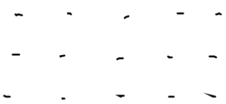
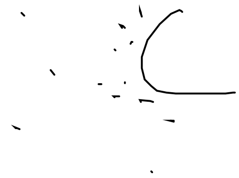
VII. Finite Element Methoden

Zur Lösung von partielle differential Gleichungen (PDE) haben wir bisher Finite Differenz Methoden (speziell FDTD) kennengelernt.

Beide Methoden funktionieren auf ein Gitter: ein gleichmäßiges rechteckiges Gitter

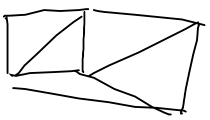


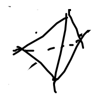
Nehmen wir an wir hätten eine Spitze aus Metall mit Feldstärke, jetzt wäre es toll wenn wir irreguläre Gitter wählen könnten ⇒ viele Punkte bei der Spitze, weniger im Bereich geringer Feldstärke.



⇒ Dazu Finite Element Methode

Idee: Wir zerlegen den Raum in kleine Volumen (Flächen) z.B. Dreiecke in 2D oder Tetraeder, Hexaeder





also Finite Element

(Wir folgen C. Schwarzbach "3D-Finite-Elemente zur Diskretisierung der Maxwellgleichungen")

Beispiel

(i) Sei Ω_j das Gebiet eines finiten Elements (z.B. Dreiecke, Tetraeder)

(#) $$\nabla\times\left(\frac{1}{\mu_r\mu_0}\nabla\times\underline{E}\right)-\omega^2\varepsilon_0\varepsilon_r\underline{E}=i\omega j \quad \leftarrow \text{z.B. Polarisation}$$

sowie $$i\omega\,\nabla\cdot(\varepsilon_0\varepsilon_r\underline{E})=\nabla\cdot j_v$$

gelten auf Ω_j mit stetigen ε's, μ's und ν's.

(ii) Zwischen Ω_i und Ω_j ($i \neq j$) sind die tangentialen Komponenten von E und H stetig und die Normalkomponenten von J, D und B (Wie aus ED bekannt!)

(iii) Der Rand des Rechengebiets $\Omega = \cup_j \Omega_j$ kann dann je nach Dirichlet oder von Neumann Randbed. ..

Dirichlet
$$\underline{n} \times \underline{E} = \underline{n} \times \underline{E}_0 \quad \text{auf Fläche } \Gamma_1$$

von Neumann:
$$\underline{n} \times \left(\frac{1}{\mu_0 \mu_r} \nabla \times \underline{E}\right) = i\omega J_1 \quad \text{auf Fläche } \Gamma_2$$
$$i\omega\, \underline{n} \cdot (\varepsilon_0 \varepsilon_r \underline{E}) = \underline{n} \cdot J_v \quad \text{auf Fläche } \Gamma_2$$

schwache Formulierung

Was ist ein Funktional? Ein Funktional bildet ein Vektor auf eine Zahl ab! In dem Sinn ist $\langle \phi |$ ein Funktional, denn für $|\psi\rangle$ fest ist $\langle \phi | \psi \rangle$ eine Zahl!
Allgemein für unsere Feld
$$\langle \phi | \psi \rangle = \int_\Omega \underline{\phi}^*(\underline{r}) \cdot \underline{\psi}(\underline{r})\, d\underline{r}$$
können wir das brauchen um Funktional zu definieren.

Eine schwache Formulierung bedeutet, dass etwas in dem Sinne eines Funktionals gleich ist.
(Insbesondere sind Grenzflächen damit enthalten)
Sei jetzt $\underline{\Phi}$ eine Testfunktion.

$$\int_\Omega \underline{\Phi}^*(\underline{r}) \cdot \nabla \times \left(\frac{1}{\mu_0\mu_r} \nabla \times \underline{E}\right) d^3r \underset{\text{partielle Integration}}{=} \int_\Omega (\nabla \times \phi^*(\underline{r})) \cdot \left(\frac{1}{\mu_0\mu_r} \nabla \times \underline{E}\right) d^3r$$

$$+ \int_{\partial\Omega} \phi^*(\underline{r}) \left(\underline{n} \times \left(\frac{1}{\mu_0\mu_r} \nabla \times \underline{E}\right)\right) d^3r$$

Zusammen mit den neuen Randbed. und der Forderung $\underline{n} \times \phi = 0$ auf der Dirichlet Fläche (Vgl. #)

Bestimme $\underline{E}$, so dass

$$\int_\Omega (\nabla \times \phi(\underline{r})) \left(\frac{1}{\mu_0\mu_r} \nabla \times \underline{E}\right) d^3r - \omega^2 \int_\Omega \phi^* \cdot (\varepsilon\, \underline{E}) \, d^3r$$

$$= i\omega \int_\Omega \phi^* \cdot J_r \, d^3r - i\omega \int_{\Gamma_2} \phi \cdot J_f \, d^3r$$

für alle Testfunkt. ϕ gilt!

$\rightarrow$ Enthält die PDE, die Stetigkeit der Tangentialkompon. und Neum. Randbed. $\Rightarrow$ Nur näherungsweise Erfüllung!

Die Dirichlet, Stetigkeit von E wird über die Konstruktion der Funktion erfüllt:

$$U = \{ \underline{E} \in H^{rot}(\Omega) : \underline{n} \times \underline{E} = \underline{n} \times \underline{E}_0 \text{ auf } \Gamma_1 \} \quad \text{(Ansatzfunkt.)}$$

rot einf. anwend.

$$V = \{ \underline{\phi} \in H^{rot}(\Omega) : \underline{n} \times \underline{\phi} = 0 \text{ auf } \Gamma_1 \} \quad \text{(Testfunkt.)}$$

$$H^{rot} = \{ \Psi \in L^2(\Omega)^3 : \text{rot}\, \Psi \in L^2(\Omega)^3 \}$$

Beispiel für schwache Formul. benutzt.

Finite Element (Vorgehen)

1. Schritt: Zerlegen Ω in geometrische Elemente (Dreieck, Hexagon, Tetraeder, etc.)

2. Schritt: Wir approximieren den unendlich dimensionalen Funktionen durch endliche Funktionen (Endlich viele Basisfunktionen)
Damit ist V_H, V_H endlich dimensional $\Rightarrow$ Variationsproblem endlich Dimension.

3. Schritt. Sei $\{\Phi\}$ ein vollständiger Satz von Basisfunktionen
Dann ist

$$\underline{E}(\underline{r}) = \sum_i c_i \underline{\Phi}_i(\underline{r}) \quad \circledast$$

Sortiere die Basisfunktionen so, dass $m \leq n$ Funktionen $\{\phi_i\}^n$ Basis von V sind

Die restlichen Koeffizienten c_i (mit $i \geq n$) werden durch Dirichlet Randbed. festgelegt.

4. Schritt: Transformation des Variationsproblems auf die endliche Basis. (Ansatz $\circledast$) mittels einsetzen:

$$\sum_{i=1}^{m} a_{j,i} \, c_i = f_j \qquad j = 1, \ldots, m$$

wobei

$$a_{ji} := \int_\Omega \nabla\times\phi_j \cdot \left(\frac{1}{\mu_0 \mu_r} \nabla\times\phi_i\right) d^3r - \omega^2 \int_\Omega \phi_j \left(\varepsilon_r \varepsilon_0 \phi_i\right) d^3r$$

$$f_i = i\omega \int_\Omega \Phi_j^{*} J_v \, d^3r - i\omega \int_{\Gamma_2} \phi_j^{*} \cdot J_A \, d^2r - \sum_{i=m+1}^{n} a_{ji} c_i$$

Bekannt aus den Randbed.

$\Rightarrow$ Abgeschlossen auf nicht hermitesches komplexes lin. Gleichungssystem.

Lösen wir das Gleichungssystem erhalten wir das $\underline{E}$-Feld für jeden Punkt im Gebiet approximiert durch die Basisfunkt.!

Üblicherweise werden die Basisfunktion mit kompaktem Träger auf Ω_i definiert, dies führt zu einer dünnbesetzten Matrix.

<u>Bemerkung</u>

1) Je nach Problem gibt es verschiedene Basisfunktionen. In der Regel sind es Polynome vom Grad k, die die notwendigen Randbedingungen des Ansatzes erfüllen (Abhängig von DGL), z.B. tangential Komponente stetig oder verschwindend auf Grenzfläche. Standardansatz Finite Element oder Ansatz nach Nedelec.

2) Neben Problemen im Frequenzraum gibt es auch FE für die Zeitdynamik in Kontinuumsphysik, Akkustik etc.

3.) Fertige FEM Solver, JCMWave (Elektrodynamik) Comsol (Alles mögliche, Elektrodynamik, Elastomechanik, Wärmeleitung, Industriestandard) und viele mehr.

4.) Meist muss noch ein an das Problem angepasstes Gitter konstruiert werden:
Typisches Vorgehen

Mesh konstruieren ←
↓
Problem lösen — ggf. Mesh anpassen.
↓
lokalen Fehler berechnen →

5.) Vorteil gegenüber Finite Differenzen
a) Beliebige Gitter
b) Einfache Implementierung von Grenzflächen (Stetigkeit)

VIII.15 Matrizen Tensoren: Rechenoperationen, Normen, Diagramme

Was ist ein Tensor? (Abbildung mehrerer Dimensionen auf eine Zahl)

Zahl c (Hat kein Index => Tensor 0ter Stufe)

Vektor $\underline{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}$ (Element v_n haben ein Index => Tensor 1ter Stufe)

Matrix $\underline{\underline{M}} = \begin{pmatrix} m_{11} & \cdots & m_{n1} \\ \vdots & & \vdots \\ m_{n1} & \cdots & m_{nn} \end{pmatrix}$ (Element m_{nn} haben zwei Indices Tensor 2ter Stufe)

Tensor: $T_{n_1 n_2 n_3}$ 3 Stufe

$\vdots$

$T_{n_1 \cdots n_k}$ k Stufe

Wo treten diese auf? Was ist das Problem?

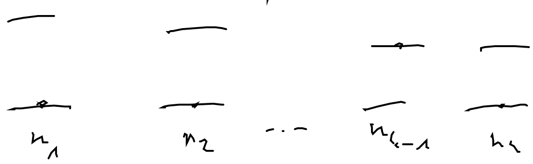
z.B. Wellenfunktion:

		Interpretation	Skalierung
1 Teilchen	$\psi(\underline{x}_1)$	Tensor erster Stufe	N
2. Teilchen	$\psi(\underline{x}_1, \underline{x}_2)$ (z.B. Exziton)	Tensor zweiter Stufe	N^2
3. Teilchen	$\psi(\underline{x}_1, \underline{x}_2, \underline{x}_3)$ (z.B. Trion)	Tensor dritter Stufe	N^3
4. Teilchen	$\psi(\underline{x}_1, x_2, x_3, x_4)$ (z.B. Biexziton oder Korrelation)	Tensor vierter Stufe	N^4

$\langle a^\dagger_{v k_1} a_{c k_2} \rangle$ Exzit. auf BZ — Tensor zweiter Stufe N^2

$\langle a^\dagger_{v k_1} a^\dagger_{v k_2} a_{c k_3} a_{c k_4} \rangle$ Biexzit. auf BZ — Tensor vierter Stufe N^4

oder Spinketten



$\Rightarrow \psi_{n_1, \dots, n_k}$ Tensor k-ter Stufe 2^k

eCommerce

z. B. Kunde beim Online Shopping

T(Kunde, Kategorie, Produkt 2, Produkt 3 ...)

Auch hochdimensionaler Tensor dünn besetzt.

Übersetzungsmatrix

$U(\underbrace{}_{\text{Wort in Deutsch}}, \underbrace{}_{\text{Wort in Englisch}}, \underbrace{}_{\text{Wort in Chinesisch}})$ auch das ist ein hochdimensionaler Tensor.

Neuronale Netze werden auch als Tensor dargestellt.

$\Rightarrow$ Megaproblem der Fluch der Dimensionalität

alles skaliert x^{NE} Rank des Tensors

Hochdimensionale Tensoren können wir nicht speichern

oder doch?