



AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA
IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE

Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej
Informatyka Stosowana

Bartosz Rogowski, IV rok, 303793

7 listopada 2021

Inżynierskie Metody Numeryczne 2

Raport z ćwiczenia nr 3

Rozwiązanie problemu własnego operatora różniczkowego w MES 1D z funkcjami kształtu Lagrange'a.

1 Wstęp teoretyczny

Jednowymiarowe równanie różniczkowe można zapisać w postaci:

$$Lu = f, \quad u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}, \Omega = [a, b], \quad (1)$$

np. $\frac{d^2 u(x)}{dx^2} = \sin(x)$. Rozwiązania poszukuje się w pewnej zdefiniowanej bazie funkcyjnej*:

$$u(x) \simeq v(x) = \sum_{i=1}^N c_i \cdot \phi_i(x), \quad (2)$$

gdzie: $v(x)$ – funkcja próbna/testowa, $\phi_i(x)$ – i -ta funkcja bazowa; jednak pojawia się pytanie jak dobrać współczynniki c_i . Głównym motywem jest znalezienie rozwiązania, które będzie spełniać równanie (1). Miarą pomagającą określić jego jakość jest residuum (także: błąd, reszta, pozostałość):

$$E = Lv - f, \quad (3)$$

żąda się aby było równe 0. Do takiej sytuacji na pewno doszłoby, gdyby znalezione rozwiązanie było równe analitycznemu: $u = v \implies E = 0$, jednak w praktyce dokładne rozwiązanie u nie jest znane (z tego też powodu miara określona jako $E = |u - v|$ nie miałaby zastosowania – poza tym wówczas byłby to problem aproksymacji), a najczęściej rozwiązanie v nie będzie idealne, tzn. $E \neq 0$, dlatego poszukiwane są minima residuum E_{min} , z pomocą których można wyznaczyć współczynniki c_i .

Istnieje wiele podejść do znalezienia wspomnianych współczynników, korzystając z tak zdefiniowanego – wzór (3) – residuum, kilka z nich przedstawiono w tabeli 1.

*Dzięki temu uzyskuje się więcej informacji niż gdyby np. znane były tylko wartości w poszczególnych punktach, ponadto szybciej osiąga się zbieżność wyników. Wybór bazy zawęża przestrzeń poszukiwań optymalnych rozwiązań (które zależą od optymalnych współczynników c_i).

kolokacji	zerowanie się residuum w N węzłach funkcji $v(x)$, tzn. $E(x_j) = 0$	Uwaga! $Lu(x_j) = Lv(x_j) \not\Rightarrow u(x_j) = v(x_j)$, np. $u''(x_j) = v''(x_j) \not\Rightarrow u(x_j) = v(x_j)$
najmniejszych kwadratów	szukamy F_{min} , czyli $\frac{\partial F}{\partial c_j} = 0$	$F = \int_a^b E^2 dx$
reszt ważonych		$F = \int_a^b E \cdot w_i(x) dx$
wariacyjna (Reyleigha-Ritza)		$F = \int_a^b u \left(\frac{1}{2} Lu - f \right) dx$
różnic skończonych	pochodne zastępujemy odpowiednimi ilorazami	przy odpowiednich ilorazach można dojść do szczególnego przypadku metody reszt ważonych dla odcinkowo liniowej bazy i funkcji wagowych typu delta Diraca

Tabela 1: Wybrane metody i ich opis.

Metoda Galerkina to szczególny przypadek metody reszt ważonych – funkcje bazowe $\phi_i(x)$ są tożsame z funkcjami wagowymi $w_i(x)$:

$$F = \int_a^b E \cdot \phi_i(x) dx. \quad (4)$$

Wówczas równość silną (1) zastępuje się przez tzw. równość słabą (N liczb), czyli rzutuje się lewą i prawą stronę równania (1) na funkcje bazowe ϕ_i :

$$\int_a^b Lu \cdot \phi_i dx = \int_a^b f \cdot \phi_i dx \xrightarrow{\text{notacja}} (Lu, \phi_i) = (f, \phi_i), \quad i = 1, \dots, N, \quad (5)$$

ponadto przy liczeniu całki z wyrazem Lu korzysta się z całkowania przez części, np. dla $L = \Delta$ (czyli w 1D druga pochodna):

$$\int_{\Omega} u'' \cdot \phi_i dx = - \underbrace{\int_{\Omega} u' \cdot \phi'_i dx}_{(u', \phi'_i)} + \underbrace{u'(b) \cdot \phi_i(b) + u'(a) \cdot \phi_i(a)}_{\text{często wartości brzegowe równe 0}}. \quad (6)$$

Sprawia to, że residuum E jest ortogonalne do każdego wektora bazowego. Znajdzenie ekstremów funkcjonału F daje układ N równań N niewiadomych, dzięki któremu można wyznaczyć współczynniki c_i . Wstawiając $v(x)$ ze wzoru (2) za $u(x)$ do wzoru (5) dostaje się równanie:

$$\sum_{i=1}^N c_i \left(\phi'_i(x), \phi'_j(x) \right) = (f, \phi_j(x)), \quad (7)$$

a układ ten można zapisać w postaci macierzowej jako:

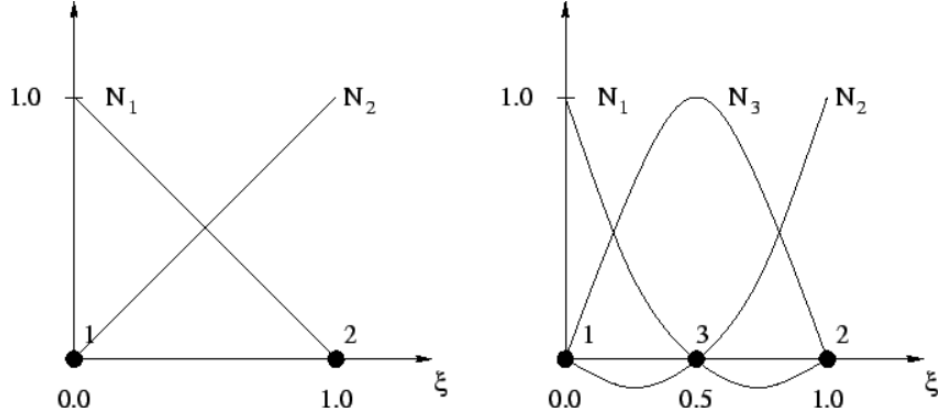
$$A\vec{c} = \vec{b}, \quad (8)$$

gdzie elementy macierzy A oraz wektora \vec{b} to odpowiednio:

$$a_{i,j} = \int_a^b \phi_i \cdot L\phi_j dx, \quad (9)$$

$$b_i = \int_a^b f \cdot \phi_i dx. \quad (10)$$

Metoda elementów skończonych* jest numeryczną metodą rozwiązywania problemów brzegowych. Polega na aproksymacji równań różniczkowych poprzez podział obszaru obliczeniowego na małe fragmenty zwane elementami skończonymi oraz specjalny sposób konstruowania funkcji aproksymujących opierających się na funkcjach zdefiniowanych w tych elementach [1]. Można powiedzieć, że jest ona połączeniem **metody Galerkina** z bazą odcinkami wielomianowych funkcji zdefiniowanych w sposób rozłączny przestrzennie (rys. 1)[†].



Rysunek 1: Funkcje kształtu dla jednowymiarowych elementów (po lewo: liniowe; po prawo: kwadratowe).

Najpierw definiowane są elementy skończone – w przypadku jednowymiarowym jest to n przedziałów wyznaczonych przez N węzłów ($N = n + 1$), które nie muszą być równoodległe, co jest wielką zaletą tej metody (np. jeśli spodziewamy się, że rozwiązanie jest „szybko zmienne” w pewnym obszarze, to możemy tam zagęścić siatkę). Ponieważ element może mieć K funkcji kształtu, to ostateczne rozwiązanie – odpowiednik wzoru (2) – ma postać:

$$v(x) = \sum_{p=1}^N c_p \cdot \phi_p(x) = \sum_{m=1}^M \sum_{j=1}^K c_{m,j} \cdot \phi_{m,j}(x). \quad (11)$$

Dodatkowo relacja między indeksem p (globalnym) związanym z węzłami, a (węzłami lokalnymi) m oraz j – kolejno: indeks po elementach, indeks po funkcjach bazowych, musi zostać zdefiniowana.

W MES także układ zapisuje się macierzowo – odpowiednik wzoru (8):

$$S\vec{c} = \vec{F}, \quad (12)$$

gdzie w żargonie tej metody stosuje się nazwy:

- S – macierz sztywności (ang. *stiffness matrix*)
- \vec{F} – wektor obciążeń (ang. *load vector*)[‡]; **nie mylić z funkcjonałem F** .

Aby uprościć obliczenia (np. całkowanie) i zautomatyzować wyznaczanie elementów macierzy sztywności oraz wektora obciążeń, stosuje się przejście do przestrzeni referencyjnej – dla każdego elementu jego krańce są mapowane na przedział $[-1, 1]$ [§]. Przykładem takiego mapowania jest:

$$\xi(x) = \frac{x - \frac{x_n + x_{n+1}}{2}}{J_m} \longleftrightarrow x(\xi) = \frac{x_n + x_{n+1}}{2} + J_m \cdot \xi, \quad (13)$$

*W analizie numerycznej stosuje się nazwę *metoda elementu skończonego* (ang. *finite element method*).

[†]Źródło: <https://www.iue.tuwien.ac.at/phd/radi/img233.gif> (data dostępu: 2 listopada 2021)

[‡]W problemach inżynierskich, skąd wywodzi się ta metoda, wektor ten najczęściej stanowiły siły (ang. *forces*).

[§]W literaturze można się spotkać także z mapowaniem na przedział $[0, 1]$.

gdzie

$$J_m = \frac{dx}{d\xi} = \frac{x_{n+1} - x_n}{2},$$

J_m – skala transformacji m -tego elementu (jakobian). Transformacja pochodnej funkcji złożonej:

$$g'[x(\xi)] = \frac{dg[x(\xi)]}{dx} = \frac{dg(\xi)}{d\xi} \cdot \frac{d\xi}{dx} = \frac{dg(\xi)}{d\xi} \cdot \frac{1}{J_m}. \quad (14)$$

W ogólnym przypadku stosuje się funkcjonal z residuum określonego wzorem (3), jednak dla niektórych problemów, np. Poissona, lepiej zastosować inny:

$$F(v) = \frac{1}{2} \cdot (v, Lv) - (f, v). \quad (15)$$

2 Zadanie do wykonania

2.1 Opis problemu

Naszym zadaniem było znalezienie rozwiązania różniczkowego operatora energii oscylatora harmonicznego, czyli rozwiązanie problemu własnego:

$$-\frac{1}{2} \cdot \frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{1}{2} \cdot x^2 \cdot u = E \cdot u \quad (16)$$

przy użyciu **metody elementów skończonych** w $\Omega = [x_1, x_N]$ dla węzłów rozłożonych nierównomiernie (odpowiada za to parametr α):

$$x_k = x_{max} \cdot \left(\frac{|2 \cdot k - N - 1|}{N} \right)^\alpha \cdot \text{sign} \left(\frac{2 \cdot k - N - 1}{N} \right), \quad k = 1, \dots, N. \quad (17)$$

Przyjęto $K = 3$ funkcje kształtu Lagrange'a (kwadratowe) na jeden element:

$$\phi_1(\xi) = \frac{\xi}{2} \cdot (\xi - 1) \quad (18)$$

$$\phi_2(\xi) = -(\xi + 1) \cdot (\xi - 1) \quad (19)$$

$$\phi_3(\xi) = \frac{\xi}{2} \cdot (\xi + 1). \quad (20)$$

Dzięki użyciu **metody Galerkina** równanie (16) można zapisać jako:

$$S \cdot \vec{c}_\mu = E_\mu \cdot O \cdot \vec{c}_\mu, \quad (21)$$

gdzie:

- \vec{c}_μ – wektor własny odpowiadający wartości własnej energii E_μ ,
- S – globalna macierz sztywności,
- O – macierz całek przekrywania.

Elementy tych macierzy (o indeksach globalnych p, q) są wyrażone wzorami (22) i (23):

$$S_{p,q} = \sum_{m=1}^M \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \int_{-1}^1 \left(\frac{1}{2 \cdot J_m} \cdot \frac{d\phi_i}{d\xi} \cdot \frac{d\phi_j}{d\xi} + \frac{1}{2} \cdot J_m \cdot (x(\xi))^2 \cdot \phi_i \cdot \phi_j \right) d\xi, \quad (22)$$

$$O_{p,q} = \sum_{m=1}^M \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \int_{-1}^1 (J_m \cdot \phi_i \cdot \phi_j) d\xi, \quad (23)$$

gdzie

$$x(\xi) = \frac{x_{2m-1} + x_{2m+1}}{2} + J_m \cdot \xi, \quad J_m = \frac{x_{2m+1} - x_{2m-1}}{2}. \quad (24)$$

Ponadto zależność między indeksami globalnymi p i q , a lokalnymi i, j została zdefiniowana dla $m = 1, 2, \dots, M$ jako:

$$p = 2 \cdot m + (i - 2), \quad i = 1, 2, 3 \quad (25)$$

$$q = 2 \cdot m + (j - 2), \quad j = 1, 2, 3. \quad (26)$$

W celu porównania wyników, znane są rozwiązania analityczne – kolejno: wartości własne energii oraz wektory własne:

$$E_\mu = \mu + \frac{1}{2}, \quad (27)$$

$$u_\mu(x) = \kappa_\mu \cdot H_\mu(x) \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right), \quad x \in \mathbb{R}, \quad (28)$$

gdzie:

- $H_\mu(x)$ – μ -ty wielomian Hermite’a,
- $\kappa_\mu = (2^\mu \cdot \mu! \cdot \sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}}$ – stała normalizacyjna*.

Pochodne pierwszego rzędu zastąpiono ilorazem symetrycznym z krokiem $\Delta\xi$, natomiast całki zostały obliczone za pomocą kwadratury Gaussa-Legendre’a – pomogła w tym funkcja `gsl_integration_glfixed_point` z biblioteki `GSL` generująca węzły kwadratury (dla tego zadania: 5 węzłów). Do rozwiązania równania (21) wykorzystano metody `gsl_eigen_gensymmv`.

ostatni węzeł	$x_{max} = 6$
liczba elementów	$M = 5, 10, 30$
liczba funkcji/węzłów	$N = 2 \cdot M + 1$
parametr odpowiedzialny za rozłożenie węzłów	$\alpha \in [0.4, 2]$
krok α	$\Delta\alpha = 0.05$
krok różniczkowania	$\Delta\xi = 0.001$
liczba węzłów kwadratury	$\eta = 5$
krok zapisywania wyników $u_\mu(x)$	$\Delta x = 0.01$

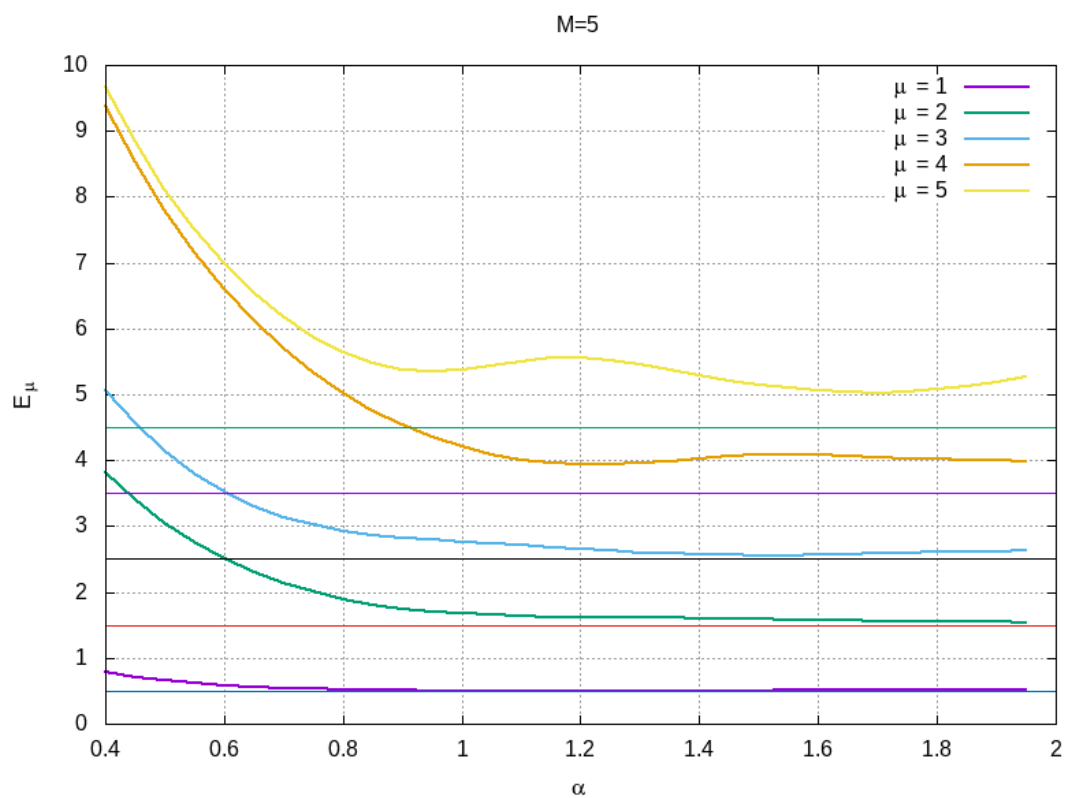
Tabela 2: Parametry dane w treści zadania.

2.2 Wyniki

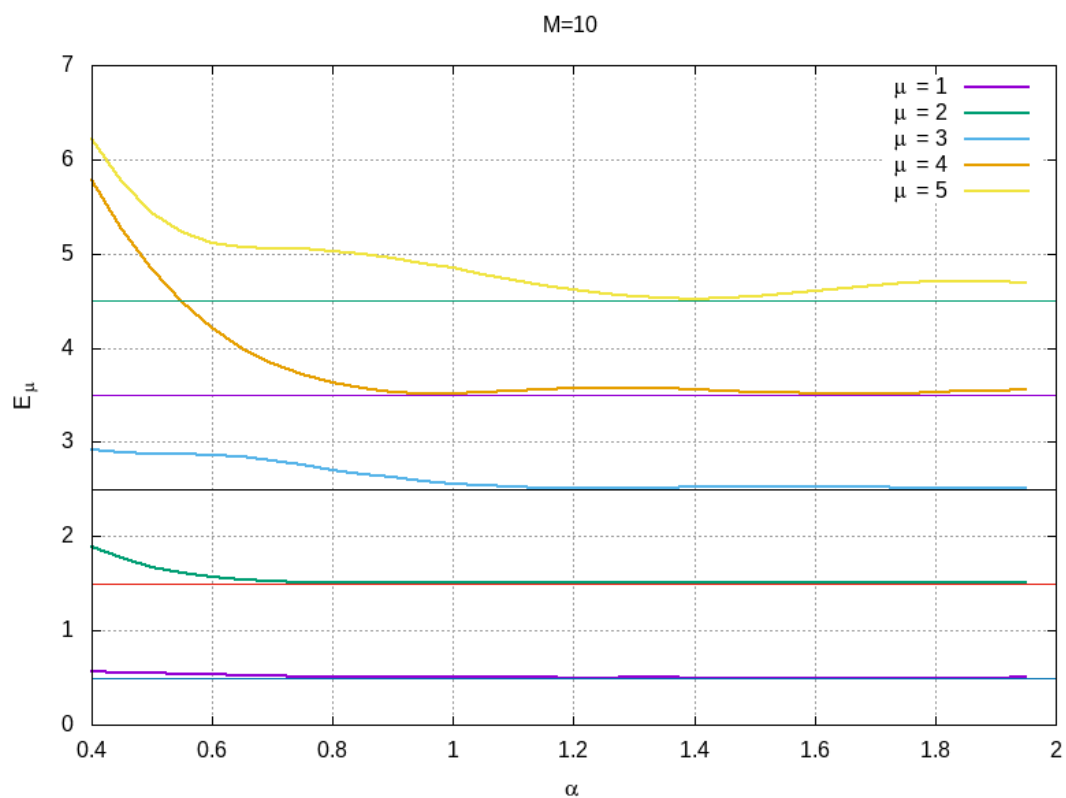
Specjalnie przygotowany skrypt z pomocą programu Gnuplot umożliwił prezentację graficzną otrzymanych danych. W celu zbadania zależności pomiędzy rozłożeniem węzłów (parametr α), a uzyskanymi energiami E_μ , wykonano wykresy dla pierwszych pięciu wartości energii (tzn. $\mu = 1, 2, 3, 4, 5$) – rys. 2-4.

Uwaga: cienkimi poziomymi liniami zaznaczono rozwiązania analityczne.

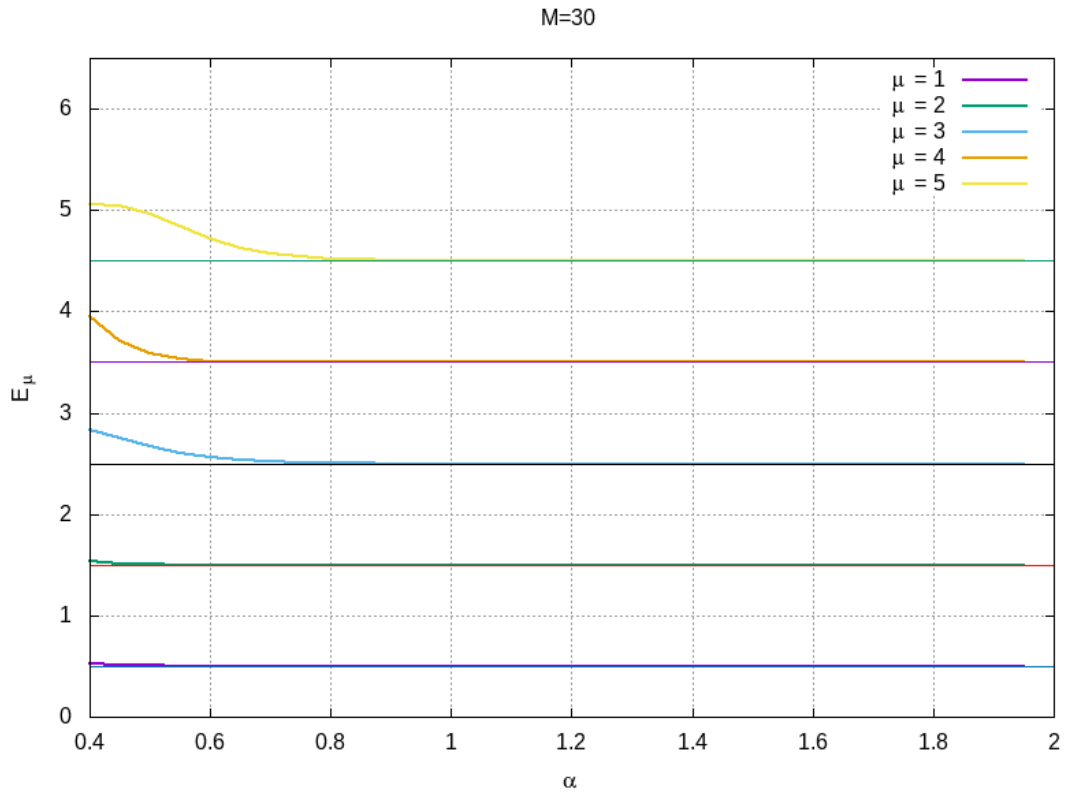
*Źródło: https://chem.libretexts.org/Courses/Pacific_Union_College/Quantum_Chemistry/05%3A_The_Harmonic_Oscillator_and_the_Rigid_Rotor/5.06%3A_The_Harmonic_Oscillator_Wavefunctions_involving_Hermite_Polynomials#mjb-eqn-scale – wzór (5.6.15) (data dostępu: 3 listopada 2021)



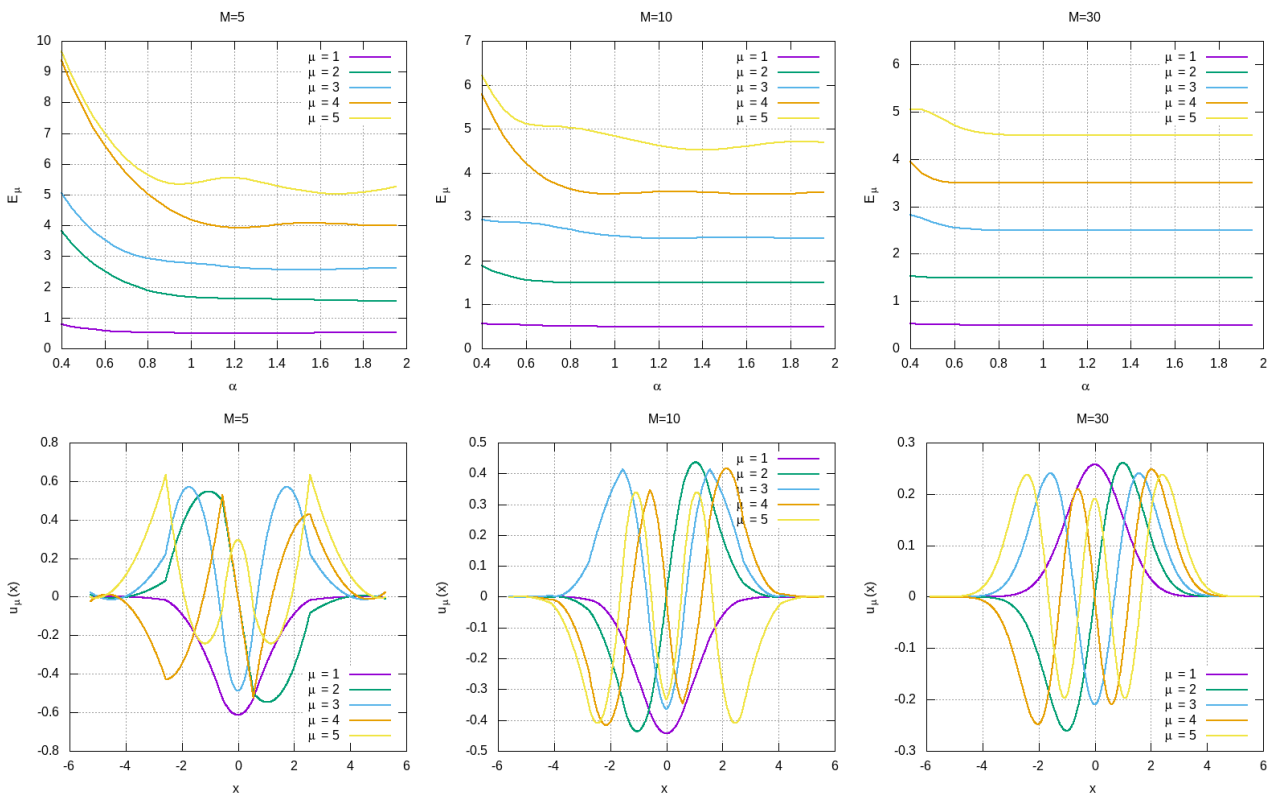
Rysunek 2: Wykres energii w zależności od rozłożenia węzłów (parametr α) dla 5 elementów.



Rysunek 3: Wykres energii w zależności od rozłożenia węzłów (parametr α) dla 10 elementów.

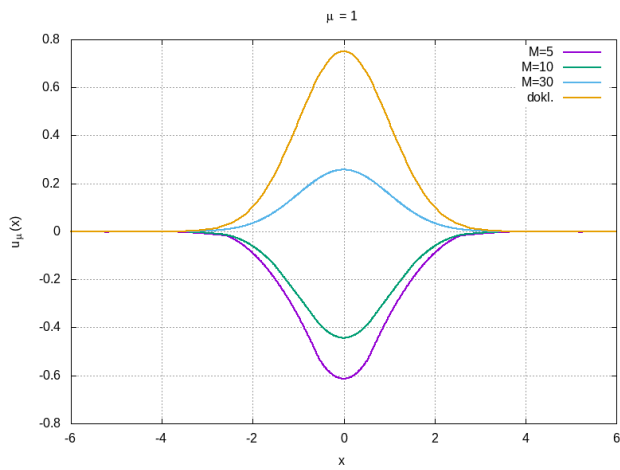


Rysunek 4: Wykres energii w zależności od rozłożenia węzłów (parametr α) dla 30 elementów.

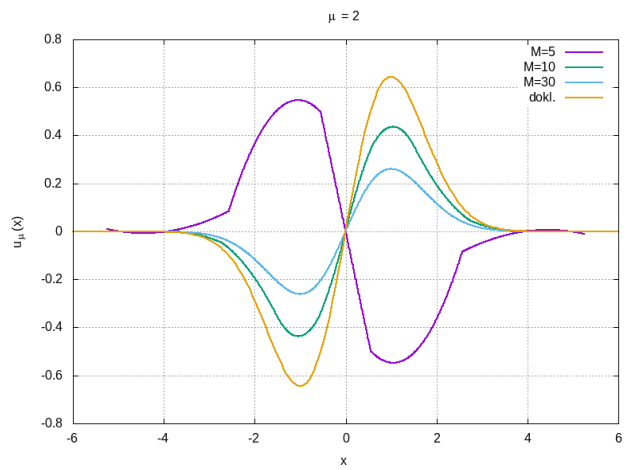


Rysunek 5: Wykres rozwiązań dla M elementów (zestawienie wszystkich otrzymanych wyników).

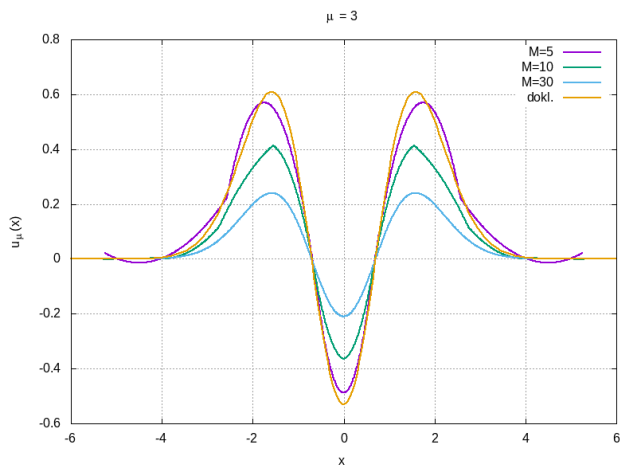
Dla $\alpha = 1.4$ wykonano także wykres **nieunormowanych** zależności $u_\mu(x)$ (również dla $\mu = 1, 2, 3, 4, 5$) i porównano z **unormowanym** rozwiązaniem dokładnym – rys. 6.



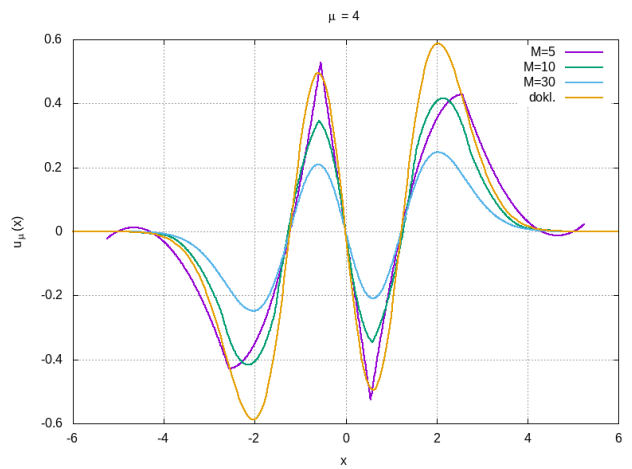
(a) $\mu = 1$



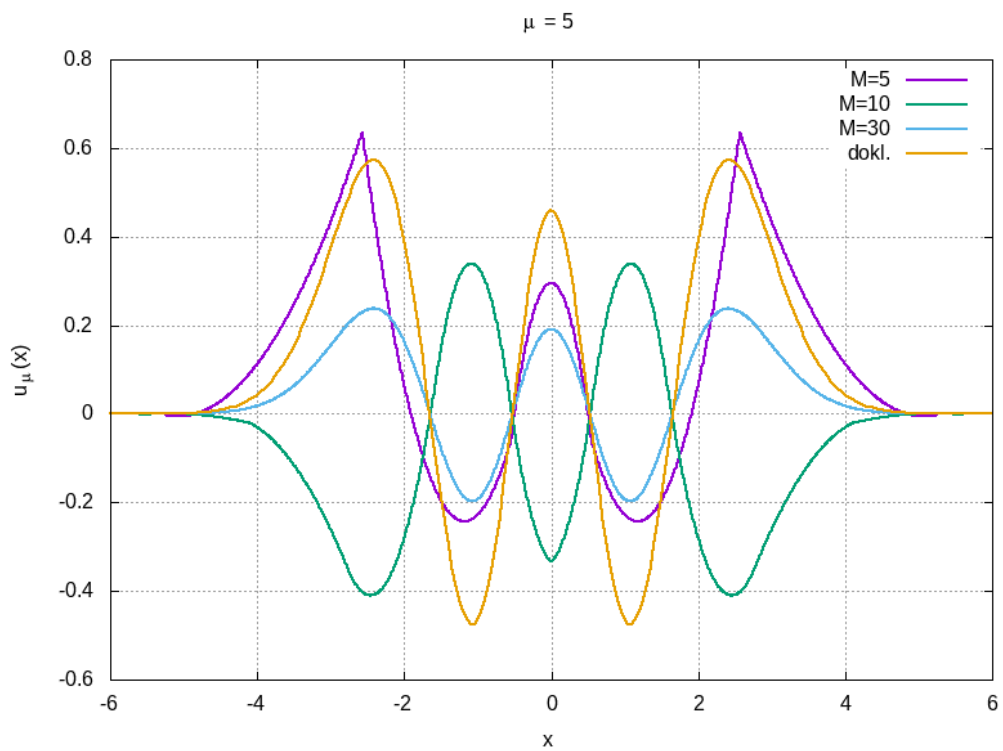
(b) $\mu = 2$



(c) $\mu = 3$



(d) $\mu = 4$

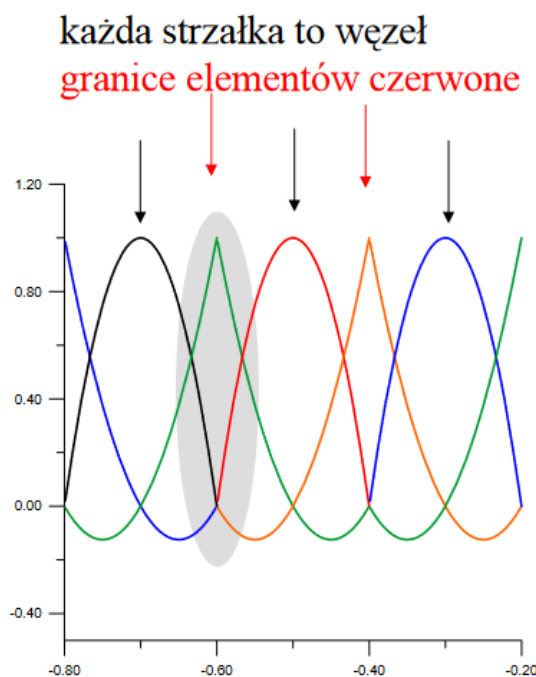


(e) $\mu = 5$

Rysunek 6: Wykresy nieunormowanych funkcji $u_\mu(x)$ i unormowane rozwiązanie analityczne.

3 Wnioski

- MES jest niezwykle przydatnym narzędziem w rozwiązywaniu problemów brzegowych i znajduje wiele zastosowań w różnych problemach inżynierskich.
- Jak można zauważyć z rysunków 2-4, MES oszacowuje wyniki z góry i zbliża się do wartości analitycznej. Tam, gdzie różnica między wartościami numeryczną a dokładną jest najmniejsza, rozłożenie węzłów jest najlepsze (około wartości $\alpha = 1.4$).
- Jednym z testów poprawności może być sprawdzenie zawartości macierzy S oraz O – powinny być one symetryczne z wartościami rzeczywistymi (dodatkowo: dodatnimi na diagonalu).
- Rozwiązania $u_\mu(x)$ są kanciaste, zwłaszcza przy małej liczbie elementów, ponieważ kwadratowa baza Lagrange’a gwarantuje tylko ciągłość funkcji na granicy elementów (rys. 7)*, podczas gdy pochodna jest nieciągła na granicy elementów.
- Rysunki 6a-6e pokazują, że wyniki są zbliżone do analitycznego, jednak aby dokładnie je porównać, należy je unormować. Widać jednak, że są poprawne z dokładnością co do znaku i stałej normalizacyjnej.
- Dla obu przypadków zwiększenie liczby elementów skutkuje poprawą otrzymanych wyników, jednak już dla $M = 10$ wydają się być akceptowalne.



Rysunek 7: Kwadratowe funkcje kształtu Lagrange’a.

4 Bibliografia

- [1] Krzysztof Banaś. *Wprowadzenie do MES*. 2020. URL: http://ww1.metal.agh.edu.pl/~banas/wprowadzenie_do_MES.pdf. (data dostępu: 31 października 2021).

*Źródło: <https://home.agh.edu.pl/~chwiej/imn/imn2/15/w3.pdf> (data dostępu: 6 listopada 2021)