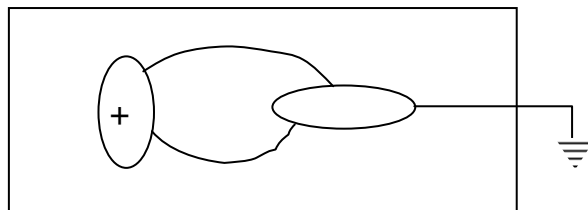


Introduktion till PDE med Cmsol

Skol-laboration: jonvandring

Ett läskapper fuktas med saltvatten och man lägger på elektroder som ansluts till en (lik)spänning. När man lägger på KMnO_4 -kristaller löses de upp och jonerna vandrar iväg med violetta spår.



Vi ska modellera detta försök med Cmsol, och ställer först upp differentialekvationen.

Låt elektriska fältet vara $\mathbf{E} = -\text{grad } V$ där V är elektriska potentialen. En elektrisk laddning q påverkas av kraften $q\mathbf{E}$, och den vandrar med hastigheten $\mathbf{v} = m\mathbf{E}$ (m kallas mobiliteten). Låt koncentrationen vara n st/ m^2 så blir strömtätheten (fluxen av laddning)

$$\mathbf{F} = -\sigma \text{grad } V,$$

där $\sigma = nmq^2$ är konduktiviteten. Konservationslagen för jonladdning blir då

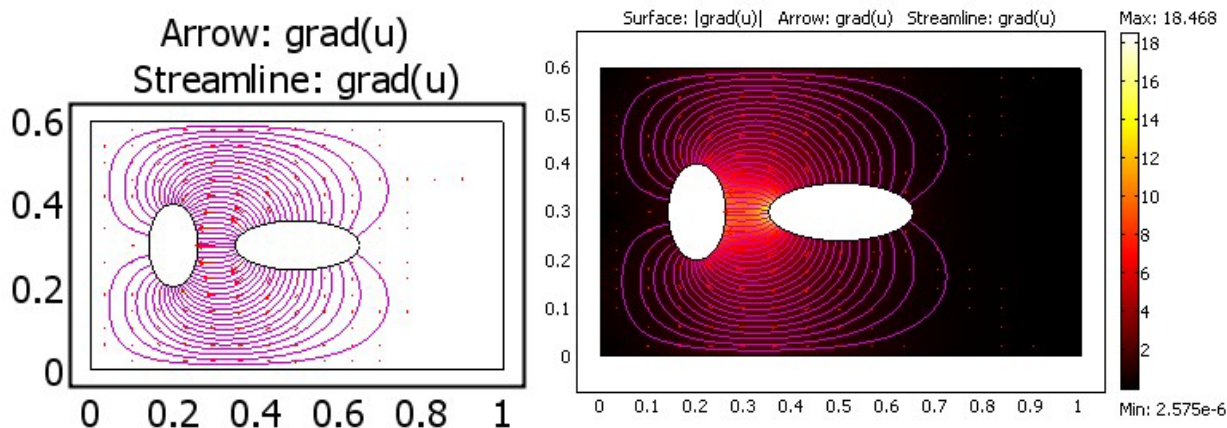
$$0 = \nabla \cdot (\sigma \nabla V) \Leftrightarrow \Delta V = 0$$

eftersom σ antas konstant. $V = 1$ V på den vänstra elektroden, 0 på den högra. Genom läskapparskanten går ingen ström, så $\mathbf{F} \cdot \mathbf{n} = 0$ eller $\sigma \text{grad } V \cdot \mathbf{n} = 0$ där $\mathbf{n}$ är normalen till randen.

Det är *Laplace's* ekvation med *Dirichlet*-villkor på elektrodränderna och homogena *Neumann*-villkor på ytterranden, ett standardproblem.

1. När problemet lösts kan vi rita jon-banorna $\mathbf{r}(t)$.

Vi har $d\mathbf{r}/dt = \mathbf{v} = -mq\nabla V$ och använder *streamline*-plot. Fältet visas med pilar (vänster)



2. Vi visualiserar också fältstyrkan $|\nabla V|$ med färgfält (höger).

3. Motståndet mellan elektroderna blir $\Delta V/I$ där I är totala strömmen och ΔV spänningen. Den kan vi beräkna med en kurvintegral (boundary integration) över randen Γ till en elektrod,

$$I = \int_{\Gamma} \sigma \nabla V \cdot \mathbf{n} dl.$$

Formulering av PDE och modeller

Modeller - konervationslagar och konstitutiva relationer.

Exempel: $N(\mathbf{r}, t)$ st. gula molekyler per m^3 i ett strömmande kontinuum, i $\mathbf{R}^n$, $n = 3$

Def.

Flux: # gula molekyler per sekund per m^2 yta vars normal bildar vinkeln θ med $\mathbf{F}$
 $|\mathbf{F}| \cos\theta = \mathbf{F} \cdot \mathbf{n}$

Totala flödet genom en stillastående yta S blir då (positivt i samma riktning som $\mathbf{n}$)

$$Q = \int_S \mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS \quad \text{st/sek.}$$

Om gula molekyler skapas i netto-takten $f(\mathbf{r}, t)$ [st/sek/ m^3] så gäller uppenbarligen, om S omsluter en volym V , att

$$\underbrace{\frac{d}{dt} \int_V N(\mathbf{r}, t) dV}_{\text{Nettoförändringstakt i } V} = \underbrace{\int_V f(\mathbf{r}, t) dV}_{\text{Nettoproduktion i } V} - \underbrace{\int_S \mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS}_{\text{Nettoutflöde ur } V \text{ genom } S} \quad \text{st/sek.}$$

som med Gauss' sats $\int_V \nabla \cdot \mathbf{F} dV = \int_S \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} dS$ blir

$$\int_V \left\{ \frac{\partial}{\partial t} N(\mathbf{r}, t) - f(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \right\} dV = 0$$

Eftersom detta gäller för varje volym V får vi

$$\frac{\partial}{\partial t} N(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = f(\mathbf{r}, t),$$

konervationslagen för "gula molekyler". Men det är bara en ekvation för de $2 + n$ obekanta N , f , och $\mathbf{F}$. Om man formulerar modeller för $\mathbf{F}$ och f uttryckta i N blir systemet slutet.

Exempel.

1. Om molekylerna "passivt" följer med ett givet hastighetsfält $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ blir

$$\mathbf{F} = N\mathbf{u}$$

Om källor saknas blir alltså

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \nabla \cdot (N\mathbf{u}) = 0$$

$$\underbrace{\frac{\partial N}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla N}_{\text{Materiella derivatan, } \frac{DN}{Dt}} = -N \underbrace{\nabla \cdot \mathbf{u}}_{\text{"volym-skälthet"}}$$

Om det man räknar är *alla* molekyler dvs. masstätheten $\rho(\mathbf{r}, t)$ [kg/m^3] har vi *kontinuitetsekvationen* i kontinuumsmekaniken.

2. Värmeflödet i en fast kropp är enligt Fouriers (fenomenologiska och empiriska) lag proportionellt mot negativa temperatur-gradienten,

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = -k(\dots) \nabla T(\mathbf{r}, t) \text{ [W/m}^2\text{]}$$

Förändringshastigheten i termisk energi per m^3 är $\rho(\mathbf{r})C(\mathbf{r})\frac{\partial T}{\partial t}$ där C är specifika värmekapaciteten $\text{J/kg}^\circ\text{K}$.

Konservationslagen för termisk energi blir *värmeledningsekvationen*

$$\rho(\mathbf{r})C(\mathbf{r})\frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (k(\dots) \nabla T) = f$$

där vi också antagit en värmekälla $f \text{ W/m}^3$. Det finns en mängd liknande modeller för andra processer, se listan nedan. Comsols modell-ekvation för dem formuleras som

$$e \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + d \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (c \nabla u) = f \quad \text{i } \Omega$$

På randen: $\begin{cases} h \cdot u = r & \text{Dirichlet - villkor} \\ \mathbf{cn} \cdot \nabla u = q \cdot u + g & \text{Neumann - villkor} \end{cases} \quad (*)$

där vi tagit med andra tidsderivatan för att få med Newtons kraftekvation på enkelt sätt.

Not: Den senare sortens randvillkor med q skilt från noll kallas oftast blandat (mixed) eller strålningsvillkor (radiation) eller Robin-villkor, och termen Neumann-villkor reserveras då för fallet $q = 0$.

Andra processer som modelleras av Comsol-ekvationen

Transversell utböjning av membran:

u = förskjutning, c = membranspänning, f = normallast, d = dämpkoefficient, e = masstäthet

Värmeledning (**Fouriers** lag):

u = temperatur, c = värmeledningskoefficient, f = värmekälla, $e = 0$, d = värmekapacitet; q = värmeövergångstal

Diffusion (**Ficks** lag):

u = koncentration, c = diffusionskoefficient, f = källa; $e = 0$, $d = 1$; q = (mass)övergångstal

Stationär likström i resistivt medium (**Ohms** lag) – jonvandringsexemplet:

u = potential, c = konduktivitet (= 1/resistivitet), f = strömkälla, $e = d = 0$; q = övergångskonduktans

Elektrostatik i laddningsfritt dielektrikum

u = potential, c = dielektricitets-konstant, $f = 0$, $d = e = 0$
 r = potential på ledare, $q = g = 0$ vid isolering

Stationär strömning i poröst medium (**Darcys** lag):

u = tryck, c = Darcy-koefficient, f = volymskälla, $e = d = 0$;

Vorticitets-fri ($\nabla \times \mathbf{u} = 0$) inkompressibel ($\frac{D\rho}{Dt} = 0 \Rightarrow \nabla \cdot \mathbf{u} = 0$) strömning:

u = hastighetspotential, $c = 1$, $f = 0$; $d = e = 0$
 $q = g = 0$ längs fasta väggar; $u = 1$ vid inlopp, $u = 0$ vid utlopp.

Variationsformulering

Vi ska nu beskriva hur ekvationerna kan lösas approximativt. Som exempel tar vi ett linjärt problem.

$$\begin{aligned} Lu = f : au - \nabla \cdot (c \nabla u) &= f \text{ i } \Omega \\ c \nabla u \cdot \mathbf{n} &= qu + g \text{ på randen} \end{aligned} \quad (\text{S})$$

1. Icke-linjära ekvationer kan man linjarisera (Newtons metod) och får då en följd av linjära problem (S) att lösa.
2. Transienta förlopp diskretiserar man i tiden och får ett problem (S) att lösa i varje tidssteg.

Om u satisfierar differentialekvationen i varje x kallas den en *stark* eller klassisk lösning. För en stark lösning blir $\int_{\Omega} (Lu - f) \cdot v(x) d\Omega = 0$ för varje funktion v för vilken integralen kan evalueras.

Omvänt, om u har två kontinuerliga derivator och $\int_{\Omega} (Lu - f) \cdot v(x) d\Omega = 0$ för alla v så måste

$Lu = f(x)$ i varje punkt x i Ω . Så långt inget nytt; men det enkla tricket att skriva om integralen med Gauss sats kopplar in randvillkoren och ger en vidare klass av lösningar:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (au - \nabla \cdot (c \nabla u) - f) \cdot v(x) d\Omega &= \int_{\Omega} (auv + c \nabla u \cdot \nabla v - fv) d\Omega - \int_{\partial\Omega} c \nabla u \cdot \mathbf{n} v dS = \\ \int_{\Omega} (auv + c \nabla u \cdot \nabla v - fv) d\Omega - \int_{\partial\Omega} (qu + g)v dS &= 0 \end{aligned} \quad (\text{V})$$

En funktion u som satisfierar den sista relationen för varje v för vilket integralen existerar kallas en *svag* (weak) lösning. Integralformuleringen kallas *variationsformuleringen*. En stark lösning är en svag lösning men inte nödvändigtvis tvärtom *eftersom svaga lösningar bara behöver ha kvadratintegrabla förstaderivator medan starka lösningar måste ha två derivator*. Det är således lättare att konstruera approximativa lösningar till variationsformuleringen än till differentialekvationen.

Ex. 1 Låt V vara volymen i härledningen ovan av differentialekvationen. Tag

$$v(x) = 1 \text{ om } x \text{ i } V, 0 \text{ utanför}$$

så blir variationsformuleringen just den integral-form vi startade från vid härledningen.

Ex. 2 Ekvationer i R^n .

Om $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ (differentialekvationen) så är $\mathbf{v}^T(\mathbf{Ax} - \mathbf{b}) = 0$ (variationsformuleringen) för alla $\mathbf{v}$ i R^n . Omvänt, om $\mathbf{v}^T(\mathbf{Ax} - \mathbf{b}) = 0$ för n linjärt oberoende $\mathbf{v}$ så blir (svaga lösningen) $\mathbf{x}$ också en lösning till $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ (stark).

Ex. 3

Många modeller för jämviktsproblem formuleras som minimeringsproblem för en (potentiell) energi. För utböjningen av inspända membranet är

$$E = \underbrace{\frac{1}{2} \int_{\Omega} c |\nabla u|^2 d\Omega}_{\text{Elastisk energi}} + \underbrace{\int_{\Omega} f u d\Omega}_{\text{"virtuellt" arbete}}$$

I MatFys-kursen behandlas variations-räkning, som visar att en minimerare till E måste satisfiera variationsproblemet

$$0 = \int_{\Omega} (c \nabla u \cdot \nabla v + f v) d\Omega, \text{ för alla } v \text{ som är noll på randen}$$

$$u = 0 \text{ på randen}$$

och att en tillräckligt snäll sådan svag lösning satisfierar *Euler-Lagranges* differentialekvation

$$\nabla \cdot (c \nabla u) = f \text{ i } \Omega$$

$$u = 0 \text{ på randen}$$

Galerkins metod

Vi söker nu en approximativ *svag* lösning u_h i ett N -dimensionellt funktionsrum V_h , vars basfunktioner är $\varphi_k(x), k = 1, \dots, N$. Således söker vi de obestämda koefficienterna c_k i

ansatsfunktionen $u_h = \sum_{k=1}^N c_k \varphi_k$ så att

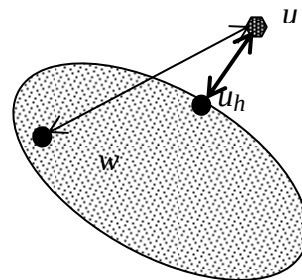
$$\int_{\Omega} (a u_h v_k + c \nabla u_h \cdot \nabla v_k - f v_k) d\Omega - \int_{\partial\Omega} (q u_h + g) v_k dS = 0$$

för ett antal lämpliga *testfunktioner* v_k . I Galerkins metod väljer man $v_k = \varphi_k$ och får precis N linjära ekvationer $\mathbf{A} \mathbf{c} = \mathbf{f}$ för de N obekanta c_k . Egenskaperna hos koefficientmatrisen $\mathbf{A}$ beror på differentialekvationen och basfunktionerna. Om t ex a och $c > 0$ blir $\mathbf{A}$ symmetrisk positivt definit, och det finns en unik lösning som stabilt kan beräknas med både elimination och iterativa metoder.

Noter.

1. För differentialekvationsproblem vars lösning ger minimum åt en energi (t ex a och $c > 0$) ger Galerkins metod minimum åt energin över underrummet V_h . Det betyder också att u_h är den bästa möjliga funktionen i V_h eftersom den gör felet $e = u - w$ minimalt i meningen

$$u_h = \arg \min_{w \in V_h} \int_{\Omega} (a e^2 + c |\nabla e|^2) d\Omega$$



2. Motsvarigheten för linjära ekvationssystem är följande: Låt $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$ ha symmetrisk positivt definit matris $\mathbf{A}$. Då ger lösningen min. åt

$$E(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \mathbf{x}$$

Om vi söker en approximation i ett underrum $W^N \subset R^n$ som spänns upp av $\mathbf{w}_k, k = 1, \dots, N, (N < n)$

$$\mathbf{x}_h = \sum_{k=1}^N c_k \mathbf{w}_k = \mathbf{W}\mathbf{c}, \mathbf{W} = (\mathbf{w}_1 \quad \mathbf{w}_2 \quad \dots \quad \mathbf{w}_N), \text{ en } n \times N \text{ - matris}$$

ska vi minimera

$$E(\mathbf{W}\mathbf{c}) = \frac{1}{2} \mathbf{c}^T \mathbf{B} \mathbf{c} - \mathbf{d}^T \mathbf{c}, \mathbf{B} = \mathbf{W}^T \mathbf{A} \mathbf{W}, \text{ en } N \times N \text{ matris, } \mathbf{d} = \mathbf{W}^T \mathbf{b}$$

där $\mathbf{B}$ också är positivt definit, dvs. lösa $\mathbf{B}\mathbf{c} = \mathbf{d}$. Då är $\mathbf{W}\mathbf{c}$ den bästa approximationen till $\mathbf{x}$ i meningen

$$\mathbf{W}\mathbf{c} = \arg \min_{\mathbf{w} \in W^N} (\mathbf{x} - \mathbf{w})^T \mathbf{A} (\mathbf{x} - \mathbf{w})$$

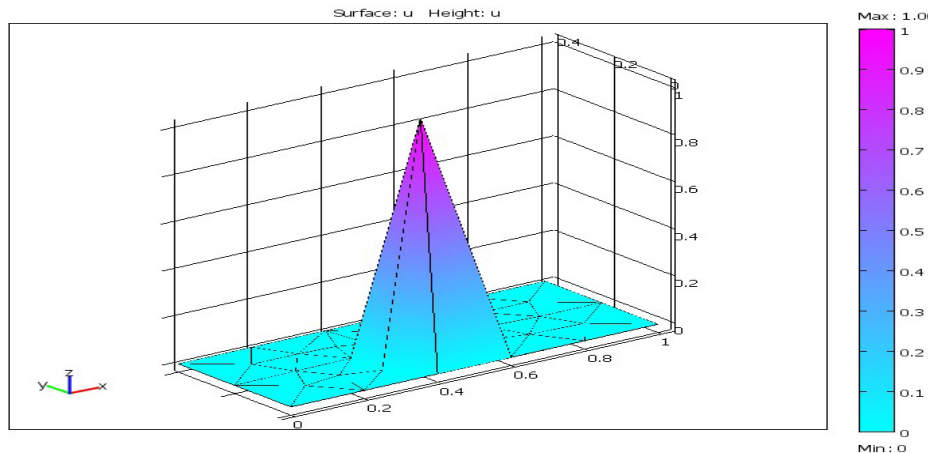
3. Galerkins metod används också för problem utan minimeringsegenskap, som konvektions-diffusionsekvationen för koncentrationen $u(x,t)$

$$\mathbf{v} \cdot \nabla u = \nabla \cdot (c \nabla u) + f(x)$$

där $\mathbf{v}(x,t)$ är hastighetsfältet. Man väljer då ofta andra test-funktioner än ϕ_k , och u_h s approximations-egenskaper är svårare att härleda för sådana ekvationer.

Finite element

I finita element-metoden väljer man basfunktioner som är nollskilda endast över små delområden, *elementen*. I 2D delar man upp beräkningsområdet i trianglar (i 3D tetraedrar). För variationsekvationerna ovan räcker det med basfunktioner vars derivator är kvadrat-integrabla, $\int_{\Omega} |\nabla \phi|^2 d\Omega < \infty$. Den enklaste konstruktionen ges av styckevis förstgrads-polynom, ett per nod i trianguleringen. En sådan visas nedan på en triangulering av en rektangel.



Man beräknar $\mathbf{A}$ genom att summera integral-bidragen från varje *triangel* T_k ; integralerna över trianglarna beräknas med numerisk kvadratur:

$$\mathbf{A} = \sum_k \int_{T_k} \nabla \phi_k \cdot \nabla \phi_j d\Omega \approx \sum_k |T_k| \left(\sum_j w_j \nabla \phi_k(x_{kj}) \cdot \nabla \phi_j(x_{kj}) \right)$$

För ekvationen ovan måste integraler av typerna

$$\int_T c \nabla \phi_k \cdot \nabla \phi_j d\Omega, \int_T a \phi_k \phi_j d\Omega, \int_T f \phi_k d\Omega, \int_{\partial T} q \phi_k \phi_j d\partial\Omega, \text{ och } \int_{\partial T} h \phi_k d\partial\Omega,$$

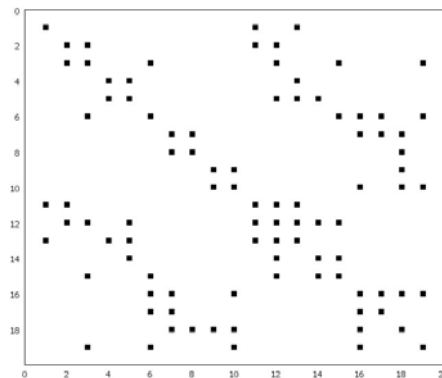
beräknas och summeras till koefficientmatris och högerled. Bidragen kommer som synes både från Ω och randen.

Här utelämnas alla detaljer, också de intressanta, både teoretiska och implementeringstekniska, men de beskrivs i fortsättningskurser och kurser i finita element. Poängen är att visa, hur uppställning av det linjära ekvationssystemet från Galerkins metod med finita element-basfunktioner enkelt låter sig automatiseras. Användaren specificerar

- geometrin (det finns program som skapar trianglarna),
- differentialekvation (partialintegration kan systemet göra själv) och
- randvillkor (behöver definitivt förklaras mer, men det får anstå till fk).

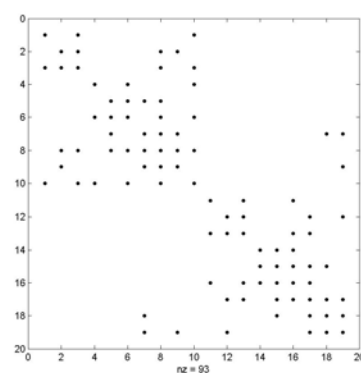
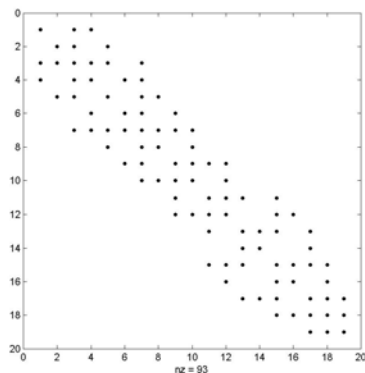
Ekvationssystemet ställs upp "automagiskt" och löses med t ex Gauss-elimination. Lösningen visualiseras med färg, form, pilar, animering, intressanta funktionaler, som randintegralen i jonvandringsexemplet, beräknas, etc.

Vi ser nu att valet av finita-element basen gör matrisen gles: $a_{kj} = 0$ om inte basfunktionerna lappar över varandra, dvs., om inte nod k och j är i samma triangel. Matrisen för rektangeln ovan med 19 noder får bara 93 icke-nollor dvs. i medel mindre än sex per rad:



Mönstret är symmetriskt: grannskap är alltid en reflexiv relation. Om också värdena blir lika hänger ihop med om ekvationen är själv-adjungerad.

Man kan ändra mönstret genom att numrera om noderna. Det är viktigt att numrera så, att det inte blir för många nya icke-nollor vid Gauss-eliminationen. RCM-algoritmen ger vänster bild och AMD höger. Elisabeth Cuthill & Sean McKee – metoden numrerar grannar efter varann och ger bandstruktur, Approx. Minimal Degree väljer pivotelement som minimerar fill-in i just det steget



Med effektiv numrering löser eliminationsprogram problem som ovan med 1/2 miljon obekanta på sekunder på en modern PC. Man kan alltså ha en halv triangel per pixel på skärmen! Men för tre-dimensionella problem blir matriserna mycket mindre glesa, minneskravet mycket större och iterativa metoder behövs. För a och $c > 0$ finns det t ex multi-grid metoder som har komplexitet $O(N)$, men för $a < 0$ (tidsharmonisk vågrörelse beskriven i frekvens-domän med Helmholtz ekvation) är det mycket svårare.

Tillägg: Optimalitet i energi-norm – R^n -modellen

Låt $Ax = b$ ha symmetrisk, positivt definit matris A . Då ger lösningen minimum åt

$$E(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$$

för $x = A^{-1}b = x^*$. Vi söker en approximation i det linjära under-rummet $W^N \subset R^n$ som spans upp av w_k , $k = 1, \dots, N$, ($N < n$)

$$x_h = \sum_{k=1}^N c_k w_k = Wc, W = (w_1 \ w_2 \ \dots \ w_N), \text{ a } n \times N \text{ - matrix}$$

genom minimering av

$$E(Wc) = \frac{1}{2} c^T Bc - d^T c, B = W^T A W, \text{ an } N \times N \text{ matrix, } d = W^T b$$

där B också är positivt definit. Lösningen ges av lösningen till $Bc^* = d$. Då är Wc^* bästa approximation till x i meningen

$$Wc^* = \arg \min_{w \in W^N} (x^* - w)^T A (x^* - w)$$

Förberedelse:

Formeln $\langle x, y \rangle = x^T A y$ definierar en inre product på R^n . Symmetri- och linjaritets-axiomen för detta kontrollerar man enkelt. Således kan formeln

$$\|x\|_E = \langle x, x \rangle^{(1/2)}$$

definiera en norm, som vi kallar energi-normen (Övning: Bevisa triangel-olikheten för $\| \cdot \|_E$)

Bevis:

Ekvationen för c ger

$$W^T A W c^* = W^T b :$$

$$W^T (\underbrace{A W c^* - b}_{-residual}) = 0 \Leftrightarrow W^T A (\underbrace{W c^* - x^*}_{error^*})$$

Dessa utsagor kallas "Galerkin-ortogonalitet"

W är ortogonal

i Euklidesk mening ($x^T y$) mot residualen $A W c^* - b$

i energi-mening ($x^T A y$) mot fel- vektorn $W c^* - x^*$

Då följer

$$\|W c^* - x^*\|_E \leq \|W c - x^*\|_E \quad \forall c \in R^N$$

För:

$$\begin{aligned}\|\mathbf{W}\mathbf{c} - \mathbf{x}^*\|_E^2 &= \left\| \underbrace{\mathbf{W}\mathbf{c}^* - \mathbf{x}^*}_{\mathbf{e}^*} + \underbrace{\mathbf{W}(\mathbf{c} - \mathbf{c}^*)}_{\mathbf{w}} \right\|_E^2 = \langle \mathbf{e}^* + \mathbf{w}, \mathbf{e}^* + \mathbf{w} \rangle = \\ &= \langle \mathbf{e}^*, \mathbf{e}^* \rangle + \underbrace{\langle \mathbf{w}, \mathbf{w} \rangle}_{\geq 0} + 2 \underbrace{\langle \mathbf{e}^*, \mathbf{w} \rangle}_{=0} \geq \langle \mathbf{e}^*, \mathbf{e}^* \rangle = \|\mathbf{W}\mathbf{c}^* - \mathbf{x}^*\|_E^2\end{aligned}$$

QED