

1 Implementierung in Python mit FEniCS

1.1 ???

mach 2 große sections bib und main, dann bei bib untersections gitter, lösen von pdes und b

Nachdem wir in vorigen Kapiteln den theoretischen Hintergrund der Formoptimierung und gradientenbasierte Verfahren, wie dem L-BFGS-Verfahren, gelegt haben, möchten wir in diesem Abschnitt die Implementierung des Algorithmus `cite` in Python 3.5 `Versicherung, dass es nur unter dieser Version läuft` mit Hilfe des Moduls FEniCS vorstellen. Im Folgenden werden wir die in den Dateien enthaltenen Kommentare nicht oder nicht in voller Länge in den Codeausschnitten aufführen, da wir Redundanz bei den Erklärungen vermeiden möchten. Selbstverständlich sind in den Quellcodes selber ausführliche Kommentierungen vorhanden. Die Implementierung in Python besteht im wesentlichen aus den beiden Dateien

`shape_main.py` `shape_bib.py`.

Die Datei `shape_main.py` enthält hierbei den zusammenhängenden Hauptcode. Die Datei `shape_bib.py` ist eine Bibliothek, in welcher Funktionen zum Umgang mit Gittern, Berechnungen auf Formen, Löser für PDEs und der L-BFGS-Algorithmus mit den damit verbundenen Objekten gebündelt sind. Die Berechnungen auf den Formen und das Lösen der PDEs wird mittels FEniCS geschehen. FEniCS ist eine <https://fenicsproject.org/> frei zugängliche Programmierung, welche ermöglicht, partielle Differentialgleichungen mit relativ geringem Aufwand zu lösen. Dabei bedient sich FEniCS der sogenannten *Unified Form Language* (UFL), was die Grundlage zur Implementierung der PDE's in schwacher Formulierung darstellt, mehr hierzu bei [5]. Diese nutzen wir, um Bevor wir uns der Lösung von PDE's und der Implementierung des L-BFGS-Algorithmus zuwenden, müssen wir zunächst klären, wie wir die notwendigen Gitter erzeugen und mit diesen umgehen.

`subsection gitter?`

Gitterdateien erzeugen wir mit Hilfe des offen zugänglichen Programms Gmsh 3.0.6 <http://gmsh.info/>. Hierbei muss man zunächst eine `.geo` Datei geschrieben werden. Wir zeigen dies am Beispiel eines kleinen Kreises. Zunächst setzen wir die für unser Gitter relevanten Punkte in ein 3-dimensionales Koordinatensystem

```
1 Point(1) = {0.0, 0.0, 0.0, 1.0};
2 Point(2) = {1.0, 0.0, 0.0, 1.0};
3 Point(3) = {0.0, 1.0, 0.0, 1.0};
```

1 Implementierung in Python mit FEniCS

```
4 Point(4) = {1.0, 1.0, 0.0, 1.0};
5 Point(5) = {0.5, 0.35, 0.0, 1.0};
6 Point(6) = {0.5, 0.5, 0.0, 1.0};
7 Point(7) = {0.5, 0.65, 0.0, 1.0};
```

Hierbei beschreiben die ersten 3 Einträge des Tupels die x-, y- und z-Koordinaten der Punkte, der vierte Eintrag gibt die sogenannte *characteristic length* der Punkte an, was lediglich die Elementgröße des Punktes ist. Punkte 1 bis 4 werden dazu dienen das Einheitsquadrat im \mathbb{R}^2 zu definieren, Punkte 5 bis 7 werden einen Kreis mit Mittelpunkt (0.5, 0.5) definieren. Dies geschieht mittels der Befehle

```
1 Line(1) = {1, 2};
2 Line(2) = {2, 4};
3 Line(3) = {4, 3};
4 Line(4) = {3, 1};
5
6 Circle(5) = {5, 6, 7};
7 Circle(6) = {7, 6, 5};
```

Da diese Befehle lediglich Linien und Halbkreise aus den eingegebenen Punkten definieren, ist es nötig mittels eines **Loop**-Befehls diese zu einer gemeinsamen Form zu verbinden.

```
1 Line Loop(1) = {1, 2, 3, 4};
2 Line Loop(2) = {5, 6};
```

Um innere und äußere Gebiete, welche durch Abgrenzung mittels des Kreises definiert sind, zu markieren, setzen wir diese als **Plane Line** fest. Die erste Zahl gibt jeweils die Nummer des **Line Loops** des äußeren Randes, die zweite die des inneren Randes an.

```
1 Plane Surface(1) = {1, 2};
2 Plane Surface(2) = {2};
```

Weil wir später in der Implementierung auf die Ränder bzw. Formen zugreifen möchten, ist es abschließend noch nötig diese als sogenannte **Physical Lines** und **Physical Surfaces** zu definieren.

```
1 Physical Line(1) = {1};
2 Physical Line(2) = {2};
3 Physical Line(3) = {3};
4 Physical Line(4) = {4};
5 Physical Line(5) = {5};
6 Physical Line(6) = {6};
7
8 Physical Surface(1) = {1};
9 Physical Surface(2) = {2};
```

1 Implementierung in Python mit FEniCS

Die so geschriebene `.geo`-Datei wird nun mit Hilfe des Programms `Gmsh` mit dem Kommando

```
gmsh mesh_smallercircle.geo -2 -clscale 0.025
```

in eine `.msh` Datei konvertiert. Dabei ist `mesh_smallercircle.geo` der Name der gespeicherten `.geo`-Datei, `-2` die Dimension des erzeugten Gitters und `0.025` die Feinheit des Gitters. Um diese Datei für FEniCS nutzbar zu machen, konvertieren wir diese mit Hilfe des Dolfin-Befehls

```
dolfin-convert mesh_smallercircle.msh mesh_smallercircle.xml
```

wobei der erste Eingabewert der Name der `.msh`-Datei ist, und der zweite der Name der erzeugten `.xml`-Datei. Hierbei werden außerdem neben dem bloßen Mesh auch eine `facet_region.xml`-Datei erstellt, mit welcher man die Ränder initialisieren kann, sowie eine `physical_region.xml`-Datei, welche zur Initialisierung der Gebiete des Inneren und Äußeren der Form dient.

neuer Abschnitt?

Nun besitzen wir die nötigen Gitterdateien, um auf diesen Formoptimierung zu betreiben. Wir stellen kurz vor, mit welchen Objekten und Funktionen wir mit diesen umgehen. Eines der beiden zentralen Objekte des Optimierungsprogramms ist die sogenannte *MeshData-Klasse*.

```
1 class MeshData:
2
3     # Objekt mit allen Daten des Gitters
4     def __init__(self, mesh, subdomains, boundaries, ind):
5
6         # FEniCS Mesh
7         self.mesh = mesh
8
9         # FEniCS Subdomains
10        self.subdomains = subdomains
11
12        # FEniCS Boundaries
13        self.boundaries = boundaries
14
15        # Indizes der Knotenpunkte mit Traeger nicht
16        # am inneren Rand
17        self.indNotIntBoundary = ind
```

In einem Objekt dieser Klasse werden sowohl das Gitter, als auch die Gebiete und Ränder bzw. Formen gespeichert. Weiterhin benötigen wir für spätere

1 Implementierung in Python mit FEniCS

folgende Berechnungen auch die Indizes der Knotenpunkte (engl. *Vertices*), welche keinen Träger am inneren Rand haben, gespeichert. Die Initialisierung erfolgt mit der von uns implementierten Funktion

`load__mesh(Name),`

wobei **Name** der Name der Mesh-Datei ohne .xml-Endung ist. Die **subdomains** und **boundaries** werden als sogenannte **MeshFunction** initialisiert. Dies sind Objekte einer in FEniCS implementierten Klasse, welche als Array im *i*-ten Eintrag die Nummer der **subdomain** bzw. der **boundary** zurückgibt, welche den Nummern der **Physical Surface** bzw. **Physical Line** in der .geo-Datei entsprechen. Diese Initialisierungen geschehen über die Befehle

```
1 mesh      = Mesh(path_meshFile + ".xml")
2 subdomains = MeshFunction("size_t", mesh,
3                             path_meshFile + "__physical_region.xml")
4 boundaries = MeshFunction("size_t", mesh,
5                             path_meshFile + "__facet_region.xml")
6 ind       = __get_index_not_interior_boundary(mesh, subdomains,
7                                                boundaries)
```

wobei **Mesh** als Eingabe den Pfad zur .xml-Datei enthält. Die Meshfunktionen erhalten neben dem **mesh**-Objekt den Typ der Funktion, in diesem Fall **size_t**, und die Pfade zu den jeweiligen Dateien **__physical_region.xml** und **__facet_region.xml**. Es bleibt noch, die Indexliste der Indizes mit Träger nicht am Inneren Rand zu initialisieren. Um diese Indexliste zu erzeugen haben wir die Funktion

`__get_index_not_interior_boundary(mesh, subdomains, boundaries, interior = True)`

implementiert. Als Input erhält sie die oben gezeigten Objekte, falls **interior = True** eingestellt ist, so gibt die Funktion die Liste mit Indizes ohne Träger am Inneren Rand wieder. Wir möchten an dieser Stelle anmerken, dass Indizes auch mehrfach vorkommen, was für unser Programm kein Problem darstellt und bei Bedarf verbessert werden kann. Ist der Parameter **interior = False**, so gibt die Funktion eine Liste mit den Indizes der Knotenpunkte genau des inneren Randes wieder. Dies spart uns die Implementierung einer weiteren Funktion. Das Erzeugen der Liste basiert auf Iterationen durch Facetten des Randes, deren Knoten und den benachbarten Knoten. Diese aufwändige Iteration ist nötig, da die Indizierung der Facetten in der Meshfunktion des Randes in FEniCS nicht mit den Indizes der Mesh's übereinstimmen. Für die genaue Implementierung verweisen wir auf den von uns beigefügten Code.

neuer Abschnitt lösen von PDE und berechnungen, falls oben noch irgendwas dazugehören ka

Nun besitzen wir Gitterobjekte, auf welchen wir Berechnungen durchführen können. Der Hauptanteil der Berechnungen besteht in dem Lösen von partiellen Differentialgleichungen. Die Gleichungen, welche wir für die Formoptimierung lösen müssen, haben wir in [zitat kapitel vorher](#) eingeführt. Dabei handelt es sich um die Poisson-Zustandsgleichung [ref](#), die zugehörige adjungierte Gleichung [ref](#), und die lineare Elastizitätsgleichung [ref](#), welche uns einen Formgradienten liefern wird. Wir möchten exemplarisch an der implementierten Funktion zur Lösung der linearen Elastizitätsgleichung zeigen, wie dies in FEniCS praktisch passiert. Für die beiden anderen Gleichungen wird im wesentlichen analog vorgegangen, hierbei verweisen wir auf unseren Quellcode [zitat?](#). Die Lösung der Gleichungen wird über die Funktionen

```
1 solve_state(meshData, fValues)
2 solve_adjoint(meshData, y, z)
3 solve_linelas(meshData, p, y, z, fValues,
4               mu_elas, nu, zeroed = True)
```

zurückgegeben, wobei jede Funktion ein Objekt der `MeshData`-Klasse erhält, sowie die nötigen Funktionen aus den oben genannten Gleichungen, welche als sogenannte *FEniCS-Funktionen* initialisiert sind. Der Löser der linearen Elastizitätsgleichung benötigt weiterhin die aus [ref lame param](#) bekannten Lamé-Parameter, sowie den Parameter der Perimeter-Regularisierung `nu`. Die Einstellung `zeroed = True` bewirkt, dass bei Lösen der Gleichung die Werte der Punkte ohne Träger am inneren Rand auf 0 gesetzt werden, was eine Instabilität des Verfahrens vermeidet. Wir vermuten, dass es sich bei den Instabilitäten um Rundungs- und/ oder Diskretisierungsfehler handelt, siehe [11], Abschnitt 5. Die genaue Ursache der Fehler ist jedoch nicht sicher geklärt.

Wie oben schon erwähnt, sind die Funktionen `p`, `y`, `z` FEniCS-Funktionen. Skalarwertige FEniCS-Funktionen `f` auf dem Gitter `meshData.mesh` werden beispielsweise mit

```
1 V = FunctionSpace(meshData.mesh, "P", 1)
2 f = Function(V)
```

initialisiert. Um die lineare Elastizitätsgleichung zu lösen, müssen wir zunächst den dazugehörigen Funktionenraum angeben, was durch

```
1 V = VectorFunctionSpace(meshData.mesh, "P", 1, dim=2)
```

geschieht. Da die Lösung eine vektorwertige Funktion ist, ist es für FEniCS notwendig die Dimension explizit anzugeben. Die Parameter `"P"` und `1` geben an, dass die Werte zwischen den Gitterpunkten mittels einer Polynominterpolation

1 Implementierung in Python mit FEniCS

vom Grad 1 erzeugt werden. Hier sind weitere Möglichkeiten zur Interpolation gegeben, siehe etwa [4]. Um die Gleichung aufzustellen, müssen wir Randwerte festlegen. Für die Dirichlet-Nullrandwerte geschieht dies über den Befehl

```
1 u_out = Constant((0.0, 0.0))
2 bcs = [DirichletBC(V, u_out,
3               meshData.boundaries, i) for i in range(1, 5)]
```

wobei i über die Nummern der äußeren Ränder läuft. FEniCS unterscheidet beim Lösen von Differentialgleichungen zwischen Testfunktionen und der Lösungsfunktion. Wir initialisieren diese mittels

```
1 U = TrialFunction(V)
2 v = TestFunction(V)
```

sage, dass damit nicht so einfach gearbeitet werden kann, vielleicht das vorweg nehmen, oder wobei U die Lösung, also das Gradientenvektorfeld in Domaindarstellung, und v stellvertretend für die zum Raum V gehörenden Testfunktionen steht. Nun wird die linke und rechte Seite der Gleichung aufgestellt:

```
1 LHS = bilin_a(meshData, U, v, mu_elas)
2 F_elas = shape_deriv(meshData, p, y, z, fValues, nu, v)
```

Hierbei ist `bilin_a` die aus `ref bilinform` bekannte Bilinearform, und `shape_deriv` die in `ref shape deriv` angegebene Formableitung. Beides wird in der für FEniCS typischen Weise assembliert, wobei wir dies exemplarisch an der Bilinearform `bilin_a` aufzeigen:

```
1 def bilin_a(meshData, U, V, mu_elas):
2
3     dx = Measure("dx", domain=meshData.mesh,
4               subdomain_data=meshData.subdomains)
5
6     epsilon_v = sym(nabla_grad(V))
7     sigma_U = 2.0*mu_elas*sym(nabla_grad(U))
8
9     a = inner(sigma_U, epsilon_v)*dx('everywhere')
10    value = assemble(a)
11
12    return value
```

Input sind ein Objekt der `MeshData`-Klasse, sowie zwei FEniCS Funktionen U , V und die Lamé-Parameter `mu_elas`. `eigentlich lame oder? passt eig.` Hier kommt die Stärke von FEniCS zur Geltung, nämlich die Verwendung der eingangs erwähnten *Unified Form Language*. Die hier initialisierten Objekte sind exakt die Objekte, welche in der schwachen Formulierung der Gleichung `ref lin elas` auftauchen, was der mathematischen Schreibweise sehr nahe steht,

1 Implementierung in Python mit FEniCS

und somit die Lesbarkeit deutlich erhöht. Es ist lediglich notwendig die Objekte abschließend zu assemblieren um einen Wert zu erhalten. Dies geschieht mit dem Befehl `assemble`. Genau auf selbige Weise wird die Formableitung `shape_deriv` aufgebaut, weshalb wir hier auf den Quellcode verweisen. Da die Angabe der programmiertechnischen Details der Objekte der UFL den Rahmen dieser Arbeit sprengen würde, verweisen wir für den interessierten Leser auf [4] und [5].

```
printe mal F_elas und schaue, wie das mit der Ableitung shape_deriv zusammenhängt und nr  
jetzt solve_linelas fertig erklären.  
vergiss nicht die distance function
```

LITERATUR

Literatur

- [1] M. Genzen, A. Staab, Prof. E. Emmrich. Sobolew-Slobodeckij-Räume - die Theorie der gebrochenen Sobolew-Räume, Technische Universität Berlin. 2014.
- [2] G. Geymonat. Trace Theorems for Sobolev Spaces on Lipschitz Domains. Necessary Conditions. 2007.
- [3] J. M. Lee. *Introduction to Smooth Manifolds,, Second Edition*. Springer, Graduate Texts in Mathematics, 2013.
- [4] H. P. Langtangen, A. Logg. *Solving PDEs in Python - The FEniCS Tutorial Volume I*. Springer, 2017.
- [5] M. S. Alnæs, A. Logg. *UFL Specification and User Manual 0.3*. www.fenics.org, 2010.
- [6] K. Burg, H. Haf, F. Wille, A. Meister. *Partielle Differentialgleichungen und funktionalanalytische Grundlagen, 5. Auflage*. Vieweg +Teubner Verlag, Springer Fachmedien, 2010.
- [7] B. Zhong P.A. Sherar, C.P.Thompson, B. Xu. An optimization method based on b-spline shape functions & the knot insertion algorithm. *Proceedings of the World Congress on Engineering*, II, 2007.
- [8] S. Schmidt. Weak and strong form shape Hessians and their automatic generation. 2018, SIAM J. Sci. Comput., Vol. 40, No.2, pp. C210-C233.
- [9] Volker Schulz. A riemannian view on shape optimization. *Foundations of computational Mathematics*, 14:483-501, 2014.
- [10] B. Schweizer. *Partielle Differentialgleichungen - Eine anwendungsorientierte Einführung*. Springer Spektrum, 2013.
- [11] Volker Schulz, Martin Siebenborn. Computational comparison of surface metrics for pde constrained shape optimization. *Comput. Methods Appl. Math 2016*, 2016.
- [12] Kevin Sturm. *On shape optimization with non-linear partial differential equations*. PhD thesis, Technische Universität Berlin, 2015.

LITERATUR

- [13] W. Arendt, K. Urban. *Partielle Differenzialgleichungen - Eine Einführung in analytische und numerische Methoden*. Spektrum Akademischer Verlag Heidelberg, 2010.
- [14] K. Welker. Suitable Spaces for Shape Optimization. 2017, arXiv: 1702.07579v2.
- [15] Kathrin Welker. *Efficient PDE Constrained Shape Optimization in Shape Spaces*. PhD thesis, Universität Trier, 2016.
- [16] Volker Schulz, Martin Siebenborn, Kathrin Welker. Towards a lagrange-newton approach for constrained shape optimization. *arXiv: 1405.3266v2*, 2014.
- [17] Volker Schulz, Martin Siebenborn, Kathrin Welker. Pde constrained shape optimization as optimization on shape manifolds. *Geometric Science of Information, Lecture Notes in Computer Science*, 9389:pp. 499–508, 2015.
- [18] Volker Schulz, Martin Siebenborn, Kathrin Welker. Efficient pde constrained shape optimization based on steklov-poincaré-type metrics. *SIAM J. OPTIM.*, Vol. 26, No. 4, pp. 2800-2819, 2016.
- [19] Jorge Nocedal, Stephen J. Wright. *Numerical Optimization, Second Edition*. Springer, 2006.
- [20] M. C. Delfour, J. P. Zolésio. *Shapes and Geometries: Metrics, Analysis, Differential Calculus, and Optimization, 2nd ed.* SIAM Advances in Design and Control, 2011.