endlich ist}$$

- Jede stetig differenzierbare Funktion ist in  $H^1(\Omega)$ .
- ▶ Eine stückweise stetig differenzierbare Funktion ist genau dann in  $H^1(\Omega)$ , wenn sie global stetig ist.
- Punktwerte sind für Funktionen in  $H^1(\Omega)$  nicht definiert.  $v(x) = \ln(|\ln(\sqrt{x^2 + y^2})|)$  ist in  $H^1(B(0, 1))$ , besitzt aber keinen endlichen Wert im Ursprung.

117/ 264



Vertiefung Numerische Mathematik Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen -Variationsformulierung

RUE

## Eigenschaften des Variationsproblems

- Das Variationsproblem hat eine eindeutige Lösung.
- ▶ Die Lösung des Variationsproblems ist das eindeutige Minimum in  $H_0^1(\Omega)$  der Energiefunktion

 $\frac{1}{2}\int_{\Omega} \left[\nabla u \cdot A\nabla u + \alpha u^2\right] dx - \int_{\Omega} f u dx.$ 



Vertiefung Numerische Mathematik Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen -Variationsformulierung

## Variationsproblem

Finde 
$$\boldsymbol{u} \in H_0^1(\Omega)$$
 so, dass für alle  $\boldsymbol{v} \in H_0^1(\Omega)$  gilt

$$\int_{\Omega} \left[ \nabla v \cdot A \nabla u + \alpha u v \right] dx = \int_{\Omega} f v dx$$

118/ 264

RUE



Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen

#### Idee

- $\blacktriangleright$  Zerlege  $\Omega$  in nicht überlappende, einfache Teilgebiete, sog. Elemente, wie Dreiecke, Parallelogramme, Tetraeder, Parallelepipede, ... (Unterteilung).
- Ersetze in der Variationsformulierung den Raum  $H_0^1(\Omega)$ durch einen endlich dimensionalen Unterraum bestehend aus stetigen Funktionen, die stückweise auf den Elementen Polynome sind (Finite-Element-Raum).
- ▶ Dies führt auf ein lineares Gleichungssystem für die Approximation  $u_{\tau}$  and ie Lösung u der partiellen Differentialgleichung.



#### Vertiefung Numerische Mathematik

Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen Finite-Element-Diskretisierung

#### Unterteilung

 $\mathcal{T} = \{K_i : 1 \leq i \leq N_{\mathcal{T}}\}$  bezeichnet eine Unterteilung von  $\Omega$  mit folgenden Eigenschaften:

- $\Omega$  ist die Vereinigung aller Elemente K in  $\mathcal{T}$ .
- ▶ Zulässigkeit: Je zwei Elemente K und K' in  $\mathcal{T}$  sind entweder disjunkt oder haben einen Eckpunkt oder eine ganze Kante oder, falls d = 3 ist, eine ganze Seitenfläche gemeinsam.

zulässig nicht zulässig

• Affine Äquivalenz: Jedes Element K ist ein Dreieck oder Parallelogramm, falls d = 2 ist, oder ein Tetraeder oder Parallelepiped, falls d = 3 ist.

121/264

RU



Vertiefung Numerische Mathematik Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen Finite-Element-Diskretisierung

RUE

#### Finite-Element-Räume



- $S^{k,-1}(\mathcal{T}) = \{ v : \Omega \to \mathbb{R} : v \big|_{K} \in R_{k}(K) \text{ für alle } K \in \mathcal{T} \}$

$$\blacktriangleright \quad S^{k,0}(\mathcal{T}) = S^{k,-1}(\mathcal{T}) \cap C(\overline{\Omega})$$

$$\blacktriangleright \quad S_0^{k,0}(\mathcal{T}) = S^{k,0}(\mathcal{T}) \cap H_0^1(\Omega)$$

$$= \{ v \in S^{k,0}(\mathcal{T}) : v = 0 \text{ auf } \Gamma \}$$



Vertiefung Numerische Mathematik Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen Finite-Element-Diskretisierung

#### Bemerkungen

- Wenn  $\Omega$  kein Polyeder ist, kann man es nicht durch geradlinige Elemente wie Dreiecke überdecken, so dass der Rand von  $\Omega$  zusätzlich approximiert werden muss.
- ▶ Die Zulässigkeit wird benötigt, damit die Finite-Element-Räume in  $H_0^1(\Omega)$  enthalten sind.
- ▶ Bei fehlender Zulässigkeit muss die Inklusion der Finite-Element-Räume explizit erzwungen werden, was die Implementierung erschwert.
- ▶ Es können auch allgemeine Vierecke und Quader betrachtet werden, was die Implementierung erschwert.

#### 122/264

RUF



Vertiefung Numerische Mathematik Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen Finite-Element-Diskretisierung

#### Bemerkungen

- ▶ Wegen der globalen Stetigkeit ist  $S^{k,0}(\mathcal{T}) \subset H^1(\Omega)$ .
- $\blacktriangleright$  Der Polynomgrad k kann auch von Element zu Element variieren, was auf einen höheren Aufwand für die Implementierung führt.



Vertiefung Numerische Mathematik - Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen - Finite-Element-Diskretisierung

RUB

## **Diskretes Problem**

Finde  $u_{\mathcal{T}} \in S_0^{k,0}(\mathcal{T})$  (Ansatzfunktion) so, dass für alle  $v_{\mathcal{T}} \in S_0^{k,0}(\mathcal{T})$  (Testfunktion) gilt

$$\int_{\Omega} \left[ \nabla v_{\mathcal{T}} \cdot A \nabla u_{\mathcal{T}} + \alpha u_{\mathcal{T}} v_{\mathcal{T}} \right] dx = \int_{\Omega} f v_{\mathcal{T}} dx$$

125/264

RUE



Vertiefung Numerische Mathematik - Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen - Finite-Element-Diskretisierung

## A priori Felerabschätzungen

- Bezeichne mit  $h_{\mathcal{T}}$  den maximalen Durchmesser aller Elemente in  $\mathcal{T}$ .
- ▶ Dann gelten folgende a priori Fehlerabschätzungen für die Lösung u des Varitionsproblems und die Lösung  $u_{\mathcal{T}}$  des Finite-Element-Problems:

```
\begin{aligned} \|\nabla u - \nabla u_{\mathcal{T}}\| &\leq c_1 h_{\mathcal{T}}^k \\ \|u - u_{\mathcal{T}}\| &\leq c_2 h_{\mathcal{T}}^{k+1} \text{ (Falls } \Omega \text{ konvex ist.)} \end{aligned}
```

▶ Die Konstanten  $c_1$  und  $c_2$  hängen von  $\Omega$ , der Diffusion A, der Reaktion  $\alpha$  und den  $L^2$ -Normen der Ableitungen bis zur Ordnung k - 1 von f ab.



Vertiefung Numerische Mathematik Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen Finite-Element-Diskretisierung

#### Eigenschaften des diskreten Problems

- ▶ Das diskrete Problem hat eine eindeutige Lösung.
- ▶ Die Lösung des diskreten Problems ist das eindeutige Minimum in  $S_0^{k,0}(\mathcal{T})$  der Energiefunktion

$$rac{1}{2}\int_{\Omega} \left[ 
abla u \cdot A 
abla u + lpha u^2 
ight] dx - \int_{\Omega} f u dx.$$

- ▶ Das diskrete Problem führt nach Wahl einer Basis für  $S_0^{k,0}(\mathcal{T})$  auf ein lineares Gleichungssystem.
- Die Matrix, genannt Systemsteifigkeits- oder Steifigkeitsmatrix, ist symmetrisch, positiv definit.
- Der Vektor der rechten Seite wird häufig als Lastvektor bezeichnet.
- ▶ Die Zahl der Gleichungen und Unbekannten ist  $\approx k^d N_T$  $(N_T = \#T).$

RUF



Vertiefung Numerische Mathematik └─Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen └─Finite-Element-Diskretisierung

#### Praktische Aspekte

- ▶ Wahl einer Basis für  $S_0^{k,0}(\mathcal{T})$
- ▶ Aufstellen der Steifigkeitsmatrix und des Lastvektors
- ▶ Berechnung der dabei auftretenden Integrale
- ▶ Behandlung gekrümmter Ränder
- ▶ Behandlung von Neumann-Randbedingungen
- ▶ Behandlung von Konvektionstermen (→ Petrov-Galerkin Verfahren)
- ▶ Bestimmung einer optimalen Unterteilung  $(\rightarrow \text{Adaptivität})$
- ▶ Lösung der diskreten Probleme ( $\rightarrow$  Effiziente Löser)



Vertiefung Numerische Mathematik └─Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen └─Praktische Aspekte

## Elementfreiheitsgrade $\mathcal{N}_{K,k}$





Vertiefung Numerische Mathematik - Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen - Praktische Aspekte

# RUB

129/ 264

RUE

## Nodale Basisfunktionen

Für  $z \in \mathcal{N}_{\mathcal{T},k}$  ist die nodale Basisfunktion  $\lambda_{z,k}$  eindeutig definiert durch die Bedingungen

- $\blacktriangleright \lambda_{z,k} \in S^{k,0}(\mathcal{T}),$
- $\blacktriangleright \lambda_{z,k}(z) = 1,$
- $\lambda_{z,k}(y) = 0$  für alle  $y \in \mathcal{N}_{\mathcal{T},k} \setminus \{z\}.$





## Globale Freiheitsgrade $\mathcal{N}_{\mathcal{T},k}$



• Wegen der Zulässigkeit von  $\mathcal{T}$  sind die Funktionen in  $S^{k,0}(\mathcal{T})$  eindeutig definiert durch ihre Werte in  $\mathcal{N}_{\mathcal{T},k}$ .



RUE



Vertiefung Numerische Mathematik └─Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen └─Praktische Aspekte

#### Eigenschaften

- $\{\lambda_{z,k} : z \in \mathcal{N}_{\mathcal{T},k}\}$  ist eine Basis für  $S^{k,0}(\mathcal{T})$ .
- $\{\lambda_{z,k} : z \in \mathcal{N}_{\mathcal{T},k} \setminus \Gamma\}$  ist eine Basis für  $S_0^{k,0}(\mathcal{T})$ . (Freiheitsgrade auf dem Rand  $\Gamma$  werden unterdrückt.)
- ▶  $\lambda_{z,k}$  verschwindet außerhalb der Vereinigung aller der Elemente, die den Punkt z enthalten.
- ▶ Die Steifigkeitsmatrix ist dünn besetzt.



RUB

## Berechnung durch Transformation auf ein Referenzelement

- ▶ Bestimme die nodalen Basisfunktionen  $\widehat{\lambda}_{\widehat{z},k}$  zum Referenzelement  $\widehat{K}$
- $\blacktriangleright$ Bestimme eine affine Transformation des Referenzelementes  $\widehat{K}$  auf das aktuelle ElementK

$$\widehat{K} \ni \widehat{x} \mapsto x = b_K + B_K \widehat{x} \in K$$

• Berechne  $\lambda_{z,k}$  aus  $\widehat{\lambda}_{\widehat{z},k}$  mit Hilfe der affinen Transformation  $\lambda_{z,k}(x) = \widehat{\lambda}_{\widehat{z},k}(\widehat{x})$ 

133/ 264

RUE

Vertiefung Numerische Mathematik
Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen
Praktische Aspekte

#### Beispiele für affine Transformationen



▶ Analoge Formeln gelten für Parallelepipede.



Vertiefung Numerische Mathematik └─Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen └─Praktische Aspekte

## Beispiele für $\widehat{\lambda}_{\widehat{z},k}$ $\blacktriangleright$ Referenzdreieck $\frown$ $\flat k = 1$

- Ecken 1 x y, x, y k = 2Ecken (1 - x - y)(1 - 2x - 2y), x(2x - 1), y(2y - 1)Kantenmitten 4x(1 - x - y), 4xy, 4y(1 - x - y)
- ▶ Referenzquadrat

▶ 
$$k = 1$$
  
Ecken  $(1 - x)(1 - y)$ ,  $x(1 - y)$ ,  $xy$ ,  $(1 - x)y$   
▶  $k = 2$   
Ecken  $(1 - 2x)(1 - x)(1 - 2y)(1 - y)$ ,  
 $x(2x - 1)(1 - 2y)(1 - y)$ ,  $x(2x - 1)y(2y - 1)$ ,  
 $(1 - 2x)(1 - x)y(2y - 1)$   
Kantenmitten  $4x(1 - x)(1 - y)(1 - 2y)$ ,  $4x(2x - 1)y(1 - y)$ ,  
 $4x(1 - x)y(2y - 1)$ ,  $4y(1 - y)(1 - 2x)(1 - x)$   
Schwerpunkt  $16x(1 - x)y(1 - y)$ 

134/ 264



Berechnung aus Element-Geometrie (k = 1)

$$\begin{array}{c} \mathbf{a}_{2} \\ \mathbf{a}_{0} \\ \mathbf{a}_{1} \\ \mathbf{a}_{0} \\ \mathbf{a}_{1} \\ \mathbf{a}_{0} \\ \mathbf{a}_{1} \\ \mathbf{a}_{3} \\ \mathbf{a}_{2} \\ \mathbf{a}_{0} \\ \mathbf{a}_{1} \\ \mathbf{a}_{1} \\ \mathbf{a}_{2} \\ \mathbf{a}_{2} \\ \mathbf{a}_{2} \\ \mathbf{a}_{2} \\ \mathbf{a}_{1} \\ \mathbf{a}_{2} \\ \mathbf{a$$

- Parallelepipede analog mit 3 Faktoren entsprechend 3 Tetraedern
- ► Alle Indizes sind modulo der Eckenzahl des Elementes zu nehmen.



## Berechnung aus Element-Geometrie $(k \ge 2)$

- Die  $\lambda_{z,k}$  können dargestellt werden als Produkte der Basisfunktionen erster Ordnung  $\lambda_{\mathbf{a}_i,1}$  zu den Ecken.
- ▶ Beispiel: Dreieck, k = 2
  - ▶ Eckpunkt **a**<sub>i</sub>
    - $\lambda_{\mathbf{a}_{i},2} = \lambda_{\mathbf{a}_{i}} [\lambda_{\mathbf{a}_{i}} \lambda_{\mathbf{a}_{i+1}} \lambda_{\mathbf{a}_{i+2}}]$
  - Mittelpunkt z der Kante mit Endpunkten  $\mathbf{a}_i$  und  $\mathbf{a}_{i+1}$  $\lambda_{z,2} = 4\lambda_{\mathbf{a}_i}\lambda_{\mathbf{a}_{i+1}}$
- Beispiel: Parallelogramm, k = 2
  - $\blacktriangleright$  Eckpunkt **a**<sub>i</sub>

$$\lambda_{\mathbf{a}_{i},2} = \lambda_{\mathbf{a}_{i}} [\lambda_{\mathbf{a}_{i}} - \lambda_{\mathbf{a}_{i+1}} + \lambda_{\mathbf{a}_{i+2}} - \lambda_{\mathbf{a}_{i+3}}]$$

• Mittelpunkt z der Kante mit Endpunkten  $\mathbf{a}_i$  und  $\mathbf{a}_{i+1}$ 

$$\lambda_{z,2} = 4\lambda_{\mathbf{a}_i} [\lambda_{\mathbf{a}_{i+1}} - \lambda_{\mathbf{a}_{i+2}}]$$
Schwerpunkt z

 $\lambda_{z,2} = 16\lambda_{\mathbf{a}_0}\lambda_{\mathbf{a}_2}$ 

137/264



Vertiefung Numerische Mathematik Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen Praktische Aspekte

RUE

## Aufstellen der Steifigkeitsmatrix

- $\blacktriangleright$  Durchlaufe alle Elemente K:
  - Durchlaufe alle Paare z, z' von Elementfreiheitsgraden von K
    - Berechne  $\int_{\Omega} \left[ \nabla \lambda_{z',k} \cdot A \nabla \lambda_{z,k} + \alpha \lambda_{z',k} \lambda_{z,k} \right] dx.$
    - Addiere das Ergebnis zu dem entsprechenden Eintrag der Steifigkeitsmatrix.



Vertiefung Numerische Mathematik Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen Praktische Aspekte

## Aufstellen des Lastvektors

- $\blacktriangleright$  Durchlaufe alle Elemente K:
  - Durchlaufe alle Elementfreiheitsgrade z von K:
    - Berechne  $\int_{U} f \lambda_{z,k} dx$ .
    - ▶ Addiere das Ergebnis zu dem entsprechenden Eintrag des Lastvektors.



RUF



Vertiefung Numerische Mathematik Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen Praktische Aspekte

## Berechnung von Integralen

- ▶ Die exakte Berechnung der beim Aufstellen der Steifigkeitsmatrix und des Lastvektors auftretenden Integrale ist häufig nicht möglich oder zu aufwändig.
- ▶ Die Integrale werden daher durch Quadraturformeln näherungsweise berechnet:

$$\int_{X} \varphi dx \approx Q_k(\varphi) = \sum_{q \in \mathcal{Q}_K} c_q \varphi(q).$$

▶ Damit der dadurch verursachte Fehler nicht den Fehler der Finite-Element-Diskretisierung dominiert, muss die Quadraturformel mindestens die Ordnung 2k - 2 haben:

$$\varphi dx = Q_K(\varphi)$$
 für alle  $\varphi \in R_{2k-2}(K).$ 

▶ Für lineare Elemente  $S^{1,0}(\mathcal{T})$  reicht also die Ordnung 0; für quadratische Elemente  $S^{2,0}(\mathcal{T})$  die Ordnung 2.



Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen Praktische Aspekte

## Beispiele für Quadraturformeln

- ► Dreieck:
  - ▶ Ordnung 1:
    - $\mathcal{Q}_K$  Schwerpunkt von K,
    - $\triangleright c_q = |K|$
  - ► Ordnung 2:
    - $\mathcal{Q}_K$  Kantenmittelpunkte von K,
    - $\triangleright$   $c_q = \frac{1}{3}|K|$  für alle q
- ► Parallelogramm:
  - ► Ordnung 1:
    - $\mathcal{Q}_K$  Schwerpunkt von K,
    - $\triangleright c_q = |K|$
  - ► Ordnung 3:
    - $\mathcal{Q}_K$  Ecken, Kantenmitten und Schwerpunkt von K,

•  $c_q = \begin{cases} \frac{1}{36}|K| & \text{falls } q \text{ Ecke} \\ \frac{4}{36}|K| & \text{falls } q \text{ Kantenmitte} \\ \frac{16}{36}|K| & \text{falls } q \text{ Schwerpunkt} \end{cases}$ 

141/264

RU



Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen Praktische Aspekte

RUE

## Neumann-Randbedingungen

- Die Neumann-Randbedingung  $\mathbf{n} \cdot A \nabla u = q$  auf  $\Gamma_N \subset \Gamma$ führt zu
  - einem zusätzlichen Term  $\int_{\Gamma_N} gv dS$  auf der rechten Seite des Variationsproblems,
  - einem zusätzlichen Term  $\int_{U} gv_{\mathcal{T}} dS$  auf der rechten Seite des diskreten Problems.
- ▶ Die zusätzlichen Beiträge zum Lastvektor werden beim Durchlaufen der Elemente berücksichtigt.
- $\blacktriangleright$  Die Elementfreiheitsgrade, die auf dem Neumann-Rand  $\Gamma_N$ liegen, sind zusätzliche Unbekannte.



Vertiefung Numerische Mathematik Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen Praktische Aspekte

## Behandlung gekrümmter Ränder

- ▶ Gebiete mit gekrümmten Rändern können nicht durch geradlinige Elemente wie Dreiecke, Parallelogramme usw. exakt überdeckt werden.
- ► Mögliche Auswege:
  - ▶ Benutze in Randnähe krummlinige (z.B. isoparametrische) Elemente.
    - ▶ Dies macht die Implemetierung erheblich aufwändiger.
    - Nur spezielle krummlinige Ränder können exakt dargestellt werden.
  - Approximiere das Gebiet  $\Omega$  durch ein Polyeder  $\Omega_{\mathcal{T}}$ , das exakt überdeckt wird.
    - Der durch die Randapproximation erzeugte Fehler ist  $\approx h_{\tau}^2$ .
    - ► Falls  $\Omega$  nicht konvex ist, ist  $\Omega_T \cap \Omega \neq \emptyset$ . Dann müssen die Daten  $f, A, \alpha$  der Differentialgleichung ggf. auf das größere Gebiet fortgesetzt werden.

142/264

RUF



Vertiefung Numerische Mathematik Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen Upwind und Petrov-Galerkin-Verfahren

## Konvektions-Diffusions-Gleichung

 $-\operatorname{div}(A\nabla u) + \mathbf{a} \cdot \nabla u + \alpha u = f \quad \text{in } \Omega$ u = 0 auf  $\Gamma$ 

- $\Omega$  ein Polyeder in  $\mathbb{R}^d$  mit d = 2 oder d = 3
- ▶ A(x) eine symmetrische, positiv definite,  $d \times d$  Matrix für jedes x in  $\Omega$
- $\mathbf{a}(x)$  ein Vektor in  $\mathbb{R}^d$  für jedes x in  $\Omega$
- $\alpha(x)$  eine nicht-negative Zahl für jedes x in  $\Omega$
- $\alpha(x) \frac{1}{2} \operatorname{div} \mathbf{a}(x) \ge 0$  für jedes x in  $\Omega$



#### Vertiefung Numerische Mathematik

Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen Upwind und Petrov-Galerkin-Verfahren

#### Variationsproblem

- $\triangleright$  Der Konvektionsterm **a**  $\cdot \nabla u$  führt auf einen zusätzlichen Term  $\int_{\Omega} v \mathbf{a} \cdot \nabla u dx$  im Variationsproblem.
- ▶ Das Variationsproblem hat nach wie vor eine eindeutige Lösung.
- ▶ Die Lösung des Variationsproblems ist nicht mehr Minimum einer Energiefunktion.



RU



Vertiefung Numerische Mathematik Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen Upwind und Petrov-Galerkin-Verfahren

# RUE

#### **Problem**

- ▶ Falls die Péclet-Zahl  $\frac{|\mathbf{a}|h_{\mathcal{T}}}{\nu}$  ( $\nu$  kleinster Eigenwert der Diffusionsmatrix A(x) größer ist als 1, führt die übliche Finite-Element-Diskretisierung zu unphysikalischen Oszillationen der numerischen Lösung.
- ▶ Dies liegt daran, dass diese Diskretisierung einer zentralen Differenzendiskretisierung des Konvektionstermes gleicht.
- ► Mögliche Auswege sind:
  - ► Upwind-Verfahren,
  - ▶ Petrov-Galerkin-Verfahren.



Vertiefung Numerische Mathematik Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen Upwind und Petrov-Galerkin-Verfahren

## **Diskretes** Problem

- $\triangleright$  Der Konvektionsterm  $\mathbf{a} \cdot \nabla u$  führt auf einen zusätzlichen Term  $\int_{\Omega} v_{\mathcal{T}} \mathbf{a} \cdot \nabla u_{\mathcal{T}} dx$  im diskreten Problem.
- ▶ Das diskrete Problem hat nach wie vor eine eindeutige Lösung.
- ▶ Die Lösung des diskreten Problems ist nicht mehr Minimum einer Energiefunktion.
- ▶ Die Steifigkeitsmatrix ist nicht mehr symmetrisch.

146/264

RUF

Vertiefung Numerische Mathematik Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen Upwind und Petrov-Galerkin-Verfahren

## **Upwind-Verfahren**

- ► Vorgehensweise:
  - ▶ Approximiere beim Aufstellen der Steifigkeitsmatrix die Konvektionsterme  $\int_{K} \lambda_{z',k} \mathbf{a} \cdot \nabla \lambda_{z,k} dx$  durch eine Quadraturformel  $\sum_{q \in \mathcal{Q}_{K}} c_{q} \lambda_{z',k}(q) \mathbf{a}(q) \cdot \nabla \lambda_{z,k}(q).$
  - Ersetze  $\mathbf{a}(q) \cdot \nabla \lambda_{z,k}(q)$  durch einen upwind-Differenzenquotienten wie bei Differenzenverfahren.
- ▶ Nachteile:
  - ▶ Der Ansatz führt häufig zu einem Genauigkeitsverlust.
  - Wegen der nötigen Interpolation zwischen Elementfreiheitsgraden treten häufig neue unphysikalischen Oszillationen auf.
  - resultierende diskrete Problem nicht mehr differenzierbar von der Lösung ab.



Vertiefung Numerische Mathematik

└ Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen └ Upwind und Petrov-Galerkin-Verfahren

## Petrov-Galerkin-Verfahren

► Idee:

Teste die Differentialgleichung zusätzlich elementweise mit  $\mathbf{a} \cdot \nabla v_{\mathcal{T}}$ .

► Diskretes Problem: Finde  $u_{\mathcal{T}} \in S_0^{k,0}(\mathcal{T})$  (Ansatzfunktion) so, dass für alle  $v_{\mathcal{T}} \in S_0^{k,0}(\mathcal{T})$  (Testfunktion) gilt

$$\int_{\Omega} \left[ \nabla v_{\mathcal{T}} \cdot A \nabla u_{\mathcal{T}} + v_{\mathcal{T}} \mathbf{a} \cdot \nabla u_{\mathcal{T}} + \alpha u_{\mathcal{T}} v_{\mathcal{T}} \right] dx$$
  
+ 
$$\sum_{K \in \mathcal{T}} \delta_K h_K \int_K \left[ -\operatorname{div}(A \nabla u_{\mathcal{T}}) + \mathbf{a} \cdot \nabla u_{\mathcal{T}} + \alpha u_{\mathcal{T}} \right] \mathbf{a} \cdot \nabla v_{\mathcal{T}} dx$$
  
= 
$$\int_{\Omega} f v_{\mathcal{T}} dx + \sum_{K \in \mathcal{T}} \delta_K h_K \int_K f \mathbf{a} \cdot \nabla v_{\mathcal{T}} dx$$

 $(h_K \text{ Durchmesser von } K, \delta_K > 0 \text{ Stabilitätsparameter})$ 

149/264

RU



Vertiefung Numerische Mathematik - Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen - Gemischte Finite-Element-Methoden

RUE

## Motivation

- Die üblichen Finite-Element-Verfahren liefern eine Approximation f
  ür die L
  ösung u (Verschiebung) der Differentialgleichung.
- ▶ Häufig sind abgeleitete Größen wie  $\nabla u$  (Spannungen) physikalisch interessanter.
- Diese müssen nachträglich durch numerische Differentiation bestimmt werden und werden dadurch weniger genau approximiert.
- Bei Elastizitätsproblemen führt der klassische Ansatz (Verschiebungsmethode) zu unphysikalischen Lösungen (locking).
- Gesucht sind Variationsformulierungen und Finite-Element-Diskretisierungen, die Verschiebungen und Spannungen gleichzeitig mit gleicher Genauigkeit approximieren.



Vertiefung Numerische Mathematik Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen Upwind und Petrov-Galerkin-Verfahren

### Eigenschaften

- ▶ Das diskrete Problem besitzt eine eindeutige Lösung.
- Unphysikalische Oszillationen werden weitest gehend vermieden.
- Es gelten die gleichen Fehlerabschätzungen wie bei der üblichen Diskretisierung (kein Genauigkeitsverlust).
- ► Zusätzlich gilt eine analoge Fehlerabschätzung für den Fehler  $\|\mathbf{a} \cdot \nabla u \mathbf{a} \cdot \nabla u_{\mathcal{T}}\|$  der Konvektionsableitung.
- ► Eine beliebte Wahl für die Stabilitätsparameter ist  $\delta_K = \frac{|\mathbf{a}|h_K}{\sqrt{\nu^2 + |\mathbf{a}|^2 h_K^2}}.$

150/ 264

RUE



Vertiefung Numerische Mathematik - Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen - Gemischte Finite-Element-Methoden

## Poisson-Gleichung als System erster Ordnung

Poisson-Gleichung

 $\begin{aligned} -\Delta u &= f \quad \text{in } \Omega \\ u &= 0 \quad \text{auf } \Gamma \end{aligned}$ 

- Führe  $\nabla u$  als zusätzliche Variable ein.
- ▶ Resultierendes System erster Ordnung

$$\sigma - \nabla u = 0 \quad \text{in } \Omega$$

$$\operatorname{liv} \sigma = f \quad \text{in } \Omega$$

u = 0 auf  $\Gamma$ 



Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen Gemischte Finite-Element-Methoden

## Idee der Variationsformulierung

▶ Multipliziere die erste Gleichung mit einem differenzierbaren Vektorfeld  $\tau: \Omega \to \mathbb{R}^d$  und integriere das Ergebnis über  $\Omega$ 

$$\int_{\Omega} \sigma \cdot \tau dx - \int_{\Omega} \nabla u \cdot \tau dx = 0.$$

▶ Integriere den  $\nabla u$ -Term partiell

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \boldsymbol{\tau} dx = -\int_{\Omega} u \mathrm{div} \, \boldsymbol{\tau} dx$$

▶ Multipliziere die zweite Gleichung mit einer Funktion  $v: \Omega \to \mathbb{R}$  und integriere das Ergebnis über  $\Omega$ 

$$-\int_{\Omega} \operatorname{div} \sigma v dx = \int_{\Omega} f v dx.$$

153/ 264

RUB

RU



Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen Gemischte Finite-Element-Methoden

## Eigenschaften

- ▶ Das Variationsproblem hat eine eindeutige Lösung  $(\sigma, u)$ .
- $\blacktriangleright$  Die primale Variable  $\sigma$  ist das eindeutige Minimum der Energiefunktion  $\frac{1}{2} \int_{\Omega} \sigma : \sigma dx$  unter der Nebenbedingung (Gleichgewichtsbedingung)  $-\operatorname{div} \sigma = f$ ; die duale Variable *u* ist der zugehörige Lagrange-Multiplikator.
- $\blacktriangleright$  ( $\sigma$ , u) ist der eindeutige Sattelpunkt der Funktion  $\mathcal{L}(\tau, v) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \tau : \tau dx + \int_{\Omega} v \operatorname{div} \tau dx; \sigma \text{ minimiert } \mathcal{L} \text{ bei}$ festem v, u maximiert  $\mathcal{L}$  bei festem  $\tau$ .



Vertiefung Numerische Mathematik Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen Gemischte Finite-Element-Methoden

## Variationsproblem

- $H(\operatorname{div}, \Omega) = \{ \sigma \in L^2(\Omega)^d : \operatorname{div} \sigma \in L^2(\Omega) \}$
- Finde  $u \in L^2(\Omega)$  und  $\sigma \in H(\operatorname{div}, \Omega)$ , so dass für alle  $v \in L^2(\Omega)$  und alle  $\tau \in H(\operatorname{div}, \Omega)$  gilt

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\tau} dx + \int_{\Omega} \boldsymbol{u} \operatorname{div} \boldsymbol{\tau} dx = 0$$
$$- \int_{\Omega} \boldsymbol{v} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} dx = \int_{\Omega} f \boldsymbol{v} dx$$

154/264



Vertiefung Numerische Mathematik Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen Gemischte Finite-Element-Methoden

#### RUE

#### Gemischte Finite-Element-Diskretisierung

- Bestimme eine zulässige Unterteilung  $\mathcal{T}$  von  $\Omega$ .
- ▶ Wähle endlich dimensionale Teilräume  $X(\mathcal{T})$  von  $H(\operatorname{div}, \Omega)$ und  $Y(\mathcal{T})$  von  $L^2(\Omega)$ .
- Finde  $u_{\mathcal{T}} \in Y(\mathcal{T})$  und  $\sigma_{\mathcal{T}} \in X(\mathcal{T})$ , so dass für alle  $v_{\mathcal{T}} \in Y(\mathcal{T})$  und alle  $\tau_{\mathcal{T}} \in X(\mathcal{T})$  gilt

$$\int_{\Omega} \sigma_{\tau} \cdot \tau_{\tau} dx + \int_{\Omega} u_{\tau} \operatorname{div} \tau_{\tau} dx = 0$$
$$- \int_{\Omega} v_{\tau} \operatorname{div} \sigma_{\tau} dx = \int_{\Omega} f v_{\tau} dx$$



#### Vertiefung Numerische Mathematik

└─Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen └─Gemischte Finite-Element-Methoden

# Eigenschaften

- Nach Wahl von Basen f
  ür X(T) und Y(T) f
  ührt die gemischte Finite-Element-Diskretisierung auf ein lineares Gleichungssystem, Unbekannte sind die Koeffizienten von σ<sub>T</sub> und u<sub>T</sub>.
- ▶ Die Steifigkeitsmatrix hat die Form  $\begin{pmatrix} A & B \\ B^T & 0 \end{pmatrix}$  mit einer symmetrischen, positiv definiten Matrix A und einer rechteckigen Matrix B.
- Die Steifigkeitsmatrix ist indefinit und hat positive und negative Eigenwerte.
- ▶ Die Steifigkeitsmatrix ist genau dann invertierbar, wenn  $B^T A^{-1} B$  invertierbar ist.

157/264

RU



Vertiefung Numerische Mathematik — Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen — Gemischte Finite-Element-Methoden

RUB

#### Raviart-Thomas-Diskretisierung

- $\blacktriangleright$   $\mathcal T$  besteht aus Dreiecken oder Tetraedern.
- ►  $RT(K) = {\mathbf{a} + bx : \mathbf{a} \in \mathbb{R}^d, b \in \mathbb{R}}$  (Raviart-Thomas Element)
- Freiheitsgrade sind die Normalkomponenten in den Kantenmittelpunkten für d = 2 und in den Schwerpunkten der Seitenflächen für d = 3.



- $Y(\mathcal{T}) = S^{0,-1}(\mathcal{T})$  (stückweise konstante Verschiebungen)
- ►  $X(\mathcal{T}) = \{\tau : \tau \mid_K \in RT(K) \text{ für alle } K \in \mathcal{T}, \tau \cdot \mathbf{n} \text{ ist stetig in den Kantenbzw. Flächenmitten} \}$



Vertiefung Numerische Mathematik └Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen └Gemischte Finite-Element-Methoden

#### Schwierigkeiten

- ▶ Um optimale Fehlerabschätzungen zu erhalten, muss zusätzlich der kleinste Eigenwert der Matrix  $B^T A^{-1} B$ unabhängig von  $\mathcal{T}$  von Null weg beschränkt sein (inf-sup-Bedingung).
- Nicht jede auf den ersten Blick plausible Wahl von  $X(\mathcal{T})$ und  $Y(\mathcal{T})$  erfüllt diese Bedingung.

RUF



Vertiefung Numerische Mathematik - Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen - Gemischte Finite-Element-Methoden

#### Eigenschaften

- Die Raviart-Thomas Diskretisierung erfüllt die inf-sup Bedingung.
- ▶ Es gelten die Fehlerabschätzungen

 $\|\sigma - \sigma_{\mathcal{T}}\| + \|\operatorname{div} \sigma - \operatorname{div} \sigma_{\mathcal{T}}\| + \|u - u_{\mathcal{T}}\| \le ch_{\mathcal{T}}.$ 

- ► Die Konstante c hängt von Ableitungen erster Ordnung von f, u und  $\sigma$  ab.
- Es gibt analoge Diskretisierungen höherer Ordnung und solche f
  ür Unterteilungen in Parallelogramme und Parallelepipede.



Vertiefung Numerische Mathematik

└─Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen └─Gemischte Finite-Element-Methoden

## Lineare Elastizitätstheorie

- Bei Anwendung auf die Gleichungen der linearen Elastizitätstheorie entspricht u dem Verschiebungsvektor und  $\sigma$  dem Spannungstensor.
- Eine zusätzliche Schwierigkeit bereitet die Symmetrie des Spannungstensors.
  - ▶ Für das Variationsproblem ist sie automatisch erfüllt.
  - Wird sie f
    ür das diskrete Problem exakt gefordert, treten Stabilit
    ätsprobleme auf.
  - Daher kann die Symmetrie f
     ür das diskrete Problem nur in abgeschwächter Form gefordert werden (PEERS: plane elasticity elements with reduced symmetry).

161/264

RUE

RU



Vertiefung Numerische Mathematik

A posteriori Fehlerschätzung und Adaptivität

## A posteriori Fehlerschätzung und Adaptivität

- Motivation
- ► A posteriori Fehlerschätzer
- ▶ Gitteranpassung



Vertiefung Numerische Mathematik Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen Gemischte Finite-Element-Methoden

## Strömungsmechanik

- In der Strömungsmechanik treten vorwiegend Variationsprobleme mit Divergenz-Nebenbedingungen auf, d.h. die Divergenz eines Vektorfeldes wie der Geschwindigkeit muss verschwinden (Inkompressibilität).
- Diese Nebenbedingung macht die Nutzung gemischter Finiter-Element-Methoden zwingend erforderlich.
- Bei den resultierenden Variationsproblemen sind die Rollen von u und σ vertauscht; u ist die primale Variable, σ ist der Lagrange-Multiplikator zur Nebenbedingung.
- u entspricht der Geschwindigkeit,  $\sigma$  dem Druck.

#### 162/264



-Motivation

Vertiefung Numerische Mathematik – A posteriori Fehlerschätzung und Adaptivität

#### RUE

#### Grenzen von a priori Fehlerabschätzungen

- Sie liefern nur eine asymptotische Aussage über den Fehler, d.h. über das Verhalten für immer feiner werdende Unterteilungen.
- Sie geben keine Auskunft über die tatsächliche Größe des Fehlers.
- Sie erlauben keine Rückschlüsse über die räumliche (und zeitliche) Verteilung des Fehlers.



Vertiefung Numerische Mathematik └─A posteriori Fehlerschätzung und Adaptivität └─Motivation

## RUB

#### Wunschliste

- Eine leicht berechenbare und zuverlässige Information über die tatsächliche Größe des Fehlers und seine räumliche (und zeitliche) Verteilung.
- Erhalte eine N\u00e4herungsl\u00f6sung f\u00fcr die gegebene Differentialgleichung mit vorgegebener Toleranz und (nahezu) minimalem Aufwand (z.B. gemessen in der Zahl der Freiheitsgrade).

165/264



Vertiefung Numerische Mathematik A posteriori Fehlerschätzung und Adaptivität Motivation

RUB

## Wesentliche Ingredienzien

- ► Diskretisierungsmethode
- ▶ Lösungsverfahren für die diskreten Probleme (→
   Effiziente Löser)
- $\blacktriangleright$  Fehlerschätzer ( $\longrightarrow$  A posteriori Fehlerschätzer)
- Gitteranpassungsstrategie ( $\rightarrow$  Gitteranpassung)



Vertiefung Numerische Mathematik └─A posteriori Fehlerschätzung und Adaptivität └─Motivation

#### Adaptiver Algorithmus

0. Gegeben: Daten einer partiellen Differentialgleichung und eine Toleranz  $\varepsilon$ .

Gesucht: Eine numerische Näherungslösung mit einem Fehler kleiner oder gleich der Toleranz.

- 1. Konstruiere eine erste grobe Unterteilung  $\mathcal{T}_0$ , setze k = 0.
- 2. Stelle das diskrete Problem zu  $\mathcal{T}_k$  auf und löse es (näherungsweise).
- **3.** Bestimme für jedes Element K in  $\mathcal{T}_k$  einen Fehlerschätzer.
- 4. Falls der geschätzte Gesamtfehler kleiner oder gleich der Toleranz  $\varepsilon$ ist, stopp.
- 5. Entscheide welche Elemente von  $\mathcal{T}_k$  unterteilt werden müssen und konstruiere eine entsprechende neue Unterteilung  $\mathcal{T}_{k+1}$ . Erhöhe k um 1 und gehe zu Schritt 2 zurück.

166/ 264

Vertiefung Num A posteriori I Motivation

Vertiefung Numerische Mathematik – A posteriori Fehlerschätzung und Adaptivität

#### RUE

## Beispiel: Poisson-Gleichung mit singulärer Lösung

Verfeinerung	Elemente	Unbekannte	rel. Fehler	
gleichmäßig	24576	12033	0.5%	
adaptiv	11242	5529	0.5%	



### RUB

## Beispiel: Reaktions-Diffusions-Gleichung mit innerer Grenzschicht

	Dreiecke		Vierecke	
	gleichm.	adaptiv	gleichm.	adaptiv
Unbekannte	16129	2923	16129	4722
Dreiecke	32768	5860	0	3830
Vierecke	0	0	16384	2814
rel. Fehler	3.8%	3.5%	6.1%	4.4%



169/264



Vertiefung Numerische Mathematik A posteriori Fehlerschätzung und Adaptivität A posteriori Fehlerschätzer

RUE

## Residueller Fehlerschätzer

$$\eta_{K} = \left\{ h_{K}^{2} \int_{K} |f + \operatorname{div}(A\nabla u_{\mathcal{T}}) - \mathbf{a} \cdot \nabla u_{\mathcal{T}} - \alpha u_{\mathcal{T}}|^{2} dx + \sum_{E \in \mathcal{E}_{K} \setminus \Gamma} h_{E} \int_{E} \left| \left[ \mathbf{n}_{E} \cdot A \nabla u_{\mathcal{T}} \right]_{E} \right|^{2} dS \right\}^{\frac{1}{2}}$$

- ▶  $\mathcal{E}_K$  Kanten (d = 2) bzw. Seitenflächen (d = 3) von K
- $h_K$ ,  $h_E$  Durchmesser von K bzw. E
- $\blacktriangleright~\mathbf{n}_E$ ein Einheitsvektor senkrecht zu E
- $[\varphi]_E$  Sprung einer Funktion  $\varphi$  über E



## Differentialgleichung und Diskretisierung

► Lineare elliptische Differentialgleichung zweiter Ordnung

$$-\operatorname{div}(A\nabla u) + \mathbf{a} \cdot \nabla u + \alpha u = f \quad \text{in } \Omega$$
$$u = 0 \quad \text{auf } \Gamma$$

- $\blacktriangleright \ u$ Lösung des Variationsproblems
- $\blacktriangleright$ Übliche Finite-Element-Diskretisierung zu Unterteilung  $\mathcal{T}$
- $\blacktriangleright~u_{\mathcal{T}}$  berechnete Lösung des diskreten Problems

Vertiefung Numerische Mathematik └A posteriori Fehlerschätzung und Adaptivität └A posteriori Fehlerschätzer

RUE

## A posteriori Fehlerabschätzungen

$$\left\{ \int_{\Omega} |\nabla u - \nabla u_{\mathcal{T}}|^2 dx \right\}^{\frac{1}{2}} \le c^* \left\{ \sum_{K \in \mathcal{T}} \eta_K^2 \right\}^{\frac{1}{2}}$$

$$\eta_K \le c_* \left\{ \int_{\mathbb{T}^2} |\nabla u - \nabla u_{\mathcal{T}}|^2 dx \right\}^{\frac{1}{2}}$$

►  $\omega_K$  Vereinigung aller Elemente, die mit K eine Kante (d = 2) bzw. Seitenfläche (d = 3) gemeinsam haben



- $\blacktriangleright~c^*,\,c_*$ hängen ab von
  - $\blacktriangleright$ der relativen Größe von Diffusion A, Konvektion <br/>  ${\bf a}$  und Reaktion  $\alpha$  zu<br/>einander
  - ▶ dem Polynomgrad von  $u_{\mathcal{T}}$
  - dem Formparameter von  $\mathcal{T}$  (maximales Verhältnis von Elementdurchmesser zum Durchmesser des größten eingeschriebenen Balles)



## Struktur des Fehlerschätzers

- ►  $f + \operatorname{div}(A\nabla u_{\mathcal{T}}) \mathbf{a} \cdot \nabla u_{\mathcal{T}} \alpha u_{\mathcal{T}}$  (Elementresiduum) ist das Residuum auf K von  $u_{\mathcal{T}}$  bzgl. der Differentialgleichung
- ▶  $[\mathbf{n}_E \cdot A \nabla u_T]_E$  (Kantenresiduum) ist der Sprung über E des Operators, der starke und schwache Form der Differentialgleichung verbindet (Randterm bei partieller Integration)
- Für Elemente niedriger Ordnung (k = 1) ist das Kantenresiduum häufig entscheidend.

173/264

RUE

RU



Vertiefung Numerische Mathematik A posteriori Fehlerschätzung und Adaptivität A posteriori Fehlerschätzer

Einige alternative Fehlerschätzer

- Lokale Hilfsprobleme: Löse lokale diskrete Hilfsprobleme höherer Ordnung mit Element- und Kantenresiduen als Lasttermen.
- Hierarchische Schätzer: Vergleiche die aktuelle Lösung mit einer Finite-Element-Lösung höherer Ordnung basierend auf einem Lumping der Steifigkeitsmatrix.
- ZZ-Schätzer: Vergleiche den Gradienten der Lösung mit einer Mittelung des Gradienten.
- Alle Schätzer sind äquivalent in dem Sinne, dass sie bis auf multiplikative Konstanten gegeneinander abgeschätzt werden können.



Vertiefung Numerische Mathematik └A posteriori Fehlerschätzung und Adaptivität └A posteriori Fehlerschätzer

## Struktur der a posteriori Fehlerabschätzungen

- ▶ Die obere Schranke ist global.
- Dies liegt daran, dass sie auf Eigenschaften des Lösungsoperators der Differentialgleichung beruht. (Lokale Last impliziert globale Verschiebung.)
- ▶ Die untere Schranke ist lokal.
- Dies liegt daran, dass sie auf Eigenschaften des Differentialoperators beruht. (Lokale Verschiebung impliziert lokale Last.)

174/ 264

RUF

Vertiefung Numerische Mathematik A posteriori Fehlerschätzung und Adaptivität Gitteranpassung

## Überblick

- ▶ Die Gitterverfeinerung beruht auf zwei Säulen:
  - ► Markierungsstrategien, die festlegen, welche Elemente unterteilt werden sollen,
  - Verfeinerungsregeln, die festlegen, wie ein einzelnes Element unterteilt werden soll.
- Um die Zulässigkeit der Unterteilung zu gewährleisten und hängende Knoten zu vermeiden, erfolgt die Verfeinerung in zwei Etappen:
  - ► Zuerst werden alle Elemente unterteilt, die einen zu großen Wert des Fehlerschätzers  $\eta_K$  aufweisen (reguläre Unterteilung).
  - Danach werden zusätzliche Elemente unterteilt, um hängende Knoten zu beseitigen, die während der ersten Etappe erzeugt wurden (irreguläre Unterteilung).
- Die Gitterverfeinerung kann mit einer Gittervergröberung und Gitterglättung kombiniert werden.

## Markierung mit der Maximum-Strategie

- 0. Gegeben: Unterteilung  $\mathcal{T}$ , Fehlerschätzer  $\eta_K$  für die Elemente  $K \in \mathcal{T}$ , Schwellenwert  $\theta \in (0, 1)$ . Gesucht: Teilmenge  $\widetilde{\mathcal{T}}$  von markierten Elementen, die unterteilt werden sollen.
- **1.** Berechne  $\eta_{\mathcal{T},\max} = \max_{K \in \mathcal{T}} \eta_K$ .
- 2. Falls  $\eta_K \geq \theta \eta_{\mathcal{T},\max}$  ist, markiere K und füge es zu  $\tilde{\mathcal{T}}$  hinzu.

177/264

RUE

RU



Vertiefung Numerische Mathematik A posteriori Fehlerschätzung und Adaptivität Gitteranpassung

## Reguläre Unterteilung

▶ Verbinde die Kantenmittelpunkte der Elemente.



 Dies erhält den Formparameter (Verhältnis des Elementdurchmessers zum Durchmesser des größten eingeschriebenen Balles).



Vertiefung Numerische Mathematik A posteriori Fehlerschätzung und Adaptivität Gitteranpassung

#### Modifikation

- ▶ Manchmal verteilen sich die Elemente auf drei Gruppen:
  - ▶ eine sehr kleine Zahl von Elementen mit einem sehr großen geschätzten Fehler,
  - eine sehr große Zahl von Elemente mit einem sehr kleinen geschätzten Fehler,
  - eine mittlere Zahl von Elementen mit einem geschätzten Fehler mittlerer Größe.
- Dann markiert die Maximum-Strategie nur die Elemente der ersten Gruppe.
- ▶ Dies verschlechtert die Effizienz des adaptiven Algorithmus.
- Dies kann durch folgende Modifikation vermieden werden: Markiere zuerst einen kleinen Prozentsatz ε der Elemente mit dem größten geschätzten Fehler und wende danach die Maximum-Strategie auf die verbleibenden Elemente an.

178/ 264

RUF



Vertiefung Numerische Mathematik A posteriori Fehlerschätzung und Adaptivität Gitteranpassung

## Hängende Knoten

 Hängende Knoten zerstören die Zulässigkeit der Unterteilung.



- ▶ Daher muss man
  - entweder die Stetigkeit der Finite-Element-Funktionen an den hängenden Knoten erzwingen (hängende Knoten sind keine Freiheitsgrade)
  - ▶ oder eine zusätzliche irreguläre Unterteilung durchführen.
- Das Erzwingen der Stetigkeit in den hängenden Knoten kann der Verfeinerung zuwiderlaufen.



RUB

## Irreguläre Unterteilung



181/ 264



Vertiefung Numerische Mathematik └─A posteriori Fehlerschätzung und Adaptivität └─Gitteranpassung

RUB

## Gittervergröberung

- ▶ Eine Vergröberung von Unterteilungen ist erforderlich,
  - um die Optimalität des adaptiven Algorithmus zu gewährleisten, d.h. um eine gegebene Toleranz mit einer minimalen Anzahl an Freiheitsgraden zu erreichen,
  - ▶ um zeitlich veränderliche Singularitäten zu erfassen.
- Die Gittervergröberung erfolgt durch das Zusammenfassen von benachbarten Elementen mit zu kleinem Fehler.



Vertiefung Numerische Mathematik A posteriori Fehlerschätzung und Adaptivität Gitteranpassung

#### **Bisektion markierter Kanten**

- Konstruiere die erste Unterteilung so, dass die längste Kante eines jeden Elementes auch die längste Kante des angrenzenden Elementes ist.
- ▶ Markiere die längsten Kanten in der ersten Unterteilung.
- Unterteile ein Element durch Verbinden des Mittelpunktes seiner markierten Kante mit dem gegenüberliegenden Eckpunkt (Bisektion).
- Bei Unterteilung einer Kante eines Elementes werden die anderen Kanten die markierten Kanten der resultierenden neuen Elemente.



RUF



Vertiefung Numerische Mathematik A posteriori Fehlerschätzung und Adaptivität Gitteranpassung

#### Gitterglättung

- Verbessere die Qualität einer Unterteilung *T* durch
   Verschieben der Elementeckpunkte unter Beibehaltung der Nachbarschaftsbeziehungen.
- Die Qualität wird durch eine Qualitätsfunktion q gemessen, wobei ein größerer Wert von q einer besseren Qualität entspricht.
- Die Qualität wird durch einen Gauß-Seidel artigen Glättungsprozess verbessert:

Durchlaufe alle Elementeckpunkte z in  $\mathcal{T}$ , fixiere alle durch eine Kante mit z verbundenen Elementeckpunkte und suche einen neuen Punkt  $\tilde{z}$  mit  $\min_{\tilde{z}\in \tilde{K}} q(\tilde{K}) > \min_{z\in K} q(K)$ .



# RUB

## Effiziente Löser

- Motivation
- ▶ Geschachtelte Iteration
- Klassische iterative Verfahren
- $\blacktriangleright$  CG-Verfahren
- ► Mehrgitterverfahren
- $\blacktriangleright$ Verfahrensvergleiche
- ▶ Unsymmetrische, indefinite und nichtlineare Probleme

185/ 264

RUB

Vertiefung Numerische Mathematik	
Effiziente Löser	
Motivation	

## Eigenschaften der Steifigkeitsmatrix

- ▶ Sie ist symmetrisch, positiv definit.
- Sie hat höchstens 5 von Null verschiedene Elemente pro Zeile.
- Sie hat Bandstruktur mit einer Bandbreite  $\approx h^{-1} \approx N^{\frac{1}{2}}$ .
- $\blacktriangleright$ Das Gaußsche Eliminationsverfahren erforder<br/>t $\approx N^2$  Operationen.
- ► Eine Matrix-Vektor-Multiplikation erfordert  $\approx 5N$ Operationen.
- ▶ Der kleinste Eigenwert ist  $\approx 1$ .
- Der größte Eigenwert ist  $\approx h^{-2} \approx N$ .



Vertiefung Numerische Mathematik – Effiziente Löser – Motivation

## Ein typisches Beispiel



- Poisson-Gleichung  $-\Delta u = f \text{ in } \Omega, u = 0 \text{ auf } \Gamma$
- $\Omega = (0,1)^2$  Einheitsquadrat
- Courant-Triangulation bestehend aus  $2n^2$ rechtwinklig gleichschenkligen Dreiecken mit Katheten der Länge  $h = n^{-1}$
- ▶ Lineare Finite-Elemente
- ► Zahl *N* der Unbekannten ist  $\approx n^2 = h^{-2}$ .

RUF

Vertiefung

Vertiefung Numerische Mathematik

# Eigenschaften direkter Löser

- ▶ Für ein diskretes Problem mit N Unbekannten in d Raumdimensionen benötigen sie  $\approx N^{2-\frac{1}{d}}$  Speicherplätze.
- ▶ Sie benötigen  $\approx N^{3-\frac{2}{d}}$  arithmetische Operationen.
- Bis auf Rundungsfehler liefern sie die exakte Lösung des diskreten Problems.
- ► Sie liefern eine Approximation für die Lösung der Differentialgleichung mit einem Fehler  $\approx h^{\alpha} \approx N^{-\frac{\alpha}{d}}$  (typischerweise:  $\alpha \in \{1, 2\}$ ).

### Eigenschaften klassischer iterativer Löser

- ▶ Sie benötigen  $\approx N$  Speicherplätze.
- Sie benötigen  $\approx N$  arithmetische Operationen pro Iteration.
- ▶ Ihre Konvergenzrate (Faktor um den der Fehler pro Iteration reduziert wird) verschlechtert sich mit wachsender Konditionszahl des diskreten Problems, die typischerweise  $\approx h^{-2} \approx N^{\frac{2}{d}}$  ist.
- ▶ Um einen Anfangsfehler um den Faktor 0.1 zu reduzieren benötigt man typischerweise folgende Anzahl arithmetischer Operationen:
  - ▶  $\approx N^{1+\frac{2}{d}}$  für den Gauß-Seidel Algorithmus,
  - $\triangleright \approx N^{1+\frac{1}{d}}$  für das Konjugierte-Gradienten- (CG-) Verfahren,
  - $\blacktriangleright \approx N^{1+\frac{1}{2d}}$  für das CG-Verfahren mit SSOR-Vorkonditionierung.

189/ 264

RUE

RUE

Vertiefung Numerische Mathematik
Effiziente Löser
Geschachtelte Iteration

## **Geschachtelte Gitter**

- Häufig muss man eine Folge diskreter Probleme  $L_k u_k = f_k$ lösen, die zunehmend genaueren Diskretisierungen entsprechen.
- ▶ In der Regel kennt man einen Interpolationsoperator  $I_{k-1,k}$ , der Funktionen der (k-1)-ten Diskretisierung in solche der k-ten Diskretisierung abbildet.
- ▶ Die Interpolierende einer vernünftigen Näherungslösung des (k-1)-ten diskreten Problem ist dann ein guter Startwert für jeden iterativen Löser für das k-te diskrete Problem.
- ▶ Häufig muss der Anfangsfehler nur um einen Faktor 0.1 reduziert werden.

Vertiefung Numerische Mathematik Effiziente Löser L\_Motivation

## Schlussfolgerungen

- ▶ Direkte Verfahren erfordern zu viel Speicherplatz und Rechenzeit.
- ▶ Es ist vollkommen ausreichend, eine Näherungslösung des diskreten Problems zu bestimmen, die verglichen mit der exakten Lösung der Differentialgleichung eine ähnliche Genauigkeit hat wie die exakte Lösung des diskreten Problems.
- ▶ Iterative Löser sind überlegen, wenn es gelingt, ihre Konvergenzrate zu verbessern und eine gute Startnäherung zu finden.

190/ 264

RUF



Vertiefung Numerische Mathematik Geschachtelte Iteration

## **Geschachtelte Iteration**

▶ Berechne

$$\widetilde{\boldsymbol{u}}_{\boldsymbol{0}} = \boldsymbol{u}_0 = \boldsymbol{L}_0^{-1} \boldsymbol{f}_0.$$

Für k = 1, 2, ... berechne sukzessive eine Näherungslösung  $\widetilde{u}_k$  für  $u_k = L_k^{-1} f_k$  durch Anwenden von  $m_k$  Iterationen eines iterativen Lösers auf das Problem

$$L_k u_k = f_k$$

mit Startnäherung  $I_{k-1,k}\widetilde{u}_{k-1}$ .

 $\blacktriangleright$   $m_k$  wird dabei implizit bestimmt durch das Abbruchkriterium

$$\|f_k - L_k \widetilde{u}_k\| \le \varepsilon \|f_k - L_k (I_{k-1,k} \widetilde{u}_{k-1})\|.$$

Vertiefung Numerische Mathematik Effiziente Löser Klassische iterative Verfahren

## Problemstellung

- $\blacktriangleright$  Zu lösen ist ein lineares Gleichungssystem Lu = f mit N Unbekannten.
- $\blacktriangleright$  L ist symmetrisch, positiv definit.
- $\blacktriangleright \kappa$  bezeichnet die Konditionszahl von L, d.h. das Verhältnis des größten Eigenwertes von L zum kleinsten Eigenwert.
- Es ist  $\kappa \approx N^{\frac{2}{d}}$ .

193/ 264

RUE



Vertiefung Numerische Mathematik Effiziente Löser Klassische iterative Verfahren

# RUB

#### **Jacobi-Iteration**

- Iterationsschritt:  $u \mapsto u + D^{-1}(f Lu)$
- $\blacktriangleright$  *D* ist die Diagonale von *L*.
- Die Konvergenzrate ist  $\frac{\kappa-1}{\kappa+1} \approx 1 N^{-\frac{2}{d}}$ .
- ▶ In jedem Iterationsschritt werden sukzessive alle Gleichungen durchlaufen, und die *i*-te Gleichung wird exakt nach der i-ten Unbekannten aufgelöst, ohne dabei nachfolgende Gleichungen entsprechend anzupassen.



#### **Richardson-Iteration**

- Iterationsschritt:  $u \mapsto u + \frac{1}{\omega}(f Lu)$
- $\blacktriangleright \omega$  heißt Dämpfungsparameter.
- $\triangleright \omega$  muss die gleiche Größenordnung haben wie der größte Eigenwert von L.
- Die Konvergenzrate ist  $\frac{\kappa-1}{\kappa+1} \approx 1 N^{-\frac{2}{d}}$ .



RUF



Klassische iterative Verfahren

## Gauß-Seidel-Iteration

- Iterationsschritt:  $u \mapsto u + \mathcal{L}^{-1}(Lu f)$
- $\blacktriangleright \mathcal{L}$  ist der Teil von L unterhalb der Diagonalen einschließlich der Diagonalen
- ▶ In jedem Iterationsschritt werden sukzessive alle Gleichungen durchlaufen, die *i*-te Gleichung exakt nach der *i*-ten Unbekannten aufgelöst und das Ergebnis unmittelbar in alle nachfolgenden Gleichungen eingesetzt.
- Die Konvergenzrate ist  $\frac{\kappa-1}{\kappa+1} \approx 1 N^{-\frac{2}{d}}$ .

Vertiefung Numerische Mathematik └─Effiziente Löser └─CG-Verfahren

#### Idee des CG-Verfahrens

- ▶ Die Lösung des symmetrischen, positiv definiten Gleichungssystems Lu = f ist das eindeutige Minimum der quadratischen Funktion  $J(u) = \frac{1}{2}u \cdot (Lu) - f \cdot u$ .
- ▶ Der negative Gradient  $-\nabla J(v) = f Lv$  von J an der Stelle v ist die Richtung des steilsten Abstieges.
- ▶ J nimmt auf der Geraden  $t \mapsto v + td$  sein eindeutiges Minimum an der Stelle  $t^* = \frac{(f-Lv) \cdot d}{d \cdot (Ld)}$  an.
- Bei sukzessiver Minimierung in Richtung der negativen Gradienten verlangsamt sich das Verfahren zunehmend, da die Suchrichtungen nahezu parallel werden.
- ▶ Das Verfahren wird durch Wahl *L*-orthogonaler Suchrichtungen  $(d_i \cdot (Ld_j) = 0$  für  $i \neq j)$  beschleunigt.
- L-orthogonale Suchrichtungen können während des Verfahrens rekursiv mit bestimmt werden.

197/264

RUE

RUE

	Vertiefung Numerische Mathematik	
	Effiziente Löser	
	CG-Verfahren	

## Eigenschaften

- Das CG-Verfahren benötigt nur Skalarprodukte und Matrix-Vektor-Multiplikationen.
- Die Konvergenzrate ist  $\frac{\sqrt{\kappa}-1}{\sqrt{\kappa}+1} \approx 1 N^{-\frac{1}{d}}$ .
- Das CG-Verfahren kann nur auf symmetrische, positiv definite Gleichungssysteme angewandt werden und bricht für unsymmetrische oder indefinite Systeme in der Regel zusammen.



Vertiefung Numerische Mathematik

### Das CG-Verfahren

- **0.** Gegeben: eine Startnäherung  $u_0$  und eine Toleranz  $\varepsilon > 0$ .
- 1. Berechne  $r_0 = f Lu_0$ ,  $d_0 = r_0$ ,  $\gamma_0 = r_0 \cdot r_0$ . Setze i = 0.
- 2. Falls  $\gamma_i < \varepsilon^2$  ist, gebe  $u_i$  als Näherungslösung aus; stopp. Andernfalls gehe zu Schritt **3**.
- **3.** Berechne  $s_i = Ld_i$ ,  $\alpha_i = \frac{\gamma_i}{d_i \cdot s_i}$ ,  $u_{i+1} = u_i + \alpha_i d_i$ ,  $r_{i+1} = r_i - \alpha_i s_i$ ,  $\gamma_{i+1} = r_{i+1} \cdot r_{i+1}$ ,  $\beta_i = \frac{\gamma_{i+1}}{\gamma_i}$ ,  $d_{i+1} = r_{i+1} + \beta_i d_i$ . Erhöhe *i* um 1 und gehe zu Schritt **2**.

198/ 264



Vertiefung Numerische Mathematik └─Effiziente Löser └─CG-Verfahren

## RUE

#### Idee der Vorkonditionierung (preconditioning)

- ▶ Löse statt des ursprünglichen Systems Lu = f das äquivalente System  $\widehat{L}\widehat{u} = \widehat{f}$  mit  $\widehat{L} = H^{-1}LH^{-t}$ ,  $\widehat{f} = H^{-1}f$ ,  $\widehat{u} = H^t u$  und einer invertierbaren Matrix H.
- $\blacktriangleright$  WähleH so, dass:
  - ▶ die Konditionszahl von  $\hat{L}$  we sentlich kleiner ist als diejenige von L,
  - Gleichungssysteme der Form Cv = d mit  $C = HH^t$ wesentlich leichter zu lösen sind als das ursprüngliche Problem Lu = f.
- Wende das CG-Verfahren auf das neue Gleichungssystem  $\widehat{L}\widehat{u} = \widehat{f}$  an und drücke alle Größen durch die ursprünglichen Daten L, f und u aus.

Vertiefung Numerische Mathematik Effiziente Löser CG-Verfahren

# RUE

#### Das PCG-Verfahren

- **0.** Gegeben: eine Startnäherung  $u_0$  und eine Toleranz  $\varepsilon > 0$ .
- **1.** Berechne  $r_0 = f Lu_0$ , löse  $Cz_0 = r_0$  und berechne  $d_0 = z_0, \ \gamma_0 = r_0 \cdot z_0.$  Setze i = 0.
- **2.** Falls  $\gamma_i < \varepsilon^2$  ist, gebe  $u_i$  als Näherungslösung aus; stopp. Andernfalls gehe zu Schritt 3.
- **3.** Berechne  $s_i = Ld_i$ ,  $\alpha_i = \frac{\gamma_i}{d_i \cdot s_i}$ ,  $u_{i+1} = u_i + \alpha_i d_i$ ,  $r_{i+1} = r_i \alpha_i s_i$ , löse  $Cz_{i+1} = r_{i+1}$  und berechne  $\gamma_{i+1} = r_{i+1} \cdot z_{i+1}, \ \beta_i = \frac{\gamma_{i+1}}{\gamma_i}, \ d_{i+1} = z_{i+1} + \beta_i d_i.$  Erhöhe i um 1 und gehe zu Schritt **2**.

201/264

RUE

Vertiefung Numerische Mathematik	
Effiziente Löser	
CG-Verfahren	
o o vonanion	

#### **SSOR-Vorkonditionierung**

- **0.** Gegeben: r und ein Relaxationsparameter  $\omega \in (0, 2)$ . Gesucht:  $z = C^{-1}r$ .
- **1.** Setze z = 0.
- **2.** Berechne für  $i = 1, \ldots, N$  $z_i = z_i + \omega L_{ii}^{-1} \{ r_i - \sum_{j=1} L_{ij} z_j \}.$
- **3.** Berechne für  $i = N, \ldots, 1$  $z_i = z_i + \omega L_{ii}^{-1} \{ r_i - \sum_{i=1}^{N} L_{ij} z_j \}.$

iefung Numerische Mathematik fiziente Löser CG-Verfahren

## Eigenschaften

- ▶ Die Konvergenzrate des PCG-Verfahrens ist  $\frac{\sqrt{\hat{\kappa}-1}}{\sqrt{\hat{\kappa}+1}}$ , wobei  $\hat{\kappa}$ die Konditionszahl von  $\widehat{L}$  ist.
- $\blacktriangleright$  Bei geschickter Wahl von C, z.B. bei der SSOR-Vorkonditionierung, ist  $\hat{\kappa} = N^{\frac{1}{d}}$ , was die Konvergenzrate  $1 - N^{-\frac{1}{2d}}$  ergibt.

RUF

RUF



Vertiefung Numerische Mathematik -Mehrgitterverfahren

#### Die zugrundeliegende Idee

- ▶ Klassische iterative Löser wie die Gauß-Seidel-Iteration dämpfen schnell schwingende Fehlerkomponenten stark.
- ▶ Klassische iterative Löser wie die Gauß-Seidel-Iteration dämpfen dagegen langsam schwingende Fehlerkomponenten nur sehr schlecht.
- ▶ Langsam schwingende Fehlerkomponenten können auf einem gröberen Gitter mit weniger Unbekannten gut approximiert werden.

## Der Zwei-Gitter-Algorithmus

- Führe auf dem aktuellen Gitter mehrere Schritte eines klassischen iterativen Verfahrens durch.
- ▶ Korrigiere die aktuelle Näherungslösung wie folgt:
  - ▶ Berechne das aktuelle Residuum.
  - Schränke das aktuelle Residuum auf das nächst gröbere Gitter ein.
  - Löse das resultierende Problem auf dem gröberen Gitter exakt.
  - Setze die Grobgitter-Lösung durch Interpolation auf das nächst feinere Gitter fort.
- ► Führe auf dem aktuellen Gitter mehrere Schritte eines klassischen iterativen Verfahrens durch.

205/264

RUE

RUE

Vertiefung Numerische Mathematik └─Effiziente Löser └─Mehrgitterverfahren

#### Ingredienzien

- ► Eine Folge  $\mathcal{T}_k$  zunehmend (gleichmäßig oder adaptiv) verfeinerter Unterteilungen mit zugehörigen diskreten Problemen  $L_k u_k = f_k$ .
- Ein Glättungsoperator  $M_k$ , der leicht auswertbar ist und der gleichzeitig eine passable Näherung für  $L_k^{-1}$  liefert.
- Ein Restriktionsoperator  $R_{k,k-1}$ , der Funktionen zur Unterteilung  $\mathcal{T}_k$  in solche zur nächst gröberen Unterteilung  $\mathcal{T}_{k-1}$  abbildet.
- Ein Prolongationsoperator  $I_{k-1,k}$ , der Funktionen zur Unterteilung  $\mathcal{T}_{k-1}$  in solche zur nächst feineren Unterteilung  $\mathcal{T}_k$  abbildet.

Vertiefung Numerische Mathematik └─Effiziente Löser └─Mehrgitterverfahren

## Schematische Darstellung



Vertiefung Numerische Mathematik – Effiziente Löser – Mehrgitterverfahren

## Der Mehrgitter-Algorithmus

- **0.** Gegeben: das aktuelle Niveau k, Parameter  $\mu$ ,  $\nu_1$ ,  $\nu_2$ , die Matrix  $L_k$ , die rechte Seite  $f_k$ , eine Startnäherung  $u_k$ . Gesucht: eine verbesserte Näherungslösung  $u_k$ .
- **1.** Falls k = 0 ist, berechne  $u_0 = L_0^{-1} f_0$ ; stopp.
- 2. (Vor-Glättung) Führe  $\nu_1$  Schritte des Iterationsverfahrens  $u_k \mapsto u_k + M_k(f_k - L_k u_k)$  durch.
- **3.** (Grobgitter-Korrektur)
  - **3.1** Berechne  $f_{k-1} = R_{k,k-1}(f_k L_k u_k)$  und setze  $u_{k-1} = 0$ .
  - **3.2** Führe  $\mu$  Iterationen des Mehrgitter-Algorithmus mit Parametern k - 1,  $\mu$ ,  $\nu_1$ ,  $\nu_2$ ,  $L_{k-1}$ ,  $f_{k-1}$ ,  $u_{k-1}$  durch und bezeichne das Ergebnis mit  $u_{k-1}$ .
  - **3.3** Ersetze  $u_k$  durch  $u_k + I_{k-1,k}u_{k-1}$ .
- 4. (Nach-Glättung) Führe  $\nu_2$  Schritte des Iterationsverfahrens  $u_k \mapsto u_k + M_k (f_k L_k u_k)$  durch.

## Typische Werte der Parameter

- ▶  $\mu = 1$  V-Zyklus oder
  - $\mu = 2$  W-Zyklus
- $\nu_1 = \nu_2 = \nu$  oder

 $\nu_1 = \nu, \, \nu_2 = 0 \text{ oder}$ 

- $\nu_1=0,\,\nu_2=\nu$
- ►  $1 \le \nu \le 4$ .

209/264

RUE

RUE

	Vertiefung Numerische Mathematik
	Effiziente Löser
	Mohrgittonvorfahron

## Glättung

- $\blacktriangleright$  Gauß-Seidel-Iteration
- ► SSOR-Iteration:
  - Durchlaufe die Gleichungen in aufsteigender Nummerierung mit einer Gau
    ß-Seidel-Iteration als Vor-Gl
    ättung.
  - Durchlaufe die Gleichungen in absteigender Nummerierung mit einer Gauß-Seidel-Iteration als Nach-Glättung.
- ► ILU-Glättung:
  - Bestimme eine unvollständige LR-Zerlegung (incomplete lower upper decomposition) von  $L_k$ , indem Nullelemente der Matrix unterdrückt werden (Unterdrückung von fill-in).
  - ▶ Das Ergebnis ist eine näherungsweise Zerlegung  $\mathcal{L}_k \mathcal{U}_k \approx L_k$ .
  - ► Berechne  $v_k = M_k u_k$  durch Lösen des Systems  $\mathcal{L}_k \mathcal{U}_k v_k = u_k$ .

Vertiefung Numerische Mathematik – Effiziente Löser – Mehrgitterverfahren

## **Prolongation and Restriktion**

 Die Prolongation ist typischerweise bestimmt durch die natürliche Inklusion der Finite-Element-Räume, d.h. eine Finite-Element-Funktion zu einer gröberen Unterteilung kann durch die Basisfunktionen der aktuellen, feineren Unterteilung ausgedrückt werden.



 Die Restriktion wird üblicherweise dadurch berechnet, dass Basisfunktionen zur gröberen Unterteilung in das diskrete Problem zur feineren Unterteilung als Testfunktionen eingesetzt werden.

210/ 264

RUF



## Benötigte arithmetische Operationen

- ▶ Nehme an, dass
  - ein Glättungsschritt  $O(N_k)$  Operationen erfordert,
  - ▶ die Prolongation in  $O(N_k)$  Operationen berechnet werden kann,
  - die Restriktion  $O(N_k)$  Operationen erfordert,
  - $\mu \leq 2$  ist,
  - $N_k > \mu N_{k-1}$  gilt.
- ▶ Dann benötigt eine Iteration des Mehrgitterverfahrens  $O(N_k)$  Operationen.

Vertiefung Numerische Mathematik – Effiziente Löser – Mehrgitterverfahren

#### Konvergenzraten

- Die Konvergenzrate ist kleiner als 1 gleichmäßig für alle Unterteilungen.
- ▶ Die Konvergenzrate ist durch  $\frac{c}{c+\nu_1+\nu_2}$  beschränkt, wobei c nur von den Formparametern der Unterteilungen abhängt.
- In der Praxis werden typischerweise Konvergenzraten zwischen 0.1 und 0.5 erzielt.

213/264

RUE

Vertiefung Numerische Mathematik
Effiziente Löser
Verfahrensvergleiche

#### Iterationen

Beispiel: Lineare Finite-Element-Diskretisierung auf Courant-Triangulierung der Poisson-Gleichung im Einheitsquadrat; Anfangsfehler wird um Faktor 0.05 reduziert

h	$\operatorname{GS}$	CG	PCG	MG
$\frac{1}{16}$	236	12	4	1
$\frac{1}{32}$	954	23	5	2
$\frac{1}{64}$	3820	47	7	2
$\frac{1}{128}$	15287	94	11	1

RUE



Vertiefung Numerische Mathematik – Effiziente Löser – Verfahrensvergleiche

#### Arithmetische Operationen

Beispiel: Lineare Finite-Element-Diskretisierung auf Courant-Triangulierung der Poisson-Gleichung im Einheitsquadrat; Anfangsfehler wird um Faktor 0.05 reduziert

CG MG
$10^4$ $1.2 \cdot 10^4$
$10^4$ $4.9 \cdot 10^4$
$10^5$ 2.1 · 10 <sup>5</sup>
$10^6$ 8.4 · $10^5$

214/264



#### Iterationen und Konvergenzraten

Beispiel: Lineare Finite-Element-Diskretisierung mit adaptiver Verfeinerung einer Reaktions-Diffusions-Gleichung im Einheitsquadrat mit innerer Grenzschicht; Anfangsfehler wird um Faktor 0.05 reduziert

	CG		PCG		MG	
DOF	It.	$\kappa$	It.	$\kappa$	It.	$\kappa$
9	4	0.10	3	0.2	4	0.3
47	10	0.60	7	0.5	3	0.3
185	24	0.80	12	0.7	5	0.2
749	49	0.90	21	0.8	5	0.4
2615	94	0.95	37	0.9	6	0.4
5247	130	0.96	55	0.9	5	0.4

## RUB

## CG-Verfahren für unsymmetrische oder indefinite Probleme

- Das CG-Verfahren bricht f
  ür unsymmetrische oder indefinite Probleme (Steifigkeitsmatrix hat Eigenwerte mit positivem und mit negativem Realteil) in der Regel zusammen.
- ▶ Ein naiver Ausweg ist das Anwenden des CG-Verfahrens auf die symmetrischen, positiv definiten Normalengleichungen  $L^T L u = L^T f$ .
- Dadurch verdoppelt sich der Aufwand, weil sich die Konditionszahl bei Übergang zu den Normalengleichungen quadriert.
- Einen besseren Ausweg bieten spezielle Varianten des CG-Verfahrens wie das stabilisierte bi-konjugierte Gradienten Verfahren (Bi-CG-Stab-Verfahren).

217/264

RUE

	Vertiefung Numerische Mathematik
	Effiziente Löser
	Unsymmetrische, indefinite und nichtlineare Probleme

## Eigenschaften

- ▶ Das Bi-CG-Stab-Verfahren versucht, simultan das ursprüngliche Problem Lu = f und das adjungierte Problem  $L^Tv = f$  zu lösen.
- $\blacktriangleright$  Es benötigt nur die Steifigkeitsmatrix L des ursprünglichen Problems.
- Es erfordert nur Skalarprodukte und Matrix-Vektor-Multiplikationen.
- ▶ Das Bi-CG-Stab-Verfahren kann vorkonditioniert werden; mögliche Vorkonditionierer sind das SSOR-Verfahren oder die ILU-Zerlegung angewandt auf den symmetrischen Anteil  $\frac{1}{2}(L + L^T)$  von L.



## **Bi-CG-Stab-Verfahren**

- **0.** Gegeben: eine Startnäherung  $u_0$  und eine Toleranz  $\varepsilon > 0$ .
- 1. Berechne  $r_0 = b Lu_0$  und setze  $\overline{r}_0 = r_0, v_{-1} = 0, p_{-1} = 0, \alpha_{-1} = 1, \rho_{-1} = 1, \omega_{-1} = 1$ , sowie i = 0.
- 2. Falls  $r_i \cdot r_i < \varepsilon^2$  ist, gebe  $u_i$  als Näherungslösung aus; stopp. Andernfalls gehe zu Schritt 3.
- **3.** Berechne  $\rho_i = \overline{r}_i \cdot r_i$ ,  $\beta_{i-1} = \frac{\rho_i \alpha_{i-1}}{\rho_{i-1} \omega_{i-1}}$ . Falls  $|\beta_{i-1}| < \varepsilon$  ist, liegt ein möglicher Abbruch vor; stopp. Andernfalls berechne  $p_i = r_i + \beta_{i-1} \{ p_{i-1} \omega_{i-1} v_{i-1} \}$ ,  $v_i = L p_i$ ,  $\alpha_i = \frac{\rho_i}{\overline{r}_0 \cdot v_i}$ . Falls  $|\alpha_i| < \varepsilon$  ist, liegt ein möglicher Abbruch vor; stopp. Andernfalls berechne  $s_i = r_i \alpha_i v_i$ ,  $t_i = L s_i$ ,  $\omega_i = \frac{t_i \cdot s_i}{t_i \cdot t_i}$ ,  $u_{i+1} = u_i + \alpha_i p_i + \omega_i s_i$ ,  $r_{i+1} = s_i \omega_i t_i$ . Erhöhe i um 1 und gehe zu Schritt **2**.

218/ 264

Vertiefung Numerische Mathematik - Effiziente Löser - Unsymmetrische, indefinite und nichtlineare Probleme

## RUE

## Mehrgitterverfahren für unsymmetrische oder indefinite Probleme

- Mehrgitterverfahren können direkt auf unsymmetrische oder indefinite Probleme angewendet werden.
- ▶ Unter Umständen muss man spezielle Glätter verwenden.
- Die Richardson-Relaxation angewandt auf die Normalengleichungen ist ein robuster Glätter, der allerdings zu Konvergenzraten von etwa 0.8 für das Mehrgitterverfahren führt.
- Die ILU-Zerlegung ist ebenfalls robust, aber aufwändiger und führt zu Konvergenzraten von etwa 0.5.



## Vertiefung Numerische Mathematik

Unsymmetrische, indefinite und nichtlineare Probleme

### Nichtlineare Probleme

- Nichtlineare Probleme werden typischerweise mit einem (gedämpften) Newton-Verfahren gelöst.
- In jeder Iteration des Newton-Verfahrens ist ein lineares Problem zu lösen.
- Dies kann mit iterativen Lösern geschehen, das Ergebnis der vorhergehenden Newton-Iteration ist dann meist ein guter Startwert für die innere Iteration.
- Bei Mehrgitterverfahren kann auch die Rolle von äußerer und innerer Iteration vertauscht werden, dann werden wenige Newton-Iterationen verbunden mit einer wenig genauen Lösung der linearen Hilfsprobleme als Glätter verwendet.

221/264

RUE



Vertiefung Numerische Mathematik Parabolische Differentialgleichungen Diskretisierungsmethoden

## RUB

## Modellproblem: Lineare parabolische Differentialgleichung zweiter Ordnung

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(A\nabla u) + \mathbf{a} \cdot \nabla u + \alpha u = f \quad \text{in } \Omega \times (0, T]$$
$$u = 0 \quad \text{auf } \Gamma \times (0, T]$$
$$u(\cdot, 0) = u_0 \quad \text{in } \Omega$$

- $\Omega$  ein Polyeder in  $\mathbb{R}^d$  mit d = 2 oder d = 3
- A(x,t) eine symmetrische, positiv definite,  $d \times d$  Matrix für jedes x in  $\Omega$ , t in (0,T]
- $\mathbf{a}(x,t)$  ein Vektor in  $\mathbb{R}^d$  für jedes x in  $\Omega$ , t in (0,T]
- $\alpha(x,t)$  eine nicht-negative Zahl für jedes x in  $\Omega$ , t in (0,T]
- $\alpha(x,t) \frac{1}{2} \operatorname{div} \mathbf{a}(x,t) \ge 0$  für jedes x in  $\Omega, t$  in (0,T]



## Parabolische Differentialgleichungen

- Diskretisierungsmethoden
- ▶ Raum-Zeit Finite-Elemente
- ► Charakteristikenmethode
- ► Adaptivität

Vertiefung Numerische Mathematik Parabolische Differentialgleichungen Diskretisierungsmethoden

RUB

#### Gebräuchliche Diskretisierungsmethoden

- ▶ Es gibt drei Hauptzugänge:
  - ▶ Linien-Methode,
  - ▶ Rothe-Verfahren,
  - ► Raum-Zeit Finite-Elemente.
- Für klassische nicht adaptive Unterteilungen liefern sie häufig die selben diskreten Lösungen.
- Die Linien-Methode ist unflexibel und f
  ür Adaptivit
  ät nicht geeignet.
- Die Analyse des Rothe-Verfahrens ist knifflig, da sie Differenzierbarkeitseigenschaften bzgl. der Zeitvariablen benötigt, die häufig nicht zur Verfügung stehen.
- Raum-Zeit Finite-Elemente erlauben a posteriori
   Fehlerabschätzungen und sind für Raum-Zeit-Adaptivität gut geeignet.



Vertiefung Numerische Mathematik

Diskretisierungsmethoden

#### Linien-Methode

- Wähle eine feste Unterteilung  $\mathcal{T}$  von  $\Omega$  und einen zugehörigen Finite-Element-Raum  $X(\mathcal{T})$ (Ortsdiskretisierung); bezeichne mit  $A_{\mathcal{T}}$  und  $f_{\mathcal{T}}$  die Steifigkeitsmatrix und den Lastvektor.
- Dann liefert die Ortsdiskretisierung das folgende System gewöhnlicher Differentialgleichungen:

$$\frac{u_{\mathcal{T}}}{dt} = f_{\mathcal{T}} - A_{\mathcal{T}} u_{\mathcal{T}}.$$

- Wende hierauf ein Standardverfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen an (impliziter Euler, Crank-Nicolson, Runge-Kutta, ...) (Zeitdiskretisierung).
- ▶ Das Crank-Nicolson-Verfahren ergibt z.B. die Vorschrift  $n = \frac{n-1}{2}$

$$\frac{{}^n_{\mathcal{T}}-u_{\mathcal{T}}^{n-1}}{\tau} = \frac{1}{2} \left( f_{\mathcal{T}}^n - A_{\mathcal{T}} u_{\mathcal{T}}^n + f_{\mathcal{T}}^{n-1} - A_{\mathcal{T}} u_{\mathcal{T}}^{n-1} \right).$$

225/264

RU

Vertiefung Numerische Mathematik
Parabolische Differentialgleichungen
Raum-Zeit Finite-Elemente

## Raum-Zeit-Gitter



- ►  $\mathcal{I} = \{[t_{n-1}, t_n] : 1 \le n \le N_{\mathcal{I}}\}$ : Unterteilung von [0, T] mit  $0 = t_0 < \ldots < t_{N_{\mathcal{I}}} = T$ (Die  $t_n$  werden im Laufe des Verfahrens sukzessive bestimmt.)
- $\blacktriangleright \tau_n = t_n t_{n-1}$
- $\mathcal{T}_n$ : Unterteilungen von  $\Omega$
- $X_n = X(\mathcal{T}_n)$ : zugehörige Finite-Element-Räume



#### **Rothe-Verfahren**

- Interpretiere das parabolische Problem als eine gewöhnliche Differentialgleichung und wende hierauf ein Standardverfahren an (impliziter Euler, Crank-Nicolson, Runge-Kutta, ...) (Zeitdiskretisierung).
- Jeder Zeitschritt erfordert dann die Lösung einer stationären elliptischen Differentialgleichung, die mit einem üblichen Finite-Element-Verfahren diskretisiert wird (Ortsdiskretisierung).
- Das Crank-Nicolson-Verfahren ergibt z.B. die elliptischen Differentialgleichungen

$$\frac{u^n - u^{n-1}}{\tau} + \frac{1}{2} \left( -\operatorname{div}(A\nabla u^n) + \mathbf{a} \cdot \nabla u^n + \alpha u^n - \operatorname{div}(A\nabla u^{n-1}) + \mathbf{a} \cdot \nabla u^{n-1} + \alpha u^{n-1} \right) = \frac{1}{2} \left( f^n + f^{n-1} \right).$$

226/264

Vertiefung Numerische Mathematik Parabolische Differentialgleichungen Raum-Zeit Finite-Elemente

RUB

#### Raum-Zeit Finite-Element-Diskretisierung

Berechne eine Interpolierende  $u_{\mathcal{T}_0}^0 \in X_0$  von  $u_0$  und bestimme für  $n = 1, 2, \ldots$  sukzessive  $u_{\mathcal{T}_n}^n \in X_n$  (Ansatzfunktion) so, dass mit  $u^{n\theta} = \theta u_{\mathcal{T}_n}^n + (1-\theta)u_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1}$  für alle  $v_{\mathcal{T}_n}^n \in X_n$  (Testfunktion) gilt:

$$\begin{split} &\int_{\Omega} \frac{1}{\tau_n} (u_{\mathcal{T}_n}^n - u_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1}) v_{\mathcal{T}_n} dx + \int_{\Omega} \nabla u^{n\theta} \cdot A \nabla v_{\mathcal{T}_n} dx \\ &+ \int_{\Omega} \mathbf{a} \cdot \nabla u^{n\theta} v_{\mathcal{T}_n} dx + \int_{\Omega} \alpha u^{n\theta} v_{\mathcal{T}_n} dx \\ &= \int_{\Omega} f v_{\mathcal{T}_n} dx \end{split}$$



Vertiefung Numerische Mathematik Parabolische Differentialgleichungen Raum-Zeit Finite-Elemente

## RU

#### Wahl von $\theta$

- $\theta = \frac{1}{2}$  entspricht dem Crank-Nicolson-Verfahren.
- $\blacktriangleright \ \theta = 1$  entspricht dem impliziten Euler-Verfahren.
- $\blacktriangleright \ \theta = 0$  entspricht dem expliziten Euler-Verfahren.
- ▶ Aus Stabilitätsgründen sollte  $\theta \ge \frac{1}{2}$  gewählt werden.

Vertiefung Numerische Mathematik Parabolische Differentialgleichungen Raum-Zeit Finite-Elemente

### Eigenschaften

- Für θ > 0 ist in jedem Zeitschritt ein lineares Gleichungssystem zu lösen, das der Finite-Element-Diskretisierung einer elliptischen Differentialgleichung entspricht.
- ▶ Für  $\mathbf{a} \neq 0$  ist die Steifigkeitsmatrix unsymmetrisch und indefinit.
- ▶ Bei Verwenden eines iterativen Lösers ist  $u_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1}$  ein guter Startwert für die Berechnung von  $u_{\mathcal{T}_n}^n$ .
- ► Der Fehler der Diskretisierung verhält sich wie  $h^2 + \tau^{\gamma}$  mit  $\gamma = 2$  für  $\theta = \frac{1}{2}$  und  $\gamma = 1$  für  $\theta \neq \frac{1}{2}$  (*h* maximale Ortsgitterweite,  $\tau$  maximale Zeitschrittweite).

RUF

RUF

229/264

$\mathbf{\nabla}$		
$\langle \rangle$		
$\langle \cdot \rangle$		
$\bigtriangleup$		
1	XXXX	

Vertiefung Numerische Mathematik Parabolische Differentialgleichungen Charakteristikenmethode

#### Idee

► Für jeden Punkt  $(x^*, t^*) \in \Omega \times (0, T]$  besitzt die folgende Charakteristikengleichung eine eindeutige Lösung auf dem Intervall  $(0, t^*)$ 

$$\frac{d}{dt}x(t;x^*,t^*) = \mathbf{a}(x(t;x^*,t^*),t), \quad x(t^*;x^*,t^*) = x^*.$$

Für  $U(x^*, t) = u(x(t; x^*, t^*), t)$  gilt  $\frac{dU}{dt} = \frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{a} \cdot \nabla u,$ 

$$\frac{\partial t}{\partial t} = \frac{\partial t}{\partial t} + \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$$

- ► Daher kann das Modellproblem geschrieben werden als  $\frac{dU}{dt} \operatorname{div}(A\nabla u) + \alpha u = f.$
- Die Reaktions-Diffusions-Gleichung und die Materialableitung werden separat diskretisiert.



Vertiefung Numerische Mathematik Parabolische Differentialgleichungen Charakteristikenmethode

## **Re-Interpolation**



- $\mathcal{N}_n$  bezeichne die globalen Freiheitsgrade von  $X_n$ .
- ▶ Wende für jedes n und jedes  $z \in \mathcal{N}_n$  ein klassisches Verfahren (impliziter Euler, Crank-Nicolson, Runge-Kutta, ...) auf die Charakteristikengleichung zu  $(x^*, t^*) = (z, t_n)$  an und bezeichne mit  $x_z^{n-1}$  die resultierende Näherung für  $x(t_{n-1}; z, t_n)$ .



Vertiefung Numerische Mathematik Parabolische Differentialgleichungen L Charakteristikenmethode

#### Charakteristikenmethode

- Bestimme  $\widetilde{u}_{\mathcal{T}_n}^{n-1} \in X_n$  so, dass  $\widetilde{u}_{\mathcal{T}_n}^{n-1}(z) = u_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1}(x_z^{n-1})$  ist für alle  $z \in \mathcal{N}_n$ .
- ▶ Bestimme  $u_{\mathcal{T}_n}^n \in X_n$  so, dass für alle  $v_{\mathcal{T}_n}^n \in X_n$  gilt

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_n} \int_{\Omega} u_{\mathcal{T}_n}^n v_{\mathcal{T}_n}^n dx + \int_{\Omega} \nabla u_{\mathcal{T}_n}^n \cdot A \nabla v_{\mathcal{T}_n}^n dx + \int_{\Omega} \alpha u_{\mathcal{T}_n}^n v_{\mathcal{T}_n}^n dx \\ &= \frac{1}{\tau_n} \int_{\Omega} \widetilde{u}_{\mathcal{T}_n}^{n-1} v_{\mathcal{T}_n}^n dx + \int_{\Omega} f v_{\mathcal{T}_n}^n dx \end{aligned}$$

233/ 2	26
--------	----

RUE

RUE

Vertiefung Numerische Mathematik
Parabolische Differentialgleichungen
Adaptivität

## Ein residueller Fehlerschätzer

- ▶  $\mathcal{E}_n$ : Kanten (d = 2) bzw. Seitenflächen (d = 3) der Elemente in  $\mathcal{T}_n$
- ► Ortsindikator

$$\eta_h^n = \left\{ \sum_{K \in \mathcal{T}_n} h_K^2 \int_K \left| f(x, t_n) - \frac{1}{\tau_n} (u_{\mathcal{T}_n}^n - u_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1}) \right. \\ \left. + \operatorname{div}(A \nabla u_{\mathcal{T}_n}^n) - \mathbf{a} \cdot \nabla u_{\mathcal{T}_n}^n - \alpha u_{\mathcal{T}_n}^n \right|^2 dx \right\}$$

$$+\sum_{E\in\mathcal{E}_n}h_E\int_E \left|\left[\mathbf{n}_E\cdot A\nabla u_{\mathcal{T}_n}^n\right]_E\right|^2 dS\right\}^{\frac{1}{2}}$$

▶ Zeitindikator

$$\eta_{\tau}^{n} = \left\{ \int_{\Omega} |\nabla u_{\mathcal{T}_{n}}^{n} - \nabla u_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1}|^{2} dx \right\}^{\frac{1}{2}}$$



Vertiefung Numerische Mathematik Parabolische Differentialgleichungen Charakteristikenmethode

## Eigenschaften

- ▶ Die Charakteristikenmethode, alias Transport-Diffusions-Algorithmus, ist besonders geeignet für die Diskretisierung parabolischer Gleichungen mit einem großen Konvektionsterm.
- ▶ Sie entkoppelt die Diskretisierung der Zeit- und Konvektionsableitungen von der Diskretisierung der restlichen Terme.
- ▶ Sie erfordert die Lösung einer Folge gewöhnlicher Differentialgleichungen und von Reaktions-Diffusions-Gleichungen mit symmetrisch, positiv definiter Steifigkeitsmatrix.

#### 234/264

RUF



Vertiefung Numerische Mathematik Parabolische Differentialgleichungen Adaptivität

#### Bemerkungen

- ▶  $\eta_b^n$  besteht aus den Elementresiduen der diskreten Lösung und aus Sprungtermen über die Elementgrenzen.
- ▶ Bei den Elementresiduen wird die diskrete Lösung elementweise in die Differentialgleichung eingesetzt.
- ▶ Die Sprungterme sind die gleichen wie bei der entsprechenden elliptischen Differentialgleichung (Zeitableitung unterdrückt).
- $\eta_{\tau}^{n}$  beschreibt einen Sprungterm bezüglich der Zeitvariablen.



## A posteriori Fehlerabschätzungen

- Bezeichne mit  $u_{\tau}$  die stetige, bezüglich der Zeit stückweise lineare Funktion, die zur Zeit  $t_n$  mit  $u_{\mathcal{T}_n}^n$  übereinstimmt.
- ► Dann gilt

$$\left\{\max_{0\leq t\leq T}\int_{\Omega}|u-u_{\mathcal{I}}|^{2}dx+\int_{0}^{T}\int_{\Omega}|\nabla u-\nabla u_{\mathcal{I}}|^{2}dxdt\right\}^{\frac{1}{2}}$$
$$\approx\left\{\int_{\Omega}|u_{\mathcal{T}_{0}}^{0}-u_{0}|^{2}dx+\sum_{n=1}^{N_{\mathcal{I}}}\tau_{n}\left[\left(\eta_{h}^{n}\right)^{2}+\left(\eta_{\tau}^{n}\right)^{2}\right]\right\}^{\frac{1}{2}}$$

231/204		237/	264
---------	--	------	-----

RUE

RUE

-Parabolische Differentialgielchungen
Adaptivität

#### Raum-Zeit Adaptivität

- **0.** Gegeben: Toleranz  $\varepsilon$ , Unterteilung  $\mathcal{T}_0$ , Zeitschritt  $\tau_1$
- **1.** Passe  $\mathcal{T}_0$  so an, dass  $\int_{\Omega} |u_{\mathcal{T}_0}^0 u_0|^2 dx \leq \frac{1}{4} \varepsilon^2$  ist. Setze  $n = 1, t_1 = \tau_1$ .
- **2.** Löse das diskrete Problem zur Zeit  $t_n$  und bestimme die Indikatoren  $\eta_h^n$  und  $\eta_\tau^n$ .
- **3.** Falls  $\eta_{\tau}^n > \frac{\varepsilon}{2\sqrt{T}}$  ist, ersetze  $t_n$  durch  $\frac{1}{2}(t_{n-1}+t_n)$  und gehe zu Schritt 2 zurück (Halbieren von  $\tau_n$ ).
- 4. Passe  $\mathcal{T}_n$  so an, dass  $\eta_h^n \leq \frac{\varepsilon}{2\sqrt{T}}$  ist. Falls  $\eta_{\tau}^n < \frac{\varepsilon}{4\sqrt{T}}$  ist, verdoppele  $\tau_n$ .
- **5.** Falls  $t_n = T$  ist, stopp. Andernfalls setze  $t_{n+1} = \min\{T, t_n + \tau_n\}$ , erhöhe *n* um 1 und gehe zu Schritt 2 zurück.



Vertiefung Numerische Mathematik Parabolische Differentialgleichungen Adaptivität

#### Bemerkungen

- $\triangleright \approx$  bedeutet obere und untere Schranken modulo multiplikativer Faktoren.
- Finite-Element-Funktionen und den Formparametern der Unterteilungen ab.
- ▶ Die oberen Schranken sind global in Ort und Zeit.
- ▶ Die unteren Schranken sind global im Ort und lokal in der Zeit.
- $\triangleright \eta_h^n$  kontrolliert den Fehler der Ortsdiskretisierung.
- $\triangleright \eta_{\tau}^{n}$  kontrolliert den Fehler der Zeitdiskretisierung.

RUF



Vertiefung Numerische Mathematik Parabolische Differentialgleichungen

#### Eigenschaften

Am Ende des Algorithmus ist

$$\left\{\int_{\Omega} |u_{\mathcal{T}_0}^0 - u_0|^2 dx + \sum_{n=1}^{N_{\mathcal{I}}} \tau_n \left[\left(\eta_h^n\right)^2 + \left(\eta_\tau^n\right)^2\right]\right\}^{\frac{1}{2}} \le \varepsilon.$$

- ▶ Beim Anpassen von  $\mathcal{T}_n$  werden  $t_n$ ,  $\tau_n$  und  $\eta_{\tau}^n$  fest gehalten.
- ▶ Die Anpassung von  $\mathcal{T}_n$  erfordert ggf. das wiederholte Lösen diskreter Probleme und die Neuberechnung von  $\eta_h^n$ .

# RUB

## Finite-Volumen-Methoden

- ▶ Systeme in Divergenzform
- ▶ Grundidee der Finite-Volumen-Verfahren
- ▶ Konstruktion der Gitter
- ▶ Konstruktion der numerischen Flüsse
- ▶ Zusammenhang mit Finite-Element-Methoden

Vertiefung Numerische Mathematik - Finite-Volumen-Methoden - Systeme in Divergenzform

## Aufgabenstellung

- ▶ Gebiet:  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$
- ▶ Quelle:  $\mathbf{g} : \mathbb{R}^m \times \Omega \times (0, \infty) \to \mathbb{R}^m$
- $\blacktriangleright \text{ Masse: } \mathbf{M}: \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m$
- ▶ Fluss:  $\underline{\mathbf{F}} : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^{m \times d}$
- Anfangswert:  $\mathbf{U}_0: \Omega \to \mathbb{R}^m$
- ▶ Problem: Finde  $\mathbf{U} : \Omega \times (0, \infty) \to \mathbb{R}^m$  so, dass mit geeigneten Randbedingungen gilt

$$\begin{split} \frac{\partial \mathbf{M}(\mathbf{U})}{\partial t} + \operatorname{div} \underline{\mathbf{F}}(\mathbf{U}) &= \mathbf{g}(\mathbf{U}, x, t) \qquad \text{in } \Omega \times (0, \infty) \\ \mathbf{U}(\cdot, 0) &= \mathbf{U}_0 \qquad \text{in } \Omega \end{split}$$

$$\bullet \operatorname{div} \underline{\mathbf{F}}(\mathbf{U}) = \left(\sum_{j=1}^{d} \frac{\partial \underline{\mathbf{F}}(\mathbf{U})_{i,j}}{\partial x_j}\right)_{1 \le i \le m}$$

241/264

	$\land$	
	$\wedge$	
XA		
	XXX	$\sim$
	$ \land \land \land \land$	
		$\sim$

Vertiefung Numerische Mathematik - Finite-Volumen-Methoden - Systeme in Divergenzform



## Advektive und Viskose Flüsse

 $\blacktriangleright$  Der Fluss $\underline{\mathbf{F}}$ kann in zwei Beiträge aufgespalten werden:

 $\underline{\mathbf{F}} = \underline{\mathbf{F}}_{adv} + \underline{\mathbf{F}}_{visc}.$ 

- $\blacktriangleright$  **\underline{F}\_{adv}** heißt advektiver Fluss und enthält keine Ableitungen.
- $\underline{\mathbf{F}}_{\text{visc}}$  heißt viskoser Fluss und enthält räumliche Ableitungen.
- Der advektive Fluss modelliert Transport- oder Konvektionsphänomene.
- ▶ Der viskose Fluss modelliert Diffusionsphänomene.

Ľ

Vertiefung Numerische Mathematik - Finite-Volumen-Methoden - Systeme in Divergenzform

## Beispiele

 Lineare parabolische Differentialgleichungen zweiter Ordnung:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(A\nabla u) + \mathbf{a} \cdot \nabla u + \alpha u = f$$

- $> \frac{\partial t}{m} = 1$
- $\mathbf{U} = u$
- $\mathbf{M}(\mathbf{U}) = u$

$$\blacktriangleright \underline{\mathbf{F}}_{\mathrm{adv}}(\mathbf{U}) = \mathbf{a}u$$

• 
$$\underline{\mathbf{F}}_{\text{visc}}(\mathbf{U}) = -A\nabla u$$

- $\mathbf{g}(\mathbf{U}) = f \alpha u + (\operatorname{div} \mathbf{a})u$
- ► Euler-Gleichungen
- ▶ Kompressible Navier-Stokes-Gleichungen
- ► Burger-Gleichung

242/264

RUF



### **Erster Schritt**

- ▶ Wähle einen Zeitschritt  $\tau > 0$ .
- Wähle eine Unterteilung  $\mathcal{T}$  von  $\Omega$  in beliebige, nicht überlappende Polyeder.
- Betrachte ein  $n \in \mathbb{N}^*$  und ein  $K \in \mathcal{T}$ .
- ▶ Integriere das System über  $K \times [(n-1)\tau, n\tau]$ :

$$\int_{(n-1)\tau}^{n\tau} \int_{K} \frac{\partial \mathbf{M}(\mathbf{U})}{\partial t} dx dt + \int_{(n-1)\tau}^{n\tau} \int_{K} \operatorname{div} \mathbf{F}(\mathbf{U}) dx dt$$
$$= \int_{(n-1)\tau}^{n\tau} \int_{K} \mathbf{g}(\mathbf{U}, x, t) dx dt$$

245/264

RUB

RUE

Vertiefung Numerische Mathematik
Finite-Volumen-Methoden
Grundidee der Finite-Volumen-Verfahren

## **Dritter Schritt**

- Nehme an, dass U bezüglich Ort und Zeit stückweise konstant ist.
- ► Bezeichne mit  $\mathbf{U}_{K}^{n}$  und  $\mathbf{U}_{K}^{n-1}$  den Wert von **U** auf *K* zu den Zeiten  $n\tau$  und  $(n-1)\tau$ :

$$\int_{K} \mathbf{M}(\mathbf{U}(x, n\tau)) dx \approx |K| \mathbf{M}(\mathbf{U}_{K}^{n})$$
$$\int_{K} \mathbf{M}(\mathbf{U}(x, (n-1)\tau)) dx \approx |K| \mathbf{M}(\mathbf{U}_{K}^{n-1})$$
$$\int_{(n-1)\tau}^{n\tau} \int_{\partial K} \mathbf{\underline{F}}(\mathbf{U}) \cdot \mathbf{n}_{K} dS dt \approx \tau \int_{\partial K} \mathbf{\underline{F}}(\mathbf{U}_{K}^{n-1}) \cdot \mathbf{n}_{K} dS$$
$$\int_{(n-1)\tau}^{n\tau} \int_{K} \mathbf{g}(\mathbf{U}, x, t) dx dt \approx \tau |K| \mathbf{g}(\mathbf{U}_{K}^{n-1}, x_{K}, (n-1)\tau)$$



## **Zweiter Schritt**

Integriere die Terme auf der linken Seite partiell:

$$\int_{(n-1)\tau}^{n\tau} \int_{K} \frac{\partial \mathbf{M}(\mathbf{U})}{\partial t} dx dt = \int_{K} \mathbf{M}(\mathbf{U}(x, n\tau)) dx$$
$$- \int_{K} \mathbf{M}(\mathbf{U}(x, (n-1)\tau)) dx$$
$$\int_{(n-1)\tau}^{n\tau} \int_{K} \operatorname{div} \mathbf{F}(\mathbf{U}) dx dt = \int_{(n-1)\tau}^{n\tau} \int_{\partial K} \mathbf{F}(\mathbf{U}) \cdot \mathbf{n}_{K} dS dt$$

246/264



## Vierter Schritt

Approximiere das Randintegral für den Fluss durch einen numerischen Fluss:

$$\tau \int_{\partial K} \underline{\mathbf{F}}(\mathbf{U}_{K}^{n-1}) \cdot \mathbf{n}_{K} dS$$
  
$$\approx \tau \sum_{\substack{K' \in \mathcal{T} \\ \partial K \cap \partial K' \in \mathcal{E}}} |\partial K \cap \partial K'| \mathbf{F}_{\mathcal{T}}(\mathbf{U}_{K}^{n-1}, \mathbf{U}_{K'}^{n-1})$$



### **Resultierendes Finite-Volumen-Verfahren**

▶ Berechne für jedes Element  $K \in \mathcal{T}$ 

$$\mathbf{U}_K^0 = \frac{1}{|K|} \int_K \mathbf{U}_0(x)$$

▶ Berechne für n = 1, 2, ... sukzessive für jedes Element  $K \in \mathcal{T}$ 

$$\mathbf{M}(\mathbf{U}_{K}^{n}) = \mathbf{M}(\mathbf{U}_{K}^{n-1})$$
$$-\tau \sum_{\substack{K' \in \mathcal{T} \\ \partial K \cap \partial K' \in \mathcal{E}}} \frac{|\partial K \cap \partial K'|}{|K|} \mathbf{F}_{\mathcal{T}}(\mathbf{U}_{K}^{n-1}, \mathbf{U}_{K'}^{n-1})$$
$$+\tau \mathbf{g}(\mathbf{U}_{K}^{n-1}, x_{K}, (n-1)\tau).$$

249/264

RUB

RUE



# Vertiefung Numerische Mathematik

Grundidee der Finite-Volumen-Verfahren



- Konstruiere die Unterteilung  $\mathcal{T}$ .
- Bestimme den numerischen Fluss  $\underline{\mathbf{F}}_{\mathcal{T}}$ .
- ▶ Berücksichtige Randbedingungen.



## Mögliche Modifikationen

- ▶ Die Zeitschrittweite kann variabel sein.
- $\blacktriangleright$  Die Unterteilung von  $\Omega$  kann sich von Zeitschritt zu Zeitschritt ändern.
- $\blacktriangleright$  Die Näherung  $\mathbf{U}_{K}^{n}$ muss nicht stückweise konstant sein.

250/264

RUF



#### **Duale Gitter**

- Die Unterteilung  $\mathcal{T}$  wird häufig als duales Gitter zu einer zulässigen primalen Finite-Element-Unterteilung  $\tilde{\mathcal{T}}$  konstruriert.
- ▶ Für Probleme in zwei Raumdimensionen (d = 2) gibt es hierfür im wesentlichen zwei verschiedene Ansätze:
  - ▶ Konstruiere für jedes Element  $\widetilde{K} \in \widetilde{\mathcal{T}}$  die Mittelsenkrechten.
  - ▶ Verbinde für jedes Element  $\widetilde{K} \in \widetilde{\mathcal{T}}$  seinen Schwerpunkt mit den Kantenmittelpunkten.



## Mittelsenkrechten und Schwerpunkte



253/264

RUE

Vertiefung Numeris
${}^{\bot}_{\rm Finite-Volumen-I}$
<b>Konstruktion</b>

#### sche Mathematik Methoden der Gitter

## RUB

## Vor- und Nachteile von Mittelsenkrechten

- ▶ Die Strecke  $\overline{x_{E,1} x_{E,2}}$  und die Kante *E* schneiden sich in einem rechten Winkel.
- Die Mittelsenkrechten eines Dreiecks können sich in einem Punkt außerhalb des Dreieckes schneiden. Der Schnittpunkt der Mittelsenkrechten liegt genau dann im Dreieck, wenn das Dreieck spitzwinklig ist.
- ▶ Die Mittelsenkrechten eines Vierecks brauchen sich nicht zu schneiden. Die Mittelsenkrechten eines Viereckes schneiden sich genau dann in einem Punkt, wenn das Viereck ein Rechteck ist.
- ▶ Die Konstruktion mit Mittelsenkrechten hat kein dreidimensionales Analogon.



Vertiefung Numerische Mathematik Finite-Volumen-Methoden Konstruktion der Gitter

## Eigenschaften dualer Gitter

- ▶ Jedes Element in  $K \in \mathcal{T}$  entspricht einem Elementeckpunkt  $x_{K}$ von  $\widetilde{\mathcal{T}}$  und umgekehrt.
- $\blacktriangleright$  Zu jeder Kante *E* von  $\mathcal{T}$  gibt es zwei Elementeckpunkte  $x_{E,1}$ ,  $x_{E,2}$  von  $\widetilde{\mathcal{T}}$  so, dass die Strecke  $\overline{x_{E,1} x_{E,2}}$  die Kante E schneidet.



254/264

RUF

#### Vertiefung Numerische Mathematik Finite-Volumen-Methoden

-Konstruktion der numerischen Flüsse

## RUF

#### Bezeichnungen und Annahmen

- $\blacktriangleright$   $\mathcal{T}$  sei ein duales Gitter zu einer primalen Finite-Element-Unterteilung  $\widetilde{\mathcal{T}}$ .
- Für jede Kante oder Fläche E von  $\mathcal{T}$  seien
  - $K_1$  und  $K_2$  die angrenzenden Volumina,
  - $\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2$  die Werte  $\mathbf{U}_{K_1}^{n-1}$  und  $\mathbf{U}_{K_2}^{n-1}$ ,
  - $x_1, x_2$  die Elementeckpunkte von  $\widetilde{\mathcal{T}}$ , für die die Strecke  $\overline{x_1 x_2}$  die Kante oder Fläche E schneidet.
- ▶ Spalte den numerischen Fluss  $\underline{\mathbf{F}}_{\tau}(\mathbf{U}_1,\mathbf{U}_2)$  in einen viskosen numerischen Fluss  $\underline{\mathbf{F}}_{\mathcal{T}, \text{visc}}(\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2)$  und einen advektiven numerischen Fluss  $\underline{\mathbf{F}}_{\mathcal{T},adv}(\mathbf{U}_1,\mathbf{U}_2)$  auf.



Vertiefung Numerische Mathematik - Finite-Volumen-Methoden - Konstruktion der numerischen Flüsse

#### Approximation der viskosen Flüsse

- Führe ein lokales Koordinatensystem  $\eta_1, \ldots, \eta_d$  so ein, dass die Richtung  $\eta_1$  parallel ist zur Richtung von  $\overline{x_1 x_2}$  und die restlichen Richtungen tangential sind zu E.
  - $\eta_2$   $\eta_1$
- Drücke alle Ableitungen in  $\underline{\mathbf{F}}_{\text{visc}}$  durch partielle Ableitungen bezüglich des neuen Koordinatensystems aus.
- Unterdrücke alle partiellen Ableitungen, die nicht  $\eta_1$  betreffen.
- ▶ Approximiere partielle Ableitungen bezüglich  $\eta_1$  durch Differenzenquotienten der Form  $\frac{\varphi_1 \varphi_2}{|x_1 x_2|}$ .

257/264

RUE

RUE

Vertiefung Numerische Mathematik	
Finite-Volumen-Methoden	
Konstruktion der numerischen Flüsse	

## Approximation der advektiven Flüsse

► Steger-Warming

$$\mathbf{F}_{\mathcal{T},\mathrm{adv}}(\mathbf{U}_1,\mathbf{U}_2) = C(\mathbf{U}_1)^+\mathbf{U}_1 + C(\mathbf{U}_2)^-\mathbf{U}_2$$

▶ van Leer

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{\mathcal{T},\text{adv}}(\mathbf{U}_1,\mathbf{U}_2) \\ &= \left[ C(\mathbf{U}_1) + C(\frac{1}{2}(\mathbf{U}_1+\mathbf{U}_2))^+ - C(\frac{1}{2}(\mathbf{U}_1+\mathbf{U}_2))^- \right] \mathbf{U}_1 \\ &+ \left[ C(\mathbf{U}_2) - C(\frac{1}{2}(\mathbf{U}_1+\mathbf{U}_2))^+ + C(\frac{1}{2}(\mathbf{U}_1+\mathbf{U}_2))^- \right] \mathbf{U}_2 \end{aligned}$$



Vertiefung Numerische Mathematik └─Finite-Volumen-Methoden └─Konstruktion der numerischen Flüsse

#### Spektralzerlegung der advektiven Flüsse

- ▶ Bezeichne mit  $C(\mathbf{V}) = D(\underline{\mathbf{F}}_{adv}(\mathbf{V}) \cdot \mathbf{n}_{K_1}) \in \mathbb{R}^{m \times m}$  die Ableitung von  $\underline{\mathbf{F}}_{adv}(\mathbf{V}) \cdot \mathbf{n}_{K_1}$  nach  $\mathbf{V}$ .
- Nehme an, dass diese Matrix diagonalisierbar ist (f
  ür Eulerund kompressible Navier-Stokes-Gleichungen erf
  üllt)

 $Q(\mathbf{V})^{-1}C(\mathbf{V})Q(\mathbf{V}) = \Delta(\mathbf{V})$ 

mit einer invertierbaren Matrix  $Q(\mathbf{V}) \in \mathbb{R}^{m \times m}$  und einer Diagonalmatrix  $\Delta(\mathbf{V}) \in \mathbb{R}^{m \times m}$ .

• Setze  $z^+ = \max\{z, 0\}, z^- = \min\{z, 0\}$  und

 $\Delta(\mathbf{V})^{\pm} = \operatorname{diag}(\Delta(\mathbf{V})_{11}^{\pm}, \dots, \Delta(\mathbf{V})_{mm}^{\pm}),$  $C(\mathbf{V})^{\pm} = Q(\mathbf{V})\Delta(\mathbf{V})^{\pm}Q(\mathbf{V})^{-1}.$ 

258/ 264

RUF



Vertiefung Numerische Mathematik └Finite-Volumen-Methoden └Konstruktion der numerischen Flüsse

#### Eigenschaften

- ▶ Beide Ansätze erfordern die Berechnung von  $D\underline{\mathbf{F}}_{adv}(\mathbf{V}) \cdot \mathbf{n}_{K_1}$  und der entsprechenden Eigenwerte und Eigenvektoren für geeignete Werte von  $\mathbf{V}$ .
- ▶ Im allgemeinen ist der Ansatz von van Leer aufwändiger als der von Steger-Warming, da er drei statt zwei Auswertungen von  $C(\mathbf{V})$  erfordert.
- ▶ Für die kompressiblen Navier-Stokes- und Euler-Gleichungen kann dieser Mehraufwand vermieden werden, da diese Gleichungen die spezielle Struktur  $\underline{\mathbf{F}}_{adv}(\mathbf{V}) \cdot \mathbf{n}_{K_1} = C(\mathbf{V})\mathbf{V}$  haben.



## Ein eindimensionales Beispiel

- Burger-Gleichung:  $\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0$ •  $\underline{\mathbf{F}}_{adv}(u) = \frac{1}{2}u^2, C(u) = u, C(u)^{\pm} = u^{\pm}$
- ► Steger-Warming:

$$\underline{\mathbf{F}}_{\mathcal{T},\mathrm{adv}}(u_1, u_2) = \begin{cases} u_1^2 & \text{if } u_1 \ge 0, u_2 \ge 0\\ u_1^2 + u_2^2 & \text{if } u_1 \ge 0, u_2 \le 0\\ u_2^2 & \text{if } u_1 \le 0, u_2 \le 0\\ 0 & \text{if } u_1 \le 0, u_2 \ge 0 \end{cases}$$

▶ van Leer:

$$\underline{\mathbf{F}}_{\mathcal{T},\mathrm{adv}}(u_1, u_2) = \begin{cases} u_1^2 & \text{if } u_1 \ge -u_2\\ u_2^2 & \text{if } u_1 \le -u_2 \end{cases}$$

261/264

RUE

Vertiefung Numerische Mathematik Finite-Volumen-Methoden **Zusammenhang mit Finite-Element-Methoden** 

RUE

## Ein einfacher adaptiver Algorithmus

- ▶ Zu gegebener Lösung  $\mathbf{U}_{\mathcal{T}}$  der Finite-Volumen-Diskretisierung berechne die zugehörige Finite-Element-Funktion  $\widetilde{\mathbf{U}}_{\widetilde{\tau}}$ .
- ▶ Wende einen gebräuchlichen Fehlerschätzer auf  $\widetilde{\mathbf{U}}_{\widetilde{\tau}}$  an.
- ▶ Basierend auf diesem Fehlerschätzer wende eine gebräuchliche Verfeinerungsstrategie auf  $\widetilde{\mathcal{T}}$  an und konstruiere so eine neue lokal verfeinerte Unterteilung  $\widehat{\mathcal{T}}$ .
- Benutze  $\hat{\mathcal{T}}$  als primales Gitter zur Konstruktion eines neuen dualen Gitters  $\mathcal{T}'$ . Dies ist die Verfeinerung von  $\mathcal{T}$ .



## **Zugeordnete Finite-Element-Funktionen**

- $\blacktriangleright$   $\mathcal{T}$  sei ein duales Gitter zu einer primalen Finite-Element-Unterteilung  $\widetilde{\mathcal{T}}$ .
- ▶ Dann gibt es eine Eins-zu-Eins-Beziehung zwischen stückweise konstanten Funktionen zu  $\mathcal{T}$  und stetigen stückweise linearen Funktionen zu  $\widetilde{\mathcal{T}}$ :

$$\mathbf{U}^{0,-1}(\mathcal{T})^m \ni \mathbf{U}_{\mathcal{T}} \leftrightarrow \widetilde{\mathbf{U}}_{\widetilde{\mathcal{T}}} \in S^{1,0}(\widetilde{\mathcal{T}})^m$$
  
 $\mathbf{U}_{\mathcal{T}}|_K = \widetilde{\mathbf{U}}_{\widetilde{\mathcal{T}}}(x_K)$  für alle  $K \in \mathcal{T}$ .

262/264

RUF

RUF

Literatur

Vertiefung Numerische Mathematik

## Literatur

- D. Braess Finite Elemente Springer 2007
- W. Dahmen, A. Reusken Numerik für Ingenieure und Naturwissenschaftler Springer 2006
- P. Deuflhard, F. Bornemann Numerische Mathematik II de Gruyter 2002
- H. R. Schwarz, N. Köckler Numerische Mathematik Vieweg-Teubner 2009