

Metoda končnih elementov, ki minimizira kvadrat ostanka aproksimacije

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.

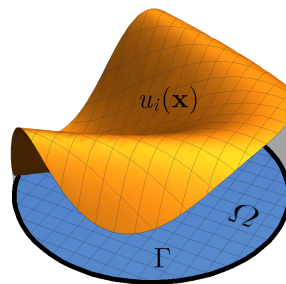
1 Temelji FEM

Kadar obravnavamo prostorsko dinamiko (npr. prevajanje toplote ali tok tekočine), lahko fizični prostor modeliramo kot 1, 2, 3 ali 4-mnogoterost. Temelje FEM bomo polagali na splošnem primeru d -mnogoterosti, v prid predstavljalivosti pa na njih sproti gradili konkretni 2D primer.

Naj bo prizorišče dogajanja d -monogoterost Ω , opremljena s krajevnim vektorjem \mathbf{x} . Pri reševanju sistema p PDE iščemo p funkcij $u_1(\mathbf{x}), \dots, u_p(\mathbf{x})$, ki v vsaki točki odprte domene Ω zadostijo sistemu PDE, na meji Γ pa robnim pogojem (slika 1). Obravnava bo enostavnejša, če iskane funkcije zložimo v vektor $\mathbf{u}(\mathbf{x})$:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_d \end{bmatrix} \quad d \text{ koordinat na } \Omega,$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} u_1(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ u_p(\mathbf{x}) \end{bmatrix} \quad p \text{ neznank na } \Omega.$$



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

Splošno razlago bomo sproti ilustrirali sistema s tremi spremenljivkami ($p = 3$).

$$\alpha \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \beta \frac{\partial u_2}{\partial x_1} + \gamma u_2 = 0, \quad (1)$$

$$\alpha u_1 + \gamma \frac{\partial u_3}{\partial x_2} = 0, \quad (2)$$

$$\alpha \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \gamma \frac{\partial u_2}{\partial x_2} - \beta u_3 = 0. \quad (3)$$

Pri FEM ne operiramo neposredno na PDE, ampak jih najprej pretvorimo v enakovreden variacijski problem. Za poljubno funkcijo $\mathbf{w}(\mathbf{x})$ zapišemo funkcional $I[\mathbf{w}(\mathbf{x})]$, ki zavzame minimalno vrednost, kadar je \mathbf{w} enaka rešitvi. Ta funkcional je pri vseh različicah FEM integral neke funkcije $F = F(\mathbf{w})$ po domeni Ω :

$$I[\mathbf{w}(\mathbf{x})] = \int_{\Omega} F(\mathbf{w}(\mathbf{x})) \, d\Omega \quad \text{funkcional} \quad . \quad (4)$$

Kot vemo, poiščemo minimum funkcionala I tako, da za \mathbf{w} vstavimo:

$$\mathbf{w}(\mathbf{x}, \varepsilon) = \mathbf{u}(\mathbf{x}) + \varepsilon \mathbf{v}(\mathbf{x}) \quad , \quad (5)$$

kjer je $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ poljuben odmik od rešitve $\mathbf{u}(\mathbf{x})$, ε pa skalar. Odvajamo po ε in odvod enačimo z 0:

$$\frac{dI}{d\varepsilon} = \int_{\Omega} \frac{d}{d\varepsilon} F(\mathbf{w}) d\Omega = \int_{\Omega} \frac{dF}{d\mathbf{w}} \cdot \frac{d\mathbf{w}}{d\varepsilon} d\Omega = \int_{\Omega} \frac{dF}{d\mathbf{w}} \cdot \mathbf{v} d\Omega = 0 \quad \text{prva variacija} . \quad (6)$$

Fizikalno najintuitivnejša je **Rayleigh-Ritzeva različica**, kjer za F uporabimo energijski potencial sistema PDE. Rešitev $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ je potemtakem funkcija, ki minimizira totalno potencialno energijo sistema. Rayleigh-Ritzeva različica poseduje lastnost najboljšega približka (minimizira razliko energijskih norm numerične in eksaktne rešitve), hkrati pa vodi do sistema linearnih algebrskih enačb, ki je zelo prikladen za reševanje s hitrimi iteracijskimi metodami.

Z Rayleigh-Ritzevo metodo dobimo sistem linearnih algebrskih enačb za

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

2 Temelji mehanike tekočin

V zadnjih stotih letih se je v fiziki močno uveljavil izraz teorija polja, ob katerem najprej pomislimo na Maxwellov elektromagnetizem (1864). V pristopu s polji nas v vsaki točki prostora zanima časovni razvoj neke količine $f(\mathbf{r}, t)$, ki jo imenujemo polje spremenljivke f . Pristop torej ni nič drugega kot reševanje parcialnih diferencialnih enačb (PDE), polje pa ime, ki naznani neodvisni spremenljivki \mathbf{r} in t . Potemtakem je mehanika tekočin, ki so jo začeli razvijati Euler, Cauchy ter Navier (slika ??), **pravzaprav teorija polja**. Večina fizikov se z našo uvrstitvijo mehanike tekočin med teorije polja ne bi strinjala, ker se je uporaba izraza zasedrila drugam. Teorija polja je dandanes del kraljestva domišljavih izrazov, ki ne služijo razjasnitvi stvari, ampak zavijanju le-teh v tančico skrivnostnosti. Kljub temu je izraz polje uporaben pri sklicevanju na funkcije oblike $f(\mathbf{r}, t)$.

V mehaniki tekočin iščemo polja hitrosti \mathbf{v} , tlaka P , gostote ρ in temperature T . V večini primerov zadošča opis s poljema hitrosti (rezervoar kinetične energije) in tlaka (rezervoar potencialne energije). Pri stisljivih tekočinah moramo za razrešitev PDE tlak povezati z gostoto, včasih pa tudi s temperaturo, preko enačbe stanja tekočine. Temperaturno polje deluje kot rezervoar notranje energije, s katerim ostala rezervoarja energijo izmenjujeta na reverzibilen (adiabatno segrevanje/ohlajanje) ali ireverzibilen način (trenje ali viskoznost). Ireverzibilno je tudi prerazporejanje notranje energije s toplotno difuzijo.

Kako naj sestavimo dinamične enačbe, ki opisujejo razvoj vseh zgoraj naštetih polj? Za to obstaja izjemno preprost in sistematičen način, na katerem temeljijo vse teorije polja (npr. elastomehanika, mehanika tekočin, elektromagnetna teorija). Za opis dogajanja pravzaprav potrebujemo le eno polje, **polje gostote gibalne količine** π , in eno enačbo njegove dinamike. Vedno, kadar se poljubna količina \mathbf{p} , katere gostoto opisuje polje $\pi(\mathbf{r}, t)$, podreja lokalnemu ohranitvenemu zakonu, zapišemo dinamiko gostotnega polja kot:

$$\boxed{\frac{\partial \pi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \pi) = 0} \quad \text{kontinuitetna enačba} , \quad (7)$$

kjer je \mathbf{u} [m/s] hitrostno polje prenašalcev količine \mathbf{p} in $\mathbf{u} \otimes \pi$ pretok (fluks) \mathbf{p} . Enačbo (7) si je lažje zapomniti z besedami:

$$\text{hitrost spreminjanja gostote } \mathbf{p} + \text{divergenca pretoka } \mathbf{p} = 0 . \quad (8)$$

Postavimo se v neko točko prostora. Polje π v tej točki služi kot rezervoar \mathbf{p} . Prvi člen enačbe (7) pove hitrost polnjenja tega rezervoarja s \mathbf{p} , drugi člen pa pove, s kolikšno hitrostjo priteka \mathbf{p} iz okoliških rezervoarjev. Enačba torej pravi, da je hitrost polnjenja rezervoarja s \mathbf{p} enaka hitrosti pritekanja \mathbf{p} iz

okolice. Količina \mathbf{p} nikjer ne nastaja ali izginja, torej se ohranja. Ponavadi enačbo (7) zapišemo v obliki:

$$\frac{\partial \boldsymbol{\pi}}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{T} = 0 \quad , \quad (9)$$

kjer pretok vektorske količine \mathbf{p} označimo s tenzorjem drugega ranga:

$$\boxed{\mathbf{T} = \mathbf{u} \otimes \boldsymbol{\pi}} \quad \text{pretok } \mathbf{p} . \quad (10)$$

Če naj tenzor \mathbf{T} opisuje invariantno količino (dinamika neodvisna od izbire koordinatnega sistema), ga mora biti mogoče diagonalizirati s preprostim zasukom koordinatnega sistema (ortogonalno transformacijo). To pomeni, da mora biti simetričen ($T_{ij} = T_{ji}$), v tem primeru pa iz definicije (10) sledi:

$$\mathbf{u} \times \boldsymbol{\pi} = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \mathbf{u} \parallel \boldsymbol{\pi} . \quad (11)$$

Tenzorski produkt dveh vektorjev je namreč simetričen le, če sta vzporedna. Vektorja \mathbf{u} in $\boldsymbol{\pi}$ torej povezuje skalar, ki ga označimo z ρ (posplošena gostota prenašalca \mathbf{p}):

$$\mathbf{u} = \frac{\boldsymbol{\pi}}{\rho} . \quad (12)$$

Tenzor pretoka \mathbf{p} lahko torej namesto s hitrostjo \mathbf{u} izrazimo tudi z gostoto prenašalcev ρ :

$$\boxed{\mathbf{T} = \frac{1}{\rho} \boldsymbol{\pi} \otimes \boldsymbol{\pi}} . \quad (13)$$

Bralec je verjetno zaslutil, da smo z vpeljanimi oznakami pripravili teren za izpeljavo enačb gibanja. Kot smo namignili, bodo vpeljane oznake prevzele naslednje vloge:

$\mathbf{p} \quad \left[\frac{\text{kg m}}{\text{s}} = \text{Ns} \right]$	gibalna količina (GK)
$\boldsymbol{\pi} \quad \left[\frac{\text{Ns}}{\text{m}^3} = \frac{\text{kg}}{\text{m}^2 \text{s}} \right]$	gostota GK
$\mathbf{T} \quad \left[\frac{\text{N}}{\text{m}^2} = \text{Pa} \right]$	pretok GK ali napetostni tenzor
$\rho \quad \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right]$	gostota mase

kar pomeni, da bo enačba (7) opisala pretakanje GK po prostoru. Ker želimo, da bi opisala kaj oprijemljivega, bomo $\boldsymbol{\pi}$ in \mathbf{T} izrazili z merljivimi količinami. Prvi člen enačbe (7), $\partial \boldsymbol{\pi} / \partial t$, predstavlja hitrost polnjenja rezervoarja GK ($\boldsymbol{\pi}$) v neki točki. Prisotnost $\boldsymbol{\pi}$ v prostoru je izključno posledica prisotnosti gostote mase ρ , ki se giblje s hitrostjo \mathbf{v} :

$$\boldsymbol{\pi} = \frac{\partial(m\mathbf{v})}{\partial V} = \rho \mathbf{v} \quad , \quad (14)$$

zato je prvi člen vedno oblike:

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} \quad \text{1. člen enačbe gibanja} .$$

Drugi člen opisuje vpliv okoliških tokov GK na hitrost polnjenja rezervoarja. Njihovo skupno vsoto opiše pretok \mathbf{T} , ki ga lahko sestavlja več prispevkov, pri čemer mora biti vsak simetričen:

$$\begin{array}{ccccccc} \mathbf{T} & = & \mathbf{T}_m & + & \mathbf{T}_p & + & \mathbf{T}_\nu & + \dots \\ \text{skupni} & & \text{mehanski} & & \text{tlačni} & & \text{disipativni} & \end{array} \quad (15)$$

V \mathbf{T} vključimo interakcije, ki jih želimo upoštevati. Vanj smo primorani vključiti le mehanski prispevek \mathbf{T}_m (zaradi gibanja mase), ostale člene vključimo po želji. Mehanskega prispevka ni težko zapisati, ker je hitrost prispevanega toka GK enaka hitrosti delcev (\mathbf{v}), ki prenašajo gostoto GK $\rho \mathbf{v}$. Iz definicije

(10) zato sledi:

$$\boxed{\mathbf{T}_m = \rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}} \quad \text{mehanski napetostni tenzor} . \quad (16)$$

Poglejmo, kaj nam da dinamična enačba (9), če napetostnemu tenzorju (15) ne dodamo drugih prispevkov kot mehanskega:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) &= 0 \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} \mathbf{v} + \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\rho \mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} + (\nabla \cdot (\rho \mathbf{v})) \mathbf{v} &= 0 \\ \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\rho \mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} + \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \right) \mathbf{v} &= 0 \end{aligned} \quad (17)$$

V oklepaju zadnjega člena (17) opazimo levo stran enačbe tipa (7) z gostoto $\pi \rightarrow \rho$ in hitrostjo $\mathbf{u} \rightarrow \mathbf{v}$. V primeru, da velja:

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0} \quad \text{ohranitev mase} , \quad (18)$$

je torej ohranjena količina masa ($\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{m}$). Masa se v realnosti zares ohranja, zato zadnji člen enačbe (17) črtamo, in dobimo:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = 0 \quad \text{Eulerjeva oblika} . \quad (19)$$

konvektivni

Zadnji člen se imenuje konvektivni člen, ker opiše spremembo gostote GK v naslednjem trenutku, ko stari tekočinski element z gostoto GK π_1 zamenja nov tekočinski element z malo drugačno gostoto GK π_2 . Konvekcija je le zapleten izraz za gibanje tekočine na makroskopski skali (bulk flow).

Da bi bolje razumeli, kaj nam želi enačba (19) povedati, razpišimo eno komponento v kartezičnih koordinatah:

$$\rho \left(\frac{\partial v_x}{\partial t} + \frac{\partial v_x}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial v_x}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial v_x}{\partial z} \frac{dz}{dt} \right) = 0 . \quad (20)$$

Izraz v oklepajih je totalni odvod $v_x(x, y, z, t)$ po času. Sledi, da lahko enačbo (19) pišemo tudi v obliki:

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = 0 \quad \text{Lagrangeva oblika} . \quad (21)$$

V Eulerjevi obliki (19) opazujemo dinamiko v fiksni točki prostora, medtem ko v Lagrangevi obliki (21) sledimo tekočinskemu elementu. Lagrangeva oblika pove, da se bodo vsi tekočinski elementi gibal s takšno hitrostjo, kot smo jim jo dali na začetku, in med seboj ne bodo interagirali. To je odraz dejstva, da v napetostni tenzor nismo vgradili še nobene interakcije.

3 Dodajanje interakcij napetostnemu tenzorju

Poleg gibanja mase prispevajo k pretoku GK še nevidni tokovi GK, ki jim pravimo napetosti. Ena takšnih je napetost, ki nastane zaradi upiranja tekočine stiskanju - napetost izotropnega tlaka P . Polje tlaka služi kot rezervoar potencialne energije, njegov prispevek k pretoku GK pa je enak:

$$\boxed{\mathbf{T}_P = P \delta} \quad \text{tlačni napetostni tenzor} , \quad (22)$$

kjer je δ izotropni tenzor. Tlačna napetost torej oddaja GK enakomerno v vse smeri. Divergenca \mathbf{T}_P , ki vpliva na dinamiko, je enaka gradientu tlačnega polja:

$$\nabla \cdot \mathbf{T}_P = \nabla P . \quad (23)$$

To je razumljivo: kadar je tlak povsod enak, ni dinamike. Z gravitacijskim pospeškom \mathbf{g} izrazimo še gravitacijski napetostni tenzor, ki ga zaenkrat ne bomo objasnjevali:

$$\boxed{\mathbf{T}_g = \frac{\mathbf{g} \otimes \mathbf{g} - \frac{1}{2}g^2\delta}{4\pi G}} \quad \text{gravitacijski napetostni tenzor .} \quad (24)$$

Njegova divergenca je enaka gostoti gravitacijske sile:

$$\nabla \cdot \mathbf{T}_g = -\rho \mathbf{g} . \quad (25)$$

Z dodatkom tlačnega (23) in gravitacijskega (25) člena dinamični enačbi (19), se prebijemo do Eulerjeve enačbe, ki opisuje gibanje tekočine, v kateri ni disipacije:

$$\boxed{\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} + \frac{\nabla P}{\rho} - \mathbf{g} = 0} \quad \text{Eulerjeva enačba .} \quad (26)$$

Tekočini brez disipacije pravimo **idealna tekočina**. Specifična entropija tekočinskih elementov se v takšni tekočini ohranja.

Zdaj želimo dodati še disipacijo - pretvarjanje kinetične energije v notranjo. Iz elastomehanike je znano, da lahko deformacijski tenzor razstavimo na volumenski raztezek (izotropni tenzor), strig (simetrični, brezsledni tenzor) in rotacijo (antisimetrični tenzor). Analog deformacijskega tenzorja v mehaniki tekočin je gradient hitrostnega polja, ki namesto deformacij opisuje hitrost deformiranja. Tudi tega lahko razstavimo na hitrost raztezanja, hitrost striga in hitrost rotacije:

$$\nabla \mathbf{v} = \underbrace{\frac{1}{3}\theta\delta}_{\text{raztezek}} + \underbrace{\boldsymbol{\sigma}}_{\text{strig}} + \underbrace{\mathbf{r}}_{\text{rotacija}} , \quad (27)$$

kjer so:

$$\theta = \nabla \cdot \mathbf{v} \quad \text{hitrost raztezanja ,} \quad (28)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \right) - \frac{1}{3}\theta\delta \quad \text{hitrost striga ,} \quad (29)$$

$$\mathbf{r} = \frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{v} - (\nabla \mathbf{v})^T \right) \quad \text{hitrost rotacije .} \quad (30)$$

Pri Newtonskih tekočinah, pri katerih je strižna napetost sorazmerna hitrost strižnega deformiranja, zapišemo disipativni tenzor kot:

$$\boxed{\mathbf{T}_\nu = -\zeta\theta\delta - 2\eta\boldsymbol{\sigma}} \quad \text{disipativni napetostni tenzor .} \quad (31)$$

Vpeljali smo koeficienta volumenske (ζ) in strižne viskoznosti (η). Zdaj smo v položaju, da zapišemo Navier-Stokesovo (NS) enačbo v splošni obliki:

$$\boxed{\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} + \frac{\nabla P}{\rho} - \mathbf{g} = \nabla(\zeta\theta) + 2\nabla \cdot (\eta\boldsymbol{\sigma})} \quad \text{Navier-Stokesova enačba .} \quad (32)$$

Ponavadi jo srečamo zapisano v obliki za nestisljive tekočine, pri katerih velja $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$. Tako prvi člen na desni strani očitno odpade, drugi člen pa se občutno poenostavi, saj velja:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{2}(\nabla \cdot \nabla \mathbf{v} + \nabla(\nabla \cdot \mathbf{v})) \longrightarrow \frac{1}{2}\nabla^2 \mathbf{v} .$$

Prav tako predpostavimo, da se strižna viskoznost η spreminja veliko počasneje kot hitrost striga $\boldsymbol{\sigma}$, zato jo lahko nesemo pred operator divergence. Če vpeljemo še kinematično viskoznost:

$$\nu = \frac{\eta}{\rho} , \quad (33)$$

lahko NS enačbo zapišemo kot:

$$\boxed{\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} + \frac{\nabla P}{\rho} - \mathbf{g} = \nu \nabla^2 \mathbf{v}} \quad \text{NS enačba za nestisljive tekočine.} \quad (34)$$

4 Povzetek

Do NS enačbe smo se prebili z dodajanjem naslednjih prispevkov k skupnemu pretoku GK:

- prispevek zaradi gibanja mase (viden, mehanski prispevek),
- prispevek sil (neviden prispevek):
 - prispevek reverzibilne stisljivosti, ki hrani energijo kot napeta vzmet (tlak),
 - prispevek gostote gravitacijske sile,
 - prispevek ireverzibilnega prenosa GK zaradi relativnega gibanja med deli tekočine, ob čemer se mehanska energija pretvarja v notranjo (viskoznost).

Literatura

- [1] B.-n. Jiang, *The Least-Squares Finite Element Method*. Springer-Verlag, 1998, Heidelberg.
- [2] K. Simonyi, *A Cultural History of Physics*. CRC Press, 2012, Boca Raton.