D. Hemzal, F. Münz
hemzal@physics.muni.cz

## Metoda konečných prvků (Finite Elements Method)

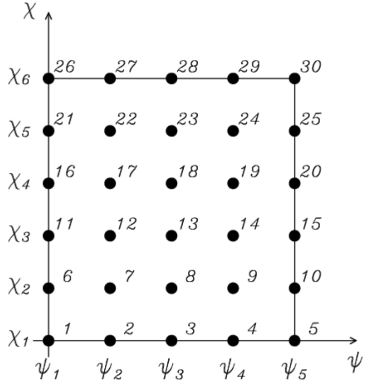
metoda konečných diferencí:

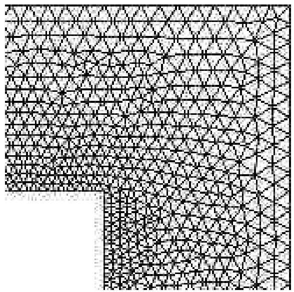
- průběh funkce je přesný
- vyjádření derivace je přibližné

metoda konečných prvků:

- průběh funkce je přibližný
- vyjádření derivace je přesné

výhody MKP: dobře popisuje složité oblasti
nevýhody MKP: těžko se získávají testovací 'analytická' řešení



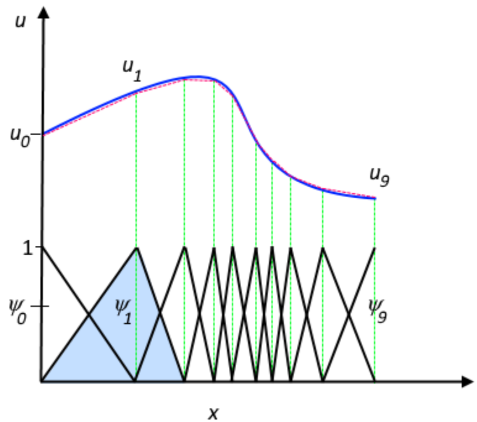
Zkoumaná oblast $\Omega$ je rozdělena na *elementy* $T^j$; v rámci každého z elementů se fyzikální parametry úlohy zpravidla předpokládají konstantní (na (společné) hranici dvou elementů tedy často mají skok).

Hledaná veličina $\psi(x)$, se diskretizuje jako $\psi[i]$ v uzlech v místech vrcholů elementů $T^j$. Uzly, které jsou prvky hranice $\partial\Omega$ nazýváme *hraniční*, ostatní uzly označujeme jako *vnitřní*.

D. Hemzal, F. Münz
hemzal@physics.muni.cz

Aproximace se provádí s pomocí *tvarových funkcí* $N^T[i]$ (lineárních, kvadratických … obecně řádu $k$) vztahujících uzel $i$ s přilehlými elementy $T$

> všeobecně platí, že se snažíme používat nejnižší řád aproximace, který ještě umožní najít netriviální řešení zvolené diferenciální rovnice; například pro rovnice druhého řádu stačí $k = 1$.
>
> lepší aproximace dosáhneme překročením nejnižšího řádu, v praxi často znamená možnost hrubšího dělení $\Omega$; jednotlivé elementy vš získávají větší počet parametrů a tak výpočetní úspora nemusí b velká.
>
> řádům $k \geq 3$ se vyhýbáme kvůli jejich tendenci oscilovat.

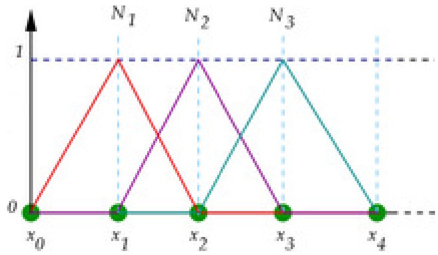



a následně vytvořených *aproximačních funkcí* $N[i]$ jako sjednocení všech $N^T[i]$ zkonstruovaných z tvarových funkcí, které zasahují do elementů $T$ obsahujících uzel $i$.

> zjevně tedy $N[i]$ a $N[j]$ mají nenulovou společnou podporu pouze pokud uzly $i$ a $j$ náleží stejnému elementu.

## Metoda konečných prvků v 1D

V případě 1D úlohy vznikají elementy $T$ prostým (byť nehomogenním) dělením intervalu $\Omega \in \mathrm{R}$ na subintervaly.




U všech typů elementů je třeba dbát, aby byly nedegenerované, tj. aby $\int_T \mathrm{d}\Omega \neq 0$, v 1D se podmínka redukuje na vyloučení subintervalů nulové délky.

Lineární tvarové funkce $N^-[i]$, resp. $N^+[i]$ spojují uzel $i$ s nejbližším sousedem vlevo a vpravo a mají formu úseček nabývajících hodnoty 1 v uzlu $i$ a hodnoty 0 v uzlu $i-1$, resp. $i+1$:

$$N^-[i] : y = \frac{x - x[i-1]}{x[i] - x[i-1]} \qquad x \in \langle x[i-1], x[i] \rangle$$

$$N^+[i] : y = \frac{x - x[i+1]}{x[i] - x[i+1]} \qquad x \in \langle x[i], x[i+1] \rangle$$

Aproximační funkce $N[i]$ je potom sjednocením $N[i] = N^-[i] \bigcup N^+[i]$.

U vyšších řádů tvarových funkcí se pro každý element přidávají vnitřní parametry, ovlivňující chování složitějších křivek na každém z intervalů (počet přidaných parametrů je dán balancováním stupňů volnosti).

D. Hemzal, F. Münz
hemzal@physics.muni.cz

Jádro metody vzniká spojením dvou fundamentálních kroků:

1) uvědoměním, že hledanou funkci $\Psi$ můžeme (ve spojité oblasti) vyjádřit jako

$$\Psi(x) = \sum_i \Psi[i] N[i]$$

pouze s využitím hodnot $\Psi[i]$ v diskretizovaných uzlech.

zároveň, díky volbě aproximačních funkcí nezasahujících za nejbližších $k$ sousedů, se na příspěvku v daném intevalu $\langle x[i], x[i+1] \rangle$ podílí jen $k$ tvarových funkcí (resp. $k$ jejich aproximačních větví)

přitom $\Psi[i]$ jsou z hlediska diferenciálního operátoru konstantami.

Skutečně, pro $k = 1$ mezi dvěma body platí

$$\Psi(x) = \frac{\Psi[i] - \Psi[i+1]}{x[i+1] - x[i]} x + \frac{\Psi[i]x[i+1] - \Psi[i+1]x[i]}{x[i+1] - x[i]} \qquad x \in \langle x[i], x[i+1] \rangle$$

Tímto způsobem je do formulace vnesena nespojitost (v prvních derivacích pro $k = 1$, atd.), ale metoda jako celek je na to připravena druhým krokem,

2) reformulovaním tzv. *slabé variační úlohy* pro řešenou soustavu rovnic

D. Hemzal, F. Münz
hemzal@physics.muni.cz

## Slabá formulace variační úlohy

Budeme se zabývat řešením Cauchyova problému pro lineární diferenciální operátor $L$ (obsahující derivace) $k$-tého řádu. Uvažujme tedy oblast $\Omega$ s hranicí $\partial\Omega$ a na ní rovnici

$$Lu = 0,$$

včetně příslušných okrajových podmínek $f(u, \nabla u, \dots)|_{\partial\Omega}$.

Aplikovat metodu konečných prvků jako $L\bar{u} = 0$ prostřednictvím $\bar{u} = \sum_i u[i]N[i]$ formálně nelze kvůli nespojitosti tvarových funkcí. Mohli bychom ovšem uvažovat slabší podmínku

$$\int_\Omega L(\bar{u})\mathrm{d}\,\Omega = 0.$$

Jelikož se jedná o integraci v Riemannově smyslu, jsou povoleny nespojitosti na množině míry nula. Řešení původní rovnice splní i slabší intergrální podmínku, opačně to ale neplatí.

Z důvodu aproximace MKP slabší řešení navíc původní formulaci vyhovět ani nemůže a musíme obecně očekávat

$$R \equiv L(\bar{u}) \neq 0.$$

D. Hemzal, F. Münz
hemzal@physics.muni.cz

Máme pochopitelně zájem o co nejlepší splnění výchozí rovnice, a v tomto ohledu exituje několik postupů, které je možné aplikovat:

**metoda nejmenších čtverců**. Požadujeme

$$\int_\Omega R^2 \mathrm{d}\,\Omega \to \min,$$

a aplikací standardního aparátu metody nejmenších čtverců dostaneme

$$j: \qquad 2\int_\Omega R \frac{\partial R}{\partial \bar{u}[j]} \mathrm{d}\,\Omega = 0.$$

**metoda vážených reziduí**. Reziduum se minimalizuje vzhledem ke vhodným váhovým funkcím podmínkami

$$j: \qquad \int_\Omega w_j R \mathrm{d}\,\Omega = 0$$

metoda nejmenších čtverců: $w_j = \dfrac{\partial R}{\partial \bar{u}[j]}$

metoda kolokační: $w_j = \delta(|\mathbf{x} - \mathbf{x}[j]|)$ – fixujeme přesné splnění rovnice v uzlových bodech

metoda Galerkinova: $w_j = N[j]$ – nejlepší aproximace na (pod)prostoru span$(N[j])$

D. Hemzal, F. Münz
hemzal@physics.muni.cz

## MKP – příklad sestavení v 1D, Poissonova rovnice

Uvažujme Poissonovu rovnici

$$L(u) \equiv \Delta u - 4\pi\rho = 0.$$

Je-li $\bar{u} = \sum_i u[i]N[i]$, dostáváme pro Galerkinovy podmínky

$$j: \qquad \int_\Omega N[j]L\left(\sum_i u[i]N[i]\right)\mathrm{d}\,\Omega = \sum_i u[i]\int_\Omega N[j]\nabla(\nabla N[i])\mathrm{d}\,\Omega - 4\pi\int_\Omega N[j]\rho\mathrm{d}\,\Omega = 0,$$

kde ovšem můžeme psát $N[j]\nabla(\nabla N[i]) = \nabla(N[j]\nabla N[i]) - \nabla N[j]\nabla N[i]$ a na první člen použít Gaussovu větu. Dostaneme

$$j: \qquad \sum_i u[i]\int_{\partial\Omega} N[j]\nabla N[i]\mathrm{d}\,W - \sum_i u[i]\int_\Omega \nabla N[j]\nabla N[i]\mathrm{d}\,\Omega = 4\pi\int_\Omega N[j]\rho\mathrm{d}\,\Omega,$$

což je algebraická soustava $\mathbf{Ku} = \mathbf{b}$, kde příspěvek objemových členů je

$$K_{ij} = \int_\Omega \nabla N[j]\nabla N[i]\mathrm{d}\,\Omega \qquad b_j = 4\pi\int_\Omega N[j]\rho\mathrm{d}\,\Omega.$$

Omezíme-li se Dirichletovými a homogenními Neumannovými podmínkami, nepřináší okrajový integrál žádný vklad. Přesněji, triviální Neumannova podmínka nevyžaduje žádnou modifikaci rovnic, podmínka Dirichletova svými hodnotami vstoupí do integrálu u okrajových elementů, ale jelikož je hodnota na hranici zadána, všechny takové členy se převádí jako konstanta na pravou stranu (v samotných Dirichletovsky zadaných uzlech rovnice samozřejmě nesestavujeme vůbec).

D. Hemzal, F. Münz
hemzal@physics.muni.cz

V uvedeném zápisu by sestavení rovnic procházelo ve velké smyčce všechny uzly, v každém cyklu by se dohledávaly všechny elementy, které uzel obsahují. To není praktické, zejména ve vyšších dimenzích výstup z generátoru sítě obsahuje primárně seznam elementů a jeho neustálé prohledávání pro aktuální uzel by bylo extrémně zdlouhavé. Problém má jednoduché řešení tkvící v samotném zavedení MKP, kdy (pro $k = 1$) tvarové funkce nezasahují mimo jeden element.

Například diagonální prvek $K_{jj} = \int_\Omega \nabla N[j] \nabla N[j] \mathrm{d}\,\Omega$ má dva příspěvky,

$$K_{jj} = \int_{x[j-1]}^{x[j]} (\nabla N^-[j])^2 \mathrm{d}\,x + \int_{x[j]}^{x[j+1]} (\nabla N^+[j])^2 \mathrm{d}\,x,$$

které lze pohodlně vygenerovat při procházení jednotlivých elementů,

$$K_{jj} = \frac{1}{x[j] - x[j-1]} + \frac{1}{x[j+1] - x[j]}.$$

Podobně (pro $i \neq j$) bude $K_{ij} = \int_\Omega \nabla N[i] \nabla N[j] \mathrm{d}\,\Omega$ nenulové pouze pro $i = j \pm 1$,

$$K_{j+1\,j} = \int_{x[j]}^{x[j+1]} \nabla N^+[j] \nabla N^-[j+1] \mathrm{d}\,x = -\frac{1}{x[j+1] - x[j]}, \quad K_{j-1\,j} = \int_{x[j-1]}^{x[j]} \nabla N^+[j-1] \nabla N^-[j] \mathrm{d}\,x = -\frac{1}{x[j] - x[j-1]}.$$

Základní kontrolou našeho sestavení je symetrie matice $K$, v obecnějším případě bývá matice soustavy před zavedením okrajových podmínek hermiteovská.

D. Hemzal, F. Münz
hemzal@physics.muni.cz

Komponenty vektoru pravé strany $b_j = 4\pi \int_\Omega N[j]\rho \mathrm{d}\Omega$ se rovněž rozpadají na jednoduché příspěvky

$$b_j = 4\pi \int_{x[j-1]}^{x[j]} N^-[j]\rho \mathrm{d}x + 4\pi \int_{x[j]}^{x[j+1]} N^+[j]\rho \mathrm{d}x,$$

přičemž způsobů, jak konkrétně zapracovat hodnoty $\rho$ je více. Můžeme například považovat $\rho$ za konstantní na jednotlivých elementech, potom

$$b_j = 4\pi\rho[\alpha] \int_{x[j-1]}^{x[j]} N^-[j]\mathrm{d}x + 4\pi\rho[\beta] \int_{x[j]}^{x[j+1]} N^+[j]\mathrm{d}x = 4\pi \left[\rho[\alpha]\frac{x[j]-x[j-1]}{2} + \rho[\beta]\frac{x[j+1]-x[j]}{2}\right].$$

Nebo můžeme, více v souladu s myšlenkou MKP, uvažovat $\rho = \sum_i \rho[i]N[i]$, odkud

$$b_j = 4\pi \sum_i \rho[i] \int_{x[j-1]}^{x[j]} N^-[j]N[i]\mathrm{d}x + 4\pi \sum_i \rho[i] \int_{x[j]}^{x[j+1]} N^+[j]N[i]\mathrm{d}x.$$

Nyní opěr s výhodou využijeme nepřekrývající se aproximační funkce, např.

$$\sum_i \rho[i] \int_{x[j-1]}^{x[j]} N^-[j]N[i]\mathrm{d}x = \rho[j] \int_{x[j-1]}^{x[j]} (N^-[j])^2\mathrm{d}x + \rho[j-1] \int_{x[j-1]}^{x[j]} N^-[j]N^+[j-1]\mathrm{d}x =$$

$$= \rho[j]\frac{x[j]-x[j-1]}{3} + \rho[j-1]\frac{x[j]-x[j-1]}{6}$$

a

$$\sum_i \rho[i] \int_{x[j]}^{x[j+1]} N^+[j] N[i] \mathrm{d}x = \rho[j] \int_{x[j]}^{x[j+1]} (N^+[j])^2 \mathrm{d}x + \rho[j+1] \int_{x[j]}^{x[j+1]} N^+[j] N^-[j+1] \mathrm{d}x =$$

$$= \rho[j] \frac{x[j+1]-x[j]}{3} + \rho[j+1] \frac{x[j+1]-x[j]}{6},$$

takže celkem

$$\frac{b[j]}{4\pi} = \rho[j] \frac{x[j+1]-x[j-1]}{3} + \rho[j-1] \frac{x[j]-x[j-1]}{6} + \rho[j+1] \frac{x[j+1]-x[j]}{6}.$$

Vypišme si všechny získané koeficienty ve zjednodušením případě ekvidistatního kroku $\varepsilon$:

$$K_{j-1\,j} = -\frac{1}{\varepsilon} \quad K_{j\,j} = \frac{2}{\varepsilon} \quad K_{j+1\,j} = -\frac{1}{\varepsilon}$$

$$\frac{b[j]}{4\pi} = \varepsilon \left[ \frac{\rho[j-1] + 4\rho[j] + \rho[j+1]}{6} \right].$$

S $\varepsilon$ z pravé strany rozeznáváme v sestavené matici diskretizovaný Laplasián, na pravé straně zbývá váhovaný průměr hodnot v okolí aktuálního uzlu, přičemž většina váhy spočívá na hodnotě v aktuálním uzlu. Důvod této změny (ve FD by vystupoval pouze aktuální uzel) tkví v Galerkinově optimalizaci - rovnici se snažíme řešit nejen v uzlových bodech, ale i v oblasti mezi nimi.