Análisis numérico de elementos finitos

Dr. Stefan Frei
Department of Mathematics
University College London

Curso compacto, Parte II
Universidad Nacional Agraria La Molina
Agosto 2-8, 2017

Overview

Formulación variacional

Hallar $u \in V$ *tal que*

$$a(u, \phi) = (f, \phi)_\Omega \quad \forall \phi \in V$$

Condiciones:

- Coercividad: $a(u, u) \geq \alpha \|u\|_V^2$
- Continuidad: $a(u, \phi) \leq c\|u\|_V \|\phi\|_V$

Problema: El espacio V tiene dimensión **infinito**, pero la computadora es **finita**

Método de Galerkin:

- Sea $V_h \subset V$ un espacio finito (discretización **conforme**)
- Problema discreto: *Hallar* $u_h \in V_h$ *tal que*

$$a(u_h, \phi_h) = (f, \phi_h)_\Omega \quad \forall \phi_h \in V_h$$

- Existencia y unicidad por el teorema de Lax-Milgram

Formulación variacional

Hallar $u \in V$ *tal que*

$$a(u,\phi) = (f,\phi)_\Omega \quad \forall \phi \in V$$

Condiciones:

- Coercividad: $a(u,u) \geq \alpha \|u\|_V^2$
- Continuidad: $a(u,\phi) \leq c\|u\|_V \|\phi\|_V$

Problema: El espacio V tiene dimensión **infinito**, pero la computadora es **finita**

Método de Galerkin:

- Sea $V_h \subset V$ un espacio finito (discretización **conforme**)
- Problema discreto: *Hallar* $u_h \in V_h$ *tal que*

$$a(u_h,\phi_h) = (f,\phi_h)_\Omega \quad \forall \phi_h \in V_h$$

- Existencia y unicidad por el teorema de Lax-Milgram

$V_h \subset V$: discretización **conforme**

Subtraer el problema discreto del problema continuo resulta en

Ortogonalidad de Galerkin

$$a(u - u_h, \phi_h) = 0 \quad \forall \phi \in V_h$$

Nota: Solo es valida para una discretización **conforme**

Propriedad de la mejor aproximación

Suponemos que $a(\cdot,\cdot)$ es simétrica: $a(u,v) = a(v,u)$
Entonces, $a(\cdot,\cdot)$ es un producto escalar y

$$\|u\|_a := a(u,u)^{1/2}$$

define una norma, llamado **norma de energía**.

La ortogonalidad implica la

Propriedad de la mejor aproximación

$$\|u-u_h\|_a = \min_{\phi_h\in V_h} \|u-\phi_h\|_a$$

Prueba: Para cada $\phi_h \in V_h$ tenemos

$$\|u-u_h\|_a^2 = a(u-u_h, u-u_h) = a(u-u_h,u-u_h) + \underbrace{a(u-u_h, u_h-\phi_h)}_{=0}$$

$$= a(u-u_h, u-\phi_h) \leq \|u-u_h\|_a \|u-\phi_h\|_a.$$

Entonces también para el mínimo

$$\|u-u_h\|_a \leq \min_{\phi_h\in V_h} \|u-\phi_h\|_a.$$

Propriedad de la mejor aproximación

Suponemos que $a(\cdot,\cdot)$ es simétrica: $a(u,v) = a(v,u)$
Entonces, $a(\cdot,\cdot)$ es un producto escalar y

$$\|u\|_a := a(u,u)^{1/2}$$

define una norma, llamado **norma de energía**.

La ortogonalidad implica la

Propriedad de la mejor aproximación

$$\|u - u_h\|_a = \min_{\phi_h \in V_h} \|u - \phi_h\|_a$$

Prueba: Para cada $\phi_h \in V_h$ tenemos

$$\begin{aligned} \|u-u_h\|_a^2 = a(u-u_h, u-u_h) &= a(u-u_h, u-u_h) + \underbrace{a(u-u_h, u_h-\phi_h)}_{=0} \\ &= a(u-u_h, u-\phi_h) \le \|u-u_h\|_a \|u-\phi_h\|_a. \end{aligned}$$

Entonces también para el mínimo

$$\|u - u_h\|_a \le \min_{\phi_h \in V_h} \|u - \phi_h\|_a.$$

Error en la norma de V

Estimación: Utilizando la coercividad y continuidad tenemos

$$\|u - u_h\|_V \leq \frac{1}{\sqrt{\alpha}}\|u - u_h\|_a \leq \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \min_{\phi_h \in V_h} \|u - \phi_h\|_a$$
$$\leq \frac{\sqrt{c}}{\sqrt{\alpha}} \min_{\phi_h \in V_h} \|u - \phi_h\|_V$$

El error de la discretización se reduce a **propiedades de aproximación** de espacios $V_h \subset V$!

Problema de Laplace:

$$\|u\|_a := \|\nabla u\|_\Omega$$

es una norma en el espacio $H_0^1(\Omega)$.

- Propriedad de la mejor aproximacíon:

$$\|\nabla(u-u_h)\|_\Omega = \min_{\phi_h \in V_h} \|\nabla(u-\phi_h)\|_\Omega$$

- Estimación en la norma de $H^1(\Omega)$:

$$\begin{aligned}\|u-u_h\|_{H^1(\Omega)} \le \sqrt{1+c_P^2}\|\nabla(u-u_h)\|_\Omega &\le \sqrt{1+c_P^2}\min_{\phi_h \in V_h} \|\nabla(u-\phi_h)\|_\Omega \\ &\le \sqrt{1+c_P^2}\min_{\phi_h \in V_h} \|u-\phi_h\|_{H^1(\Omega)}\end{aligned}$$

Overview

Métodos espectrales de Galerkin:

(i) Polinomios globales

$$V_h := \left\{ p(x,y) = \sum_{i,j=0}^{m} c_{ij} x^i y^j \right\}, \quad h = 1/m$$

(ii)

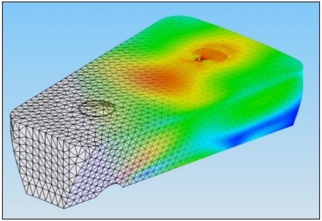
$$V_h := \left\{ t(x,y) = \sum_{i,j=0}^{m} c_{ij} \sin(i\pi x)\, \sin(j\pi y) \right\}, \quad h = 1/m$$

Problema: Implementación de condiciones de frontera en dominios complejos

$$u\big|_{\partial\Omega} = 0 \quad \forall u \in V_h$$

Triangulación $\mathcal{T}_h$ del dominio Ω:

$$\overline{\Omega} = \cup_{T\in\mathcal{T}_h} \overline{T}$$



Utilizamos un espacio polinomial en cada célula T

(iii) Elementos finitos

$$V_h := \left\{ v \in C(\Omega) \,\middle|\, v|_T \in P(T)\,\forall T \in \mathcal{T}_h,\ v = 0 \text{ en } \partial\Omega \right\}$$

Espacios polinomiales

- 2d: $P(T) = P_m(x,y) = \sum_{i+j\le m} c_{ij}x^i y^j, \quad Q_m(x,y) = \sum_{i,j\le m} c_{ij}x^i y^j$
- 3d: $P(T) = P_m(x,y,z) = \sum_{i+j+k\le m} c_{ijk}x^i y^j z^k,$
  $Q_m(x,y,z) = \sum_{i,j,k\le m} c_{ijk}x^i y^j z^k$

Espacios conformes

- Método conforme: $V_h \subset V$
- Para el problema de Laplace $V = H_0^1(\Omega)$
- Ecuación de la placa: $V = H_0^2(\Omega)$

Lema (Regularidad)

Sea $v : \Omega \to \mathbb{R}$ con $v_{|T} \in C^\infty(T)$ para cada célula T de una triangulación con $\overline{\Omega} = \cup_{T \in \mathcal{T}_h} \overline{T}$. Para $k \geq 1$, tenemos

$$v \in C^k(\Omega) \Leftrightarrow v \in H^{k+1}(\Omega).$$

- Para el problema de Laplace: Espacio conforme

$$V_h := \left\{ v \in C(\Omega) \,\middle|\, v|_T \in P(T) \forall T \in \mathcal{T}_h,\ v = 0 \text{ en } \partial\Omega \right\}$$

- Para la ecuación de la place: Espacio conforme

$$V_h := \left\{ v \in C^1(\Omega) \,\middle|\, v|_T \in P(T) \forall T \in \mathcal{T}_h,\ v = \partial_n v = 0 \text{ en } \partial\Omega \right\}$$

Espacios conformes

- Método conforme: $V_h \subset V$
- Para el problema de Laplace $V = H_0^1(\Omega)$
- Ecuación de la placa: $V = H_0^2(\Omega)$

Lema (Regularidad)

Sea $v : \Omega \to \mathbb{R}$ con $v_{|T} \in C^\infty(T)$ para cada célula T de una triangulación con $\overline{\Omega} = \cup_{T \in \mathcal{T}_h} \overline{T}$. Para $k \geq 1$, tenemos

$$v \in C^k(\Omega) \Leftrightarrow v \in H^{k+1}(\Omega).$$

- Para el problema de Laplace: Espacio conforme

$$V_h := \left\{ v \in C(\Omega) \,\middle|\, v|_T \in P(T) \forall T \in \mathcal{T}_h,\ v = 0 \text{ en } \partial\Omega \right\}$$

- Para la ecuación de la place: Espacio conforme

$$V_h := \left\{ v \in C^1(\Omega) \,\middle|\, v|_T \in P(T) \forall T \in \mathcal{T}_h,\ v = \partial_n v = 0 \text{ en } \partial\Omega \right\}$$

Ejemplo: Elementos finitos P_1

- Triangulación del dominio $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$ con triángulos:

$$\mathcal{T}_h = \{ T_1, T_2, \dots \}$$

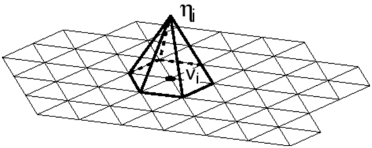
- Polinomios lineales

$$P_1 := \{p(x,y) = c_0 + c_1 x + c_2 y\}$$

- Espacio finito

$$V_h := \left\{ v_h \in C(\overline{\Omega}) : v_h|_T \in P_1 \, \forall T \in \mathcal{T}_h, v = 0 \text{ en } \partial\Omega \right\}$$

- Base



Sistema lineal

Hallar $u_h \in V_h$ tal que

$$a(u_h, \phi_h) = (f, \phi_h)_\Omega \quad \forall \phi_h \in V_h$$

Sea $\{\phi_i, i = 1...N\}$ una base de V_h y $u_h = \sum_{j=1}^N u_j \phi_j$ con valores $u_j \in \mathbb{R}$.

El sistema se escribe equivalentemente

$$\sum_{j=1}^{N} u_j a(\phi_j, \phi_i) = (f, \phi_i)_\Omega \quad i = 1...N$$

Definiendo una matrix $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ y un vector $b \in \mathbb{R}^N$ con elementos

$$a_{ij} = a(\phi_j, \phi_i),$$
$$b_i = (f, \phi)$$

obtenemos el sistema lineal

$$Au = f$$

Hallar $u_h \in V_h$ tal que

$$a(u_h, \phi_h) = (f, \phi_h)_\Omega \quad \forall \phi_h \in V_h$$

Sea $\{\phi_i, i = 1...N\}$ una base de V_h y $u_h = \sum_{j=1}^N u_j \phi_j$ con valores $u_j \in \mathbb{R}$.

El sistema se escribe equivalentemente

$$\sum_{j=1}^{N} u_j a(\phi_j, \phi_i) = (f, \phi_i)_\Omega \quad i = 1...N$$

Definiendo una matrix $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$ y un vector $b \in \mathbb{R}^N$ con elementos

$$a_{ij} = a(\phi_j, \phi_i),$$
$$b_i = (f, \phi)$$

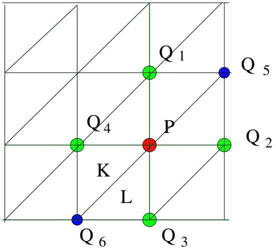
obtenemos el sistema lineal

$$Au = f$$

Calculamos la matríz A para el problema de Poisson

$$a_{ij} = a(\phi_j, \phi_i) = (\nabla\phi_j, \nabla\phi_i)_\Omega$$

con elementos P_1 en una triangulación uniforme



Matríz

Obtenemos

$$a_{ij} = \begin{cases} 4 & \text{si } i = j \\ -1 & \text{si } i = j \pm 1 \text{ o } i = j \pm m \\ 0 & \text{else.} \end{cases}$$

Como matríz

$$\begin{pmatrix} 4 & -1 & & \dots & -1 & & & \\ -1 & 4 & -1 & & & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \ddots & \\ -1 & & -1 & 4 & -1 & & & -1 \\ & \ddots & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & & & & & \\ & & & & & -1 & 4 & -1 \\ & & & -1 & & & -1 & 4 \end{pmatrix}$$

- La matríz es dispersa por la definición de la base
- Muy importante para memoría y eficiencía de algoritmos para solucionar el sistema

Overview

En el caso de triángulos arbitrarios la calculación no es tan facil.

Utilizamos una **transformación** $\xi_T : \hat{T} \to T$ desde el triángulo de referencia $\hat{T}$ para calcular los integrales allí

$$\xi_T(s,t) = x^0 + s(x^1 - x^0) + t(x^2 - x^0)$$

Su derivada está dado por

$$F = \nabla \xi_T = \left(x^1 - x^0, \quad x^2 - x^0\right)$$

Definimos las funciones

$$\hat{\phi}(s,t) := \phi(\xi_T(s,t))$$

Transformación a la célula de referenica resulta en

$$\int_T \nabla\phi_i \cdot \nabla\phi_j \, dx = \int_{\hat{T}} |\det(F)| \left(F^{-T}\hat{\nabla}\hat{\phi}_i\right)\left(F^{-T}\hat{\nabla}\hat{\phi}_j\right) d(s,t)$$

Triangulación general

En el caso de triángulos arbitrarios la calculación no es tan facil.

Utilizamos una **transformación** $\xi_T : \hat{T} \to T$ desde el triángulo de referencia $\hat{T}$ para calcular los integrales allí

$$\xi_T(s,t) = x^0 + s(x^1 - x^0) + t(x^2 - x^0)$$

Su derivada está dado por

$$F = \nabla \xi_T = \left(x^1 - x^0, \quad x^2 - x^0 \right)$$

Definimos las funciones

$$\hat{\phi}(s,t) := \phi(\xi_T(s,t))$$

Transformación a la célula de referenica resulta en

$$\int_T \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j \, dx = \int_{\hat{T}} |\det(F)| \left(F^{-T} \hat{\nabla} \hat{\phi}_i \right) \left(F^{-T} \hat{\nabla} \hat{\phi}_j \right) \, d(s,t)$$

Solucionar el sistema lineal

Considera una discretización con elementos P_1 con $N = 10^6$ nodos en 2d

- Memória:
  - Matríz densa: $N^2 = 10^{12}$ elementos ($\approx 8TB$, 1 double $\approx 8B$)
  - Matríz dispersa: $cN = c10^6$ elementos, aquí $c = 5$ ($\approx 40MB$, 1 double $\approx 8B$)

- Solución directo con eliminación de Gauss
  - Matríz densa: $\mathcal{O}(N^3) = \mathcal{O}(10^{18})$ operaciones aritméticas
  - Matríz dispersa: $\mathcal{O}(m^2 N) = \mathcal{O}(N^2) = \mathcal{O}(10^{12})$ operaciones aritméticas

- Solución iterativo:
  - Métodos de Jacobi, Gauss-Seidel: convergencia muy lenta para problemas de este típo
  - Método del gradiente conjugado, Método multi-malla
  - En 3 dimensiones normalmente $\gg 10^6$ nodos

Condiciones de Dirichlet

Posibilidad 1: Aumentar el sistema con condiciones adicionales

$$U \in \mathbb{R}^{N+M}: \qquad \widetilde{A}U = \widetilde{F}$$

donde

$$\widetilde{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ 0 & I \end{pmatrix}, \quad \widetilde{F} = \begin{pmatrix} F_1 \\ u_0 \end{pmatrix}$$

- Desconocidos son los $(N+M)$ puntos (interiores+exteriores)
- Matrix pierde la simetría

Posibilidad 2: Eliminación de las desconocidas en la frontera y añadir sus contribuciones al lado derecho

$$V \in \mathbb{R}^{N}: \qquad AV = F_{u_0}$$

- Desconocidos son los (N) puntos interiores.
- Matríz simétrica (si $a(\cdot,\cdot)$ es simétrica).

Conclusión

- Método de Galerkin: Hallar $u_h \in V_h \subset V$ tal que

$$a(u_h, \phi_h) = (f, \phi_h) \quad \forall \phi_h \in V_h$$

- Ortogonalidad de Galerkin

$$a(u - u_h, \phi_h) = 0 \quad \forall \phi_h \in V_h$$

- Propriedad de la mejor aproximación

$$\|u - u_h\|_a = \min_{\phi_h \in V_h} \|u - \phi_h\|_a, \quad \|u - u_h\|_V \leq \frac{\sqrt{c}}{\sqrt{\alpha}} \min_{\phi_h \in V_h} \|u - \phi_h\|_V$$

- Lo que falta:
  - Estimación de las propiedades de aproximación de los espacios $V_h \subset V$ dependiendo del tamaño de las celulas h

$$\min_{\phi_h \in V_h} \|u - \phi_h\|_V \leq Ch^? \|u\|_?$$

  - Estimación del error en diferentes normas (norma de $L^2(\Omega)$)

Conclusión II

- Elementos finitos basados en espacios polinomiales en elementos
- Sistema lineal con matrizes dispersas
- Lo que falta: Construcción de elementos/espacios finitos y ejemplos