

Metoda končnih elementov, ki minimizira kvadrat ostanka aproksimacije (LSFEM)

Seminarska naloga pri Naprednih numeričnih metodah

Numerično reševanje parcialnih diferencialnih enačb (PDE) je zaradi pomanjkanja vsestranskega algoritma še zmeraj bolj umetnost kot ustaljena znanost [1]. Pri zapletenih problemih hitro prispemo do vznožja gore matematične teorije, ki je ni moč zaobiti. Zaradi množice različnih pristopov reševanja ter raztresene in neprijazno napisane literature, lahko le ugibamo, kako visoko se bomo na poti do prelaza morali povzpeti. Zapletenim problemom prostorske dinamike v:

- dinamiki tekočin,
- termodinamiki,
- elektrodinamiki,
- kvantni teoriji,
- splošni teoriji relativnosti,

kjer naletimo na PDE, se tako tudi v višjem izobraževanju najraje izognemo. Metoda končnih elementov (FEM), ki minimizira kvadrat ostanka aproksimacije (LSFEM: Least Squares FEM), obeta razvoj vsestranskega algoritma za reševanje PDE in s tem približanje omenjenih problemov širšemu krogu raziskovalcev.

1 Podlaga za temelje LSFEM

Kadar obravnavamo prostorsko dinamiko (npr. tok tekočine), lahko fizični prostor modeliramo kot 1, 2 ali 3-mnogoterost. Temelje LSFEM bomo polagali na splošnem primeru d -mnogoterosti, za ponazoritev pa na njih sproti gradili konkretni 2D primer.

Naj bo torej prizorišče dogajanja d -mnogoterost Ω (slika 1), opremljena s krajevnim vektorjem:

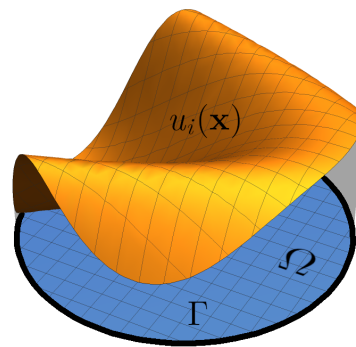
$$\mathbf{x} = \{x_1, \dots, x_d\}.$$

Pri reševanju sistema m PDE iščemo nabor funkcij:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \{u_1(\mathbf{x}), \dots, u_m(\mathbf{x})\},$$

ki v vsaki točki domene Ω zadosti sistemu PDE, na meji Γ pa robnim pogojem. Konkretni primer bomo gradili na 2D primeru s štirimi spremenljivkami, pri katerem bosta krajevni vektor in vektor odvisnih spremenljivk enaka:

$$\mathbf{x} = \{x, y\} \quad \text{in} \quad \mathbf{u} = \{u, v, p, \omega\}.$$



Slika 1: Domena Ω , meja domene Γ in komponenta rešitve $u_i(\mathbf{x})$.

Dinamiko naj opiše **sistem Stokesovih enačb** za nestisljive tekočine v obliki hitrost-tlak-vrtinčnost, ki jim za večjo nazornost primera umetno dodamo koeficiente $\alpha(\mathbf{x})$, $\beta(\mathbf{x})$, $\gamma(\mathbf{x})$ in $\delta(\mathbf{x})$:

$$\alpha \frac{\partial p}{\partial x} + \beta \frac{\partial \omega}{\partial y} = f_x, \quad (1) \quad \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (3)$$

$$\gamma \frac{\partial p}{\partial y} - \delta \frac{\partial \omega}{\partial x} = f_y, \quad (2) \quad \omega + \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} = 0. \quad (4)$$

Stokesove enačbe ustrezajo stacionarnim Navier-Stokesovim enačbam brez nelinearnih konvektivnih členov, ki jih moramo pri numeričnem reševanju linearizirati. Ker ta korak za ponazoritev LSFEM ni ključen, se mu na tak način izognemo. Stokesove enačbe opisujejo plazeče se tokove, pri katerih je konvekcija gibalne količine (zaradi gibanja) majhna v primerjavi z njeno difuzijo (zaradi viskoznosti).

V enačbah ni časovnih odvisnosti (razen preko časovno odvisnih robnih pogojev), zato so takšni tokovi časovno obrnljivi: časovno obrnjena rešitev enačb je prav tako rešitev (slika 2).



Slika 2: Zabaven eksperiment, pri katerem se v ozkem prostoru med dvema koncentričnima valjema nahaja viskozna tekočina, ki jo na dveh mestih označimo z liso barvila. Valja pet minut vrtimo v nasprotnih smereh (Stokesov tok, ki tako nastane, imenujemo Taylor-Couettov tok), da se lisi pomešata, nato smeri vrtenja obrnemo in po petih minutah se lisi ponovno sestavita. Pridobljeno iz [2].

Sistem PDE, ki ga obravnavamo, zapišemo bolj jedrnato v matrični obliki. To je enostavno, če je sistem linearen. Uvedemo diferencialni operator \mathbf{A} :

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}_0(\mathbf{x}) + \mathbf{A}_1(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial x_1} + \mathbf{A}_2(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial x_2}, \quad (5)$$

s katerim lahko sistem enačb zapišemo kot:

$$\left(\mathbf{A}_0(\mathbf{x}) + \mathbf{A}_1(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial x_1} + \mathbf{A}_2(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad (6)$$

oziroma na kratko:

$$\boxed{\mathbf{A}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x})} \quad \text{system PDE} . \quad (7)$$

V matriko \mathbf{A}_0 spravimo vse koeficiente pred členi z odvisnimi spremenljivkami, v matriko \mathbf{A}_1 vse koeficiente pred členi z odvodi odvisnih spremenljivk po koordinati x_1 in v \mathbf{A}_2 vse koeficiente pred členi z odvodi odvisnih spremenljivk po koordinati x_2 . Ostale člene zložimo v vektor \mathbf{f} . Enačbe (1) - (4) lahko po zgledu enačbe (6) zapišemo kot:

$$\left[\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\delta \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} + \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma \\ 0 & 0 & \beta & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial y} \right] \cdot \begin{pmatrix} u(\mathbf{x}) \\ v(\mathbf{x}) \\ p(\mathbf{x}) \\ \omega(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ f_x(\mathbf{x}) \\ f_y(\mathbf{x}) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (8)$$

2 Temelji LSFEM

Vse različice FEM vsaj okvirno temeljijo na variacijskem pristopu, kjer ne operiramo neposredno na PDE, ampak jih najprej pretvorimo v enakovreden variacijski problem: omislmo si **poskusno funkcijo** $\mathbf{w}(\mathbf{x})$, ki jo napnemo nad domeno Ω , in izberemo funkcional $I[\mathbf{w}(\mathbf{x})]$, ki za vsako $\mathbf{w}(\mathbf{x})$ vrne neko realno število. Za uspešnost variacijskega pristopa moramo izbrati funkcional, ki vrne najmanjšo vrednost, ko je $\mathbf{w}(\mathbf{x})$ enaka rešitvi. Kadar obstaja s sistemom PDE povezan energijski potencial, je le-ta fizikalno najintuitivnejša izbira za konstrukcijo funkcionala. Zato ni presenetljivo, da je bila **Rayleigh-Ritzeva različica FEM** (RRFEM), ki jo na tak način dobimo, razvita prva [3]. Konstrukcija funkcionala in njegova minimizacija sta tipična koraka variacijskega pristopa in nista specifična za RRFEM: vzamemo neko funkcijo poskusne funkcije $F(\mathbf{w})$ in jo integriramo po domeni Ω :

$$\boxed{I[\mathbf{w}(\mathbf{x})] = \int_{\Omega} F(\mathbf{w}(\mathbf{x})) \, d\Omega} \quad \text{funkcional poskusne funkcije} . \quad (9)$$

Ko smo prepričani, da ima funkcional (9) minimum pri rešitvi $\mathbf{u}(\mathbf{x})$, sledimo znanemu Euler-Lagrangevemu postopku. Ta nas pripelje do variacijske izjave, ki velja le, kadar je poskusna funkcija $\mathbf{w}(\mathbf{x})$ enaka rešitvi $\mathbf{u}(\mathbf{x})$. Poskusno funkcijo razvijemo okoli rešitve:

$$\tilde{\mathbf{w}}(\mathbf{x}, \varepsilon) = \mathbf{u}(\mathbf{x}) + \varepsilon \mathbf{v}(\mathbf{x}) , \quad (10)$$

kjer je $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ poljubna odmična funkcija, ε pa realno število. Kadar gre ε proti nič, gre $\tilde{\mathbf{w}}(\mathbf{x}, \varepsilon)$ proti rešitvi problema $\mathbf{u}(\mathbf{x})$, hkrati pa vemo, da ima funkcional I pri $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ minimum. Minimum funkcionala poiščemo tako, da razvoj (10) vstavimo v funkcional (9) namesto $\mathbf{w}(\mathbf{x})$ in izraz odvajamo po ε :

$$\frac{dI}{d\varepsilon} = \int_{\Omega} \frac{d}{d\varepsilon} F(\tilde{\mathbf{w}}) \, d\Omega = \int_{\Omega} \frac{dF}{d\tilde{\mathbf{w}}} \cdot \frac{d\tilde{\mathbf{w}}}{d\varepsilon} \, d\Omega = \int_{\Omega} \frac{dF}{d\tilde{\mathbf{w}}} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega , \quad (11)$$

nato pa ε v (11) pošljemo proti nič in celoten izraz enačimo z nič:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{dI}{d\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\Omega} \frac{dF(\tilde{\mathbf{w}}(\mathbf{x}, \varepsilon))}{d\tilde{\mathbf{w}}} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) \, d\Omega = 0 . \quad (12)$$

Limita deluje le na prvi člen v integrandu, zato se variacijska izjava glasi:

$$\boxed{\int_{\Omega} \left(\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{dF(\tilde{\mathbf{w}})}{d\tilde{\mathbf{w}}} \right) \cdot \mathbf{v} \, d\Omega = 0 , \quad \forall \mathbf{v}(\mathbf{x})} \quad \text{variacijska izjava} . \quad (13)$$

V jeziku funkcionalne analize, kjer na funkcije gledamo kot na vektorje, izjava pove naslednje: projekcija izraza v oklepaju na katerokoli odmično funkcijo $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ mora biti enaka nič, ali krajše: izraz mora biti ortogonalen na katerokoli $\mathbf{v}(\mathbf{x})$.

$F(\mathbf{w}(\mathbf{x}))$ v funkcionalu poskusne funkcije je pri RRFEM energijski potencial, funkcional pa torej skupna potencialna energija sistema, ki jo rešitev $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ minimizira. Zaradi tega ima RRFEM lastnost najboljšega približka, diskretizacija pa vodi do simetričnega in pozitivno-definitnega sistema algebrskih enačb, ki je zelo prikladen za reševanje s hitrimi iteracijskimi metodami. Različica metode se je izkazala v gradbenem inženirstvu, kjer je s problemom vedno povezan energijski potencial. Večina računalniških programov s tega področja zato še danes temelji na RRFEM.

Žal energijski potencial povezan s sistemom PDE ne obstaja vedno, kar je značilno za sisteme PDE v dinamiki tekočin. To je motiviralo razvoj Galerkinove različice FEM (GFEM), ki je zastavljena kot posplošitev RRFEM, vendar na precej neroden način. Ideja GFEM je, da lahko za vsak sistem PDE (7) in za poljubno poskusno funkcijo $\mathbf{w}(\mathbf{x})$ definiramo vektor ostanka $\mathbf{R}(\mathbf{w}(\mathbf{x}))$. Vse člene v enačbi (7) damo na eno stran in namesto $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ pišemo $\mathbf{w}(\mathbf{x})$:

$$\boxed{\mathbf{R}(\mathbf{w}(\mathbf{x})) = \mathbf{A}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{w}(\mathbf{x}) - \mathbf{f}(\mathbf{x})} \quad \text{ostanek} . \quad (14)$$

Funkcija $\mathbf{w}(\mathbf{x})$, ki naredi ostanek $\mathbf{R}(\mathbf{w}(\mathbf{x}))$ enak nič, je rešitev problema $\mathbf{u}(\mathbf{x})$. Idejo za izničenje ostanka vzamemo iz variacijske izjave (13): naj bo ostanek $\mathbf{R}(\mathbf{w}(\mathbf{x}))$ ortogonalen na katerokoli odmično funkcijo $\mathbf{v}(\mathbf{x})$:

$$\int_{\Omega} \mathbf{R}(\mathbf{w}(\mathbf{x})) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) \, d\Omega = 0 . \quad (15)$$

Pristop se imenuje **metoda uteženih ostankov** in nas za sebi-adjungirane ter pozitivno-definitne $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ pripelje do istega sistema algebrskih enačb kot RRFEM. Uporabimo pa ga lahko tudi za sisteme PDE, ki ne posedujejo teh lastnosti - takšne, ki se pojavijo v dinamiki tekočin, zato daje vtis posplošitve RRFEM. Akademiki so pričakovali, da bo GFEM v dinamiki tekočin enako uspešna, kot je bila RRFEM v gradbenem inženirstvu, a so se njihova pričakovanja izkazala kot preveč optimistična [1]. Težava GFEM izhaja iz šibkih temeljev pristopa uteženih ostankov. Načelo (15) ni nujno zvesto reševanju osnovnega problema PDE in v rešitvi se pogostokrat pojavijo lažne oscilacije (*wiggles*). Teh se je mogoče znebiti

le z močnimi izboljšavami mreže, kar očitno krni praktičnost metode. Zaradi tega obstaja cela vrsta priredb Galerkinove metode, ki skuša težavo odpraviti. Zaradi tega sta metoda končnih diferenc in metoda končnih volumnov v dinamiki tekočin še vedno v modi. Večina računalniških programov za simulacije dinamike tekočin je dandanes napisana na osnovi , saj je zanjo napisane ogromno literature. To ne velja za mlajšo LSFEM. To idejo uporabimo tudi pri LSFEM, kjer se minimizacije lotimo na legitimen način. Za $F(\mathbf{w}(\mathbf{x}))$ vstavimo:

$$F(\mathbf{w}(\mathbf{x})) = \mathbf{R}(\mathbf{w}(\mathbf{x})) \cdot \mathbf{R}(\mathbf{w}(\mathbf{x})) \quad \text{kvadrat vektorja ostanka} \quad (16)$$

in minimiziramo funkcional:

$$I[\mathbf{w}(\mathbf{x})] = \int_{\Omega} \mathbf{R}(\mathbf{w}(\mathbf{x})) \cdot \mathbf{R}(\mathbf{w}(\mathbf{x})) \, d\Omega \quad \text{funkcional LSFEM} , \quad (17)$$

od koder dobi metoda svoje ime.

komentirali slabosti, ki jih prinese.

Pri LSFEM od enačbe (13) nadaljujemo po pravilih. Imamo:

$$\frac{dF(\tilde{\mathbf{w}})}{d\tilde{\mathbf{w}}} = 2\mathbf{R}(\tilde{\mathbf{w}}) \cdot \frac{d\mathbf{R}(\tilde{\mathbf{w}})}{d\tilde{\mathbf{w}}} = 2(\mathbf{A} \cdot \tilde{\mathbf{w}} - \mathbf{f}) \cdot \mathbf{A} \quad (18)$$

in

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{dF(\tilde{\mathbf{w}})}{d\tilde{\mathbf{w}}} = 2(\mathbf{A} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{f}) \cdot \mathbf{A} . \quad (19)$$

Variacijska izjava se nato glasi:

$$\int_{\Omega} 2(\mathbf{A} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{f}) \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega = 0 , \quad \forall \mathbf{v}(\mathbf{x}) . \quad (20)$$

Če jo rahlo preoblikujemo in zapišemo z matrikami, imamo:

$$\int_{\Omega} (\mathbf{A}\mathbf{v})^T (\mathbf{A}\mathbf{u} - \mathbf{f}) \, d\Omega = 0 , \quad \forall \mathbf{v} . \quad (21)$$

Po diskretizaciji problema (15) dobimo toliko algebraskih enačb, kolikor vozliščnih funkcij.

3 Diskretizacija

Od te točke dalje nadaljujemo z diskretizacijo problema, to je, pretvorbo na sistem N algebraskih enačb. Ta korak je enak pri vseh različicah FEM. Funkcije na domeni Ω imajo neskončno število prostostnih stopenj. Problem pripravimo za numerično reševanje tako, da funkcijam omejimo število prostostnih stopenj. Rešitev npr. zapišemo kot sestavljanko vozliščnih funkcij. Imamo N vozlišč:

$$u_i(\mathbf{x}) = \sum_{a=1}^N \Phi^{a0} u_i^{a0} \quad (22)$$

Potem omejimo Diskretizacija problema

Galerkin, Najmanjših kvadratov [1] Basic lemma of variational principles: Temeljni lema variacijskih načel.

Literatura

- [1] B.-n. Jiang, *The Least-Squares Finite Element Method*. Springer-Verlag, 1998, Heidelberg.
- [2] Wikipedia. (2019). Stokes Flow, spletni naslov: https://en.wikipedia.org/wiki/Stokes_flow.
- [3] W. Ritz, „Über eine neue Methode zur Lösung gewisser Variationsprobleme der mathematischen Physik“, *Journal für die Reine und Angewandte Mathematik*, let. 135, str. 1–61, 1909.