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

FEM ve 3D a v obecné dimenzi

Začněme s konstrukcí tvarových funkcí

$$N^T[a] = \alpha x + \beta y + \gamma z + \delta$$

ve 3D. Výchozími elementy T ve 3D jsou jehlany, definované čtyřmi vrcholy, takže podobně jako v případě nižších dimenzí dostáváme soustavu

$$\begin{pmatrix} x_a & y_a & z_a & 1 \\ x_b & y_b & z_b & 1 \\ x_c & y_c & z_c & 1 \\ x_d & y_d & z_d & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \\ \delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Tento tvar není přímo vhodný pro zápis v obecné dimenzi v tom smyslu, že ji s přibývající dimenzí nelze přímočaře rozšiřovat o nové sloupce a řádky. Protože nás však bude zajímat především determinant této matice, můžeme si dovolit manipulovat s jejími řádky, například do tvaru

$$\Delta = \begin{pmatrix} x_a - x_b & y_a - y_b & z_a - z_b & 0 \\ x_b - x_c & y_b - y_c & z_b - z_c & 0 \\ x_c - x_d & y_c - y_d & z_c - z_d & 0 \\ x_d & y_d & z_d & 1 \end{pmatrix}.$$

Nyní je rozvojem podle posledního sloupce patrné, že

$$\Delta \sim \begin{pmatrix} x_a - x_b & y_a - y_b & z_a - z_b \\ x_b - x_c & y_b - y_c & z_b - z_c \\ x_c - x_d & y_c - y_d & z_c - z_d \end{pmatrix},$$

a tato matice se dá s přibývajícími dimenzemi rozšiřovat velmi pohodlným způsobem. Jako bonus stačí počítat determinant z matice řádu o jedna menšího, než ve výchozím tvaru. Navíc existuje obecný vztah mezi objemem d-rozměrného simplexu a maticí Δ,

$$V(T) = \frac{1}{d!}|\Delta|,$$

jak se dá snadno ověřit na 1D a 2D případu.

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

K vyjádření tvarových funkcí $N^T[a] = \alpha x + \beta y + \gamma z + \delta$ je ještě třeba pomocí Kramerova pravidla spočítat determinanty Δ_α až Δ_δ, nejpohodlněji asi v původní soustavě; například po záměně prvního sloupce dostáváme

$$\Delta_\alpha = \begin{vmatrix} 1 & y_a & z_a & 1 \\ 0 & y_b & z_b & 1 \\ 0 & y_c & z_c & 1 \\ 0 & y_d & z_d & 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} y_b & z_b & 1 \\ y_c & z_c & 1 \\ y_d & z_d & 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} y_b - y_c & z_b - z_c & 0 \\ y_c - y_d & z_c - z_d & 0 \\ y_d & z_d & 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} y_b - y_c & z_b - z_c \\ y_c - y_d & z_c - z_d \end{vmatrix},$$

ve kterém poznáváme plochu projekce stěny protilehlé vrcholu a do roviny yz. Obdobně dopandou Δ_β a Δ_γ, pro Δ_δ dostaneme

$$\Delta_\delta = \begin{vmatrix} x_a & y_a & z_a & 1 \\ x_b & y_b & z_b & 0 \\ x_c & y_c & z_c & 0 \\ x_d & y_d & z_d & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} x_b & y_b & z_b \\ x_c & y_c & z_c \\ x_d & y_d & z_d \end{vmatrix}$$

Můžeme tedy tvarovou funkci přehledně zapsat jako

$$N^T[a] = \frac{1}{\Delta(T)} \left[\Delta_{\neg x}(\neg a) x + \Delta_{\neg y}(\neg a) y + \Delta_{\neg z}(\neg a) z + \Delta_\delta(\neg a) \right].$$

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

FEM, pokročilé vztahy

Vraťme se k (pro jednoduchost dvojrozměrnému) integrálu

$$\iint_T N[a]\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y,$$

pro tvarovou funkci $N[a] = \alpha x + \beta y + \gamma$ nad elementem T. Až dosud jsme tento integrál rozdělovali na momentové příspěvky

$$\iint_T N[a]\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = \alpha I^T(1,0) + \beta I^T(0,1) + \gamma I^T(0,0).$$

Pokusme se nyní o explicitní dosazení všech komponent; především, pro element s vrcholy a, b, c máme

$$\Delta = x_a y_b + x_b y_c + x_c y_a - x_a y_c - x_b y_a - x_c y_b,$$

dále $\Delta_\alpha = (y_b - y_c)$, $\Delta_\beta = (x_c - x_b)$, $\Delta_\gamma = (x_b y_c - x_c y_b)$ a pro zúčastněné momentové integrály platí

$$I^T(0,0) = \frac{|\Delta|}{2} \qquad I^T(1,0) = \frac{1}{3}(x_a + x_b + x_c)\frac{|\Delta|}{2} \qquad I^T(0,1) = \frac{1}{3}(y_a + y_b + y_c)\frac{|\Delta|}{2}.$$

Po dosazení tedy celkem dostáváme

$$\iint_T N[a]\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = \frac{(y_b - y_c)(x_a + x_b + x_c) + (x_c - x_b)(y_a + y_b + y_c) + 3(x_b y_c - x_c y_b)}{3\Delta}\frac{|\Delta|}{2} = \frac{1}{6}|\Delta|,$$

a k výpočtu tohoto typu integrálů tak lze vlastně náročné sestavení momentových integrálů zcela obejít.

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

Obecněji se dá ukázat, že nad libovolným elementem $T(a,b,c)$ platí

$$\iint_T (N[a])^i (N[b])^j (N[c])^k \,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = \frac{i!j!k!}{(i+j+k+2)!}|\Delta|;$$

tento vztah lze poměrně jendoduše zobecnit do obecné dimenze (povšimněme si, že nad 2D elementem - trojúhelníkem - se vyskytují nějvýše tři různé $N[\ ]$).

Další typ integrálu, který se ve fyzikálních úlohách vyskytuje, je

$$\iint_T \nabla N[i]\cdot\nabla N[j]\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = (\alpha[i]\alpha[j] + \beta[i]\beta[j])\frac{|\Delta|}{2}.$$

V integrandu může také vystupovat libovolná funkce; vyřešíme ve 2D případu integrál

$$I_f = \int_T f(x,y)(N[a])^i (N[b])^j (N[c])^k \,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y.$$

Chceme-li postupovat v souladu s myšlenkami MKP, vyjádříme vystupující funkci pomocí jejího FEM ansatzu $f(x,y) = \sum_l f[l]N[l]$, takže celý integrál má tvar

$$\sum_l f[l] \int_T N[l](N[a])^i (N[b])^j (N[c])^k \,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y$$

a každý maticový příspěvek by tedy měl vznikat sumováním f přes všechny elementy. Z vlastností tvarových funkcí ovšem samozřejmě vypývá, že do celé sumy přispějí jen ty $N[l]$, jejichž l náleží aktuálnímu elementu T. Celkem tedy

$$I_f = \left[(i+1)!j!k!f[a] + i!(j+1)!k!f[b] + i!j!(k+1)!f[c]\right]\frac{|\Delta|}{(i+j+k+3)!}.$$

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

Shrnutí

V rámci zobecňování zaveďme nová označení pro vrcholy (a,b,c, ...) elementu T a jejich souřadnice v prostoru s dimenzí d.

1) Oindexujme nejprve vrcholy římskými indexy: a_i, $i = 1..d+1$, souřadnice oindexujme řeckými indexy $\alpha \in \langle 0, d \rangle$: $x[0] = 1$, $x[1] \equiv x$, $x[2] \equiv y$, atd.
   Pro souřadnice vrcholů tak celkem dostáváme výrazy typu $a_i[\alpha]$ a je například $a_i[0] = 1$, $a_2[3] \equiv b_z$ atd.

2) Dále zaveďme nové označení $I[\alpha, \beta]$ momentových integrálů až do druhého řádu včetně: indexy $\alpha, \beta \in \langle 0, d \rangle$ nyní udávají, které souřadnice vstupují do výpočtu momentu:

$$I[\alpha, \beta] = \iint_T x[\alpha] x[\beta] \, \mathrm{d}\Omega,$$

   Porovnáním s původním označením máme například $I[1,1] \equiv I(2,0)$, $I[1,3] = I(1,0,1)$, $I[0,2] = I(0,1)$, apod.

Výhodou nového zápisu je, že je schopen jediným kompaktním zápisem

$$I_T[\alpha, \beta] = \frac{1}{(d+1)(d+2)} \left(\sum_{i=1}^{d+1} a_i[\alpha] \cdot \sum_{i=1}^{d+1} a_i[\beta] + \sum_{i=1}^{d+1} a_i[\alpha] a_i[\beta] \right) \frac{|\Delta_T|}{d!}$$

postihnout všechny momenty do druhého řádu pro libovolnou dimenzi úlohy.

Přitom

$$\Delta_T = \begin{vmatrix} a_1[1] - a_2[1] & a_1[2] - a_2[2] & \dots \\ a_2[1] - a_3[1] & a_2[2] - a_3[2] & \\ \vdots & & \ddots \end{vmatrix}.$$

K vyjádření tvarových funkcí je ještě třeba pomocí Kramerova pravidla spočítat ještě částečné determinanty,

$$N^T[a] = \frac{1}{\Delta_T} \left[\Delta_0(\neg a) + \sum_{\alpha=1}^{d} \Delta_{\neg\alpha}(\neg a) \right],$$

kde

$$\Delta_0 = \begin{vmatrix} b[1] & b[2] & \dots \\ c[1] & c[2] & \\ \vdots & & \ddots \end{vmatrix}$$

Pro integrál z tvarových funkce nad elementem T pak platí

$$\iint_T (N[1])^{i1} (N[2])^{i2} \dots \, \mathrm{d}\Omega = \frac{I!}{(|I| + d)!} |\Delta_T|,$$

kde pro multiindex $I = (i1, i2, \dots)$ platí $I! = \Pi_j \, i_j!$ a $|I| = \sum_j i_j$.

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

Na závěr zbývá vyjádřit momentové příspěvky okrajových integrálů

$$\int_{\partial\Omega} N[j]\nabla N[i]\,\mathrm{d}W.$$

Pro jednoduchost demonstrujme postup na 3D příspěvku

$$Q_T(i,j,k) = \int\int x^i y^j z^k\,\mathrm{d}S;$$

na takový integrál vede nehomogenní Neumannova podmínka i podmínka smíšeného typu.

Je-li hraniční stěna parametrizována jako $z = \alpha x + \beta y + \gamma$, můžeme shora uvedený integrál (prvního druhu) napsat jako

$$Q_T(i,j,k) = \int\int x^i y^j z^k \sqrt{1 + \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)^2}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y,$$

kde koeficienty parametrizace stěny se určí opět Kramerovým pravidlem $\alpha = \Delta_\alpha/\Delta$, atd. z

$$\begin{pmatrix} z_a \\ z_b \\ z_c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_a & y_a & 1 \\ x_b & y_b & 1 \\ x_c & y_c & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}.$$

Potom

$$\sqrt{1 + \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)^2} = \sqrt{1 + \alpha^2 + \beta^2} = \frac{1}{|\Delta_{\neg z}|}\sqrt{(\Delta_{\neg z})^2 + (\Delta_{\neg x})^2 + (\Delta_{\neg y})^2}.$$

Integrujeme tedy vlastně přes průmět stěnového elementu (zde trojúhelníka) do roviny x-y, jeho skutečný sklon je pak zohledněn vystupující odmocninou. To s sebou přináší nepříjemnost v tom smyslu, že i když stěna má zaručeně nenulovou plochu, její průmět již může být degenerovaný do úsečky (pokud bude svislá) a potom $\Delta_{\neg z} = 0$ a shora uvedený vztah bude (zatím) divergovat.
Problém se vyřeší úplným vyhodnocením vystupujících členů. Vyhodnoťme nejprve momenty typu $Q_T(i,j,0)$; pro ně zjevně platí

$$Q_T(i,j,0) = \frac{1}{|\Delta_{\neg z}|}\sqrt{(\Delta_{\neg z})^2 + (\Delta_{\neg x})^2 + (\Delta_{\neg y})^2} \int\int x^i y^j \,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = \sqrt{(\Delta_{\neg z})^2 + (\Delta_{\neg x})^2 + (\Delta_{\neg y})^2}\,\frac{I_{\neg z}(i,j)}{|\Delta_{\neg z}|}$$

a vztah bude vždy nedegenerovaný. Dosazením $z = \alpha x + \beta y + \gamma$ pak pro momenty až do druhého řádu podobně dostáváme

$$\begin{aligned}
Q_T(0,0,1) &= \sqrt{(\Delta_{\neg z})^2 + (\Delta_{\neg x})^2 + (\Delta_{\neg y})^2}\,\frac{1}{6}(z_a + z_b + z_c) \\
Q_T(1,0,1) &= \sqrt{(\Delta_{\neg z})^2 + (\Delta_{\neg x})^2 + (\Delta_{\neg y})^2}\,\frac{1}{24}\left[2(x_a z_a + x_b z_b + x_c z_c) + x_a(z_b + z_c) + x_b(z_a + z_c) + x_c(z_a + z_b)\right] \\
Q_T(0,1,1) &= \sqrt{(\Delta_{\neg z})^2 + (\Delta_{\neg x})^2 + (\Delta_{\neg y})^2}\,\frac{1}{24}\left[2(y_a z_a + y_b z_b + y_c z_c) + y_a(z_b + z_c) + y_b(z_a + z_c) + y_c(z_a + z_b)\right] \\
Q_T(0,0,2) &= \sqrt{(\Delta_{\neg z})^2 + (\Delta_{\neg x})^2 + (\Delta_{\neg y})^2}\,\frac{1}{12}(z_a^2 + z_b^2 + z_c^2 + z_a z_b + z_b z_c + z_a z_c).
\end{aligned}$$

K divergencím již dojít nemůže a navíc jsou 3D okrajové momenty plně vyjádřitelné pomocí jejich 2D objemových variant:

$$Q_T^{\mathrm{3D}}[\alpha,\beta] = \sqrt{(\Delta_{\neg z})^2 + (\Delta_{\neg x})^2 + (\Delta_{\neg y})^2}\,\frac{I_{\neg z}^{\mathrm{2D}}[\alpha,\beta]}{|\Delta_{\neg z}|},$$

kde ovšem za α, β může libovolně figurovat také z. Uvedený vztah je pak snadno rozšiřitelný do obecné dimenze.