Numerical Simulation of Harmonic Map Heat Flow

Semesterarbeit SS04/05

Gian-Marco Baschera, Nicolas Hodler

Betreuer: Prof. Dr. R. Hiptmair (SAM)

Inhalt

Teil 1:

- Ausgangsgleichung
- Zeitdiskretisierung
- FEM
- Lösung des nichtlinearen Systems
- Konvergenz
- Fragen Teil 1

Inhalt

Teil 2:

- Matlab: Programmstruktur
- C/C++: Optimierung, Parallelisierung
- Resultate
- Fragen

Ausgangsgleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} &= \mathbf{m} \times (\Delta \mathbf{m} \times \mathbf{m}) \quad \text{in }]0,T[\times\Omega \ , \\ \mathbf{m}(0) &= \mathbf{m}_0 \quad \text{in } \Omega \ , \\ \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \mathbf{n}} &= 0 \quad \text{on }]0,T[\times\partial\Omega \ . \end{aligned} \tag{1}$$

Ausgangsgleichung

Schöne Eigenschaft:

$$\frac{d|\mathbf{m}|^2}{dt} = 2\mathbf{m} \cdot \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = 2\mathbf{m} \cdot (\mathbf{m} \times (\Delta \mathbf{m} \times \mathbf{m})) = 0$$

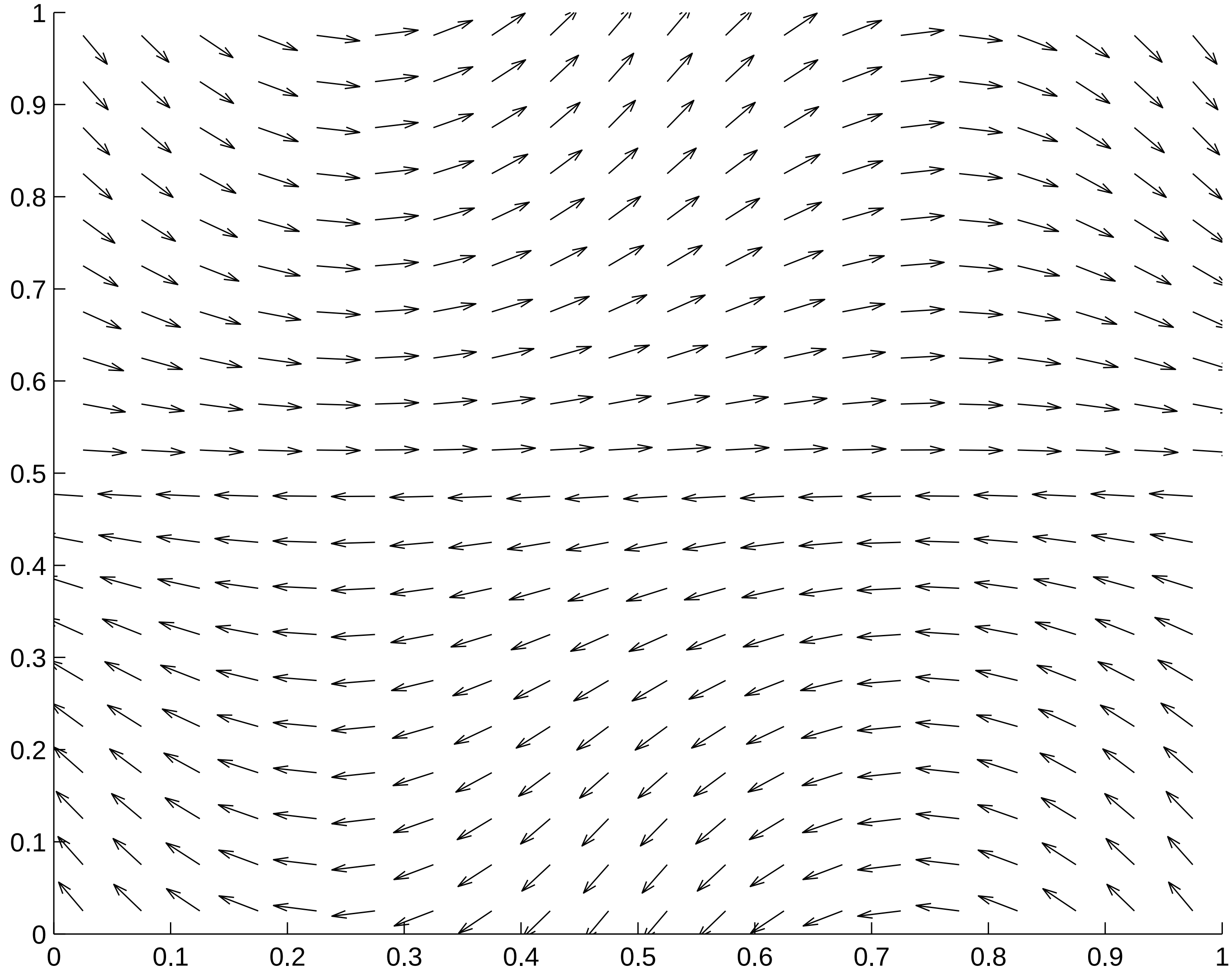
Daraus folgt:

$$|\mathbf{m}(t^n)| = |\mathbf{m}(t^0)|$$

Wähle

$$|\mathbf{m}(t^n)| = 1$$

Ausgangsgleichung



Zeitdiskretisierung

Methode von Heun:

$$f'(t) = F(t)$$

$$\frac{f(t^{n+1}) - f(t^n)}{\kappa} = \frac{F(t^{n+1}) + F(t^n)}{2}$$

Führe Notationen ein

$$\mathbf{m}^n \approx \mathbf{m}(t_n)$$

$$\delta_t \mathbf{m}^{n+1/2} \approx \frac{\mathbf{m}^{n+1} - \mathbf{m}^n}{k}$$

$$\overline{\mathbf{m}}^{n+1/2} \approx \tfrac{1}{2}(\mathbf{m}^{n+1} + \mathbf{m}^n)$$

Zeitdiskretisierung

Damit wird das semi-diskrete System (1)

$$\delta_t \mathbf{m}^{n+1/2} = \overline{\mathbf{m}}^{n+1/2} \times (\Delta \overline{\mathbf{m}}^{n+1/2} \times \overline{\mathbf{m}}^{n+1/2}) \quad , \quad \mathbf{m}^0 = \mathbf{m}_0 \quad (2)$$

Multipliziere (2) mit $\overline{\mathbf{m}}^{n+1/2}$

$$|\mathbf{m}^{n+1}|^2 - |\mathbf{m}^n|^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad |\mathbf{m}^n| = |\mathbf{m}_0| \quad \forall n \ ,$$

Verfahren von Heun führt zur Erhaltung der Norm im semi-diskreten Problem.

Kleiner Trick

Es gilt die Vektor Identität

$$\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) - \mathbf{c}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \quad \forall \mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c} \in \mathbb{R}^3 \ .$$

Das heisst für uns:

$$\mathbf{m} \times (\Delta \mathbf{m} \times \mathbf{m}) = \Delta \mathbf{m} \cdot \mathbf{m}^2 - \mathbf{m}(\Delta \mathbf{m} \cdot \mathbf{m})$$

Und für das semi-diskrete System

$$\delta_t \mathbf{m}^{n+1/2} = \Delta \overline{\mathbf{m}}^{n+1/2} \cdot |\overline{\mathbf{m}}^{n+1/2}|^2 - \overline{\mathbf{m}}^{n+1/2}(\Delta \overline{\mathbf{m}}^{n+1/2} \cdot \overline{\mathbf{m}}^{n+1/2})$$

Finite Elemente Methode

Repetition:

1. Variationelle Formulierung
2. Galerkin Diskretisierung: Ersetzte Testraum durch endlich dimensionalen Unterraum
3. Wähle Basisfunktion mit lokalem Träger

FEM 1. Variationelle Formulierung

Definiere neue Unbekannte $\mathbf{j} := \nabla \overline{\mathbf{m}}^{n+1/2}$

$$\begin{aligned} \delta_t \mathbf{m}^{n+1/2} &= \overline{\mathbf{m}}^{n+1/2} \cdot |\overline{\mathbf{m}}^{n+1/2}|^2 - \overline{\mathbf{m}}^{n+1/2} (\operatorname{div} \overline{\mathbf{j}}^{n+1/2} \cdot \overline{\mathbf{m}}^{n+1/2}) \\ \mathbf{j}^n &= \nabla \overline{\mathbf{m}}^n \end{aligned}$$

Führt auf gemischtes Variationsproblem

$$\left(\delta_t \mathbf{m}^{n+1/2}, \mathbf{v}\right)_0 = \left(\operatorname{div} \overline{\mathbf{j}}^{n+1/2} \cdot \mathbf{v}, |\overline{\mathbf{m}}^{n+1/2}|^2\right)_0 - \left(\operatorname{div} \overline{\mathbf{j}}^{n+1/2} \cdot \overline{\mathbf{m}}^{n+1/2}, \overline{\mathbf{m}}^{n+1/2} \cdot \mathbf{v}\right)_0 \tag{3}$$

$$\left(\operatorname{div} \mathbf{q}, \mathbf{m}^{n+1}\right)_0 = -\left(\mathbf{j}^{n+1}, \mathbf{q}\right)_0 \tag{4}$$

$$\forall \mathbf{v} \in (L^2(\Omega))^3\,, \quad \forall \mathbf{q} \in (\boldsymbol{H}_0(\operatorname{div};\Omega))^3$$

Warum gemischte Formulierung?

FEM 2. Galerkin Diskretisierung

Ersetzte

$(L^2(\Omega))^3$	durch $\mathbf{V}_h \in (L^2(\Omega))^3$,
$(\boldsymbol{H}_0(\mathrm{div};\Omega))^3$	durch $Q_h \in (\boldsymbol{H}_0(\mathrm{div};\Omega))^3$

wähle

für $\mathbf{V}_h$	Raum stückweise konstanter Vektorfelder auf Ω ,
für Q_h	Raum der Raviart-Thomas Finiten Elemente niedrigster Ordnung

FEM 2. Galerkin Diskretisierung

Wahl von $\mathbf{V}_h$ erlaubt lokales testen der Gleichung (3) dh. Gleichung (3) muss für alle $\mathbf{v} \in \mathbf{V}_h$ gelten, auch für

$$\mathbf{v}_h := \chi_K \bar{\mathbf{m}}_h^{n+1/2}$$

χ_K ist die charakteristische Funktion auf Zelle K. Damit gilt

$$\frac{1}{2\tau}(\mathbf{m}_{h|K}^{n+1} - \mathbf{m}_{h|K}^{n})(\mathbf{m}_{h|K}^{n+1} + \mathbf{m}_{h|K}^{n}) = \frac{1}{2\tau}|\mathbf{m}_{h|K}^{n+1}|^2 - |\mathbf{m}_{h|K}^{n}|^2 = 0 \; .$$

Die Norm von $\mathbf{m}$ bleibt auf jeder Zelle erhalten.

FEM 2. Galerkin Diskretisierung

Basisfunktion für i-te Komponente stückweise konstanter Vektorfelder:

$$\mathbf{b}_{ki}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \vec{e}_i & \mathbf{x} \in \Omega_k \\ 0 & elsewhere \end{cases}$$

FEM 2. Galerkin Diskretisierung

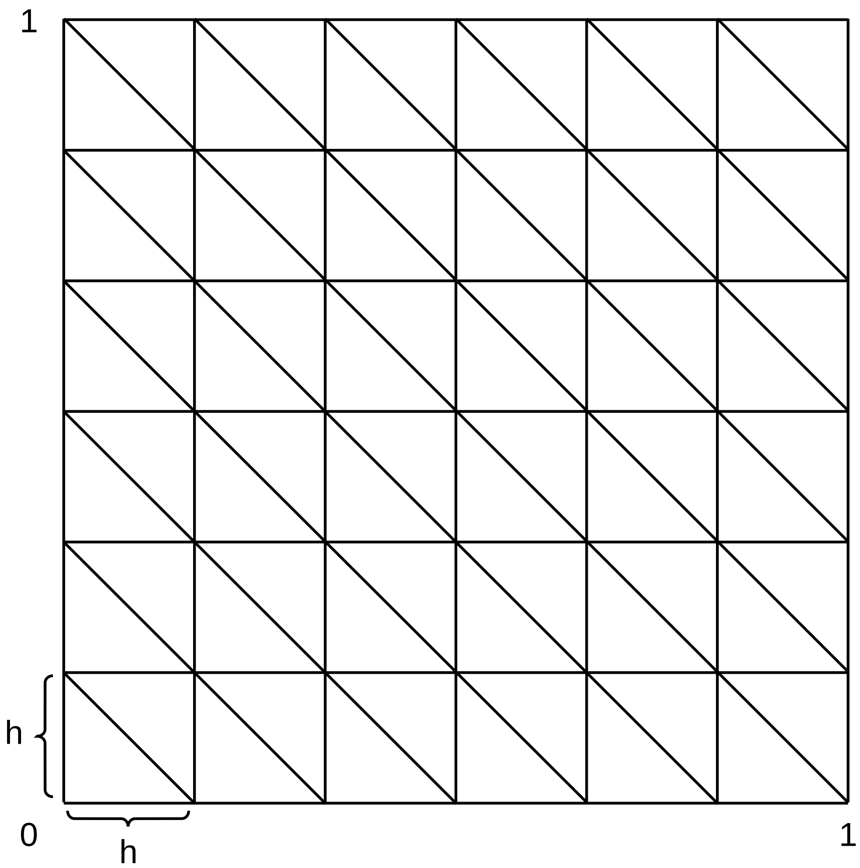
Basisfunktion für i-te Komponente mit Raviart Thomas Finite Elemente für Dreieck mit Ecken a_e

$$\mathbf{B}_{ei}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{s_k}{h}\frac{|e|}{2|T|}(\mathbf{x}-\mathbf{a}_e)\otimes\vec{e}_i & \mathbf{x}\in\Omega_k \\ 0 & elsewhere \end{cases}$$

Bestimmt Normalkomponente von $\mathbf{q}$ auf Dreiecksseiten. $\mathbf{q}$ ist $(\boldsymbol{H}_0(\mathrm{div};\Omega))^3$ konform wenn Normalkomponente von $\mathbf{q}$ stetig ist, d.h. es gibt ein Freiheitsgrad pro Dreiecksseite.

FEM 3. Wahl der Basisfunktionen

Rechengebiet $\Omega = [0,1]^2$
Wähle regelmässiges Dreiecksgitter der Gitterweite $h = 1/N$



FEM 3. Wahl der Basisfunktionen

Also

$$\mathbf{v}_h = \sum_{k,i} v_{ki}\mathbf{b}_{ki} \quad , \quad \mathbf{q}_h = \sum_{k,e,i} q_{kei}\mathbf{B}_{kei}$$

Damit gilt das gemischte Variationsproblem

$$\begin{aligned} \left(\delta_t \mathbf{m}_h^{n+1/2}, \mathbf{b}_{ki}\right)_0 - \left(\operatorname{div}\bar{\mathbf{j}}^{n+1/2} \cdot \mathbf{b}_{ki}, |\overline{\mathbf{m}}_h^{n+1/2}|^2\right)_0 & \\ + \left(\operatorname{div}\bar{\mathbf{j}}^{n+1/2} \cdot \overline{\mathbf{m}}_h^{n+1/2}, \overline{\mathbf{m}}_h^{n+1/2} \cdot \mathbf{b}_{ki}\right)_0 &= 0 \quad \forall k, i \\ \left(\operatorname{div}\mathbf{B}_{ei}, \mathbf{m}_h^{n+1}\right)_0 + \left(\mathbf{j}_h^{n+1}, \mathbf{B}_{ei}\right)_0 &= 0 \quad \forall e, i \end{aligned}$$

Ersetzte nun

$$\mathbf{m}_h = \sum_{k,i} m_{ki}\mathbf{b}_{ki} \quad , \quad \mathbf{j}_h = \sum_{k,e,i} j_{kei}\mathbf{B}_{kei}$$

FEM 3. Wahl der Basisfunktionen

Führt schliesslich mit globalem Lösungsvektor

$$\mathbf{x}^n = \begin{pmatrix} m_{ki} \\ j_{ei} \end{pmatrix}^n$$

auf nichtlineares Gleichungssystem $\mathbf{A}(\mathbf{x}^{n+1}, \mathbf{x}^n) = 0$ mit

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}^{n+1}, \mathbf{x}^n) =$$

$$\left(\begin{array}{l} \frac{h^2}{2}\delta_t \overline{m}_{ki}^{n+1/2} - s_k \sum_{e\in E_k} |e| \overline{\dot{j}}_{ei}^{n+1/2} \cdot \sum_{l=1}^{3} |\overline{\mathbf{m}}_h^{n+1/2}|^2 + s_k \sum_{l=1}^{3} |e| \overline{\dot{j}}_{el}^{n+1/2} \overline{m}_{kl}^{n+1/2} \overline{m}_{ki}^{n+} \\ \sum_{k|e\in E_k} \left(s_k |e| m_{ki}^{n+1} + \sum_{e'\in E_k} \dot{j}_{e'i}^{n+1} I_{ee'} \right) \end{array} \right.$$

Randbedingungen

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \mathbf{n}} = \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{on } \partial\Omega,$$

- Randbedingung wird erfüllt wenn alle Koeffizienten der Raviart Thomas Basisfunktionen auf dem Rand null sind.
- Basisfunktionen auf dem Rand können eliminiert werden.
- Ergibt $15N^2 - 6N$ Unbekannte.

Lösung des nichtlinearen Systems

Für jeden Schritt muss $\mathbf{A}(\mathbf{x}^{n+1}, \mathbf{x}^n) = 0$ gelten. Finde die Lösung für jeden Zeitschritt iterativ mit dem Newton Verfahren:

$$\mathbf{x}^{i+1} = \mathbf{x}^i - \mathbf{DA}(\mathbf{x}^i, \mathbf{x}^n) \backslash \mathbf{A}(\mathbf{x}^i, \mathbf{x}^n).$$

Als Startwert kann die Lösung des letzten Zeitschritts verwendet werden.

$$\mathbf{x}^0 = \mathbf{x}^n.$$

Newton Verfahren benötigt Jacobi Matrix $\mathbf{DA} := \frac{\partial \mathbf{A}_i}{\partial \mathbf{x}_j^{n+1}}$

Lösung des nichtlinearen Systems

$$\frac{\partial \mathbf{A}_{ki}}{\partial m_{k'i'}^{n+1}} = \begin{cases} \frac{h^2}{2\kappa} + \frac{s_k}{2} \sum_{\substack{l=1 \\ l\neq i}}^{3} \sum_{e\in E_k} |e| \overline{j}_{el}^{n+1/2} \overline{m}_{kl}^{n+1/2} & \substack{k'=k, \\ i'=i} \\ -s_k \sum_{e\in E_k} |e| \overline{j}_{ei}^{n+1/2} \overline{m}_{ki'}^{n+1/2} + \frac{s_k}{2} \sum_{e\in E_k} |e| \overline{j}_{ei'}^{n+1/2} \overline{m}_{ki}^{n+1/2} & \substack{k'=k, \\ i'\neq i} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$\frac{\partial \mathbf{A}_{ki}}{\partial j_{e'i'}^{n+1}} = \begin{cases} -\frac{s_k}{2} |e'| \sum_{\substack{l=1 \\ l\neq i}}^{3} \left| \overline{m}_{kl}^{n+1/2} \right|^2 & \substack{e'\in E_k, \\ i'=i} \\ -\frac{s_k}{2} |e'| \overline{m}_{ki}^{n+1/2} \overline{m}_{ki'}^{n+1/2} & \substack{e'\in E_k, \\ i'\neq i} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$\frac{\partial \mathbf{A}_{ei}}{\partial j_{e'i'}^{n+1}} = \begin{cases} \frac{2}{3} h^2 & \substack{e'=e, \\ i'=i} \\ -\frac{1}{6} h^2 & \exists k | e \in H_k, e' \in V_k \text{ or } e \in V_k, e' \in H_k, \\ & i' = i \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

Lösung des nichtlinearen Systems

Eigenschaften der Jacobimatrix $\mathbf{DA}$

- Weil sich das Gitter nicht verändert bleibt die Struktur von $\mathbf{DA}$ während der ganzen Simulation gleich.
- Wegen lokalem Träger der FE Basis Funktionen wird $\mathbf{DA}$ dünnbesetzt. 4 bis 12 Einträge in jeder Zeile.
- Die zweite Gleichung in der gemischten variationellen Formulierung ist linear. Dies führt zu konstanten Einträgen in $\mathbf{DA}$.

Diese Eigenschaften müssen für eine effiziente Simulation benützt werden.
Der Knackpunkt der Simulation ist die Lösung von $\mathbf{DA}\backslash\mathbf{A}$ für jeden Newton Schritt.

Konvergenz

Wie messe ich den Diskretisierungsfehler?
Benütze die 2D Anfangsbedingung:

$$\mathbf{m}_0 = \begin{pmatrix} \cos(\cos(\pi x)\cos(\pi y)) \\ \sin(\cos(\pi x)\cos(\pi y)) \\ 0 \end{pmatrix}$$

Und vergleiche mit analytischer Lösung:

$$\mathbf{m}_{sol} = \begin{pmatrix} \cos(e^{-2\pi^2 t}\cos(\pi x)\cos(\pi y)) \\ \sin(e^{-2\pi^2 t}\cos(\pi x)\cos(\pi y)) \\ 0 \end{pmatrix}$$

Konvergenz

Was wenn es keine analytische Lösung gibt?

1. Gib eine analytische Lösung $\mathbf{m}_{force}$ vor, die Normerhaltung und Randbedingungen erfüllt.
2. Setzt ein in Gleichung (1) ein und berechne übrigbleibender Forcing Term.
3. Diskretisiere den Forcing Term und baue ihn in die Simulation ein.

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = \mathbf{m} \times (\Delta \mathbf{m} \times \mathbf{m}) + \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) \tag{5}$$

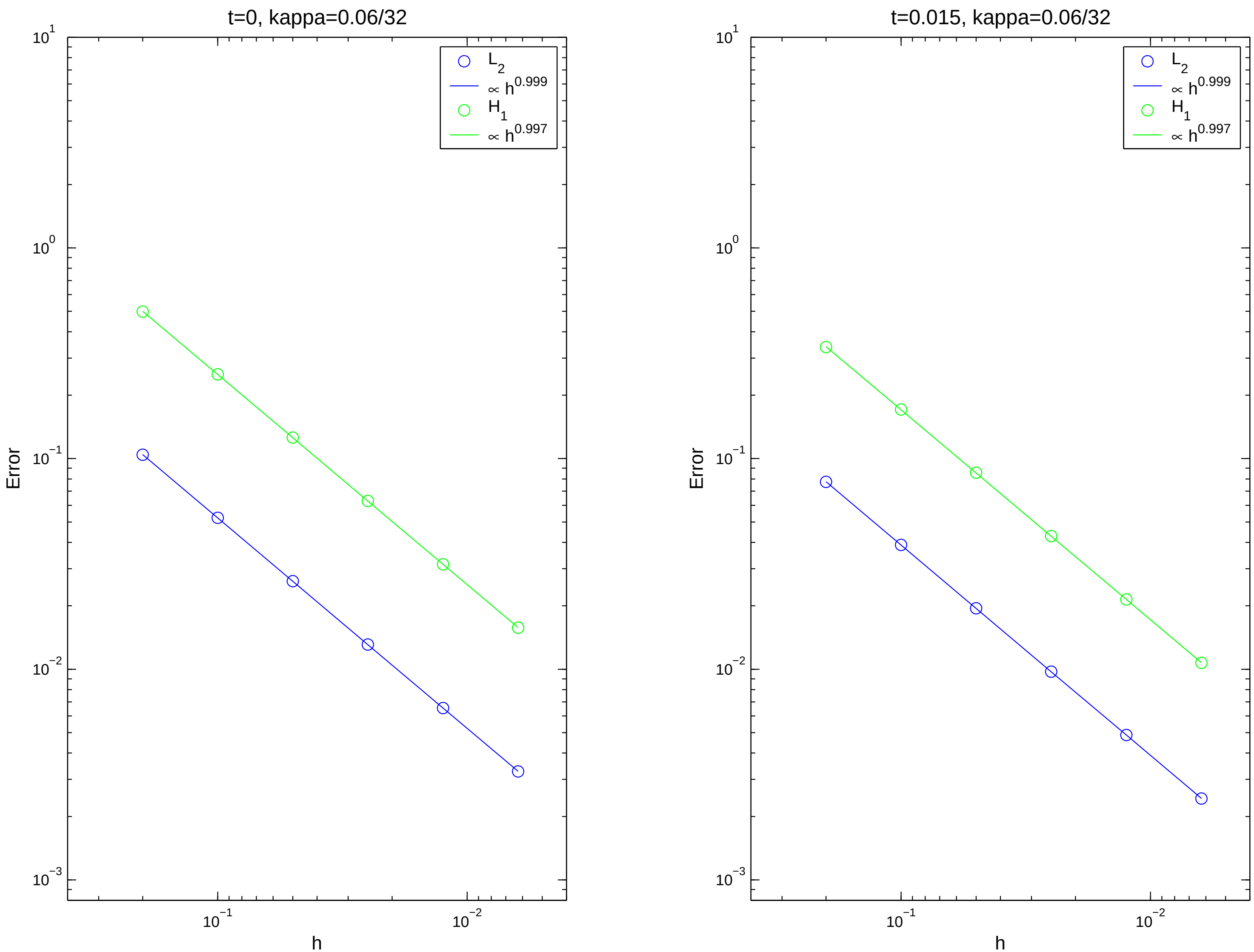
Konvergenz

Problem: Schöne Eigenschaft der Normerhaltung?

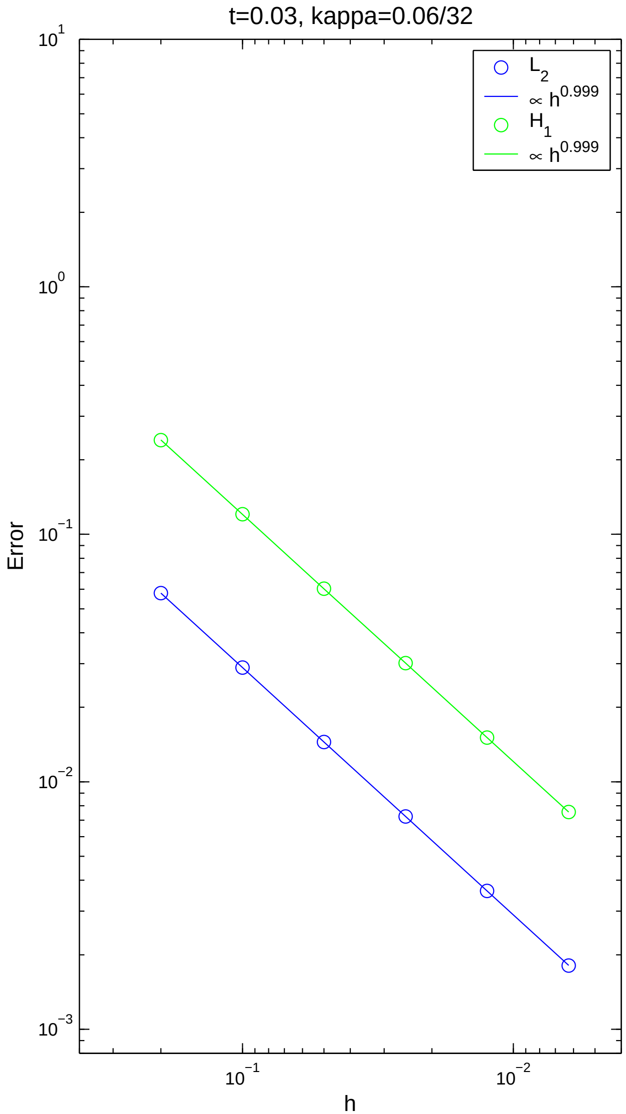
Nach zeitlicher Diskretisierung des Forcing Terms mit der Methode von Heun nur gewährleistet, falls gilt:

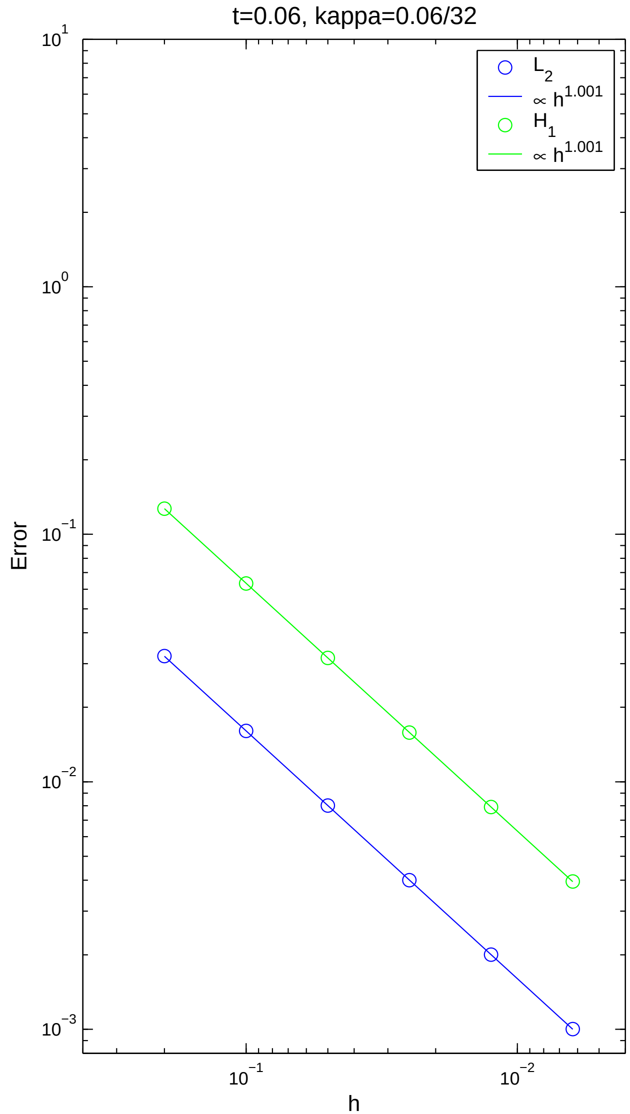
$$\overline{\mathbf{f}}^{n+1} \cdot \overline{\mathbf{m}}^{n} + \overline{\mathbf{f}}^{n} \cdot \overline{\mathbf{m}}^{n+1} = 0$$

Konvergenz: h Verfeinerung



Konvergenz: h Verfeinerung





Konvergenz κ Verfeinerung