

Treball final de grau

GRAU DE MATEMÀTIQUES

Facultat de Matemàtiques i Informàtica
Universitat de Barcelona

El Mètode dels elements finits

Autor: Eloi Sans Gispert

Director: Dr. Àngel Jorba

Realitzat a: Departament de Matemàtiques
i Informàtica

Barcelona, 17 de enero de 2017

Abstract

The Finite Element Method (FEM) is a numerical tool to approach the solution of Partial Differential Equations. We study this method from plenty points of view: the theoretical base, a possible implementation and the usage in some examples. We also try to show the versatility of the method and the advantages throw other methods. To develop the study of the examples I have programmed the method in C-language

Resum

El Mètode dels Elements Finitos (FEM) és una eina de càlcul numèric per aproximar solucions d'Equacions amb Derivades Parcial. En el treball s'estudia el mètode des de unes quantes besants: la base teòrica, una possible implementació i l'ús en un parell d'exemples. L'estudi també pretén mostrar la versatilitat del mètode i els avantatges respecte altres mètodes. Per desenvolupar aquest treball i l'estudi dels exemples he programat el mètode en el llenguatge C.

Agraïments

Vull agrair el suport rebut per part de la meva família i la meva parella, que tot i que no han entès gaire del que feia en el treball i la carrera en general, sempre ho han intentat i m'han estat animant a continuar.

Vull agrair els moments viscuts amb l'Arnau Sistach i el Christian Soler en les incomptables hores que hem coincidit a l'aula IC, que han fet més amè el procés.

Moltes gracies també al meu tutor Àngel Jorba i als meus amics de la carrera, que sempre que han pogut m'han ajudat.

Index

1. Introducció	2
2. Mètode dels elements finits.	3
2.1. Base teòrica.	3
2.1.1. Els espais de Banach	3
2.1.2. Els espais de Hilbert	4
2.1.3. Els espais de Sobolev	6
2.2. Forma dèbil o BVP	7
2.3. El mètode	9
3. Eines de calcul numèric.	11
3.1. Triangulació de Delaunay.	11
3.2. Formula de Heró.	11
3.3. Integral sobre un triangle.	12
3.4. Mètode del Gradient Conjugat.	13
3.4.1. Steepest Descent.	14
3.4.2. El mètode i la seva convergència.	14
4. Implementació del mètode dels elements finits	18
4.1. Cas 1-dimensional	18
4.2. Cas 2-dimensional	18
5. Exemples resolts	23
5.1. Cas 1-dimensional	23
5.2. Cas 2-dimensional	25
5.2.1. Exemple del quadrat	25
5.2.2. Exemple del disc	28
6. Importància i usos del Mètode dels Elements Finites	30
6.1. Comparació FEM amb FDM	30
7. Conclusions	31
8. Bibliografia	32

1. Introducció

Sovint els alumnes ens plantegem com a Treball de Final de Grau, temes o idees que estan més que lluny de les nostres immediates possibilitats. Aquesta ambició és necessària pel progrés de la ciència, però excessiva per dur a terme un TFG. Aquest ha sigut el meu cas. La meua idea inicial pel TFG era modelitzar un problema concret de biomecànica-humana que encara no s'ha modelitzat fins ara. Buscant bibliografia i començant a ser conscient que no seria viable, la meua idea, vaig descobrir el Mètode dels Elements Finitos (FEM).

El Mètode dels Elements Finitos, és un mètode numèric molt utilitzat en l'enginyeria de ponts i camins, la aeronàutica, la biomedicina, ... ; per resoldre Equacions amb Derivades Parcial. Aquest mètode linealitz el nostre problema transformant-lo d'una EDP aparentment difícil de resoldre a un sistema d'equacions fàcilment tractable.

L'objectiu d'aquest treball no és només explicar el mètode purament teòric, sinó programarlo i explicar quina implementació he utilitzat en un seguit d'exemples. Per l'elaboració he intentat donar una base teòrica ferma d'anàlisi funcional per poder abordar el problema de les EDP's i justificar la formulació dèbil de les mateixes.

Em centro també en les eines d'anàlisi numèric que he agut d'aplicar i desenvolupar per poder programar el mètode. Algunes d'aquestes eines les he après a la carrera en les assignatures de Mètodes Numèrics, però moltes d'altres les he estudiat únicament per l'elaboració d'aquest treball.

2. Mètode dels elements finits.

2.1. Base teòrica.

En aquest apartat veurem les eines d'anàlisi funcional necessàries per abordar el problema de les EDP's. Algunes de les demostracions no es desenvolupen perquè ja s'han vist a l'assignatura d'Anàlisi Real i Funcional, d'altres tot hi vistes també a l'assignatura les he inclòs per la seva importància en el desenvolupament de la part teòrica d'aquest treball.

Notació 1. *En tota la secció s'utilitza μ per anomenar una mesura, en concret treballarem amb la de Lebesgue, però deixo la notació de μ ja que els resultats podrien ser vàlids per altres mesures*

2.1.1. Els espais de Banach

Definició 2.0.1. *Un espai vectorial X sobre \mathbb{K} és de Banach si és normat i complet per aquesta norma*

Definició 2.0.2. *Definim els espais de Lebesgue:*

$$L^p(\mu) := \left\{ [f] : \|f\|_p = \left(\int |f|^p d\mu(x) \right)^{1/p} < \infty \right\} \text{ per } 1 \leq p < \infty$$

on $g \in [f] \Leftrightarrow g$ és mesurable i $g = f$ a.e. x

$$L^\infty(\mu) := \inf\{M > 0 : |f(x)| \leq M \text{ a.e. } x\}$$

Proposició 2.1. *Un espai normat E és de Banach $\Leftrightarrow \forall \{f_n\}_n \subset E$ t.q. $\sum_n \|f_n\| < +\infty$ es compleix que $\exists f \in E$ t.q.*

$$f = \lim_N \sum_{n=1}^N f_n \text{ i.e. } \left(\left\| f - \sum_{n=1}^N f_n \right\| \xrightarrow{N} 0 \right)$$

Proposició 2.2. Desigualtat de Hölder

Sigui $1 \leq p < \infty$ i p' l'exponent conjugat, i.e. $(\frac{1}{p} + \frac{1}{p'} = 1)$. Llavors $\forall f \in L^p(\mu), g \in L^{p'}(\mu)$

$$\int |fg| d\mu \leq \left[\int f^p d\mu \right]^{1/p} \left[\int g^{p'} d\mu \right]^{1/p'} = \|f\|_p \|g\|_{p'}$$

Teorema 2.3. *Si $1 \leq p < \infty$ ($L^p(\mu), \|\cdot\|_p$) és un espai de Banach.*

Demostració. 1. $\|\cdot\|_p$ és norma:

$$(a) \quad \|f\|_p = 0 \Leftrightarrow f = 0 \text{ a.e. } x \Leftrightarrow f \in [0] \Rightarrow [f] = 0$$

$$(b) \quad \|\lambda f\|_p = |\lambda| \|f\|_p$$

$$(c) \quad \|f + g\|_p^p = \int |f(x) + g(x)|^p d\mu(x) = \int |f(x) + g(x)| |f(x) + g(x)|^{p-1} d\mu(x) \\ \leq \int |f(x)| |f(x) + g(x)|^{p-1} d\mu(x) + \int |g(x)| |f(x) + g(x)|^{p-1} d\mu(x)$$

Aplicant la desigualtat de Hölder 2.2

$$\leq \|f\|_p \left[\int |f(x) + g(x)|^{(p-1)p'} d\mu(x) \right]^{1/p'} + \|g\|_p \left[\int |f(x) + g(x)|^{(p-1)p'} d\mu(x) \right]^{1/p'}$$

$$\left[\frac{1}{p} + \frac{1}{p'} = 1 \Rightarrow (p-1)p' = p \right]$$

$$= (\|f\|_p + \|g\|_p) \|f + g\|_p^{p/p'} = (\|f\|_p + \|g\|_p) \|f + g\|_p^{p-1} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \|f + g\|_p \leq \|f\|_p + \|g\|_p$$

2. Completitud: Utilitzant la proposició 2.1

$$\text{Sigui } (f_n)_n \subset L^p(\mu) : \sum_n \|f_n\|_p < +\infty \stackrel{?}{\Rightarrow} \exists f \in L^p : \sum_{n=1}^N f_n \rightarrow f$$

$$\left(\int \left(\sum_{n=1}^{\infty} |f_n(x)| \right)^p d\mu(x) \right)^{1/p} = \left(\int \lim_N \left(\sum_{n=1}^N |f_n(x)| \right)^p d\mu(x) \right)^{1/p}$$

Utilitzant convergència monòtona i la desigualtat triangular tenim que:

$$\left(\int \lim_N \left(\sum_{n=1}^N |f_n(x)| \right)^p d\mu(x) \right)^{1/p} \leq \lim_N \sum_{n=1}^N \|f_n(x)\|_p = \sum_{n=1}^{\infty} \|f_n(x)\|_p < +\infty \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \begin{cases} g(x) = \sum_{n=1}^{\infty} |f_n(x)| < +\infty \text{ a.e. } x \\ g \in L^p(\mu) \end{cases} \Rightarrow \sum_{n=1}^{\infty} |f_n(x)| < +\infty \quad \forall x \Rightarrow \sum_{n=1}^{\infty} f_n(x) \text{ convergeix } \forall x$$

$$\text{Finalment: } \|f - \sum_{n=1}^N f_n\|_p = \left\| \sum_{n=N+1}^{\infty} f_n(x) \right\|_p \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} \|f_n(x)\|_p \xrightarrow{N} 0$$

□

2.1.2. Els espais de Hilbert

Definició 2.3.1. Un espai vectorial dotat d'un producte escalar, \langle, \rangle , se l'anomena pre-Hilbertià. Si a més és complet diem que és un espai de Hilbert.

Proposició 2.4. Sigui (H, \langle, \rangle) pre-Hilbertià. Si definim la norma $\|x\| = \langle x, x \rangle^{1/2}$ es compleix:

$$\|a + b\|^2 + \|a - b\|^2 = 2\|a\|^2 + 2\|b\|^2 \quad \forall a, b \in H$$

Aquesta igualtat s'anomena: Igualtat del Paral·lelogram

Demostració. Aplicant el teorema del cosinus tenim que:

$$\begin{aligned} \|a + b\|^2 + \|a - b\|^2 &= \|a\|^2 + \|b\|^2 + 2\operatorname{Re} \langle a, b \rangle + \|a\|^2 + \|b\|^2 - 2\operatorname{Re} \langle a, b \rangle \\ &= 2\|a\|^2 + 2\|b\|^2 \end{aligned}$$

□

Proposició 2.5. $L^p(\mu)$ amb $\langle f, g \rangle = \int_{\Omega} fg \, d\mu(x)$ és espai de Hilbert $\Leftrightarrow p = 2$

Demostració. Suposem que L^p és Hilbert llavors és complex:

$$\|f + g\|_p^2 + \|f - g\|_p^2 = 2\|f\|_p^2 + 2\|g\|_p^2 \quad \forall f, g \in L^p$$

és a dir:

$$\left(\int_{\Omega} |f + g|^p d\mu \right)^{2/p} + \left(\int_{\Omega} |f - g|^p d\mu \right)^{2/p} = 2 \left(\int_{\Omega} |f|^p d\mu \right)^{2/p} + 2 \left(\int_{\Omega} |g|^p d\mu \right)^{2/p}$$

Si agafem $f = \chi_{[0,1]}$ i $g = \chi_{[1,2]}$ tenim que la igualtat queda:

$$\left(\int_{[0,2]} 1^p d\mu \right)^{2/p} + \left(\int_{[0,1]} 1^p d\mu + \int_{[1,2]} 1^p d\mu \right)^{2/p} = 2 \left(\int_{[0,1]} 1^p d\mu \right)^{2/p} + 2 \left(\int_{[1,2]} 1^p d\mu \right)^{2/p}$$

desenvolupant les integrals veiem que aquesta igualtat és complex, si i només si, $p = 2$

$$2(2)^{2/p} = 2(1)^{2/p} + 2(1)^{2/p} = 4(1)^{2/p} \Leftrightarrow p = 2$$

□

Definició 2.5.1. Sigui E un espai de Hilbert i \mathbb{K} un cos es defineix el dual de E en \mathbb{K} com:

$$E' = L(E, \mathbb{K}) := \{T : E \rightarrow \mathbb{K} \text{ lineals i continues}\}$$

Teorema 2.6. (Teorema de Riesz)

Sigui (H, \langle, \rangle) un espai de Hilbert i H' el seu dual

$$\forall T \in H', \exists! y \in H \text{ t.q. } T(x) = \langle x, y \rangle \quad \forall x \in H$$

Demostració. Sigui $N = \ker T \Rightarrow N$ és un subespai tancat de H .

- Si $N = H$ llavors $T = 0$ podem agafar $y = 0 \Rightarrow T(x) = \langle x, 0 \rangle \quad \forall x \in H$
- Si $N \neq H$ podem expressar H com: $H = N \oplus N^{\perp}$ llavors $\exists z_0 \in N^{\perp}, z_0 \neq 0$.
Per construcció $\alpha = T(z_0) \neq 0$ llavors $\forall x \in H \quad x - T(x) \frac{z_0}{\alpha} \in N$ ja que $\langle x - T(x) \frac{z_0}{\alpha}, z_0 \rangle = 0$ desenvolupant $T(x) \langle \frac{z_0}{\alpha}, z_0 \rangle = \langle x, z_0 \rangle$ i fent el canvi $z = \frac{\bar{\alpha}}{\langle z_0, z_0 \rangle} z_0$ tenim que $T(x) = \langle x, z \rangle \quad \forall x \in H$
- Unicitat: Suposem que $\exists z' \neq z$ t.q. $T(x) = \langle x, z' \rangle \quad \forall x \in H$
Llavors $\forall x \in H \quad \langle x, z - z' \rangle = 0$ i si agafem $x = z - z', \|z - z'\| = 0 \Rightarrow z = z'$

□

Aquest teorema ens demostra l'existència d'una bijecció entre un espai de Hilbert i el seu dual. I com es poden representar els elements del dual a partir d'elements de l'espai d'origen. Aquest concepte és molt important i necessari per entendre la construcció que ve a continuació dels espais de Sobolev

2.1.3. Els espais de Sobolev

Els espais de Sobolev, és la base teòrica que permet resoldre EDP's. Per afrontar el problema de les EDP's necessitem definir l'operador derivar dèbil ja que les funcions de L^2 no tenen perquè ser derivables en el sentit clàssic. Sigui d'ara en endavant $\Omega \in \mathbb{R}^n$ un obert.

Definició 2.6.1. *Diem que el suport d'una funció és $\text{supp}(f) = \{x \in \Omega | f(x) \neq 0\}$*

Definició 2.6.2. *Definim l'espai de funcions $\mathcal{D}(\Omega) = \{\phi \in C^\infty(\Omega) | \text{supp}(\phi) \text{ és compacte}\}$, el dual d'aquest espai, $\mathcal{D}'(\Omega)$ s'anomena espai de distribucions.*

Observació: En els espais $\mathcal{D}(\Omega)$ fixant $f \in L^2$ tenim que:

$$\begin{aligned} T_f : \mathcal{D}(\Omega) &\rightarrow \mathbb{R} \\ g &\rightarrow \langle f, g \rangle \end{aligned}$$

Clarament $T_f \in \mathcal{D}'(\Omega)$ això ens defineix una relació entre L^2 i $\mathcal{D}'(\Omega)$, en certa manera podríem entendre els elements de L^2 com elements de l'espai de distribucions.

El nostre objectiu és definir una derivada per les funcions de L^2 que no son derivades en els sentit clàssic o que la seva derivada no pertany a L^2 . Per la regla d'integració per parts i que $\text{supp}(\phi_i)$ és compacte tenim que:

$$\langle \frac{\partial f}{\partial x_i}, \phi \rangle := \int_{\Omega} \frac{\partial f}{\partial x_i} \phi = - \int_{\Omega} f \frac{\partial \phi}{\partial x_i} = - \langle f, \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \rangle$$

sabem que $\frac{\partial \phi}{\partial x_i}$ si que està ben definit ja que $\phi \in C^\infty$, això ens dona una pista d'una possible definició per la forma de derivar que busquem.

Definició 2.6.3. *Definim la derivada dèbil $\frac{\partial v}{\partial x_i}$ com:*

$$\text{El } u \in L^2(\Omega) \text{ t.q. } \int_{\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} v = - \int_{\Omega} \phi u$$

L'existència d'aquest element ens la dona el Teorema de Riesz (2.6); per poder aplicar el teorema necessitem que $L^2(\Omega)$ sigui de Hilbert (2.5) i que l'operador T_f pertanyi a $L^2(\Omega)'$ com veiem en l'observació anterior.

Notació 2. *A partir d'ara D^α indicara la derivada dèbil, vist que ja no ens interessa tant la component respecte la qual es deriva. I α és la notació de multi-index*

Un cop definida la maquinaria hem de definir l'espai en que treballarem

Definició 2.6.4. *Sigui $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ conjunt no buit, $1 \leq p \leq \infty$ i $m \in \mathbb{N}$ definim els espais de Sobolev d'ordre m com:*

$$W^{m,p}(\Omega) := \{v \in L^p(\Omega) \text{ t.q. } D^\alpha v \in L^p(\Omega), |\alpha| \leq m\}$$

Per $p=2$ l'espai de Sobolev és un espai de Hilbert per tant podem definir un producte escalar i una norma en $W^{m,2}(\Omega)$

Definició 2.6.5. Siguin $u, v \in W^{m,2}(\Omega)$ definim el producte escalar $\langle u, v \rangle_{m,2}$ com:

$$\langle u, v \rangle_{m,2} := \sum_{|\alpha| \leq m} \langle D^\alpha u, D^\alpha v \rangle$$

Definició 2.6.6. Sigui $v \in W^{m,2}(\Omega)$ definim la norma $\|v\|_{m,2}$ com:

$$\|v\|_{m,2} := \left(\sum_{|\alpha| \leq m} \|D^\alpha v\|_2^2 \right)^{1/2}$$

Notació 3. $H^m(\Omega) := W^{m,2}(\Omega)$

Propietats

1. $C^m \subset H^m$
2. $\forall f \in H^1$ f és C^∞ respecte la derivada dèbil.

Seguidament he d'anomenar un parell de resultats que seran útils en les seccions següents:

Definició 2.6.7.

$$H_0^1(\Omega) := \{\text{adherència de } \mathcal{D}(\Omega) \text{ a } H^1(\Omega)\}$$

Teorema 2.7. Sigui $\Omega \in \mathbb{R}$ obert i acotat amb vora $\Gamma = \partial\Omega \in C^1$ a trossos, llavors

$$H_0^1(\Omega) = \{v \in H^1 \text{ t.q. } v|_\Gamma = 0\}$$

2.2. Forma dèbil o BVP

La formulació dèbil o variacional, és una formulació alternativa de les equacions diferencials a partir d'escriure-les com a equacions integrals. D'aquesta manera són més fàcils de tractar amb mètodes d'àlgebra lineal o d'anàlisi funcional.

Una eina que s'utilitza en la construcció de la forma dèbil és la següent:

Proposició 2.8. *Primera identitat de Green*

$$-\int_{\Omega} \Delta u v dx = \int_{\Omega} \nabla u \nabla v dx - \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u}{\partial n} v dl$$

Observació Com que treballarem amb $v \in H_0^1$ que son funcions tals que $v|_{\partial\Omega} = 0$ ens simplifica un calcul

$$\int_{\partial\Omega} \frac{\partial u}{\partial n} v dl = 0$$

per tant la identitat de Green queda de la forma:

$$-\int_{\Omega} \Delta u v dx = \int_{\Omega} \nabla u \nabla v dx$$

La forma dèbil o variacional

Les EDP's que estem analitzant són de la forma:

$$\begin{aligned} -\Delta u &= f \text{ a } \Omega \text{ obert acotat} \\ u &= 0 \text{ a } \partial\Omega \text{ que és } C^1 \text{ a trossos} \end{aligned}$$

integrant als dos costats i multiplicant per unes funcions que anomenarem funcions test

$$-\int_{\Omega} (\Delta u)v dx = \int_{\Omega} f v dx$$

si considerem les funcions $v \in H_0^1(\Omega)$ per l'apartat (2.7) ja estem tenint en compte les condicions de frontera i ens garanteix que les derivades pertanyen al nostre espai.

Llavors utilitzant la formula de Green tenim que:

$$\int_{\Omega} \langle \nabla u, \nabla v \rangle dx = \int_{\Omega} \sum_{j=1}^n \frac{\partial u}{\partial x_j} \frac{\partial v}{\partial x_j} dx = \int_{\Omega} f v dx$$

Aquest problema es pot escriure en termes de productes escalars i derivades dèbils dins dels espais anteriorment presentats:

Donat $f \in L^2(\Omega)$ volem trobar $u \in H_0^1(\Omega) \subset L^2(\Omega)$ t.q.:

$$\forall v \in H_0^1(\Omega) \quad \sum_{j=1}^n \langle \frac{\partial u}{\partial x_j}, \frac{\partial v}{\partial x_j} \rangle = \langle f, v \rangle$$

A aquesta forma se l'anomena forma variacional dèbil de la EDP.

Teorema 2.9. *Lax-Milgram*

Sigui H un espai de Hilbert i $\langle \cdot, \cdot \rangle$ un producte escalar tal que:

1. *és acotat:* $|\langle u, v \rangle| \leq C \|u\| \|v\|$
2. *és coactiu:* $\langle u, u \rangle \geq c \|u\|^2$

Llavors, $\forall f \in H'$ $\exists! u \in H$ tal que:

$$\langle u, v \rangle = f(v) \quad i \quad \|u\| \leq \frac{1}{c} \|f\|_{V'}$$

Aquest teorema ens dona l'existència i unicitat de la solució d'una ampla classe de problemes dèbils.

Observació: És fàcil, però no està de més, veure que en H_0^1 amb la norma definida anteriorment:

$$\|v\|_{1,2} := \|D^1 v\|_2$$

es compleixen les dues hipòtesis del teorema:

1. $|\langle u, v \rangle_{1,2}| \leq \|D^1 u\| \|D^1 v\|$
2. $\langle u, u \rangle_{1,2} = \|D^1 v\|_2^2$

Per tant podem assegurar que amb les EDP's que jo estic treballant existeix una única solució

2.3. El mètode

El mètode dels elements finits, és un mètode numèric que aproxima la solució d'una EDP per funcions d'un espai conegut. Podríem dir que redueix la resolució d'una EDP, que sovint pot ser molt complexa, a la resolució d'un sistema d'equacions lineals, problema molt estudiant i amb mètodes molt eficaços per resoldre'l.

El mètode consta de tres parts:

1. La formulació variacional del problema. (secció 2.2)

La primera part del mètode no és realment numèrica, però és necessària per poder abordar el nostre problema. Algunes de les solucions de les EDP's són difícils de trobar en l'expressió inicial. D'aquí la necessitat de trobar una expressió alternativa del nostre problema, que no contingui derivades segones. La forma variacional es basa en dues coses:

- Multiplicar els dos termes l'equació per funcions test d'un cert espai de funcions que ens permeti simplificar el problema. I integrar ambdós costats mantenint la igualtat.
- Un cop tenim l'expressió integral de la nostre equació, interpretar la derivada com la derivada dèbil

2. Aproximació de la solució per funcions lineals d'un domini discretitzat.

M'he centrat en EDP's lineals, de manera que considerem que el sistema resultant és lineal. Un cop tenim el problema variacional i l'espai de funcions on és vàlid i viable resoldre la nostre EDP, necessitem considerar un subespai de funcions lineals de dimensió finita. Per poder-ho fer el primer pas és discretitzar el domini de definició del problema. Podríem considerar per separat el cas 1 dimensional dels altres:

- En el 1-dimensional és simple la discretització ja que únicament hem de dividir l'interval en un nombre, com més alt millor, de subintervalls.
- Per discretitzar dominis de dimensió n , $n > 1$, la complexitat és una mica més elevada però tot i així és un problema ja resolt. Utilitzant els resultats de les triangulacions de Delaunay exposats en la secció(3.1) podem trobar triangulacions de qualsevol domini assegurant que és la millor possible. Tot i que la meua explicació sigui pel cas de $n=2$, es pot estendre a dimensions superiors.

Un cop tenim el domini discretitzat considerem el subespai V_l generat per les funcions lineals $\{\phi_i\}_i$ que:

$$\phi_i(x_j) \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}$$

on x_j són els punts que acoten els intervals en el cas 1-dimensional o els vèrtex de la triangulació en els altres casos.

Llavors quan expressem les funcions test i la solució com a combinació lineal de la nostre base ens defineix un sistema lineal on les incògnites son els coeficients amb el qual s'expressa la solució amb la nostre base $\{\phi_i\}_i$

3. Formulació i resolució del sistema lineal.

Aquesta part del mètode és en la que hi ha "més llibertat". Un cop el sistema lineal està plantejat només ens cal aplicar un mètode de resolució que sigui valid en el nostre cas. La matriu del nostre sistema és *sparse* o dispersa, i.e., té molts zeros. Es podria implementar, doncs, un mètode de Jacobi o Gauss-Seidel, per la seva eficiència en sistemes així, estudiats a Mètodes Numèrics 2. O introduir un mètode que és nou per nosaltres, no vist a la carrera, com és el cas del Mètode del Gradient Conjugat.

3. Eines de calcul numèric.

En aquest capítol exposo les eines de calcul numèric que he utilitzat per desenvolupar la meua implementació del FEM.

3.1. Triangulació de Delaunay.

Per implementar el FEM és necessari mallar el domini en que està definida la nostre EDP.

Definició 3.0.1. Una triangulació $\mathcal{T}(X)$ d'un conjunt de punts X és una família de triangles $\{T_i\}_i$ tals que:

- $\forall x \in X \quad \exists T_i$ tal que x és vèrtex de T_i
- $X = \cup_i T_i$
- Si $T_i \cap T_j \neq \emptyset \Rightarrow$ és vèrtex o costat d'ambdós

Definició 3.0.2. Siguin $T = \mathcal{T}(X)$ i $T' = \mathcal{T}(X)$ dues triangulacions diferents de X i $\theta(T)$ el conjunt dels angles de T . Diem que una triangulació T és millor que una triangulació T' si

$$\min_{\alpha} \{\alpha \in \theta(T)\} \geq \min_{\alpha'} \{\alpha' \in \theta(T')\}$$

Definició 3.0.3. Donat un conjunt de punts X existeix una triangulació $\mathcal{T}(X)$ tal que és millor o igual que totes les altres possibles, a aquesta triangulació se la denomina Triangulació de Delaunay.

Definició 3.0.4. Es diu que una triangulació T compleix la condició de Delaunay si tota circumferència circumscrita a un triangle de T no conte cap més vèrtex que els del triangle que circumscriu.

Proposició 3.1. Les triangulacions de Delaunay son aquelles que compleixen la condició de Delaunay

Observació Considerant esferes de dimensió n podem estendre aquests conceptes

La preposició anterior ens permet implementar un algoritme per trobar la millor triangulació donat un conjunt de punts.

3.2. Formula de Heró.

Donat un triangle T de costats a, b, c , la formula de Heró ens dona l'àrea del triangle.

Proposició 3.2. àrea de $T = \sqrt{s(s-a)(s-b)(s-c)}$ on $s = \frac{a+b+c}{2}$

Demostració. Per la llei del cosinus sabem que $\cos \theta = \frac{a^2+b^2-c^2}{2ab}$ d'aquí podem deduir que

$$\sin \theta = \frac{\sqrt{4a^2b^2 - (a^2+b^2-c^2)^2}}{2ab}$$

$$\begin{aligned} \text{Àrea} &= \frac{1}{2}(\text{base})(\text{altura}) = \frac{1}{2}ab \sin \theta \\ &= \frac{1}{4}\sqrt{4a^2b^2 - (a^2 + b^2 - c^2)^2} \\ &= \frac{1}{4}\sqrt{(2ab - (a^2 + b^2 - c^2))(2ab + (a^2 + b^2 - c^2))} \\ &= \frac{1}{4}\sqrt{(c^2 - (a - b)^2)((a + b)^2 - c^2)} \\ &= \frac{1}{4}\sqrt{(c - (a - b))(c + (a - b))((a + b) - c)((a + b) + c)} \end{aligned}$$

Com que $2s = a + b + c$ tenim que $\text{Àrea} = \sqrt{s(s-a)(s-b)(s-c)}$ □

Observació La formula de Heró és numèricament inestable per angles molt petits. Una formula alternativa més estable és:

$$\text{Àrea} = \frac{1}{4}\sqrt{(a + (b + c))(c - (a - b))(c + (a - b))(a + (b - c))}$$

on els costats estan reordenats tals que $a \leq b \leq c$. Els parèntesis són necessaris per guanyar l'estabilitat necessària.

3.3. Integral sobre un triangle.

En una etapa del FEM, és necessari integrar per sobre dels triangles de la triangulació. Per poder efectuar aquests càlculs numèricament he utilitzat aquesta formula:

$$\int_{T_j} f = J \int_T f = J \sum_i w_i f(z_i)$$

on:

- T_j son triangles de la triangulació
- T és el triangle de vèrtex $(0,0),(1,0),(0,1)$
- $J = \text{area}(T_j)/2$ és el Jacobià del canvi de variable
- z_i son punts de T
- w_i són els pesos de z_i

Per calcular $\text{area}(T_j)$ utilitzo la formula de Heró(3.2)

El que queda per determinar són els w_i . No he trobat cap mètode en que estiguessin determinats que em fes el pes, per tant, he buscat jo mateix com determinar els w_i . En el meu programa treballa amb funcions polinòmiques de dos variables de grau ≤ 3 , i.e., només tenen 10 termes. Com que no necessito més precisió amb 10 punts ja en tindre prou.

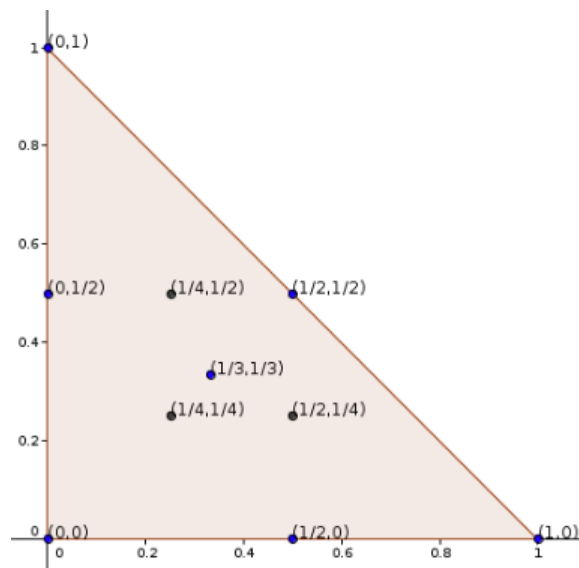
Per determinar els w_i hem d'agafar z_i més o menys repartits en T i resoldre el sistema següent:

$$\sum_i w_i f_j(z_i) = \int_T f_j$$

on:

$$f_j = \{1, x, y, x^2, xy, y^2, x^3, x^2y, xy^2, y^3\}$$

He agafat els punts:



$$\begin{aligned} z_1 &= (0, 0) & z_6 &= (1/2, 1/2) \\ z_2 &= (0, 1) & z_7 &= (1/4, 1/2) \\ z_3 &= (1, 0) & z_8 &= (1/2, 1/4) \\ z_4 &= (1/2, 0) & z_9 &= (1/4, 1/4) \\ z_5 &= (0, 1/2) & z_{10} &= (1/3, 1/3) \end{aligned}$$

i el resultat del sistema ha sigut:

$$\begin{aligned} w_1 &= 0,023027674514662817 & w_6 &= 0,05877736472532147 \\ w_2 &= 0,02302767451466331 & w_7 &= 0,06311441553077056 \\ w_3 &= 0,02302767451466335 & w_8 &= 0,06311441553077073 \\ w_4 &= 0,05877736472532045 & w_9 &= 0,063114415530775 \\ w_5 &= 0,058777364725320067 & w_{10} &= 0,06524163568773189 \end{aligned}$$

3.4. Mètode del Gradient Conjugat.

El mètode del gradient conjugat, és un mètode iteratiu de resolució de sistemes lineals, simètrics i positivament definit, que ens garanteix que amb n passos convergeix. Aquest mètode es pot entendre com una millora dels mètodes de descens, ens centrarem en el mètode *steepest descent*, utilitzant una ortogonalització similar a la de Gram-Schmidt.

3.4.1. Steepest Descent.

Volem resoldre el sistema $Ax = b$ on $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simètrica i definida positiva i $b \in \mathbb{R}^n$. Però per fer-ho considerem primerament la funció:

$$\phi(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - x^T b$$

i si calculem el gradient de ϕ

$$\nabla\phi(x) = Ax - b$$

veiem que clarament minimitzant ϕ resollem el sistema inicialment plantejat. Ara, doncs, hem passat a tenir que resoldre el problema:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \phi(x)$$

Com que la matriu és definida positiva podem assegurar que el x^* que resol el sistema és efectivament un mínim de ϕ . Donat un x_0 per minimitzar ϕ mirem la direcció definida per $-\nabla\phi(x_0)$ ja que és la de màxim pendent en el punt x_0 per tant calculem el següents punts x_k com:

$$x_{k+1} = x_k - \lambda_k p_k \text{ on } \lambda_k = \frac{p_k^T p_k}{p_k^T A p_k} \text{ i } p_k = \nabla\phi(x_k)$$

3.4.2. El mètode i la seva convergència.

Sovint en el mètode del *Steepest Descent* pot trobar direccions semblants en iterats diferents, fet que implica que es necessitin més direccions que la pròpia dimensió del sistema, teòricament necessitaria infinits iterats per trobar la solució exacta. La idea del mètode del gradient conjugat és:

- Agafar un conjunt ortogonal de direccions $\{d_i\}_{i=1}^n$
- Avançar un únic iterat en aquella direcció la distància necessària

Les dificultats doncs, son dues:

1. Calcular els vectors d_i
2. Calcular la distància necessària per avançar

Per calcular els vectors d_i , definiré dos conceptes:

Definició 3.2.1. Donats dos vectors no nuls u i v i una matriu A . Diem que són conjugats respecte A si $u^T A v = 0$

Definició 3.2.2. Definim l'operador $\langle u, v \rangle_A := u^T A v$

Proposició 3.3. \langle, \rangle_A és un producte escalar

Demostració. Recordem que $A = A^T$ i que $\forall u, v \ u^T A v > 0$

- Commutativitat

$$\langle u, v \rangle = u^T Av = (u^T Av)^T = v^T A^T u = v^T Au = \langle v, u \rangle$$

- Linealitat

$$\langle w, \lambda u + \mu v \rangle = w^T A(\lambda u + \mu v) = \lambda(w^T Au) + \mu(w^T Av)$$

□

Com solucionem els problemes anteriorment esmentats:

1. semblant al *Steepest Descent* agafem com a d_0 el gradient de $\phi(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - x^T b$:

$$d_0 = Ax_0 - b \text{ amb } x_0 = 0, \text{ generalment}$$

i els altres vectors de la base conjugats al gradient, d'aquí prove el nom del mètode; fixem-nos que no baixem pel gradient com en el *Steepest Descent*.

Signi $r_k = -\nabla\phi(x_k) = b - Ax_k$ volem que la següent direcció d_k sigui conjugada a r_k i a $d_i \forall i < k$. Per calcular-ho utilitzarem un mètode similar a l'ortonormalització de Gram-Schmidt:

$$d_k = r_k - \sum_{i=0}^{k-1} \frac{d_i^T Ar_k}{d_i^T Ad_i} d_i = r_k - \sum_{i=0}^{k-1} \frac{\langle d_i, r_k \rangle_A}{\langle d_i, d_i \rangle_A} d_i$$

tindrem doncs una base $\{d_i\}_i$ del nostre espai.

2. Signi \bar{x} el vector solució del nostre sistema, es pot expressar en funció de la base $\{d_i\}_i$:

$$\bar{x} = \sum \lambda_i d_i$$

Operant tenim que:

$$\begin{aligned} A\bar{x} &= \sum_{i=1}^n \lambda_i Ad_i \\ d_k^T A\bar{x} &= \sum_{i=1}^n \lambda_i d_k^T Ad_i \\ d_k^T b &= \sum_{i=1}^n \lambda_i \langle d_k, d_i \rangle_A \\ \langle d_k, b \rangle &= \lambda_k \langle d_k, d_k \rangle_A \\ \lambda_k &= \frac{\langle d_k, b \rangle}{\langle d_k, d_k \rangle_A} \end{aligned}$$

Per tant la successió de punts que agafem és:

$$x_{k+1} = x_k + \lambda_k d_k$$

Proposició 3.4. *Sigui $Ax = b$ un sistema lineal de dimensió n , on la matriu A és simètrica i definida positiva. I sigui \bar{x} la solució del sistema, llavors els mètode iteratiu definit per:*

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \alpha_k p^{(k)}$$

on: α_k és el valor de α t.q. minimitza $Q(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x$ $_{|x^{(k)} - \alpha p^{(k)}}$, $\alpha \in \mathbb{R}$

$$I p^{(k)} \in \{v_1, \dots, v_n\} \text{ t.q. } v_i^T A v_j = 0 \text{ si } i \neq j$$

compleix que $x^{(n)} = \bar{x} \forall x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$

Demostració. ■ Mirem que realment existeix el conjunt $\{v_1, \dots, v_n\}$

En la proposició 3.3 hem vist que $u^T A v = \langle u, v \rangle_A$ és producte escalar. Per tant donada una base qualsevol $\{u_1, \dots, u_n\}$ podem utilitzar l'ortogonalització de Gram-Schmidt amb aquest producte escalar. Això ens donarà el conjunt buscat, que a més serà base ortogonal de \mathbb{R}^n .

- Mirem quina relació hi ha entre els components de $x^{(1)}$ i $\bar{x} \forall x^{(0)} \in \mathbb{R}$, quan expressem els dos vectors en la base $\{v_1, \dots, v_n\}$ i agafem $p^{(0)} = v_k$

- Sabem que α_k minimitza $Q(x)_{|x^{(k)} - \alpha_k p^{(k)}}$ per tant:

$$\begin{aligned} Q(x^{(k)} - \alpha_k p^{(k)}) &= \frac{1}{2}(x^{(k)} - \alpha_k p^{(k)})^T A (x^{(k)} - \alpha_k p^{(k)}) - (x^{(k)} - \alpha_k p^{(k)})^T b \\ &= \frac{1}{2} \alpha_k^2 p^{(k)T} A p^{(k)} + \frac{1}{2} \alpha_k x^{(k)T} A p^{(k)} + \frac{1}{2} \alpha_k p^{(k)T} A x^{(k)} - \alpha_k p^{(k)T} b \\ &\quad + \frac{1}{2} x^{(k)T} A x^{(k)} - x^{(k)T} b \\ &= \alpha_k^2 \frac{1}{2} p^{(k)T} A p^{(k)} + \alpha_k (p^{(k)T} A x^{(k)} - p^{(k)T} b) + \frac{1}{2} x^{(k)T} A x^{(k)} - x^{(k)T} b \end{aligned}$$

Sabent que donada una paràbola $y = ax^2 + bx + c$ si $a > 0$ el mínim és igual a $-\frac{b}{2a}$, llavors aplicant que A és definida positiva:

$$\min_{\alpha_k} (Q(x)_{|x^{(k)} - \alpha_k p^{(k)}}) = \frac{p^{(k)T} A x^{(k)} - p^{(k)T} b}{p^{(k)T} A p^{(k)}}$$

- Mirem com son les components de \bar{x} :

Sabem que $\bar{x} = \sum_i^n a_i v_i$ i $A\bar{x} = b$ llavors:

$$\begin{aligned} v_k^T A \bar{x} &= v_k^T b \Leftrightarrow v_k^T A \sum_i^n a_i v_i = v_k^T b \\ &\Leftrightarrow \sum_i^n a_i v_k^T A v_i = v_k^T b \\ &\Leftrightarrow a_k v_k^T A v_k = v_k^T b \\ &\Leftrightarrow a_k = \frac{v_k^T b}{v_k^T A v_k} \\ &\Leftrightarrow a_k = \frac{\langle v_k, b \rangle}{\langle v_k, v_k \rangle_A} \end{aligned}$$

- Ara recordant que: $p^{(0)} = v_k$, $x^{(1)} = x^{(0)} - \alpha_1 p^{(0)}$, $x^{(0)} = \sum_i^n x_i^{(0)} v_i$

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= \frac{v_k^T (Ax^{(0)} - b)}{v_k^T Av_k} \\ &= \frac{v_k^T (A \sum_i^n x_i^{(0)} v_i - b)}{v_k^T Av_k} \\ &= \frac{x_k^{(0)} v_k^T Av_k - v_k^T b}{v_k^T Av_k} \\ &\Rightarrow \alpha_0 = x_k^{(0)} - \frac{v_k^T b}{v_k^T Av_k} \end{aligned}$$

Per tant la component k-essima de $x^{(1)}$ és $\frac{v_k^T b}{v_k^T Av_k}$ que és igual a \bar{x}_k

És a dir, com que ho hem provat $\forall x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ i $\forall k \leq n$, si agafem $p^{(k)} = v_k$, tindrem $x^{(n)} = \bar{x}$ \square

Observació La demostració anterior ens garanteix que amb n passos, on n és la dimensió del sistema, el nostre mètode troba la solució exacta. Per tant podríem considerar que el nostre mètode és directe. Tot i així, al afegir condicions de parada, podem fer que pari quan estem suficientment a prop de la solució. Per aquest motiu podem entendre el mètode del gradient conjugat com un mètode iteratiu.

Observació Encara que pugui semblar restrictiva la condició de que el sistema sigui definit positiu, en la implementació del FEM és molt comú treballar amb sistemes així.

4. Implementació del mètode dels elements finits

En aquesta secció vull explicar com he implementat el mètode, quines dificultats m'he trobat i quines eines he utilitzat per arreglar-ho.

4.1. Cas 1-dimensional

1. La formulació variacional del problema.

La nostre EDP queda de la forma:

$$\int_{\Omega} \nabla u(x) \nabla v(x) dx = \int_{\Omega} f(x) v(x) dx \quad \text{amb } u, v \in H_0^1$$

Però en el desenvolupament del mètode és necessari discretitzar el domini, Ω en el nostre cas. Com que $\Omega \in \mathbb{R}$ simplement contemplem un numero finit d'interval·ls disjunts, $\biguplus_i^n I_i \subset \Omega$. Utilitzant la linealitat de les integrals tenim que:

$$\sum_i^n \int_{I_i} \nabla u(x) \nabla v(x) dx = \sum_i^n \int_{I_i} f(x) v(x) dx \quad \text{amb } u, v \in H_0^1$$

2. Aproximació de la solució per funcions lineals d'un domini discretitzat.

En la meua implementació la discretització l'he fet amb uns interval·ls de la mateixa llargada. En altres casos podria ser interessant dividir el domini amb interval·ls d'alguna altre manera, però sempre disjunts.

Per fer el calcul de les integrals sobre els interval·ls $I_i = [x_i, x_{i+1}]$ he utilitzat el mètode numèric d'integració de Simpson après a l'assignatura de Mètodes Numèrics 1:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{6} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right]$$

3. Formulació i resolució del sistema lineal.

Un cop plantejat el sistema lineal, vaig resoldre'l aplicant Jacobi com he après a Mètodes Numèrics 2, la convergència d'aquest mètode amb una tolerància de 10^{-12} s'assoleix amb 147488 iterats quan treballem amb dimensió 200. Després de fer una mica de recerca i descobrir el mètode del gradient conjugat vaig implementar-lo i amb el mateix sistema i la mateixa tolerància només necessitava 5 iterats, massa diferència, però el resultat era el mateix. Evidentment és més útil el mètode del Gradient Conjugat.

4.2. Cas 2-dimensional

1. La formulació variacional del problema.

El nostre problema queda de la forma variacional següent:

$$\int_{\Omega} \nabla u(x, y) \nabla v(x, y) d(x, y) = \int_{\Omega} f(x, y) v(x, y) d(x, y) \quad \text{amb } u, v \in H_0^1$$

Però l'aproximació que nosaltres realitzem és sobre $\mathcal{T}(\Omega)$, per tant:

$$\int_{\mathcal{T}(\Omega)} \nabla u(x, y) \nabla v(x, y) d(x, y) = \int_{\mathcal{T}(\Omega)} f(x, y) v(x, y) d(x, y) \quad \text{amb } u, v \in H_0^1$$

Podem simplificar més gracies a la linealitat de les integrals:

$$\sum_{T \in \mathcal{T}(\Omega)} \int_T \nabla u(x, y) \nabla v(x, y) d(x, y) = \sum_{T \in \mathcal{T}(\Omega)} \int_T f(x, y) v(x, y) d(x, y) \quad \text{amb } u, v \in H_0^1$$

Per poder implementar aquests càlculs he aplicat un canvi de variable per portar els meus triangles a un triangle conegut. Jo he agafat el triangle T_0 amb vèrtex $(0, 0)$, $(1, 0)$, $(0, 1)$ de manera que el problema acaba quedant com:

$$\sum_{T \in \mathcal{T}(\Omega)} \int_{T_0} \nabla u(s, t) \nabla v(s, t) |\det(J)| d(s, t) = \sum_{T \in \mathcal{T}(\Omega)} \int_{T_0} f(s, t) v(s, t) |\det(J)| d(s, t)$$

on J és el Jacobià canvi: $T \rightarrow T_0$

2. Aproximació de la solució per funcions lineals d'un domini discretitzat.

■ Discretització:

Com que el nostre domini Ω pertany a \mathbb{R}^2 per discretitzar-lo hem d'utilitzar una triangulació. En el meu programa en C he utilitzat "Triangle" [6] un programa de domini lliure que malla assegurant que la triangulació trobada és de Delaunay.

Triangle necessita com a input un vector amb les coordenades dels punts i un altre amb els segments, per delimitar el domini en el que treballem. A més a més se li ha de passar una tira de caràcters que actuen com a controladors i et permeten efectuar coses com:

- Definir l'angle mínim dels triangles.
- Definir l'àrea màxima dels triangles.
- Refinar malles ja generades.
- Controlar l'output del programa.
- ...

Tot i aquests paràmetres de control els triangles que genera no són regulars.

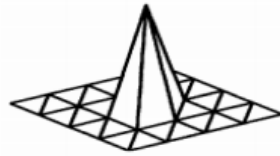
■ Definició de la base:

Un cop tenim el nostre domini discretitzat i sabem com podrem integrar sobre els petits triangles trobats, mirem com és la base en la que treballem:

Volem una base de funcions lineals $\{\phi_i\}_i$ de l'espai $H_0^1(\Omega)$ tal que:

$$\phi_i(x_j) = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}$$

Per tant queden funcions de la forma:



que es veu clarament que son de suport compacte.

Considerem un triangle arbitrari T de vèrtex $a = (a_x, a_y)$, $b = (b_x, b_y)$, $c = (c_x, c_y)$ llavors volem calcular ϕ_a sobre aquest triangle:

$$\text{Sigui } \phi_a = ux + vy + w \text{ i si apliquem que } \begin{cases} \phi_a(a) = 1 \\ \phi_a(b) = 0 \\ \phi_a(c) = 0 \end{cases}$$

Ens queda el sistema:

$$\begin{pmatrix} a_x & a_y & 1 \\ b_x & b_y & 1 \\ c_x & c_y & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Concloem, doncs, que:

$$\begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{b_y - c_y}{den} \\ \frac{b_x - c_x}{-den} \\ \frac{b_y c_x - b_x c_y}{-den} \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

on $den = -a_y b_x + a_x b_y + a_y c_x - b_y c_x - a_x c_y + b_x c_y$

En l'apartat anterior el problema queda de la forma:

$$\sum_{T \in \mathcal{T}(\Omega)} \int_{T_0} \nabla u \nabla v | \det(J) | d(s, t) = \sum_{T \in \mathcal{T}(\Omega)} \int_{T_0} f v | \det(J) | d(s, t)$$

on J és el Jacobià del canvi: $T \rightarrow T_0$

Ara que hem definit la base tenint en compte que $u, v \in H_0^1 \Rightarrow u = \sum_i u_i \phi_i$:

$$\sum_i u_i \int_{\mathcal{T}(\Omega)} \nabla \phi_i \nabla v dx = \int_{\mathcal{T}(\Omega)} f v dx \quad \text{amb } \phi_i, v \in H_0^1$$

per un altre costat, comprovar $\forall v \in H_0^1$ és equivalent a mirar-ho per la base $\{\phi_j\}_j$:

$$\forall j \quad \sum_i u_i \int_{\mathcal{T}(\Omega)} \nabla \phi_i \nabla \phi_j dx = \int_{\mathcal{T}(\Omega)} f \phi_j dx \quad \text{amb } \phi_i, \phi_j \in H_0^1$$

Si ara calculem els $\nabla \phi_a$ sobre T de vèrtex $a = (a_x, a_y)$, $b = (b_x, b_y)$, $c = (c_x, c_y)$ tenim que:

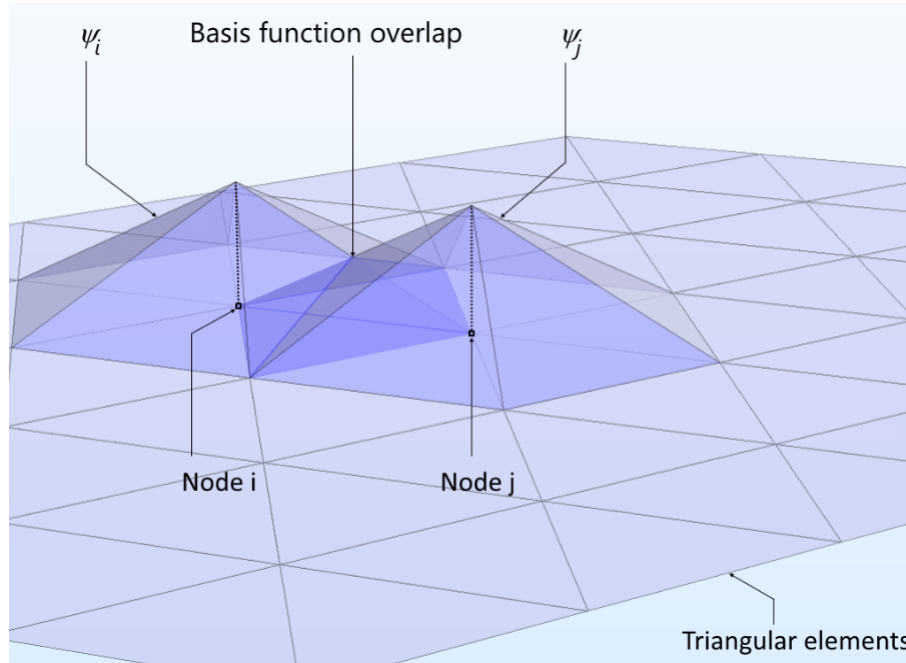
$$\nabla \phi_a = (b_y - c_y, -b_x + c_x) / den \text{ on } den \text{ és el de l'equació 4.1}$$

3. Formulació i resolució del sistema lineal.

Com hem vist anteriorment hi ha molts casos en que els elements de la nostre base són 0, tenint això en compte, podem simplificar una mica més els càlculs:

$$\forall j \quad \sum_i u_i \int_E \nabla \phi_i \nabla \phi_j dx = \int_E f \phi_j dx \quad \text{on } E = \text{supp}(\phi_i) \cap \text{supp}(\phi_j)$$

La superposició del suport de les funcions de la base es pot veure en la següent imatge:



Veiem que no tenim control sobre la forma de la intersecció dels suports.

La matriu del sistema que ens queda és:

$$A = (a_{i,j}) = \int_E \nabla \phi_i \nabla \phi_j dx$$

Per fer les assignacions en comptes de recorre els punts de la meua malla, he recorregut els triangles, ja que cada triangle influeix sempre en una submatriu de 3x3, en canvi els vèrtexs és més difícil de controlar en quines entrades influeix. La submatriu de A és de la forma:

Sigui $T_k \subset \mathcal{T}(\Omega)$ el triangle que estem recorrent i p_1, p_2, p_3 els seus vèrtex

$$\begin{bmatrix} \int_{T_k} \nabla \phi_{p_1} \nabla \phi_{p_1} & \int_{T_k} \nabla \phi_{p_1} \nabla \phi_{p_2} & \int_{T_k} \nabla \phi_{p_1} \nabla \phi_{p_3} \\ \int_{T_k} \nabla \phi_{p_2} \nabla \phi_{p_1} & \int_{T_k} \nabla \phi_{p_2} \nabla \phi_{p_2} & \int_{T_k} \nabla \phi_{p_2} \nabla \phi_{p_3} \\ \int_{T_k} \nabla \phi_{p_3} \nabla \phi_{p_1} & \int_{T_k} \nabla \phi_{p_3} \nabla \phi_{p_2} & \int_{T_k} \nabla \phi_{p_3} \nabla \phi_{p_3} \end{bmatrix}$$

És evident que quan recorreguem altres triangles algunes posicions es repetiran. Simplement hem d'anar sumant el resultat de les noves submatrius a les posicions ja

calculades. Per calcular el valor d'aquestes integrals utilitzem la fórmula anteriorment explicada i exposada en la secció 3.3

En la construcció de la matriu ens podem adonar que serà una matriu simètrica i amb molts 0, a més a més es pot demostrar que és definida positiva. Així doncs, gràcies a la seva eficàcia amb matrius d'aquest tipus, he programat el mètode del gradient conjugat 3.4. En la implementació d'aquest mètode he fet una funció específica pel càlcul del producte per la matriu, així si poguéssim simplificar aquest pas no hauria de modificar tota la funció del mètode

5. Exemples resolts

5.1. Cas 1-dimensional

Primerament en l'estudi d'aquest mètode vaig programar un cas d'una dimensió, per entendre els passos que segueix i començar-me a familiaritzar amb la teoria que el motiva. L'exemple utilitzat està preparat per poder controlar fàcilment els possibles errors del programa. No és difícil veure que la nostra funció dada és el Jacobià d'una funció coneguda. Exposo l'exemple a continuació:

1. Formulació variacional de la EDP:

$$-\Delta u = \pi^2 \sin(\pi x) \text{ a } [0, 1] \text{ i } u(0) = u(1) = 0$$

Considerem l'espai $V := H_0^1([0, 1])$ definit en (2.6.7). Si multipliquem per $v \in V$ i integrem als dos costats de la igualtat llavors el nostre problema queda de la forma:

$$-\int_0^1 \Delta u v dx = \int_0^1 \pi^2 \sin(\pi x) v dx \quad \forall v \in V$$

aplicant la integral per parts i que $v(0)=v(1)=0$

$$-\int_0^1 u' v' dx = \int_0^1 \pi^2 \sin(\pi x) v dx \quad \forall v \in V$$

i tornant a la notació de productes escalars per $L^2([0, 1])$

$$\langle u', v' \rangle = \langle \pi^2 \sin(\pi x), v \rangle \quad \forall v \in V$$

2. Aproximació de la solució per funcions lineals d'un domini discretitzat

V és un espai vectorial de dimensió infinita. Però perquè els càlculs siguin computacionalment viables hem de treballar amb un espai de dimensió finita.

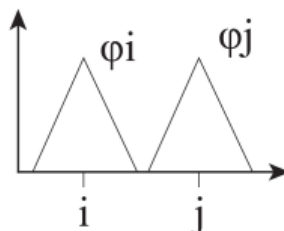
Agafem $M+1$ punts $\{x_j\}_j$ equidistants de l'interval $[0, 1]$, és a dir:

$$x_0 = 0 \text{ i } x_j = x_{j-1} + h \text{ on: } h = \frac{1}{M}$$

i definim els intervals I_j com $I_j = [x_{j-1}, x_{j+1}]$.

Considerem l'espai $V_h = \{v \in V \text{ t.q. } v \text{ és lineal a } I_j \forall j\}$ aquest espai és de dimensió finita. Sigui $\{e_i\}$ de la forma:

$$e_i(x) = \begin{cases} \frac{1}{h}(-x_{i-1} + x) & \text{si } x \in [x_{i-1}, x_i] \\ \frac{1}{h}(x - x_{i+1}) & \text{si } x \in [x_i, x_{i+1}] \\ 0 & \text{si } x \notin [x_{i-1}, x_{i+1}] \end{cases}$$



llavors són base de funcions de V_h , i.e.:

$$\forall v \in V_h \quad \exists a \in \mathbb{R}^M \text{ t.q. } v = \sum_{i=1}^M a_i e_i$$

Com que $\{e_i\}$ és base de V_h buscar $\forall v \in V_h$ és equivalent a $\forall e_i$. El problema queda:

$$\langle u', e'_i \rangle = \langle \pi^2 \sin(\pi x), e_i \rangle \quad \forall e_i$$

A més a més com que $u \in V_h$ tenim que:

$$u(x) = \sum_{i=1}^M u_i e_i \quad u_i \in \mathbb{R}$$

per tant el nostre problema es redueix a resoldre el sistema lineal:

$$\sum_{i=1}^M u_i \langle e'_i, e'_j \rangle = \pi^2 \langle \sin(\pi x), e_j \rangle \quad \forall e_j$$

Observació: El fet de discretitzar el nostre domini i agafar un espai més petit és un dels punts on es genera l'error d'aproximació d'aquest mètode.

3. Formulació i resolució del sistema lineal

El sistema anterior s'expressa matricialment de la forma:

$$Au = b \text{ on } \begin{cases} A = (a_{ij})_{ij}, & a_{ij} = \langle e'_i, e'_j \rangle \\ b = (b_j)_j, & b_j = \pi^2 \langle \sin(\pi x), e_j \rangle \end{cases}$$

Tenint en compte la construcció anterior tenim que:

$$\begin{aligned} a_{ij} &= \int_0^1 e'_i(x) e'_j(x) dx = \begin{cases} 0 & \text{si } |i-j| > 1 \\ \neq 0 & \text{altrament} \end{cases} \\ a_{ii} &= \int_0^1 (e'_i(x))^2 dx = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \frac{1}{h^2} dx = \frac{2}{h} \\ a_{ii+1} &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} -\frac{1}{h^2} dx = -\frac{1}{h} \\ a_{ii-1} &= \int_{x_{i-1}}^{x_i} -\frac{1}{h^2} dx = -\frac{1}{h} \end{aligned}$$

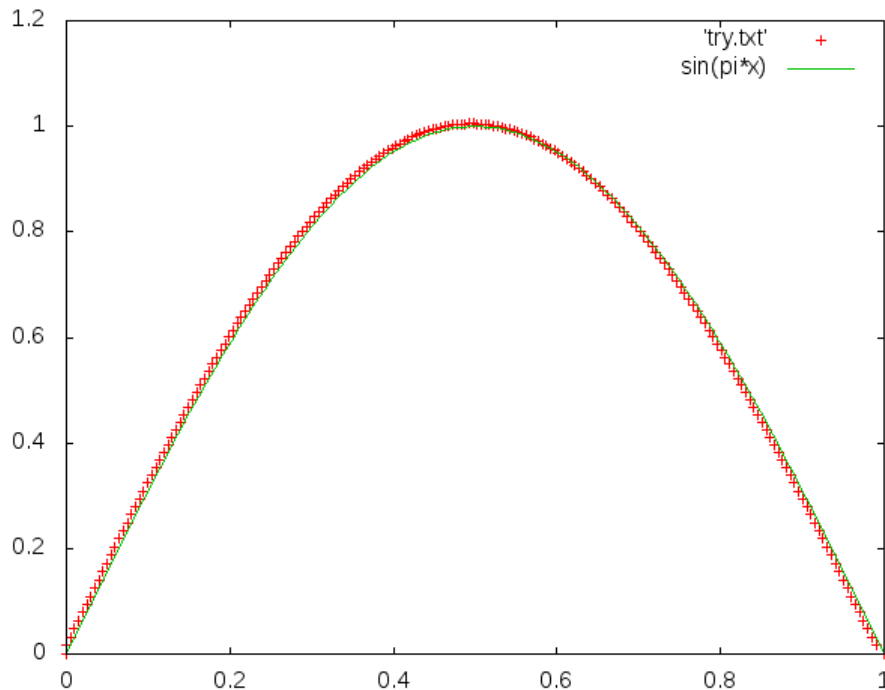
és a dir queda de la forma:

$$A = \frac{1}{h} \begin{pmatrix} 2 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 2 & -1 \\ 0 & 0 & \dots & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

es veu clarament que la matriu A és definida positiva per tant podem aplicar el mètode del gradient conjugat (3.4) per resoldre el sistema plantejat.

4. Resultats.

Aquesta és l'aproximació assolida amb un error del $9.998669e-13$ i 200 punts:



5.2. Cas 2-dimensional

Tenint en compte la secció de la implementació que he dut a terme aquí exposo els resultats de dos exemples que he analitzat.

5.2.1. Exemple del quadrat

1. Formulació variacional de la EDP

Sigui la nostre EDP:

$$-\Delta u = 2x(x-1) - 2y(y-1) \text{ a } \Omega = [0, 1]^2 \text{ i } u(\partial\Omega) = 0$$

Considerem l'espai $V := H_0^1(\Omega)$ definit en (2.6.7). Si multipliquem per $v \in V$ i integrem als dos costats de la igualtat llavors el nostre problema queda de la forma:

$$-\int_{\Omega} \Delta u v dx = \int_{\Omega} [2x(x-1) - 2y(y-1)] v dx \quad \forall v \in V$$

aplicant la identitat de Green i que $v(\partial\Omega) = 0$

$$-\int_{\Omega} \nabla u \nabla v dx = \int_{\Omega} [2x(x-1) - 2y(y-1)] v dx \quad \forall v \in V$$

i tornant a la notació de productes escalars per $L^2(\Omega)$

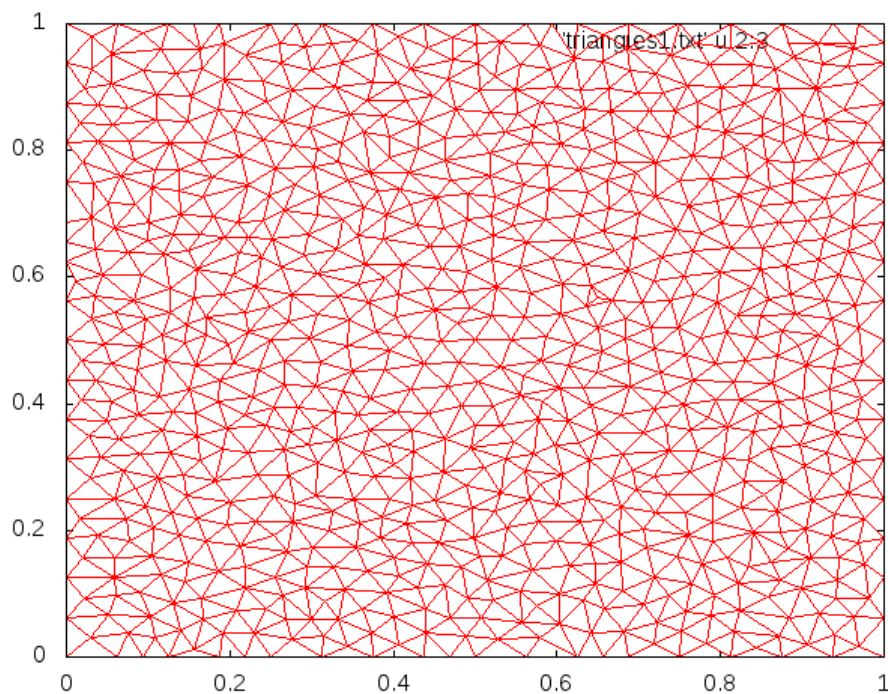
$$\langle \nabla u, \nabla v \rangle = \langle 2x(x-1) - 2y(y-1), v \rangle \quad \forall v \in V$$

2. Aproximació de la solució per funcions lineals d'un domini discretitzat.

Com en el cas 1 dimensional volem discretitzar el domini, $[0, 1]^2$ en el nostre cas. Per fer-ho he utilitzat el programa *Triangle* [6]: li he donat com a input:

- els punts: (0,0), (1,0), (0,1), (1,1)
- els segments que formen el quadrat
- la cadena de caràcters: -zpq20a0.01 . Que significa:
 - -z: numera tots els elements començant pel 0.
 - -p: la triangulació que retorna és un graf pla
 - -q20: l'angle mínim de la triangulació és 20
 - -a0.01: l'àrea mínima de la triangulació és 0.01

El programa m'ha retornat aquesta triangulació $\mathcal{T}(\Omega)$:

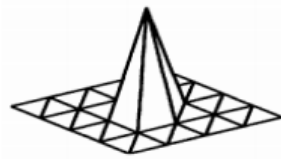


nº vèrtex= 808 , nº triangles= 1539

Un cop tinc el domini discretitzat necessitem definir una base finita de funcions lineals $\{\phi_i\}_i$ de $V_a \subset V$, considerem doncs:

$$\phi_i(x_j) \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}$$

és a dir la base te la forma:



Com hem vist en la secció anterior sistema que hem de resoldre és:

$$\forall j \quad \sum_i u_i \int_{\mathcal{T}(\Omega)} \nabla \phi_i \nabla \phi_j dx = \int_{\mathcal{T}(\Omega)} f \phi_j dx \quad \text{amb } \phi_i, \phi_j \in V_a$$

en el nostre cas $\nabla \phi_i$ és constant $\forall i$ fet que ens ha facilitat molt els càlculs

3. Formulació i resolució del sistema lineal.

El sistema lineal resultant s'expressa de forma matricial com:

$$Au = b \quad \text{on} \quad \begin{aligned} A &= (a_{ij})_{ij}, & a_{ij} &= \langle \nabla \phi_i, \nabla \phi_j \rangle \\ b &= (b_j)_j, & b_j &= \langle 2x(x-1) - 2y(y-1), \phi_j \rangle \end{aligned}$$

veient la construcció que hem fet i l'explicació de la implementació en 4.2 tenim que:

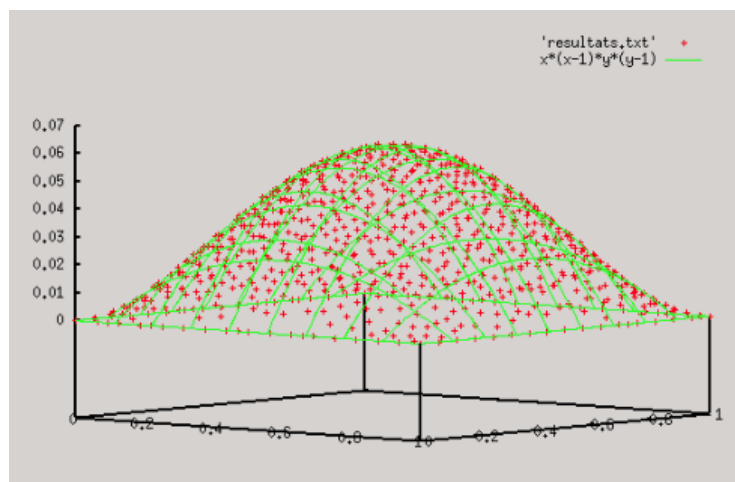
$$a_{ij} = \int_{T_k} \nabla \phi_i(x) \nabla \phi_j(x) dx = \begin{cases} 0 & \text{si } T_k \notin \text{supp}(\phi_i) \cap \text{supp}(\phi_j) \\ \neq 0 & \text{altrament} \end{cases}$$

$$a_{ii} = \int_{T_k} (\nabla \phi_i(x))^2 dx = \begin{cases} 0 & \text{si } T_k \notin \text{supp}(\phi_i) \\ \neq 0 & \text{altrament} \end{cases}$$

Un cop definit el sistema he utilitzat el mètode del gradient conjugat 3.4 per resoldre'l, l'he resol amb una tolerància de 10^{-16} ha necessitat 135 iterats.

4. Resultats.

Aquesta és l'aproximació assolida amb un error del 1.196531e-04:



5.2.2. Exemple del disc

1. Formulació variacional de la EDP

Sigui la nostre EDP:

$$-\Delta u = 4 \text{ a } \Omega = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 | x^2 + y^2 = 1\} \text{ i } u(\partial\Omega) = 0$$

Considerem l'espai $V := H_0^1(\Omega)$ definit en (2.6.7). Si multipliquem per $v \in V$ i integrem als dos costats de la igualtat llavors el nostre problema queda de la forma:

$$-\int_{\Omega} \Delta u v dx = \int_{\Omega} 4v dx \quad \forall v \in V$$

aplicant la identitat de Green i que $v(\partial\Omega) = 0$

$$-\int_{\Omega} \nabla u \nabla v dx = \int_{\Omega} 4v dx \quad \forall v \in V$$

i tornant a la notació de productes escalars per $L^2(\Omega)$

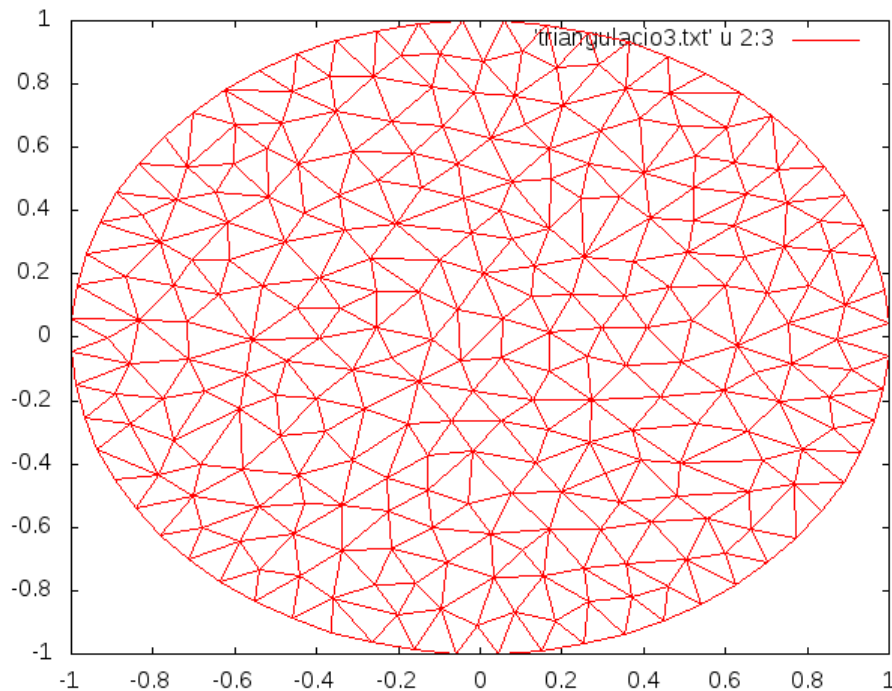
$$\langle \nabla u, \nabla v \rangle = \langle 4, v \rangle \quad \forall v \in V$$

2. Aproximació de la solució per funcions lineals d'un domini discretitzat.

Com en el cas anterior he utilitzat el programa *Triangle* [6] per discretitzar , $\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 | x^2 + y^2 = 1\}$ en el nostre cas. Per fer-ho he : li he donat com a input:

- 60 punts equidistants de la vora de Ω
- els segments que delimiten la circumferència entre els punts donats
- la cadena de caràcters: -zpq20a0.01 ; la mateixa que l'exemple anterior

El programa m'ha retornat aquesta triangulació $\mathcal{T}(\Omega)$:



nº vèrtex= 276 , nº triangles= 490

3. Formulació i resolució del sistema lineal.

El sistema lineal resultant s'expressa de forma matricial com:

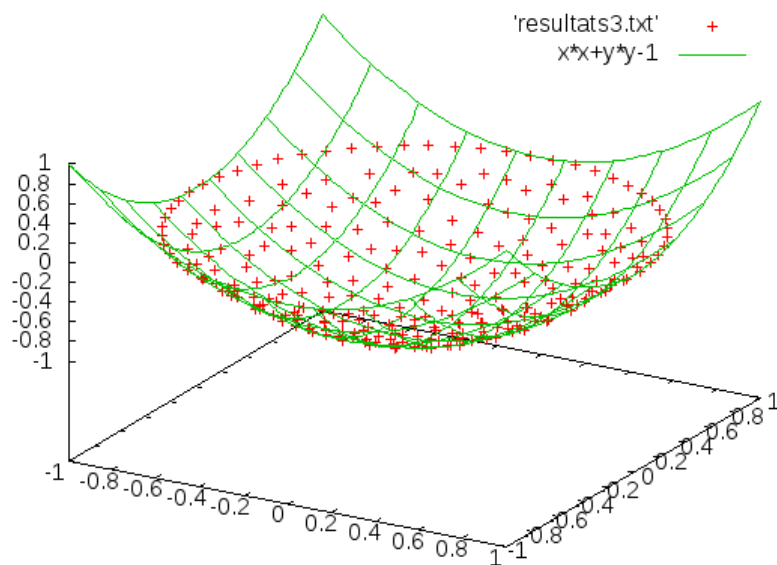
$$Au = b \text{ on } \begin{aligned} A &= (a_{ij})_{ij}, & a_{ij} &= \langle \nabla \phi_i, \nabla \phi_j \rangle \\ b &= (b_j)_j, & b_j &= \langle 4, \phi_j \rangle \end{aligned}$$

veient la construcció que hem fet i l'explicació de la implementació en 4.2 he definit el sistema.

Un cop definit el sistema he utilitzat el mètode del gradient conjugat 3.4 per resoldre'l, l'ha resol amb una tolerància de 10^{-16} , ha necessitat 77 iterats.

4. Resultats.

Aquesta és l'aproximació assolida amb un error del 4.947876e-03:



6. Importància i usos del Mètode dels Elements Finites

El mètode dels elements finits o FEM és una eina molt utilitzada en l'enginyeria per la seva versatilitat. El software desenvolupat a partir del FEM facilita la visualització de situacions com: l'aplicació de pesos o calor a estructures de diferent complexitat geomètrica, la simulació de problemes de fluids o d'electromagnetisme...

6.1. Comparació FEM amb FDM

Un altre mètode numèric per resoldre EDP's és el mètode de les diferències finites (FDM). És un mètode molt utilitzat però el FEM aporta unes quantes millores:

- El guany principal del FEM és la capacitat de treballar amb objectes geomètrics complexos amb molta facilitat. EL FDM necessita implementar-se amb dominis rectangulars o similars.
- Per un altre costat el FDM és més fàcil d'implementar que el FEM.
- Hi ha casos particulars en que es podria considerar el FDM un cas particular del FEM. Per exemple si resolent una equació de Poisson utilitzem una malla de quadrats partits per la meitat per considerar els triangles.
- En general les aproximacions assolides pel FEM són més bones que les del FDM, però existeix una forta dependència del problema que es vol solucionar. Així que és fàcil trobar contra exemples d'aquesta afirmació.

7. Conclusions

L'objectiu del meu treball era aprendre el mètode dels elements finits (FEM), tant la vessant teòrica com la seva possible implementació. Investigant la teoria rere el FEM, he après alguna de les limitacions dels espais de Hilbert, la impossibilitat de derivar. I això m'ha portat a veure i descobrir la derivada respecte distribucions o derivada dèbil i els espais de Sobolev. Tot hi haver cursat l'assignatura d'Anàlisi Real i Funcional, la dificultat d'aquest estudi ha suposat una de les traves principals del treball. És per això que es podria investigar una mica més sobre aquests espais, tot hi que és una matèria d'estudi digne d'un Treball de fi de grau propi.

En els exemples en què he programat i aplicat el FEM, he obtingut un error $< 10^{-12}$ en el cas 1-dimensional i error $> 10^{-4}$ en el cas 2-dimensional. Aquesta important diferència és deguda a dos factors, bàsicament:

- La diferència de complexitat en les dues dimensions. És força més fàcil controlar els paràmetres en dimensió 1 que en dimensió 2.
- En dimensió 1 no he guardat tota la matriu, cosa que si que he fet en dimensió 2. Això fa que tingui una limitació en la precisió en que treballem en el segon cas. És per aquest motiu que considero el meu programa purament acadèmic.

Tot i aquests entrebancs he pogut programar el mètode dels elements finits satisfactòriament i considero que l'he après i em serà útil en la meva carrera professional.

Tant és la seva utilitat que és podria aplicar en EDP's de frontera mòbil, casos de dimensió 3, EDP's no autònomes o EDP's no lineals. Tots aquests casos i aplicacions es podrien desenvolupar en una continuació d'aquest treball i serien ideals per seguir la meua recerca en la idea inicial que tenia pel meu Treball de fi de grau

8. Bibliografia

Referencias

- [1] Haim Brezis, *Functional analysis, Sobolev spaces and partial differential equations*, New York : Springer, cop. 2011
- [2] Joan Cerdà, *Linear functional analysis* Providence, R.I. : American Mathematical Society ; Madrid : Real Sociedad Matemática Española, cop. 2010
- [3] Mark S. Gockenbach, *Understanding And Implementing the Finite Element Method*, Society for Industrial and Applied Mathematics, 2006
- [4] Gene H. Golub, Charles F. van Loan, *Matrix computations*, Baltimore, Md. : The Johns Hopkins University Press, 2013
- [5] Pierre-Arnaud Raviart, J. H. Thomas, *Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles*, Paris [etc.] : Masson, 1983
- [6] Jonathan Richard Shewchuk, *Triangle: Engineering a 2D Quality Mesh Generator and Delaunay Triangulator*, in Applied Computational Geometry: Towards Geometric Engineering (Ming C. Lin and Dinesh Manocha, editors), volume 1148 of Lecture Notes in Computer Science, pages 203-222, Springer-Verlag, Berlin, May 1996. (From the First ACM Workshop on Applied Computational Geometry.)