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

Slabá formulace diferenciální úlohy

Předpokládejme diferenciální rovnici v silné formě $L(u) = 0$. Ve slabé formě ji lze psát

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

Platnost rovnice v silné formě implikuje platnost formy slabé, opačně tomu rozhodně není. Aby slabá forma implikovala silnou, muselo by platit

$$\int_\Omega vL(u)\,\mathrm{d}\Omega = 0,$$

pro všechny (vhodně integrovatelné) funkce v. Matematický smysl slabé formulace spočívá v převedení hledané funkce u mimo diferenciální operátor $L(u)$, takže podmínky na diferencovatelnost hledaného řešení jsou oslabeny a převedeny na podmínky diferencovatelnosti pomocných funkcí v. Formálně se převodu dá dosáhnout (opakovanou) aplikací per partes až k

$$\int_\Omega uL^\dagger(v)\,\mathrm{d}\Omega = 0 \qquad\qquad (+\text{ okrajové členy}),$$

kde $L^\dagger$ je oprátor sdružený s L. V praxi můžeme vyvádění u zastavit, kde potřebujeme: například pro operátory Laplaceova typu, které jsou druhého řádu, zpravidla ponecháme požadavek na spojitost hledané funkce i funkcí aproximačních a per partes aplikujeme pouze jednou:

$$\int_\Omega v\Delta\,\mathrm{d}\Omega = \int_{\partial\Omega} v\boldsymbol{\nabla}u\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S} - \int_\Omega \boldsymbol{\nabla}u\cdot\boldsymbol{\nabla}v\,\mathrm{d}\Omega.$$

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

Vraťme se zpět k zavedení slabé formy. Jedná se o soubor nekonečně mnoha podmínek, ale můžeme se omezit na vybranou třídu funkcí v, v rámci které chceme slabé řešení optimalizovat. Pro potřeby MKP samozřejmě volíme

$$v = \sum_i v[i] N[i],$$

čili snažíme se slabé řešení optimalizovat na množině funkcí přípustných jako řešení problému MKP; dostáváme

$$\sum_i v[i] \int N[i] L(u)\, \mathrm{d}\Omega = 0.$$

Mají-li $v[i]$ být libovolná, dostáváme tadiční Galerkinovy podmínky

$$i: \qquad \int_\Omega N[i] L(u)\, \mathrm{d}\Omega = 0.$$

Prověřme ještě vliv jednoduchých okrajových podmínek: okrajový integrál můžeme napsat jako

$$\int_{\partial\Omega} v \boldsymbol{\nabla} u \cdot \boldsymbol{n}\, \mathrm{d}S,$$

takže pro triviální Neumannovu podmínku na hranici, $u_n|_{\partial\Omega} \equiv \boldsymbol{\nabla} u|_{\partial\Omega} \cdot \boldsymbol{n} = 0$, nedostáváme žádný příspěvek. Dirichletova podmínka také nepřináší žádný okrajový příspěvek, ale z jiného důvodu. Po dosazení ansatzu MKP do obou vyskytujících se funkcí máme

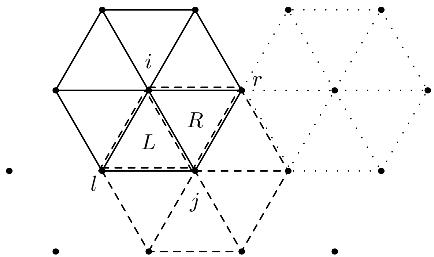
$$i: \qquad \sum_j \int_{\partial\Omega} N[i] \boldsymbol{\nabla} N[j] \cdot \boldsymbol{n}\, \mathrm{d}S.$$

U Dirichletovské hranice sice není derivace hledané funkce nijak omezena, ale sestavujeme pouze pro uzly i ležící uvnitř simulovaného objemu a hodnota jejich tvarových funkcí na hranici je nulová.

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

Metoda konečných prvků ve 2D

Věnujme se nejprve tvaru aproximačních funkcí $N[i]$.



Definice zůstává stejná: $N[i]$ se skládá z po částech lineárních oblastí (v našem případě částí rovin) tak, že je jednotková v uzlu i a nulová na všech stěnách elementů obsahujícího uzel i, které samy uzel i neobsahují.

Každá ze stěn $N[i]$, označovaná jako $N^T[i]$ je tedy tvořena částí roviny

$$ax + by + cz + d = 0,$$

jejíž koeficienty jsou v rámci $T\{i, j, k\}$ definovány z podmínek

$$N[i]|_{\mathbf{x}[i]} = 1 \qquad N[i]|_{\mathbf{x}[j]} = 0 \qquad N[i]|_{\mathbf{x}[k]} = 0.$$

(vzhledem k linearitě $N[i]$ to zaručuje i nulovost na spojnici j-k)

V praxi obvykle integrujeme v rovině xy, takže tvarové funkce volíme přímo jako $N^T[i] = ax + by + c$.

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

Soustava rovnic omezující $N^T[i]$ má tvar

$$ax[i] + bx[i] + c = 1$$

$$ax[j] + bx[j] + c = 0$$

$$ax[k] + bx[k] + c = 0,$$

řešení Kramerovým pravidlem dává

$$N^T[i] = \frac{1}{\Delta_T}[(y_j - y_k)x + (x_k - x_j)y + (x_j y_k - x_k y_j)],$$

kde $|\Delta_T| = 2S_T$ souvisí s plochou elementu T a platí

$$\Delta_T = (x_i y_j + x_j y_k + x_k y_i) - (x_i y_k + x_j y_i + x_k y_j).$$

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

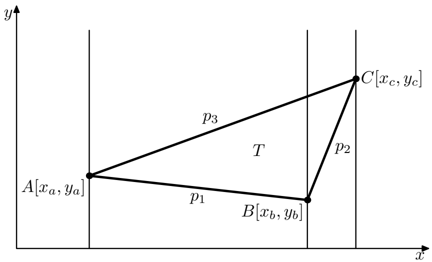
Momentové integrály ve 2D

Je vidět, že pro operátory Laplaceova typu (lineární, druhého řádu) každé dosazení do funkcionálu MKP povede na integrand ne vyšší než druhé mocniny v proměnných x, y, přičemž parametry integrálu budou známé hodnoty – souřadnice vrcholů elementů.

To ovšem také znamená, že celé sestavování rovnic se rozpadne na výpočet mnoha integrálů typu

$$I^T(a,b) = \iint_T x^a y^b \,\mathrm{d}S,$$

kde $a+b \leq 2$. Tyto integrály nazýváme *momentovými*. Zjevně, $I^T(0,0) = S_T$.



Nalezněme nyní momentové integrály $I^T(k,j)$ nad obecně položeným (trojúhelníkovým) segmentem T.

Integrály přes prvek mohou zjevně být rozepsány jako

$$I^T(k,j) = \int_{x_a}^{x_b}\int_{p_1}^{p_3} x^k y^j \,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}x + \int_{x_b}^{x_c}\int_{p_2}^{p_3} x^k y^j \,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}x.$$

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

Obecná přímka p zadaná v rovině xy body $[x_1, y_1]$ a $[x_2, y_2]$ může být zapsána ve tvaru

$$p: \qquad y = \frac{y_1 - y_2}{x_1 - x_2} x + \frac{x_1 y_2 - x_2 y_1}{x_1 - x_2},$$

což pro momentové integrály přináší

$$I^T(k,j) = \int\limits_{x_a}^{x_b} \int\limits_{\frac{y_a - y_b}{x_a - x_b} x + \frac{x_a y_b - x_b y_a}{x_a - x_b}}^{\frac{y_a - y_c}{x_a - x_c} x + \frac{x_a y_c - x_c y_a}{x_a - x_c}} x^k y^j \,\mathrm{d}y \,\mathrm{d}x + \int\limits_{x_b}^{x_c} \int\limits_{\frac{y_b - y_c}{x_b - x_c} x + \frac{x_b y_c - x_c y_b}{x_b - x_c}}^{\frac{y_a - y_c}{x_a - x_c} x + \frac{x_a y_c - x_c y_a}{x_a - x_c}} x^k y^j \,\mathrm{d}y \,\mathrm{d}x$$

Po provedení integrace můžeme všechny momenty až do druhého řádu psát

$$\begin{aligned}
I^T(0,0) &= S_T \\
I^T(1,0) &= \frac{1}{3}(x_a + x_b + x_c) S_T \qquad I^T(0,1) = \frac{1}{3}(y_a + y_b + y_c) S_T \\
I^T(2,0) &= \frac{1}{6}(x_a^2 + x_b^2 + x_c^2 + x_a x_b + x_b x_c + x_a x_c) S_T \\
I^T(0,2) &= \frac{1}{6}(y_a^2 + y_b^2 + y_c^2 + y_a y_b + y_b y_c + y_a y_c) S_T \\
I^T(1,1) &= \frac{1}{12}\big[2(x_a y_a + x_b y_b + x_c y_c) + x_a(y_b + y_c) + x_b(y_a + y_c) + x_c(y_a + y_b)\big] S_T
\end{aligned}$$

Všimněme si, že momentové integrály byly upraveny až na tvar, ve kterém jsou zcela symetrické – tímto způsobem je překonána speciálnost volby polohy bodů při odvození momentových integrálů (například singularity, které by se projevily při svislé hraně v posledním obrázku).

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

Okrajové příspěvky ve 2D FEM

Příspěvek okrajových podmínek Dirichletova a homogenního Neumannova typu v matici soustavy nevystupuje, v obecnějším případě jejich lineární kombinace jej lze nalézt explicitně. Předpokládejme smíšenou okrajovou podmínku ve tvaru $\alpha u + u_n = 0$, čili

$$\sum_j u[j]\,(\alpha N[j] + \boldsymbol{\nabla} N[j]\cdot \boldsymbol{n}) = 0.$$

Potom v rámci okrajového integrálu můžeme psát

$$K_{ij}: \qquad \sum_j u[j] \int_{\partial T} N^T[i] \boldsymbol{\nabla} N^T[j]\cdot \boldsymbol{n}\,\mathrm{d}l = -\alpha \sum_j u[j] \int_{\partial T} N^T[i] N^T[j]\,\mathrm{d}l.$$

Vyhodnoťme poslední integrál nad hranicí i-j elementu $T(i,j,k)$. Na zvolené hraně l elementu platí

$$N^T[i]\big|_l = \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \qquad N^T[j]\big|_l = \frac{x - x_i}{x_j - x_i}.$$

Parametrizaci hrany pak volíme jako $x = x_j + (x_i - x_j)\tau$, $y = y_j + (y_i - y_j)\tau$, takže celkem dostáváme

$$\int_{\partial T} N^T[i] N^T[j]\,\mathrm{d}l = -\int_0^1 \frac{(x - x_j)(x - x_i)}{(x_i - x_j)^2} L_{ij}\,\mathrm{d}\tau = -L_{ij} \int_0^1 \tau(\tau - 1)\,\mathrm{d}\tau = \frac{L_{ij}}{6},$$

kde $L_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2}$ představuje délku hranice v uvažovaném elementu. Obdobně dostaneme

$$\int_l N^T[i] N^T[i]\,\mathrm{d}l = L_{ij} \int_0^1 \tau^2\,\mathrm{d}\tau = \frac{L_{ij}}{3}.$$

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

Příklad – Helmholtzova rovnice

Uvažujme stacionární formu skalární homogenní vlnové rovnice

$$\Delta U - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = 0.$$

Stacionarita předpokládá časově ustálený stav, o kterém u vlnové rovnice víme, že je realizován harmonickým řešením $U(\boldsymbol{x}, t) = u(\boldsymbol{x}) \exp(\mathrm{i}\omega t)$. Dosazením tohoto ansatzu vskutku odstraníme z rovnice časovou závislost a dostáváme *Helmholtzovu* rovnici

$$\Delta u + \frac{\omega^2}{c^2} u = 0.$$

Protože je vlnová rovnice lineární, lze se na Helmholtzovu rovnici dívat také jako na rovnici pro jednu frekvenční kopmonentu časově proměnného pole, neboť obecně

$$U(\boldsymbol{x}, t) = \sum_{\omega} u_{\omega}(\boldsymbol{x}) \exp(\mathrm{i}\omega t)$$

Obecné časově proměnné pole pak můžeme získat tak, že provedeme větší množství stacionárních simulací pro různé frekvence a ty potom v prostoru složíme s váhami, které získáme jako komponenty Fourierova rozvoje budícího pulzu.

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

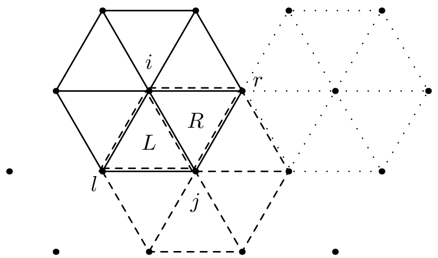
Sestavme nyní slabou formulaci úlohy s Helmholtzovou rovnicí:

$$\int_\Omega \left(\Delta u + \frac{\omega^2}{c^2} u \right) \mathrm{d}\Omega = 0.$$

Dosazením operátoru $L(u) \equiv \Delta u + (\omega^2/c^2)u$ do funkcionálu MKP, přičemž $u(\boldsymbol{x}) = \sum u[i]N[i]$, dostáváme

$$j: \qquad \sum_i u[i] \int_{\partial\Omega} N[j] \boldsymbol{\nabla} N[i] \, \mathrm{d}\boldsymbol{W} - \sum_i u[i] \int_\Omega \left[\boldsymbol{\nabla} N[i] \boldsymbol{\nabla} N[j] - \frac{\omega^2}{c^2} N[j] N[i] \right] \mathrm{d}\Omega = 0.$$

První integrál opět představuje příspěvek od okrajových podmínek a druhý od samotného operátoru Helmholtzovy rovnice.



K diagonální členům K_{ii} budou přispívat všechny elementy, obsahující uzel i.

K nediagonálním členům K_{ij} přispějí vždy pouze dva elementy, které oba uzly i, j obsahují.

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

Sestavení rovnic ve 2D

Pro diagonální integrál K_{ii} platí

$$K_{ii} = \sum_{T_k \in \mathrm{supp} N[i]} \int\limits_{T_k} \left(\boldsymbol{\nabla} N[i] \cdot \boldsymbol{\nabla} N[i] - \frac{\omega^2}{c^2} N[i] N[i] \right) \mathrm{d}S,$$

přičemž

$$\begin{aligned} &\int\limits_{T_k} \left(\boldsymbol{\nabla} N^{T_k}[i] \cdot \boldsymbol{\nabla} N^{T_k}[i] - \frac{\omega^2}{c^2} N^{T_k}[i] N^{T_k}[i] \right) \mathrm{d}S = \\ &= - \left(\frac{1}{-2S_k} \right)^2 \frac{\omega^2}{c_k^2} \Big\{ (y_l - y_r)^2 I(2,0) + (x_r - x_l)^2 I(0,2) + 2(y_l - y_r)(x_r - x_l) I(1,1) + \\ &\qquad + 2(y_l - y_r)(x_l y_r - x_r y_l) I(1,0) + 2(x_r - x_l)(x_l y_r - x_r y_l) I(0,1) + \\ &\qquad + \Big[(x_l y_r - x_r y_l)^2 - \frac{c_k^2}{\omega^2} [(y_l - y_r)^2 + (x_r - x_l)^2] \Big] I(0,0) \Big\}, \end{aligned}$$

kde uzly l, r jsou v tomto případě zbývající dva uzly vyhodnocovaného elementu, platí $T_k(i, l, r)$.

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

Obdobně, pro nediagonální členy platí

$$K_{ij} = \int\limits_{L_j} + \int\limits_{R_j} \left(\boldsymbol{\nabla} N_i^{()} \cdot \boldsymbol{\nabla} N_j^{()} - \frac{\omega^2}{c^2} N_i^{()} N_j^{()} \right) \mathrm{d}\Omega \equiv I_l + I_r.$$

Odtud,

$$\begin{aligned} I_v = -\left(\frac{1}{2S_V}\right)^2 \frac{\omega^2}{c_k^2} \Big\{ & (y_v - y_j)(y_i - y_v) I(2,0) + (x_j - x_v)(x_v - x_i) I(0,2) + \\ & + \big[(y_v - y_j)(x_v - x_i) + (y_i - y_v)(x_j - x_v)\big] I(1,1) + \\ & + \big[(y_v - y_j)(x_i y_v - x_v y_i) + (y_i - y_v)(x_v y_j - x_j y_v)\big] I(1,0) + \\ & + \big[(x_j - x_v)(x_i y_v - x_v y_i) + (x_v - x_i)(x_v y_j - x_j y_v)\big] I(0,1) + \\ & + \Big[(x_v y_j - x_j y_v)(x_i y_v - x_v y_i) - \frac{c_k^2}{\omega^2}[(y_v - y_j)(y_i - y_v) + (x_j - x_v)(x_v - x_i)]\Big] I(0,0) \Big\}, \end{aligned}$$

kde příspěvek pro levý a pravý trojúhelník získáme jako $I_l = I_{v\equiv l}$ a $I_r = I_{v\equiv r}$.

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

Sestavovací procedura ve 2D

pro každý element T :

pro každý **vnitřní** uzel i elementu T:

1) $K_{ii} += I_T$

2a) je-li uzel j vnitřní: $K_{ij} += I_{v=k}$ je-li uzel j vnější: $b_i += u[j]I_{v=k}$

2b) je-li uzel k vnitřní: $K_{ik} += I_{v=j}$ je-li uzel k vnější: $b_i += u[k]I_{v=j}$

další vnitřní uzel elementu T

další element.

Pořadí indexů v matici K je třeba nemíchat (index aktuálního uzlu je při přičítání neustále první). V kroku 2) je uzel v vždy ten, který nevystupuje v indexech matice K.

Indexy i, j, k (tam kde se jedná o vnitřní uzly) nejsou pořadová čísla odpovídajících uzlů, ale pořadová čísla těchto uzlů v seznamu vnitřních uzlů.

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

Helmholtzova rovnice - okrajové podmínky

Na závěr prozkoumejme možné okrajové podmínky pro Helmholtzovu rovnici. Dirichletova podmínka předepisuje amplitudu vybrané frekvenční komponenty v daném místě hranice. Homogenní Neumannova podmínka představuje plně odrazivou hranici. Poslední podmínka, kterou je vhodné připravit, je pak hranice volně vlnění propouštějící. Tuto podmínku lze však realizovat pouze přibližně, a to například takto: uvažujme rovinnou vlnu

$$u = u_0 \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{x}).$$

Má-li taková vlna volně projít hranicí, musí být její gradient

$$\boldsymbol{\nabla} u = u_o \mathrm{i}\boldsymbol{k} \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{x}) = \mathrm{i}\boldsymbol{k} u$$

rovnoběžný s normálou k této hranici. Přenásobíme-li obě strany rovnice normálou $\boldsymbol{n}$,

$$\boldsymbol{\nabla} u \cdot \boldsymbol{n} \equiv u_n = \mathrm{i}\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{n} u$$

vede požadavek rovnoběžnosti obou vyskytujících se vektorů na podmínku $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{n} = |\boldsymbol{k}||\boldsymbol{n}|$ a tedy

$$\partial\Omega : \qquad u_n = \frac{2\pi \mathrm{i}}{\lambda} u,$$

což je podmínka smíšeného typu. Protože tato podmínka zajišťuje, že vlnění bude procházet kolmo každou příslušnou částí okraje úlohy, je velmi důležité konstruovat tvar hranice pro numerickou simulaci v souladu s předpokládaným průběhem analytického řešení úlohy.

Jinou možností je k hranici, kterou má vlna simulovaný objem opouštět, přidat několik vrstev prostředí, ve kterém gradientně budeme zvyšovat útlum prostředí. Při vhodném nastavení se téměř žádná energie nevrátí zpět do simulovaného objemu a vlna efektivně prostředí volně opustí (nezávisle na směru letu vůči hranici).