

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 povzpeli. 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.

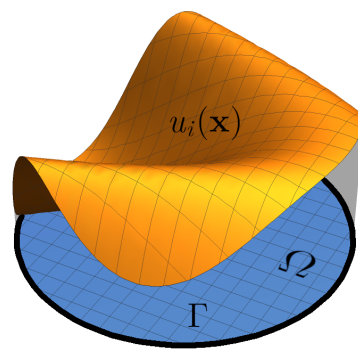
Naj bo torej prizorišče dogajanja d -mnogoterost Ω , opremljena s krajevnim vektorjem $\mathbf{x} = \{x_1, \dots, x_d\}$. Pri reševanju sistema m PDE iščemo nabor funkcij $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \{u_1(\mathbf{x}), \dots, u_m(\mathbf{x})\}$, ki v vsaki točki domene Ω zadosti sistemu PDE, na meji Γ pa robnim pogojem (slika 1). Konkretni primer bomo gradili na **sistemu Stokesovih enačb** za nestisljive tekočine v obliki u - p - ω (hitrost, tlak, vrtinčnost):

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (1)$$

$$\gamma \frac{\partial p}{\partial y} - \delta \frac{\partial \omega}{\partial x} = f_y, \quad (3)$$

$$\alpha \frac{\partial p}{\partial x} + \beta \frac{\partial \omega}{\partial y} = f_x, \quad (2)$$

$$\omega + \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} = 0, \quad (4)$$



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

ki jim za večjo nazornost primera umetno dodamo koeficiente $\alpha(\mathbf{x})$, $\beta(\mathbf{x})$, $\gamma(\mathbf{x})$ in $\delta(\mathbf{x})$ (v pravih enačbah jih ni). To je le sistem stacionarnih Navier-Stokesovih enačb 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. Kot zanimivost navržimo, da 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).

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

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



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].

s katerim lahko sistem enačb zapišemo kot:

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) . \quad \text{jedrnat zapis PDE} \quad (6)$$

$$\left(\mathbf{A}_0(\mathbf{x}) + \mathbf{A}_1(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial x_1} + \mathbf{A}_2(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) \quad (7)$$

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 x_1 in v \mathbf{A}_2 vse koeficiente pred členi z odvodi odvisnih spremenljivk po x_2 . Ostale člene zložimo v vektor \mathbf{f} . Stokesove enačbe (1) - (4) lahko po zgledu enačbe (7) 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: omislimo 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 to 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 (1909) [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 :

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

$F(\mathbf{w}(\mathbf{x}))$ je npr. pri RRFEM energijski potencial, dobljen funkcional pa skupna potencialna energija sistema. Rešitev $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ potemtakem minimizira potencialno energijo sistema, zaradi česar RRFEM poseduje lastnost najboljšega približka, hkrati pa vodi do sistema linearnih algebrskih enačb, ki je zelo prikladen za reševanje s hitrimi iteracijskimi metodami. Različica metode se je izkazala pri reševanju problemov v gradbenem inženirstvu, kjer je s problemom vedno povezan energijski potencial. Večina računalniških programov s tega področja zato še danes temelji na RRFEM.

Energijski potencial povezan s sistemom PDE žal vedno ne obstaja, kar velja predvsem v dinamiki

tekočin. To je motiviralo razvoj Galerkinove različice FEM (GFEM), ki je zastavljena kot posplošitev RRFEM, a na precej neroden, ad hoc način. Akademiki so pričakovali, da se bo uspeh RRFEM v gradbenem inženirstvu ponovil v dinamiki tekočin z Galerkinovo metodo, vendar se to ni zgodilo [1]. Večina računalniških programov za simulacije dinamike tekočin je dandanes napisana na osnovi GFEM, saj je zanj napisane ogromno literature. To ne velja za mlajšo LSFEM. Ideja GFEM je, da lahko za vsak sistem PDE definiramo vektor ostanka (glej enačbo (6)):

$$\mathbf{R}(\mathbf{w}(\mathbf{x})) = \mathbf{A}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{w}(\mathbf{x}) - \mathbf{f}(\mathbf{x}) \quad \text{vektor ostanka} . \quad (10)$$

ki ga potem na nek način poskušamo minimizirati. To idejo uporabimo tudi pri LSFEM, kjer se minimizacije lotimo na legitimen način. Za $F(\mathbf{w}(\mathbf{x}))$ vstavimo:

$$F(\mathbf{w}(\mathbf{x})) = \mathbf{R}(\mathbf{w}(\mathbf{x})) \cdot \mathbf{R}(\mathbf{w}(\mathbf{x})) \quad \text{kvadrat vektorja ostanka} \quad (11)$$

in minimiziramo funkcional:

$$\boxed{I[\mathbf{w}(\mathbf{x})] = \int_{\Omega} R^2(\mathbf{w}(\mathbf{x})) \, d\Omega} \quad \text{funkcional LSFEM} , \quad (12)$$

od koder dobi metoda svoje ime. Nadaljujmo razlago preko splošnega funkcionala (9), da bomo lahko kasneje orisali še postopek minimizacije pri GFEM in komentirali slabosti, ki jih prinese.

Ko smo torej 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:

$$\tilde{\mathbf{w}}(\mathbf{x}, \varepsilon) = \mathbf{u}(\mathbf{x}) + \varepsilon \mathbf{v}(\mathbf{x}) , \quad (13)$$

kjer je $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ poljubna odmična funkcija, ε pa realno število. Razvoj (13) vstavimo v funkcional (9) namesto $\mathbf{w}(\mathbf{x})$ in izraz odvajamo po ε :

$$\frac{dI}{d\varepsilon} = \int_{\Omega} \frac{d}{d\varepsilon} F(\tilde{\mathbf{w}}) \, d\Omega = \int_{\Omega} \frac{dF}{d\tilde{\mathbf{w}}} \cdot \frac{d\tilde{\mathbf{w}}}{d\varepsilon} \, d\Omega = \int_{\Omega} \frac{dF}{d\tilde{\mathbf{w}}} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega . \quad (14)$$

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. Da dobimo **variacijsko izjavo**, torej v odvodu funkcionala (14) ε pošljemo proti nič in izraz enačimo z nič:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{dI}{d\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\Omega} \frac{dF(\tilde{\mathbf{w}}(\mathbf{x}, \varepsilon))}{d\tilde{\mathbf{w}}} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) \, d\Omega = \boxed{\int_{\Omega} \left(\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{dF(\tilde{\mathbf{w}})}{d\tilde{\mathbf{w}}} \right) \cdot \mathbf{v} \, d\Omega = 0 , \quad \forall \mathbf{v}(\mathbf{x})} . \quad (15)$$

Formulacija Galerkinove različice se začne komaj na tem mestu. Namesto izraza v oklepaju vstavimo vektor ostanka (10):

$$\int_{\Omega} \mathbf{R}(\mathbf{w}(\mathbf{x})) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) \, d\Omega = 0 \quad (16)$$

in upamo, da bo novi način minimiziral ostanek \mathbf{R} . Pristop imenujemo *metoda uteženih ostankov* (*method of weighted residuals*). Pri LSFEM od enačbe (15) nadaljujemo po pravilih. Imamo:

$$\frac{dF(\tilde{\mathbf{w}})}{d\tilde{\mathbf{w}}} = 2\mathbf{R}(\tilde{\mathbf{w}}) \cdot \frac{d\mathbf{R}(\tilde{\mathbf{w}})}{d\tilde{\mathbf{w}}} = 2(\mathbf{A} \cdot \tilde{\mathbf{w}} - \mathbf{f}) \cdot \mathbf{A} \quad (17)$$

in

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{dF(\tilde{\mathbf{w}})}{d\tilde{\mathbf{w}}} = 2(\mathbf{A} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{f}) \cdot \mathbf{A} . \quad (18)$$

Variacijska izjava se nato glasi:

$$\int_{\Omega} 2(\mathbf{A} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{f}) \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega = 0 , \quad \forall \mathbf{v}(\mathbf{x}) . \quad (19)$$

Če jo rahlo preoblikujemo in zapišemo z matrikami, imamo:

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

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 sestavljanke vozliščnih funkcij. Imamo N vozlišč:

$$u_i(\mathbf{x}) = \sum_{a=1}^N \Phi^{a0} u_i^{a0} \quad (21)$$

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.