

Finite Element Approximation auf der Basis geometrischer Zellen

Peter Milbradt, Axel Schwöppe
 Institut für Bauinformatik, Universität Hannover

Die Methode der Finiten Elemente ist ein numerisches Verfahren zur Interpolation vorgegebener Werte und zur numerischen Approximation von Lösungen stationärer oder instationärer partieller Differentialgleichungen bzw. Systemen partieller Differentialgleichungen. Grundlage dieser Verfahren ist die Formulierung geeigneter Finiten Elemente und Finiten Element Zerlegungen. Finite Elemente besitzen in der Regel eine geometrische Basis bestehend aus Strecken im eindimensionalen, Drei- oder Vierecken im zweidimensionalen und Tetra- oder Hexaedern im dreidimensionalen euklidischen Raum, eine Menge von Freiheitsgraden und eine Basis von Funktionen. Die geometrische Basis wird nachfolgend durch die geometrische Zelle verallgemeinert.

Geometrische Zelle

Eine geometrische Zelle beschreibt die geometrische Basis eines Finiten Elements unabhängig von einer festgelegten Eckenanzahl im n -dimensionalen euklidischen Raum \mathbb{R}^n . Die geometrische Zelle ist eine kompakte Teilmenge K des \mathbb{R}^n . Die kompakte Teilmenge wird über eine Menge von ausgezeichneten Punkten $P \subseteq K$ beschrieben. Die ausgezeichneten Punkte $\mathbf{p}_0, \dots, \mathbf{p}_N \in \mathbb{R}^n$ werden als Konfiguration bezeichnet.

Eine spezielle geometrische Zelle ist die konvexe Hülle einer Konfiguration. Die konvexe Hülle wird hier über die homogene Formulierung der Linearkombination einer Konfiguration definiert. Die Faktoren der Linearkombination sind größer oder gleich null.

$$Z := \left\{ \mathbf{p} \mid \mathbf{p} = \lambda_0 \mathbf{p}_0 + \dots + \lambda_N \mathbf{p}_N \wedge \lambda_i \in \mathbb{R}_0^+ \wedge \lambda_0 + \dots + \lambda_N = 1 \right\} \quad (1)$$

Die konvexe Hülle wird hier als konvexe Zelle bezeichnet. Die ausgezeichneten Punkte der Konfiguration werden Ecken der konvexen Zelle genannt.

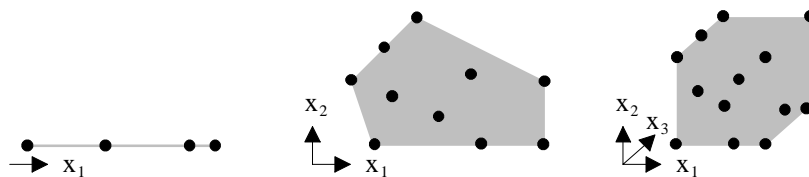


Abbildung 1: Konvexe Zellen

Werden zusätzliche Anforderungen an die Ecken einer konvexen Zelle gestellt, lässt sich eine spezielle konvexe Zelle entwickeln. Eine Ecke \mathbf{p}_j der konvexen Zelle heißt echte Ecke, wenn sie nicht als echte Linearkombination

$$\mathbf{p} = \lambda_0 \mathbf{p}_0 + \dots + \lambda_m \mathbf{p}_m \wedge \lambda_i \in \mathbb{R}^+ \wedge \lambda_0 + \dots + \lambda_N = 1 \wedge \mathbf{p}_i \in Z \quad (2)$$

beliebiger Punkte der konvexen Zelle dargestellt werden kann.

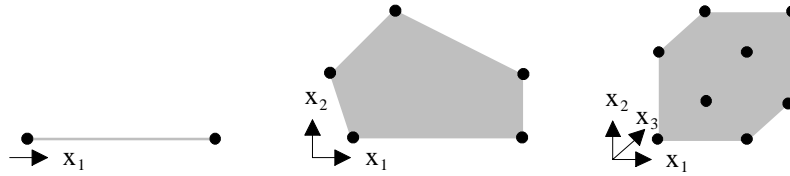


Abbildung 2: Konvexe Zellen echter Ecken

Eine weitere spezielle geometrische Zelle ist die nicht konvexe Zelle. Eine nicht konvexe Zelle wird über regularisierte Mengenoperationen aus der konvexen Hülle der Konfiguration und konvexen Subzellen bestimmt. Konvexe Subzellen beschreiben die Punkte der konvexen Zelle, die in der nicht konvexen Zelle nicht enthalten sind [7].

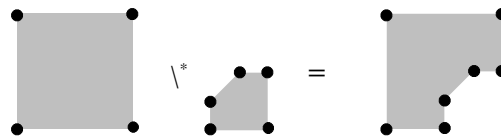


Abbildung 3: Bestimmung nicht konvexer Zellen aus konvexen Zellen

Wesentlich für die verallgemeinerte Behandlung konvexer und nicht konvexer Zellen als geometrische Zellen ist eine einheitliche Beschreibung aller Punkte einer geometrischen Zelle. Dies wird durch eine einheitliche Formulierung von Zellkoordinaten erreicht.

Zellkoordinaten

Die Beschreibung der Punkte einer geometrischen Zelle erfolgt über ein auf die Ecken bezogenes Koordinatensystem. Aus der homogenen Formulierung der konvexen Zelle (1) bieten sich die Faktoren der Linearkombination als Koordinaten an. Besitzt eine Zelle genau $n + 1$ linear unabhängige Ecken, sind die Faktoren eindeutig und heißen baryzentrische Koordinaten [5]. Besteht eine geometrische Zelle aus mehr als $n + 1$ Ecken, sind die Faktoren nicht eindeutig. Eine mögliche Bestimmung der Faktoren gründet sich auf die natürlichen Koordinaten einer Menge ausgezeichnete Punkte [8]. Die natürlichen Koordinaten ergeben sich über die Voronoi-Zerlegung zweiter Ordnung [4]. Die in dieser Form bestimmten Faktoren der Linearkombination werden Zellkoordinaten genannt.

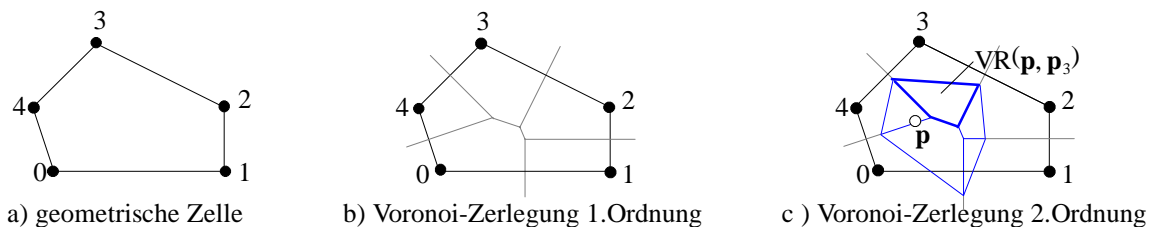


Abbildung 4: Geometrische Zelle, Voronoi-Diagramme erster und zweiter Ordnung

Die Voronoi-Zerlegung erster Ordnung einer konvexen Zelle wird bezüglich ihrer Ecken bestimmt. Jeder Ecke der konvexen Zelle wird eine Voronoi-Region zugeordnet. Eine Vor-

onoi-Region einer Ecke ist die Menge von Punkten, deren Abstand zur Ecke kleiner oder gleich ihrem Abstand zu den übrigen Ecken ist.

$$VR(\mathbf{p}_k) := \left\{ \mathbf{p} \in \mathbb{R}^n : d(\mathbf{p}, \mathbf{p}_k) \leq d(\mathbf{p}, \mathbf{p}_i) \forall i \neq k \right\} \quad (3)$$

Die Voronoi-Region zweiter Ordnung einer konvexen Zelle wird bezüglich ihrer Ecken und einem Punkt \mathbf{p} der konvexen Zelle bestimmt. Eine Voronoi-Region zweiter Ordnung ist die Menge von Punkten, deren Abstand zum Punkt \mathbf{p} kleiner oder gleich ihrem Abstand zu einer Ecke \mathbf{p}_j ist, wenn ihr Abstand zu dieser Ecke kleiner oder gleich ihrem Abstand zu den übrigen Ecken ist.

$$VR(\mathbf{p}, \mathbf{p}_j) := \left\{ \mathbf{q} \in \mathbb{R}^n : d(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \leq d(\mathbf{q}, \mathbf{p}_j) \leq d(\mathbf{q}, \mathbf{p}_k) \forall k \neq j \right\} \quad (4)$$

Die Menge aller Voronoi-Regionen der Ecken heißt Voronoi-Zerlegung erster beziehungsweise zweiter Ordnung.

$$VZ := \{VR_1, VR_2, \dots, VR_N\} \quad (5)$$

Die Zellkoordinate des Punktes \mathbf{p} bezüglich der Ecke \mathbf{p}_j wird über die Voronoi-Regionen zweiter Ordnung bestimmt. Jeder Voronoi-Region erster oder zweiter Ordnung läßt sich ein Lebesgue-Maß $\mu(VR(\mathbf{p}_k))$ bzw. $\mu(VR(\mathbf{p}, \mathbf{p}_j))$ zuordnen [4]. Dieses Maß entspricht im 2-dimensionalen Raum dem euklidischen Flächeninhalt. Das Verhältnis des Maßes der Voronoi-Region zweiter Ordnung einer Ecke \mathbf{p}_j und dem Punkt \mathbf{p} zu der Summe der Maße der Voronoi-Regionen zweiter Ordnung aller Ecken P und dem Punkt \mathbf{p} bestimmt die Zellkoordinate des Punktes \mathbf{p} für die Ecke \mathbf{p}_j eindeutig.

$$\lambda_j(\mathbf{p}, \mathbf{p}_j) := \frac{\mu(VR(\mathbf{p}, \mathbf{p}_j))}{\sum_{k=0}^N \mu(VR(\mathbf{p}, \mathbf{p}_k))} \quad (6)$$

Die Zellkoordinaten auf der Basis natürlicher Koordinaten genügen der homogenen Linearkombination (1). Besteht die konvexe Zelle aus genau $n + 1$ Ecken, entsprechen die Zellkoordinaten den baryzentrischen Koordinaten.

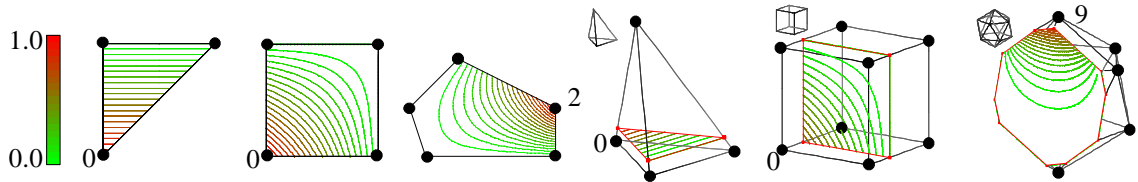


Abbildung 5: Koordinate λ_j für konvexe Zellen echter Ecken

Die Bestimmung der Zellkoordinaten über die Voronoi-Zerlegung zweiter Ordnung basiert auf einer konvexen Beschreibung der Ecken [8]. Für nicht konvexe Zellen bleiben bestimmte

Beziehungen benachbarter Ecken unberücksichtigt. Zwei Ecken heißen benachbart, wenn der Durchschnitt ihrer Voronoi-Regionen nicht leer ist. Die Beziehungen benachbarter Ecken der konvexen Subzellen werden für die Bestimmung der Zellkoordinaten nicht konvexer Zellen vernachlässigt [7].

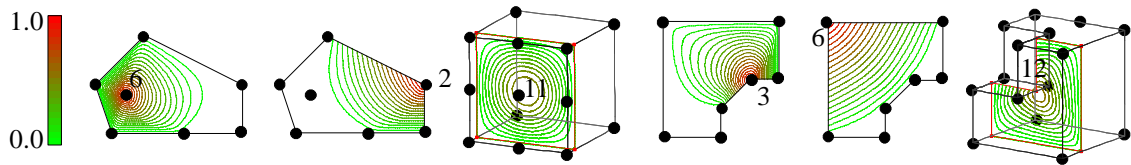


Abbildung 6: Koordinate λ_j für konvexe und nicht konvexe Zellen

Algorithmisch lassen sich die Zellkoordinaten über das Einfügen des Punktes P_i in die Voronoi-Zerlegung erster Ordnung ermitteln [8]. Algorithmen zur n-dimensionalen Bestimmung einer Voronoi-Zerlegung erster Ordnung sind in [1] und [9] aufgeführt.

Geometrisches Element

Ein geometrisches Element besteht aus einer geometrischen Zelle und einer bijektiven Abbildung.

$$GE := (Z, F) \tag{7}$$

Die Abbildung F weist einem Koordinatentupel der geometrischen Zelle ein Koordinatentupel des geometrischen Elementes zu (Abbildung 7).

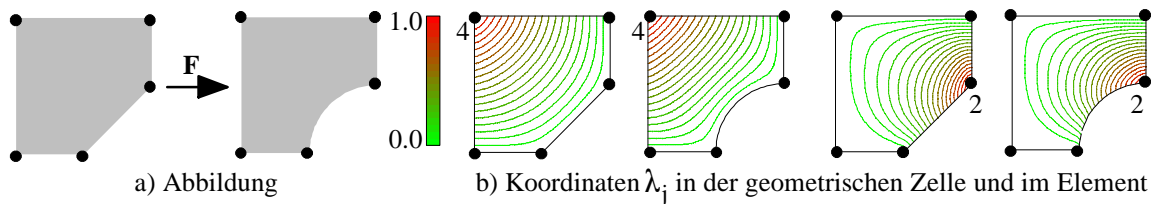


Abbildung 7: Allgemeine Abbildung

Klassische Abbildungen sind beispielsweise affine Abbildungen (Abbildung 8a)). Ein geometrisches Element mit einer affinen Abbildung kann alternativ als konvexe Zelle beschrieben werden. Die Zellkoordinaten werden allerdings bezüglich der geometrischen Lage der Konfiguration bestimmt (Abbildung 8b)).

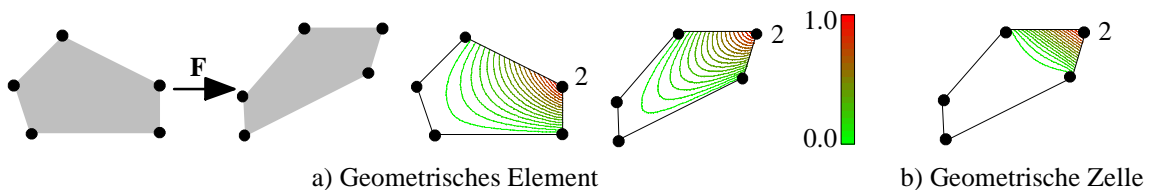


Abbildung 8: Affine Abbildung

Die Menge der Punkte eines geometrischen Elements ist eine kompakte Teilmenge des \mathbb{R}^n . Jedes geometrische Element ist daher eine geometrische Zelle und kann als solche verwendet werden.

Finites Element

Ein Finites Element besteht aus einem geometrischen Element E , einer Menge von Freiheitsgraden G und einem Raum von Interpolationsfunktionen Φ .

$$FE := (E, G, \Phi) \quad (8)$$

Einem Freiheitsgrad wird ein Punkt des geometrischen Elements, eine Basisfunktion des Interpolationsraumes und in der Regel ein Wert einer gegebenen Funktion zugeordnet. Der Träger des Interpolationsraumes ist das geometrische Element. Die zugehörigen Basisfunktionen werden in den Zellkoordinaten des geometrischen Elementes formuliert, wodurch eine geometrieunabhängige Formulierung der Basisfunktionen ermöglicht wird. Eine Basisfunktion nimmt im Freiheitsgrade, dem sie zugeordnet ist, den Wert eins an.

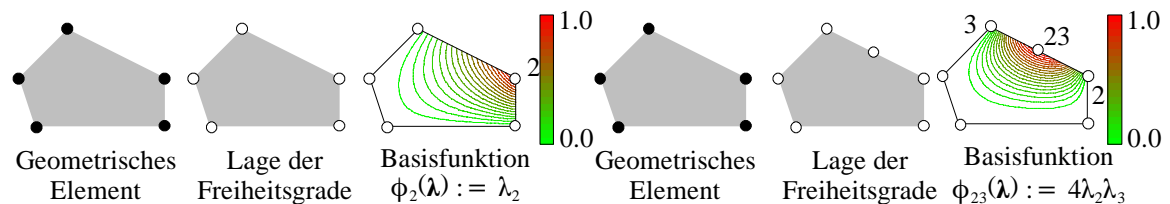


Abbildung 8: Finite Elemente

Im weiteren werden exemplarisch Finite Elemente verwendet, deren geometrische Elemente die identitive Abbildung besitzen. Die Lage ihrer Freiheitsgrade entspricht den Konfigurationen der geometrischen Zellen. Die Werte der Freiheitsgrade sind skalare Größen. Die Basis der Interpolationsfunktionen sind die Zellkoordinaten $\phi_i(\boldsymbol{\lambda}) := \lambda_i$. Sind die geometrischen Zellen Dreiecke oder Tetraeder, entsprechen diese Finiten Elemente Dreiecks- bzw. Tetraeder-Elementen mit linearen Basisfunktionen. Sind die geometrischen Zellen Rechtecke, entsprechen diese Finiten Elemente Rechteck-Elementen mit bilinearen Basisfunktionen [2].

Finite Element Interpolation

Eine Interpolation bestimmt die Näherung des Verlaufs einer unbekannt Funktion $f(\mathbf{x})$ durch eine bekannte Funktion $\hat{f}(\mathbf{x})$. Die Funktionswerte beider Funktionen stimmen an einer vorgegebenen Menge von Punkten P überein $f(\mathbf{p}_i) = \hat{f}(\mathbf{p}_i)$. Die Funktion $\hat{f}(\mathbf{x})$ wird nachfolgend als Linearkombination der linear unabhängigen Basisfunktionen und der übereinstimmenden Funktionswerte formuliert.

$$\hat{f}(\mathbf{x}) := \sum_{i=1}^N \psi_i(\mathbf{x}) f(\mathbf{p}_i) \quad (9)$$

Die Finite Element Interpolation verwendet als Basisfunktionen die Basisfunktionen des Interpolationsraumes $\psi_i := \phi_i(\boldsymbol{\lambda})$. Die Menge vorgegebener Punkte P der Interpolation entspricht den Punkten der Freiheitsgrade eines Finiten Elements.

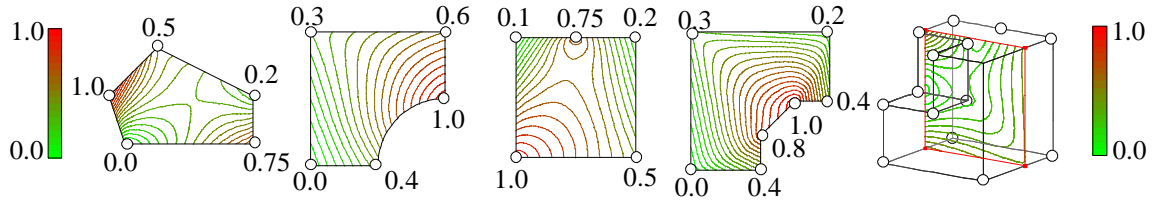


Abbildung 9: Finite Element Interpolation auf einem Finiten Element ($\phi_i(\boldsymbol{\lambda}) := \lambda_i$)

Bezüglich der Menge vorgegebener Punkte P kann eine Finite-Element-Zerlegung des Raumes \mathbb{R}^n bestimmt werden. In Anlehnung an Simplicialkomplexe [6] werden Element-Zerlegungen basierend auf Zellkomplexen [4] verwendet. Die Interpolation auf der Finiten Element Zerlegung wird über die Finite Element Interpolation auf den Finiten Elementen der Zerlegung bestimmt.

Finite Element Approximation

Eine Finite Element Approximation ist eine numerische Näherung der unbekanntenen Lösung $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ einer Gleichung $F(\mathbf{u})$. Auf der Grundlage einer zeitlichen und räumlichen Diskretisierung wird diese numerische Approximation der Gleichung $F(\mathbf{u})$ bestimmt. Die numerische Approximation bezüglich der Zeit kann mit verschiedenen Zeitschrittverfahren ermittelt werden [z.B. 3]. Die numerische Approximation bezüglich des Ortes wird ausgehend von der Überführung des unendlichen Lösungsraumes der Lösung $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ in einen endlichen Lösungsraum diskreter Lösungen $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)$ bestimmt.

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \rightarrow \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) \quad (10)$$

Die diskrete Lösung $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)$ wird durch eine Linearkombination von Basisfunktionen $\zeta_i(\mathbf{x})$ des endlichen Lösungsraumes und diskreten Werten der Lösung $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{p}_i, t)$ an vorgegebenen Punkten P formuliert.

$$\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^N \zeta_i(\mathbf{x}) \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{p}_i, t) \quad (11)$$

Die Abweichung der diskreten Lösung von der exakten Lösung wird als Defekt bezeichnet.

$$\mathbf{d} = F(\hat{\mathbf{u}}) - F(\mathbf{u}) \quad (12)$$

Das Ziel Finiten Element Verfahren, die den Defekt nutzen, besteht in der Minimierung des Defekts. Das Standard-Galerkin-Verfahren geht dazu davon aus, daß der Defekt nicht im endlichen, sondern im unendlichen Lösungsraum auftritt und fordert die Orthogonalität des Defektes bezüglich einer Basis des endlichen Lösungsraumes.

$$\int_{\Omega} \zeta_j(\mathbf{x}) \mathbf{d} \, d\Omega = 0 \quad (13)$$

Das Verfahren liefert ein Gleichungssystem mit den Unbekannten $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{p}_i, t)$. Die Koeffizienten des Gleichungssystems werden auf der Grundlage einer Diskretisierung des Ortsraumes Ω bezüglich der vorgegebenen Punkte P bestimmt. Als Diskretisierung des Ortsraumes Ω wird eine Finite Element Zerlegung gewählt. Als endlicher Lösungsraum wird der Interpolationsraum eines Finiten Elements gewählt.

Exemplarisch wird eine numerische Approximation der Lösung der 2-dimensionalen Diffusionsgleichung mit entsprechenden Anfangs- und Randbedingungen bestimmt [3].

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - k \left(\frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial y^2} \right) = 0 \quad (14)$$

Die Durchführung des Standard-Galerkin-Verfahrens für die örtliche Approximation und des impliziten Euler-Verfahrens für die zeitliche Approximation liefert ein Gleichungssystem

$$(\mathbf{M} - \mathbf{D})\hat{\mathbf{u}}^{t+1} = \mathbf{M}\hat{\mathbf{u}}^t, \quad (15)$$

dessen Massenmatrix \mathbf{M} und Diffusionsmatrix \mathbf{D} sich aus der Auswertung der Integrale

$$m_{ij} = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \phi_i \phi_j d\Omega \quad \text{und} \quad d_{ij} = k \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \phi_i}{\partial x} \phi_j + \frac{\partial \phi_i}{\partial y} \phi_j \right) d\Omega - k \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \phi_i}{\partial x} \frac{\partial \phi_j}{\partial x} + \frac{\partial \phi_i}{\partial y} \frac{\partial \phi_j}{\partial y} \right) d\Omega \quad (16)$$

auf einer Finiten Element Zerlegung ergeben. Als Diskretisierung des Ortsraumes Ω sind grundsätzlich beliebige Finite Element Zerlegungen basierend auf geometrischen Zellen modellierbar.

Das Gleichungssystem (15) wurde auf der Grundlage strukturierter Finiten Element Zerlegungen für ausgewählte Zeitschritte gelöst (Abbildung 11b)). Als Anfangsbedingung wurde einer Menge von Freiheitsgraden die Stoffkonzentration eins zugeordnet (Abbildung 11a)).

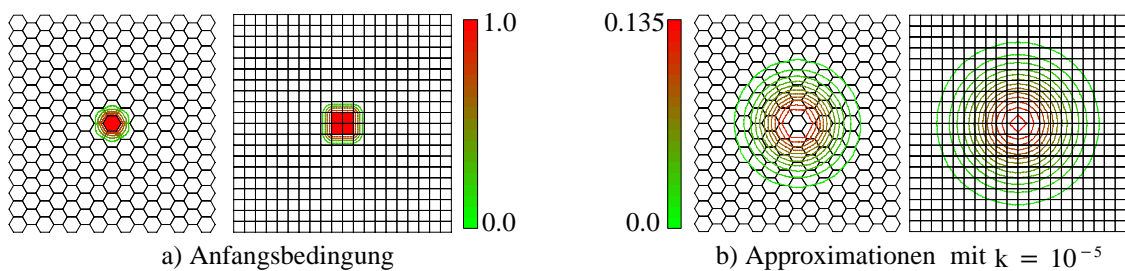


Abbildung 11: Approximationen der Lösung einer 2-dimensionalen Diffusionsgleichung

Zusammenfassung

Die geometrische Zelle wurde als geometrische Basis eines Finiten Elements formuliert. Diese geschlossene geometrische Formulierung führte zu einer geometrieunabhängigen De-

definition der Basisfunktionen eines Finiten Elements in den Zellkoordinaten der geometrischen Zelle. Finite Elemente auf der Basis geometrischer Zellen wurden als Bestandteile Finiten Element Zerlegungen in Finiten Element Interpolationen und Finiten Element Approximationen verwendet. Die Finiten Element Approximationen wurden am Beispiel der 2-dimensionalen Diffusionsgleichung über das Standard-Galerkin-Verfahren ermittelt.

Literatur

- [1] Bowyer A. (1981): *Computing Dirichlet tessellations*. The Computer Journal, Vol. 24, No. 2, pp. 162-166
- [2] Farin G. (1990): *Surfaces over Dirichlet tessellations*. Computer Aided Geometric Design 7 (1-4), pp. 281-292
- [3] Malcherek A. (2001): *Physik und Numerik der Fließgewässer*. Bundesanstalt für Wasserbau, Außenstelle Küste
- [4] Milbradt P. (2001): *Algorithmische Geometrie in der Bauinformatik*. Habilitationsschrift, Institut für Bauinformatik, Universität Hannover
- [5] Reinhardt F., Soeder H. (1974): *dtv-Atlas Mathematik, Band 1 Grundlagen Algebra und Geometrie*. Deutscher Taschenbuch Verlag
- [6] Schubert H. (1964): *Topologie*. Verlag B. G. Teubner, Stuttgart
- [7] Schwöppe A., Milbradt P. (2002): *A Class of Convex, Polygonal Bounded Finite Elements*. WCCM V, Vienna, Eds.: Mang H. A., Rammerstorfer F. G., Eberhardsteiner J.
- [8] Sibson R. (1980): *A vector identity for the Dirichlet tessellation*. Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society 87, pp. 151-155
- [9] Watson D. F. (1981): *Computing the n-dimensional Delaunay tessellation with application to Voronoi polytopes*. The Computer Journal, Vol. 24, No. 2, pp. 167-172