David Cohen (david.cohen@chalmers.se) Chalmers & GU

STUDIO I

Detta datalab är inspirerat av det som Fardin Saedpanah gav i 2019.
An English version is attached at the end of the document.

1. FEM för konvektion–diffusionsproblem

Vi skall härleda den kontinuerliga, linjära finita elementmetoden, cG(1), för randvärdesproblem i en dimension. Proceduren leder till ett linjärt ekvationssystem av typen $A\boldsymbol{\xi} = \mathbf{b}$. Här är A en koefficientmatris, $\boldsymbol{\xi}$ en vektor med värden på den approximativa lösningen i vissa noder, och $\mathbf{b}$ kallas för lastvektor och innehåller bidragen från eventuell källa och randtermer i differentialekvationen. Mer specifikt ska vi här utvidga beskrivningen av metoden för den stationära värmeledningsekvationen i Kapitel 4.3 (compendium) eller Kapitel 3.3 (bok), till fallet som också innehåller en *konvektionsterm*.

Till att börja med betraktar vi randvärdesproblem med homogena Dirichletrandvillkor. Vi illustrerar proceduren för en konkret problem nedan.

Problem: Betrakta det stationära konvektion-diffusionsproblemet

$$\begin{aligned} &-Du''(x) + \frac{1}{2}u'(x) = 1, \quad 0 < x < \pi, \\ &u(0) = u(\pi) = 0, \end{aligned} \tag{1}$$

där D är en positiv konstant (diffusionskonstant). Använd en likformig partition $\mathcal{T}_h$ av intervallet $[0, \pi]$ till $m + 1$ delintervall (med längd $h = \frac{\pi}{m+1}$) och bestäm koefficientmatrisen A och lastvektorn $\mathbf{b}$ för cG(1)-approximationen av problemet (1).

(Se också Welty et al, Fundamentals of Momentum, Heat and Mass transfer (6th ed.), ekvation (23-21) i en rumsdimension, med $v = 1/2$ och $R_A = 1$).

Lösning: Vi vill konstruera en approximativ lösning u_h i ett ändligdimensionellt rum av kontinuerliga, styckvis linjära funktioner på partitionen $\mathcal{T}_h$.

Målet är att härleda ett linjärt ekvationssystem $A\boldsymbol{\xi} = \mathbf{b}$, för de obekanta nodvärdena $\xi_j = u_h(x_j)$, $j = 1, \ldots, m$, där $x_j = jh$, för $j = 1, \ldots, m$, är noderna i partitionen $\mathcal{T}_h$. Notera att $\xi_0 = \xi_{m+1} = 0$ är givna randdata.

Både den kontinuerliga lösningen och testfunktioner är i Hilbertrummet

$$V^0 := H_0^1 = \left\{ w\colon [0, \pi] \to \mathbb{R} \, : \int_0^\pi \left(w(x)^2 + w'(x)^2 \right) \mathrm{d}x < \infty, \quad w(0) = w(\pi) = 0 \right\}.$$

För att ta fram en *variationsformulering* multiplicerar vi ekvationen (1) med en testfunktion $v \in V^0$ och integrerar över $(0, \pi)$. Efter partiell integration i första integralen får vi

$$-Du'(\pi)v(\pi) + Du'(0)v(0) + D\int_0^\pi u'(x)v'(x)\,\mathrm{d}x + \frac{1}{2}\int_0^\pi u'(x)v(x)\,\mathrm{d}x = \int_0^\pi v(x)\,\mathrm{d}x.$$

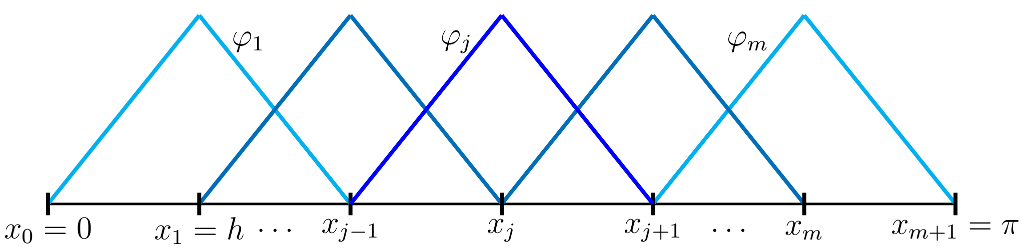
Då $v(0) = v(\pi) = 0$ ger detta följande variationsformulering:

(VF) Finn $u \in V^0$ så att $D\int_0^\pi u'(x)v'(x)\,\mathrm{d}x + \frac{1}{2}\int_0^\pi u'(x)v(x)\,\mathrm{d}x = \int_0^\pi v(x)\,\mathrm{d}x, \quad \forall v \in V^0.$

För att kunna lösa problemet med hjälp av datorn söker vi approximativa lösningar i ett ändligdimensionellt funktionsrum. I cG(1)-metoden söker vi styckvis linjära lösningar u_h i rummet

$$V_h^0 := \{\varphi \in V^0 : \varphi \text{ är kontinuerlig, styckvis linjär på partitionen } \mathcal{T}_h\}.$$

Rummet V_h^0 kan beskrivas med hjälp av basfunktioner φ_j, för $j = 1, \ldots, m$, det vill säga alla *fullständiga hattfunktioner* φ_j som är skilda från noll på $[x_{j-1}, x_{j+1}]$, för $j = 1, \ldots, m$, se Figur 1. Observera att eftersom $V_h^0 \subset V^0$ gäller att $u_h(0) = u_h(\pi) = 0$, därför behövs inga basfunktioner i noderna $x_0 = 0$, respektive $x_{m+1} = \pi$.



FIGUR 1. Basfunktioner (hattfunktioner) φ_j i partitionen $\mathcal{T}_h$.

Hattfunktionerna kan skrivas

$$\varphi_j(x) = \begin{cases} \frac{1}{h}(x - x_{j-1}), & x \in [x_{j-1}, x_j) \\ \frac{1}{h}(x_{j+1} - x), & x \in [x_j, x_{j+1}) \\ 0, & \text{annars.} \end{cases}, \qquad j = 1, \ldots, m$$

Finita elementformuleringen (den diskreta variationsformuleringen) är:

(FEM)

Finn $u_h \in V_h^0$ så att $D\int_0^\pi u_h'(x)\chi'(x)\,\mathrm{d}x + \frac{1}{2}\int_0^\pi u_h'(x)\chi(x)\,\mathrm{d}x = \int_0^\pi \chi(x)\,\mathrm{d}x, \quad \forall \chi \in V_h^0.$

Eftersom $\{\varphi_j\}_{j=1}^m$ är en bas för V_h^0 kan vi skriva $u_h(x) = \sum_{j=1}^m \xi_j \varphi_j(x)$, med några (okända) koefficienter (koordinater) ξ_j.

Genom att sätta in u_h in i (FEM), och välja $\chi = \varphi_i(x)$, $i = 1, \ldots, m$ får vi

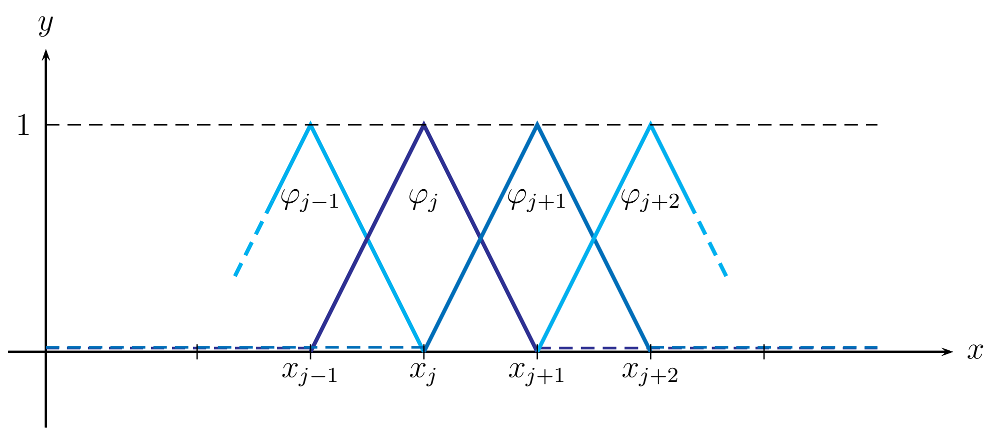
$$\sum_{j=1}^{m} \Big(D \int_0^\pi \varphi_j'(x)\varphi_i'(x)\,\mathrm{d}x + \frac{1}{2}\int_0^\pi \varphi_j'(x)\varphi_i(x)\,\mathrm{d}x \Big) \xi_j = \int_0^\pi \varphi_i(x)\,\mathrm{d}x, \quad i = 1, \ldots, m,$$

dvs m ekvationer (för $i = 1, \ldots, m$) och m obekanta $\{\xi_j\}_{j=1}^m$.

På matrisform svarar detta mot $A\boldsymbol{\xi} = \mathbf{b}$ med $A = DS + \frac{1}{2}C$, där S $(= A_{\text{unif}})$ är styvhetsmatrisen som redan har beräknats, se kapitel 4 i compendium (eller kapitel 3 i boken),

$$S = \frac{1}{h}\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \ldots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ldots & \ldots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \ldots & \ldots & \ldots & -1 & 2 \end{bmatrix}.$$

För att beräkna elementen i konvektionsmatrisen C inser vi, som tidigare, att endast c_{ij} med $|i-j| \leq 1$ kommer att ge bidrag (vilket resulterar i en tridiagonal matris), se Figur 2.



FIGUR 2. φ_j överlappar bara med sig själv, φ_{j-1} och φ_{j+1}.

Elementen i den *anti-symmetriska konvektionsmatrisen* C,

$$c_{ij} = \int_0^\pi \varphi_j'(x)\varphi_i(x)\,\mathrm{d}x,$$

kan lätt beräknas genom att beräkna integralerna

$$
(2)\qquad \begin{cases}
c_{ij} = 0, & \text{för} \quad |i-j| > 1 \\
c_{ii} = \int_0^\pi \varphi_i(x)\varphi_i'(x)\,\mathrm{d}x = 0, & \text{för} \quad i = 1,\dots,m \\
c_{i,i+1} = \int_0^\pi \varphi_i(x)\varphi_{i+1}'(x)\,\mathrm{d}x = 1/2, & \text{för} \quad i = 1,\dots,m \\
c_{i+1,i} = \int_0^\pi \varphi_{i+1}(x)\varphi_i'(x)\,\mathrm{d}x = -1/2, & \text{för} \quad i = 1,\dots,m.
\end{cases}
$$

Se även kapitel 7.4 i compendium (5.3 i boken).

Slutligen beräknas lastvektorn $\mathbf{b}$:s element b_i som

$$
b_i = \int_0^\pi \varphi_i(x)\,\mathrm{d}x = \{\text{arean under basfunktionen } \varphi_i\} = \frac{2h \cdot 1}{2} = h, \quad i = 1,\dots,m.
$$

Alltså har vi

$$
C = \frac{1}{2}\begin{bmatrix}
0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
-1 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\
0 & -1 & 0 & 1 & \dots & 0 \\
\vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\
0 & \dots & \dots & -1 & 0 & 1 \\
0 & \dots & \dots & \dots & -1 & 0
\end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = h\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}.
$$

2. Uppgifter

(a) Implementera finita elementmetoden för problem (1), som beskrivs ovan, i Matlab. Det vill säga, skriv en funktionsfil (eller skriptfil) som, givet en diffusivitetskoefficient D och en steglängd h (eller antal delintervall m), beräknar lösningsvektorn $\boldsymbol{\xi}$ genom att lösa $A\boldsymbol{\xi} = \mathbf{b}$.

Tips: På kursidan i Canvas finns en mall för Matlab-filen som ni kan använda som utgångspunkt.

(b) Péclettalet Pe (som studeras i kursen i transportprocesser) definieras som kvoten mellan konvektiv och diffusiv transport, det vill säga här (med konvektionshastigheten $v = 1/2$ och intervall-längden π)

$$\mathrm{Pe} = \frac{\text{konvektion}}{\text{diffusion}} = \frac{\frac{1}{2}\pi}{D} \propto \frac{1}{D}.$$

Studera, genom att jämföra finita elementapproximationen med den exakta lösningen till (1) (den senare kan beräknas för hand), vilken steglängd h som krävs för att få en bra noggrannhet i finita element approximationen i två fall:

Fall 1: $\mathrm{Pe} \approx 1$, alltså $D \approx 1$.

Fall 2: $\mathrm{Pe} \gg 1$, alltså $D \ll 1$ (konvektionsdominerat).

Redovisa resultaten grafiskt!

Tips: Att plotta styckvis linjära finita elementapproximationer i Matlab är enkelt, eftersom $u_h(x_j) = \xi_j$ och Matlab ritar räta linjer mellan nodvärden automatiskt, men glöm inte randdata $u_h(0) = u_h(\pi) = 0$!

1. FEM for convection-diffusion problems

We shall derive the continuous linear finite element method, cG(1), for boundary value problems in dimension one. This procedure gives a linear system of equation of the form $A\boldsymbol{\xi} = \mathbf{b}$. Here, A is a matrix, $\boldsymbol{\xi}$ a vector of approximation to the solution of some BVP at given nodes, and $\mathbf{b}$ is the last vector, which contains possible source or boundary terms. More specifically, we will extend the description of FEM seen in the lecture (Chapter 3.3 of the book) to the case of a stationary heat equation with a convection term.

To begin with, let us consider a BVP with homogeneous Dirichlet BC.

Problem: Consider the stationary convection-diffusion problem

$$
\begin{aligned}
&-Du''(x) + \frac{1}{2}u'(x) = 1, \quad 0 < x < \pi, \\
&u(0) = u(\pi) = 0,
\end{aligned} \tag{3}
$$

where the diffusion constant D is positive. Consider the uniform partition $\mathcal{T}_h$ of the interval $[0, \pi]$ with $m+1$ elements (of length $h = \frac{\pi}{m+1}$). Determine the matrix A and last vector $\mathbf{b}$ for the cG(1) approximation of the problem (3).

(See also Welty et al, Fundamentals of Momentum, Heat and Mass transfer (6th ed.), equation (23-21) in one dimension, with $v = 1/2$ and $R_A = 1$).

Solution: We shall construct a numerical approximation u_h in the finite dimensional space of continuous and piecewise linear functions on the partition $\mathcal{T}_h$.

The goal is to derive the resulting linear system of equations $A\boldsymbol{\xi} = \mathbf{b}$, for the unknowns $\xi_j = u_h(x_j)$, $j = 1, \ldots, m$, where $x_j = jh$, for $j = 1, \ldots, m$, are the nodes of the partition $\mathcal{T}_h$. Observe that $\xi_0 = \xi_{m+1} = 0$ are the given BC.

Both the continuous solution and the test functions are in the Hilbert space

$$
V^0 := H_0^1 = \left\{ w \colon [0, \pi] \to \mathbb{R} \, : \int_0^\pi \left(w(x)^2 + w'(x)^2 \right) \mathrm{d}x < \infty, \quad w(0) = w(\pi) = 0 \right\}.
$$

To produce a *variation formulation*, one multiplies the equation (3) with a test function $v \in V^0$ and integrate over $(0, \pi)$. After a partial integration in the first integral, one gets

$$
-Du'(\pi)v(\pi) + Du'(0)v(0) + D\int_0^\pi u'(x)v'(x)\,\mathrm{d}x + \frac{1}{2}\int_0^\pi u'(x)v(x)\,\mathrm{d}x = \int_0^\pi v(x)\,\mathrm{d}x.
$$

Since $v(0) = v(\pi) = 0$, one obtains the variation formulation

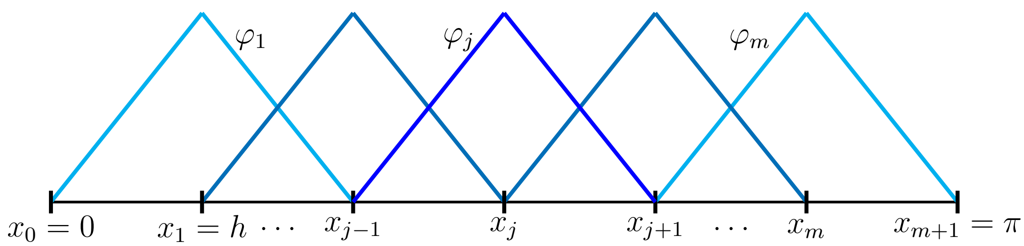
(VF)

$$
\text{Find } u \in V^0 \text{ such that } D\int_0^\pi u'(x)v'(x)\,\mathrm{d}x + \frac{1}{2}\int_0^\pi u'(x)v(x)\,\mathrm{d}x = \int_0^\pi v(x)\,\mathrm{d}x, \quad \forall v \in V^0.
$$

In order to find a numerical approximation of the above problem with a computer, one looks for an approximation in a finite dimensional space of functions. For the cG(1) method, one looks for a piecewise linear function u_h in the space

$$V_h^0 := \{\varphi \in V^0 : \varphi \text{ is continuous and piecewise linear on the partition } \mathcal{T}_h\}.$$

The space V_h^0 can be described with the help of the basis functions φ_j, for $j = 1, \ldots, m$. That is all *complete hat functions* φ_j which are non-zero on $[x_{j-1}, x_{j+1}]$, for $j = 1, \ldots, m$, see Figure 1. Observe that, since $V_h^0 \subset V^0$, one has $u_h(0) = u_h(\pi) = 0$. One then does not need basis functions at the nodes $x_0 = 0$ and $x_{m+1} = \pi$.



FIGUR 3. Basis functions (hat functions) φ_j on the partition $\mathcal{T}_h$.

The hat functions can be written as

$$\varphi_j(x) = \begin{cases} \frac{1}{h}(x - x_{j-1}), & x \in [x_{j-1}, x_j) \\ \frac{1}{h}(x_{j+1} - x), & x \in [x_j, x_{j+1}) \, , \\ 0, & \text{else.} \end{cases} \qquad j = 1, \ldots, m$$

The finite element formulation (or discrete variational formulation) reads:
(FEM)

Find $u_h \in V_h^0$ such that $D \int_0^\pi u_h'(x)\chi'(x)\,\mathrm{d}x + \frac{1}{2}\int_0^\pi u_h'(x)\chi(x)\,\mathrm{d}x = \int_0^\pi \chi(x)\,\mathrm{d}x, \quad \forall \chi \in V_h^0.$

Since $\{\varphi_j\}_{j=1}^m$ is a basis of V_h^0, one can write $u_h(x) = \sum_{j=1}^m \xi_j \varphi_j(x)$, with some (unknown) coefficients ξ_j.

By inserting u_h in equation (FEM), and choose $\chi = \varphi_i(x)$, $i = 1, \ldots, m$ as test functions, one gets

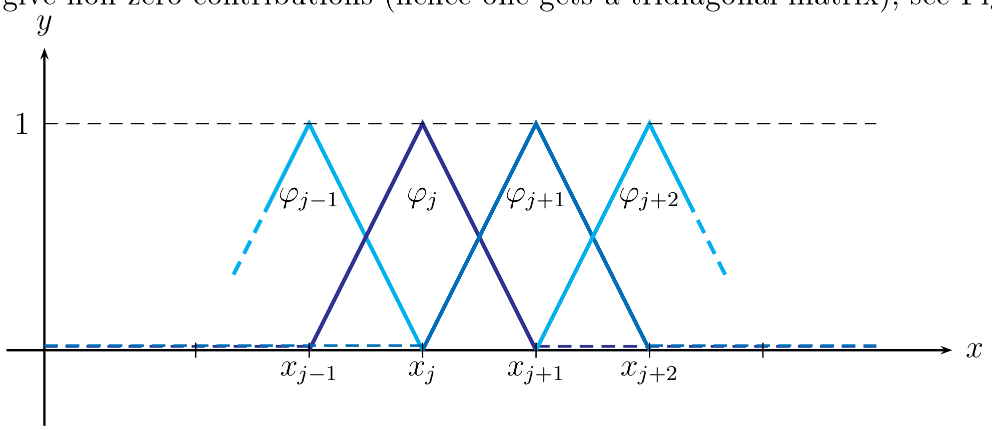
$$\sum_{j=1}^m \Big(D \int_0^\pi \varphi_j'(x)\varphi_i'(x)\,\mathrm{d}x + \frac{1}{2}\int_0^\pi \varphi_j'(x)\varphi_i(x)\,\mathrm{d}x \Big) \xi_j = \int_0^\pi \varphi_i(x)\,\mathrm{d}x, \quad i = 1, \ldots, m,$$

These are m equations (for $i = 1, \ldots, m$) with m unknowns $\{\xi_j\}_{j=1}^m$.

Or written in matrix notation $A\boldsymbol{\xi} = \mathbf{b}$ with $A = DS + \frac{1}{2}C$, where S ($= A_{\text{unif}}$) is the stiffness matrix, see Chapter 3 of the book for details,

$$S = \frac{1}{h}\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & -1 & 2 \end{bmatrix}.$$

To compute the elements of the convection matrix C, we realize, as before, that only c_{ij} with $|i-j| \leq 1$ give non-zero contributions (hence one gets a tridiagonal matrix), see Figure 4.



FIGUR 4. φ_j only overlaps with itself, φ_{j-1}, and φ_{j+1}.

The elements of the *skew-symmetric convection matrix* C,

$$c_{ij} = \int_0^\pi \varphi_j'(x)\varphi_i(x)\,\mathrm{d}x,$$

can be computed by evaluating the integrals

$$\begin{cases} c_{ij} = 0, & \text{for} \quad |i-j| > 1 \\ c_{ii} = \int_0^\pi \varphi_i(x)\varphi_i'(x)\,\mathrm{d}x = 0, & \text{for} \quad i = 1,\dots,m \\ c_{i,i+1} = \int_0^\pi \varphi_i(x)\varphi_{i+1}'(x)\,\mathrm{d}x = 1/2, & \text{for} \quad i = 1,\dots,m \\ c_{i+1,i} = \int_0^\pi \varphi_{i+1}(x)\varphi_i'(x)\,\mathrm{d}x = -1/2, & \text{for} \quad i = 1,\dots,m. \end{cases}$$

See Chapter 5.3 in the book for details.

Finally, one computes the last vector $\mathbf{b}$ with elements b_i given by

$$b_i = \int_0^\pi \varphi_i(x)\,\mathrm{d}x = \{\text{area under the basis function } \varphi_i\} = \frac{2h \cdot 1}{2} = h, \quad i = 1, \dots, m.$$

Hence, one has

$$C = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & -1 & 0 & 1 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & -1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = h\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

2. Tasks

(a) Implement the FEM for problem (3), as described above, in Matlab. That is, write an M-file (or a script file) which, given a diffusion coefficient D and a mesh h (or number of elements m), computes the approximation vector $\boldsymbol{\xi}$ by solving the linear system of equations $A\boldsymbol{\xi} = \mathbf{b}$.

Tips: The course page in Canvas offers a template for such Matlab file.

(b) The Péclet number Pe (studied in the course *transportprocesser*) is defined as the ratio between convective and diffusive transport, that is here (with the speed of convection $v = 1/2$ and length of interval π)

$$\mathrm{Pe} = \frac{\text{convection}}{\text{diffusion}} = \frac{\frac{1}{2}\pi}{D} \propto \frac{1}{D}.$$

Study, by comparing the FE approximation and the exact solution to problem eqrefdiffkonv1 (calculated by hand), what mesh h is required to get a good FE approximation in the two cases:

Case 1: $\mathrm{Pe} \approx 1$, that is $D \approx 1$.

Case 2: $\mathrm{Pe} \gg 1$, that is $D \ll 1$ (convection dominated).

Report the results graphically!

Tips: To plot a piecewise linear FE approximation in Matlab is not difficult, since $u_h(x_j) = \xi_j$ and Matlab draws straight lines between nodes automatically, but don't forget to add the BC: $u_h(0) = u_h(\pi) = 0$!