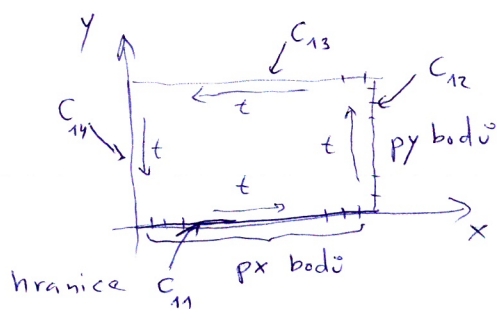


## Poznámky ke cvičení - 2D problémy v FreeFEM++

- existuje řada programových balíků pro řešení PDR pomocí metody konečných prvků ve 2D a 3D, viz  
List of finite element software packages na [en.wikipedia.org](http://en.wikipedia.org)
- na cvičení budeme používat FreeFEM++ ([www3.freemem.org](http://www3.freemem.org))  
který má poměrně přehledný vlastní jazyk podobný C++

### Problém 1: 2D Poissonova rovnice na obdélníkové oblasti



celá hranice

$$C_1 = C_{11} + C_{12} + C_{13} + C_{14}$$

řešíme PDR

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y) \quad (*)$$

kde  $f(x, y) = 2(x-a)x + 2(y-b)y$

aby bylo analytické řešení

$$u(x, y) = (x-a)x(y-b)y$$

s okrajovými podmínkami

$$u(C_1) = 0$$

- ve FreeFEM++ se zadává hranice oblasti parametricky  
konečné prvky se generují uvnitř uzavřené hranice automaticky  
pomocí Delaunayho - Voronoiova algoritmu s tím, že  
se zadává počáteční počet bodů na každém úseku hranice

- slabě formulaci (\*) dáme

$$-\int_{\Omega} \left( \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} \right) dx dy = \int_{\Omega} f \cdot v dx dy$$

$\left\{ \begin{array}{l} v \text{ jsou "testovací"} \\ \text{funkce z prostoru} \\ V, \text{ na které problém} \\ \text{řešíme} \end{array} \right\}$

odpovídá ve FreeFEM++ jazyku

$$\begin{aligned} \text{problem Poisson}(u, v) = & -\text{int2d}(Th) (dx(u) * dx(v) + dy(u) * dy(v)) \\ & - \text{int2d}(Th) (f * v) + \text{on}(C1, u=0); \end{aligned}$$

kde Th je typu mesh  $Th = \text{buildmesh}(C11(px) + \dots + C14(py))$ ;

a u a v jsou typu fespace  $Vh(Th, P1)$ ;  $Vh(u, v)$

- FreeFEM++ má implementovaný báze různé přesnosti jak pro skalární funkce, tak pro vektorové funkce
- základní jsou P1 (lineární,  $O(h^2)$ ), P2 (kvadratické,  $O(h^3)$ ) a P3 (kubické,  $O(h^4)$ ), kde  $h$  je typický rozměr prvku  
 $\uparrow$   
 zde nutno použít load "Element-P3"
- známe-li přesné řešení můžeme spočítat chybu např. pomocí  $E(h) = \left( \int_{\Omega} (u - u_{\text{exact}})^2 dx dy \right)^{1/2}$   
 což ve FreeFEM++ zadáme  

$$L2error = \text{sqr}t \left( \text{int2d}(Th) ((u - u_{\text{exact}})^2) \right);$$
 tj. vyřešíme-li problém pomocí  

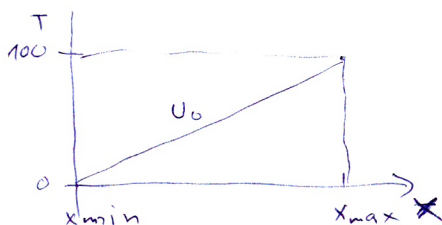
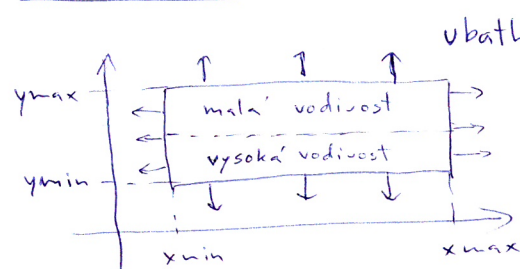
$$\text{solve Poisson}(u, v)$$
 tak s  $u$  lze nakládat jako s funkcí a buď přímou vyčíslit  $u(x, y)$  nebo integrovat přes  $Th$ .

- máme-li chybu pro  $h$  a  $2h$ , pak

$$\left. \begin{aligned} e(2h) &= c(2h)^\alpha \\ e(h) &= c h^\alpha \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{e(2h)}{e(h)} = 2^\alpha, \quad \alpha = \frac{\log\left(\frac{e(2h)}{e(h)}\right)}{\log 2}$$

a tak ověřit chování chyby

## Problém 2: 2D rovnice vedení tepla



„tepelná difuzivita“  
 $\downarrow$   
 řešíme  $\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (\kappa(x, y) \cdot \nabla u)$   
 s počáteční podmínkou  

$$u_0 = u(t=0, x, y) = 0 + 100 \frac{(x - x_{\min})}{(x_{\max} - x_{\min})}$$

a okrajovou podmínkou

$$\kappa(x, y) \frac{\partial u}{\partial n} + \alpha(u - v_{\text{bath}}) = 0$$

a kde

$$\kappa(x, y) = \begin{cases} 0,1 & \text{pro } y > \frac{y_{\max} + y_{\min}}{2} \\ 2,0 & \text{pro } y < \frac{y_{\max} + y_{\min}}{2} \end{cases}$$

a

$$\alpha = 0,25$$

- pokud použijeme pro časový vývoj Eulerovu implicitní metodu (kvůli stabilitě), pak v čase  $t_n$  je řešení  $U_n$  dáno pomocí řešení  $U_{n-1}$  v čase  $t_{n-1}$  takto

$$\int_{\Omega} v dx dy \left\{ \frac{U_n - U_{n-1}}{\Delta t} = \nabla \cdot (\alpha \nabla U_n) \right.$$

a slabší formulace bude

$$\underbrace{\int_{\Omega} \frac{U_n - U_{n-1}}{\Delta t} v dx dy + \int_{\Omega} (\nabla U_n) \alpha \nabla v dx dy - \int_{\Omega} \nabla \cdot (\alpha \nabla U_{n-1}) v dx dy}_{\text{int} 2d(T_h) \left( \frac{U * v}{\Delta t} + \alpha \cdot (dx(u) dx(v) + dy(u) dy(v)) \right)} - \underbrace{\int_{\Omega} \frac{U_{n-1} - U_{n-2}}{\Delta t} v dx dy}_{\text{int} 2d(T_h) \left( \frac{U_{old} * v}{\Delta t} \right)} = 0$$

$$\parallel$$

$$- \int_{\Gamma} v \alpha \left( \hat{n} \cdot \nabla U \right) d\ell = \int_{\Gamma} v \alpha (U - U_{bath}) d\ell$$

- je nutné ve FreeFEM++

oddělit integrály obsahující neznámou funkci  $U$  spolu s testovacími funkcemi  $v$

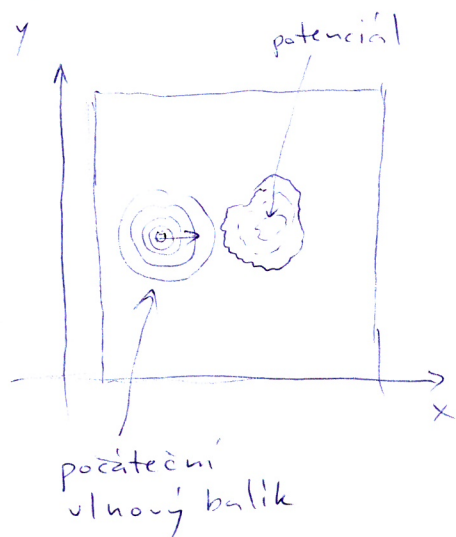
a integrály obsahující známé funkce jako  $U_{old}$  nebo  $U_{bath}$  spolu s  $v$

$$\text{int} 1d(T_h) (\alpha * U * v)$$

$$- \text{int} 1d(T_h) (\alpha * U_{bath} * v)$$

- zde vidíme příklad jiné než Dirichletovské podmínky, která se ve FreeFEM++ zahrnuje pomocí  $on(\Gamma, u = u_0)$ , nyní je okrajová podmínka součástí slabší formulace

### Problém 3: 2D časově závislá Schrödingerova rovnice



řešíme

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) + V(x, y) \psi(x, y)$$

s počáteční podmínkou

$$\psi(t=0, x, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x\sigma_y}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma_x^2} - \frac{(y-y_0)^2}{4\sigma_y^2} + ip_x x + ip_y y}$$

s okrajovými podmínkami

$$\psi(\Gamma) = 0 \quad \left( \begin{array}{l} \text{ne úplně vhodné} \\ \text{pro velká } t, \text{ odraz} \end{array} \right)$$

- implicitní Eulerova metoda by byla obdobná Problému 2
- uvažujeme nyní Crankovu-Nicolsonovu, kdy aproximuje derivaci v čase  $\frac{t_n + t_{n-1}}{2}$  centrovanou diferencí a převěruje pravou stranu:

$$\frac{\psi_n - \psi_{n-1}}{\Delta t} = \frac{1}{2} (H\psi_n + H\psi_{n-1})$$

neboli

$$\left(1 + \frac{i\Delta t}{2} H\right) \psi_n = \left(1 - \frac{i\Delta t}{2} H\right) \psi_{n-1}$$

což ve FreeFEM++ bude (psi a phi musí být nyní typu  $Vh<complex>$ ), konjugace  $\varphi^*$  není nutná, jde o testovací fce

$$\begin{aligned} & \text{int2d}(Th) (\psi * \varphi + \frac{1i * \Delta t}{4\mu} * (dx(\psi) * dx(\varphi) + dy(\psi) * dy(\varphi)) \\ & \quad + 0,5 * 1i * \Delta t * \psi * V * \varphi) \\ & - \text{int2d}(Th) (\psi_{old} * \varphi - \frac{1i * \Delta t}{4\mu} * (dx(\psi_{old}) * dx(\varphi) + dy(\psi_{old}) * dy(\varphi)) \\ & \quad - 0,5 * 1i * \Delta t * \psi_{old} * V * \varphi) \\ & + \text{on}(\Gamma, \psi = 0) \end{aligned}$$

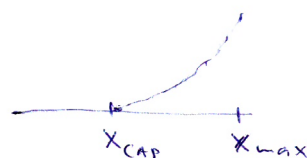
### Poznámka k problémům s odrazy na hranici

- pro odcházející vlnovou funkci je obtížné nastavit okrajovou podmínku tak, aby nedocházelo k odrazům
- obvykle se využívají triky jako

komplexní absorbní potenciál

od jistého bodu, kde je již

potenciál zanedbatelný se přidá člen typu

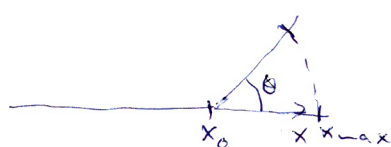


existují  
jiné volby

$$V_{CAP} = \begin{cases} -ic(x - x_{CAP})^\alpha & \text{pro } x > x_{CAP} \\ 0 & \text{pro } x < x_{CAP} \end{cases}$$

vnější komplexní škálování

- otočení gridu do komplexní roviny



$$\tilde{x} = \begin{cases} x & \text{pro } x < x_0 \\ x_0 + e^{i\theta}(x - x_0) & \text{pro } x > x_0 \end{cases}$$

$$\begin{aligned} e^{ik\tilde{x}} &\approx e^{ik(\cos\theta + i\sin\theta)x} \\ &\approx e^{ik\cos\theta x} \underbrace{e^{-k\sin\theta x}}_{\rightarrow 0 \text{ as } x \rightarrow \infty} \end{aligned}$$