Metody numeryczne II

Metoda elementu skończonego

Janusz Szwabiński

szwabin@ift.uni.wroc.pl

Metoda elementu skończonego

1. Zagadnienie modelowe
2. Metoda Ritza
3. Metoda elementu skończonego (FEM)
   - Funkcje bazowe
   - FEM

Zagadnienie modelowe

Cząstka o masie m w nieskończonej studni potencjału

$$\left[\partial_x^2 + \lambda - u(x)\right]\psi(x) = 0$$

$$\lambda \equiv \frac{2m}{\hbar^2}E, \quad u(x) \equiv \frac{2m}{\hbar^2}U(x)$$

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < 1 \\ \infty, & \text{dla pozostałych } x \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad \left(\partial_x^2 + \lambda\right)\psi(x) = 0, \quad \psi(0) = \psi(1) = 0$$

Rozwiązanie analityczne

$$\psi(x) = A\sin(\sqrt{\lambda}x) + B\cos(\sqrt{\lambda}x)$$

Z warunków brzegowych wynika

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \sin\sqrt{\lambda} & \cos\sqrt{\lambda} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0$$

Stąd

$$-\sin\sqrt{\lambda} = 0 \quad \Rightarrow \quad \sqrt{\lambda} = n\pi, \; n = 1, 2, \ldots$$

oraz

$$\psi_n(x) = \sqrt{2}\sin(n\pi x)$$

Metoda Ritza

Rozważmy funkcjonał

$$I = \frac{1}{2}\int_0^1 \mathrm{d}x \left([\partial_x \psi(x)]^2 - \lambda\psi^2(x)\right)$$

$$\begin{aligned}
\delta I &= \int_0^1 \mathrm{d}x \left\{\partial_x\psi(x)\partial_x\delta\psi(x) - \lambda\psi(x)\delta\psi(x)\right\} \\
&= \partial_x\psi(x)\delta\psi(x)|_0^1 - \int_0^1 \mathrm{d}x \left\{\partial_x^2\psi(x) + \lambda\psi(x)\right\}\delta\psi(x) \\
&= -\int_0^1 \mathrm{d}x \left\{\partial_x^2\psi(x) + \lambda\psi(x)\right\}\delta\psi(x)
\end{aligned}$$

$\Rightarrow$ rozwiązanie równania Schrödingera równoważne jest minimalizacji funkcjonału I

Wybieramy dowolne, ale liniowo niezależne funkcje

$$\phi_0(x),\ \phi_1(x),\ \phi_2(x),\ldots$$

i przybliżamy poszukiwaną funkcję w następujący sposób:

$$\psi(x) = c_0\phi_0(x) + c_1\phi_1(x) + c_2\phi_2(x) + \ldots$$

Niech

$$\begin{aligned}
\phi_1(x) &= x(1-x) \\
\phi_2(x) &= x(1-x)(1-2x)
\end{aligned}$$

$$\psi(x) \simeq c_1 x(1-x) + c_2 x(1-x)(1-2x)$$

Warunek $\delta I = 0$ (tzn. $\frac{\partial I}{\partial c_1} = 0$ i $\frac{\partial I}{\partial c_2} = 0$) prowadzi do

$$\begin{pmatrix} \frac{2}{3} - \frac{1}{15}\lambda & 0 \\ 0 & \frac{2}{5} - \frac{1}{105}\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0$$

Stąd

$\lambda_1 = 10$ (rozwiązanie analityczne: $\pi^2 \simeq 9,87$)

$\lambda_2 = 42$ (rozwiązanie analityczne: $4\pi^2 \simeq 39,5$)

Rozważmy funkcjonały

$$I_n' = \frac{1}{2}\int_0^1 \mathrm{d}x \left\{[\partial_x\psi_n(x)]^2 - \lambda_n\psi_n^2(x) - h_n[\psi_n^2(x) - 1]\right\}$$

Z warunków

$$\frac{\partial I_n'}{\partial c_1} = 0,\ \ \frac{\partial I_n'}{\partial c_2} = 0$$

oraz z warunku unormowania

$$\int_0^1 \mathrm{d}x\psi_n^2(x) = 1$$

otrzymujemy

- dla $\lambda_1 = 10$

$$\left.\begin{array}{l} 0 = -\frac{1}{15}c_1 h \\ 0 = \left(\frac{32}{105} - \frac{h}{105}\right) c_2 \\ 1 = \frac{c_1^2}{30} + \frac{c_2^2}{210} \end{array}\right\} \Rightarrow \begin{array}{l} c_1 = \sqrt{30} \\ c_2 = 0 \\ h = 0 \end{array}$$

- dla $\lambda_2 = 42$

$$\left.\begin{array}{l} 0 = -\left(\frac{32}{15} + \frac{h}{15}\right) c_1 \\ 0 = -\frac{1}{105}c_2 h \\ 1 = \frac{c_1^2}{30} + \frac{c_2^2}{210} \end{array}\right\} \Rightarrow \begin{array}{l} c_1 = 0 \\ c_2 = -\sqrt{210} \\ h = 0 \end{array}$$

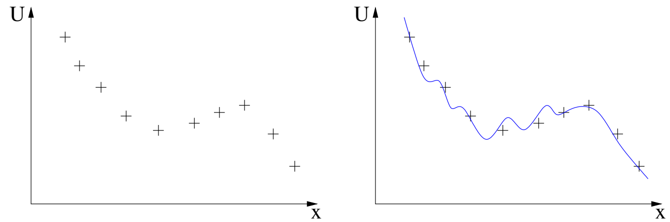
Przykład

```
p1 : x*(1-x);
p2 : x*(1-x)*(1-2*x);
plot2d([p1,p2],[x,0,1]);
psi : a*p1 + b*p2;
temp : diff(psi,x)^2 - lambda*psi^2;
i1 : integrate(diff(temp,a),x,0,1);
i2 : integrate(diff(temp,b),x,0,1);
algsys([i1,i2],[a,b,lambda]);
```


Własności

- metoda Ritza daje dość dobre wyniki, o ile tylko liczba funkcji $\phi_i(x)$ oraz ich postać są odpowiednio dobrane
- trudno poprawić uzyskane przybliżenia w systematyczny sposób

Funkcje bazowe



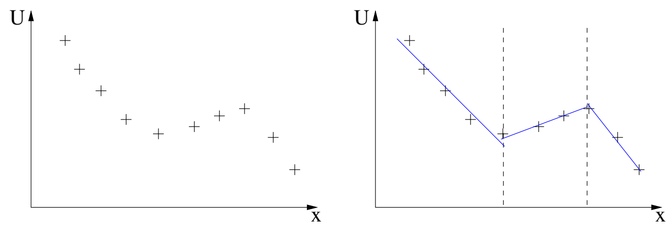
Aproksymacja wielomianowa

$$U(x) = a + bx + cx^2 + dx^3 + \ldots$$

Własności

- im większy stopień wielomianu, tym lepiej przybliżane są zadane wartości
- im większy stopień, tym większe oscylacje wielomianu pomiędzy zadanymi punktami

$\Rightarrow$ dzielimy obszar na mniejsze przedziały (*elementy*) i w każdym z nich aproksymujemy dane wielomianem niskiego stopnia



$\Rightarrow$ pozbyliśmy się oscylacji

$\Rightarrow$ kolejny problem - funkcja aproksymująca nie jest ciągła na granicach elementów

Dla każdego elementu definiujemy liniową wariację między wartościami węzłowymi wzorem

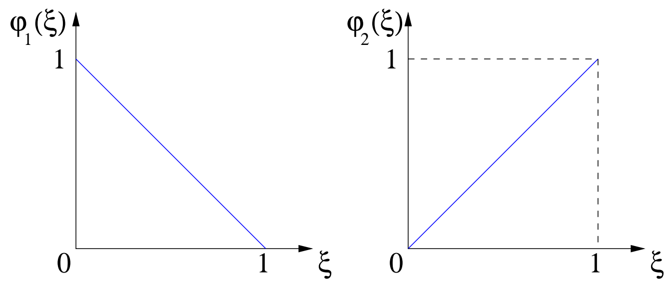
$$u(\xi) = (1-\xi)u_1 + \xi u_2$$

$\xi \in \langle 0, 1 \rangle$ to znormalizowana miara długości wzdłuż krzywej

Funkcje bazowe stowarzyszone z parametrami węzłowymi u_1 i u_2

$$\begin{aligned} \varphi_1(\xi) &= 1-\xi \\ \varphi_2(\xi) &= \xi \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \quad u(\xi) = \varphi_1(\xi)u_1 + \varphi_2(\xi)u_2$$



Macierz „połączenia”

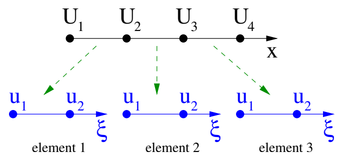
$$u_n = U_{\Delta(n,e)}$$

$\Delta(n,e)$ – globalny numer lokalnego węzła n elementu e

$\Rightarrow$ interpolacja

$$u(\xi) = \varphi_1(\xi)u_1 + \varphi_2(\xi)u_2$$

jest słuszna dla każdego elementu, o ile tylko u_1 i u_2 zostaną poprawnie zidentyfikowane



Pierwszy element

$$u(\xi) = \varphi_1(\xi)u_1 + \varphi_2(\xi)u_2, \quad u_1 = U_1, \quad u_2 = U_2$$

Drugi element

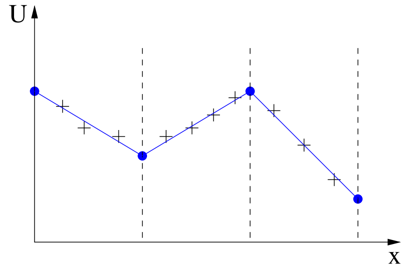
$$u(\xi) = \varphi_1(\xi)u_1 + \varphi_2(\xi)u_2, \quad u_1 = U_2, \quad u_2 = U_3$$

Trzeci element

$$u(\xi) = \varphi_1(\xi)u_1 + \varphi_2(\xi)u_2, \quad u_1 = U_3, \quad u_2 = U_4$$

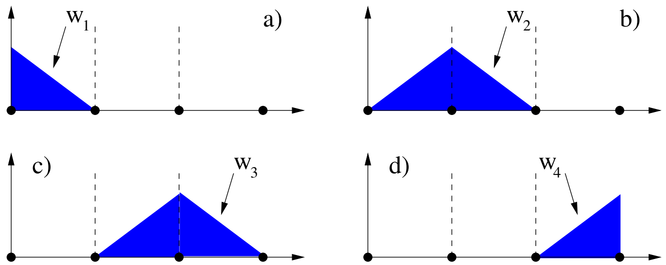
Wartości węzłowe są wspólne dla sąsiadujących elementów

$\Rightarrow$ funkcja aproksymująca jest ciągła



Wygodnie jest potraktować funkcje bazowe jako wagi parametrów węzłowych. Np. dla pierwszego elementu mamy

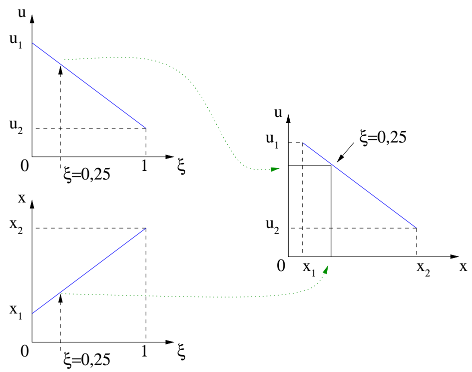
$$\begin{aligned}
u(0) &= u_1 \\
u\left(\frac{1}{4}\right) &= \frac{3}{4}u_1 + \frac{1}{4}u_2 \\
u\left(\frac{1}{2}\right) &= \frac{1}{2}u_1 + \frac{1}{2}u_2 \\
u\left(\frac{3}{4}\right) &= \frac{1}{4}u_1 + \frac{3}{4}u_2 \\
u(1) &= u_2
\end{aligned}$$



W ten sposób uzyskaliśmy opis pola $u(\xi)$, sparametryzowany w każdym elemencie. Natomiast rozkład pola względem x zadany będzie układem równań

$$\begin{aligned} u(\xi) &= \sum_n \varphi_n(\xi) u_n \\ x(\xi) &= \sum_n \varphi_n(\xi) x_n \end{aligned}$$

przy czym sumowanie przebiega po wszystkich węzłach w elemencie

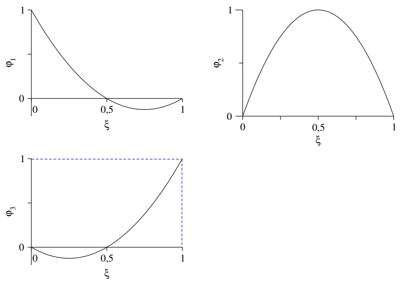


Kwadratowe funkcje bazowe

$$u(\xi) = \varphi_1(\xi)u_1 + \varphi_2(\xi)u_2 + \varphi_3(\xi)u_3$$

Ważną własnością funkcji bazowych stowarzyszonych z poszczególnymi węzłami jest, że mają one wartość 1 dla danego węzła i 0 dla pozostałych. Jeżeli więc węzły leżą w punktach $\xi = 0, \frac{1}{2}, 1$, to

$$\begin{aligned} \varphi_1(\xi) &= 2(\xi - 1)\left(\xi - \frac{1}{2}\right) \\ \varphi_2(\xi) &= 4\xi(1 - \xi) \\ \varphi_3(\xi) &= 2\xi\left(\xi - \frac{1}{2}\right) \end{aligned}$$



Funkcje bazowe w 2D

Dwuwymiarowe, biliniowe funkcje bazowe definiujemy na podstawie iloczynów funkcji jednowymiarowych:

$$
\begin{aligned}
\varphi_1(\xi_1,\xi_2) &= (1-\xi_1)(1-\xi_2)\\
\varphi_2(\xi_1,\xi_2) &= \xi_1(1-\xi_2)\\
\varphi_3(\xi_1,\xi_2) &= (1-\xi_1)\xi_2\\
\varphi_4(\xi_1,\xi_2) &= \xi_1\xi_2
\end{aligned}
$$

Wówczas

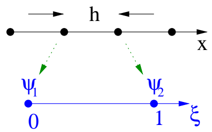
$$u(\xi_1,\xi_2)=\varphi_1(\xi_1,\xi_2)u_1+\varphi_2(\xi_1,\xi_2)u_2\varphi_3(\xi_1,\xi_2)u_3+\varphi_4(\xi_1,\xi_2)u_4$$

Metoda elementu skończonego

Zagadnienie modelowe

- dzielimy przedział $\langle 0,1\rangle$ na m elementów o długości h każdy
- Szukaną funkcję falową przybliżamy na l–tym elemencie liniowymi funkcjami bazowymi ($n=2$)

$$\psi^{(l)}(\xi)=\sum_{i=1}^{n}\psi_i^{(l)}\varphi_i(\xi)$$



Rozważamy funkcjonał

$$I=\frac{1}{2}\int_0^1 \mathrm{d}x\left\{[\partial_x\psi(x)]^2-\lambda\psi^2(x)\right\}$$

Wstawiając przybliżone wyrażenie na funkcję falową, otrzymamy (konwencja sumacyjna po i i j)

$$I=\frac{1}{2}\sum_{l=1}^{m}\int_{(l-1)h}^{lh}\mathrm{d}x\psi_i^{(l)}\left\{\partial_x\varphi_i^{(l)}(x)\partial_x\varphi_j^{(l)}(x)-\lambda\varphi_i^{(l)}(x)\varphi_j^{(l)}(x)\right\}\psi_j^{(l)}$$

Zamiana zmiennych z x na ξ odbywa się według wzoru

$$x=(l-1)h+\xi h \quad\Rightarrow\quad \mathrm{d}x=h\mathrm{d}\xi,\ \ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}=\frac{1}{h}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}$$

Dla współczynników węzłowych sąsiadujących elementów mamy

$$\psi_1^{(l)} = \psi_n^{(l-1)}$$

Stąd

$$I = \sum_{l=1}^{m} \psi_i^{(l)} \left\{ \mathbf{I}_1^{(l)}(i,j) - \lambda \mathbf{I}_2^{(l)}(i,j) \right\} \psi_j^{(l)}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{I}_1^{(l)}(i,j) &= \frac{1}{2h} \int_0^1 \mathrm{d}\xi \partial_\xi \varphi_i^{(l)}(\xi) \partial_\xi \varphi_j^{(l)}(\xi) \\ \mathbf{I}_2^{(l)}(i,j) &= \frac{h}{2} \int_0^1 \mathrm{d}\xi \varphi_i^{(l)}(\xi) \varphi_j^{(l)}(\xi) \end{aligned}$$

Dla ustalenia uwagi przyjmijmy, że

$$h = \frac{1}{4} \ \ (m = 4)$$

Wówczas

$$\mathbf{I}_1^{(l)} = \frac{1}{2h} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \ \ \mathbf{I}_2^{(l)} = \frac{h}{2} \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{6} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow$ macierze te są jednakowe dla każdego elementu i nie zależą od l

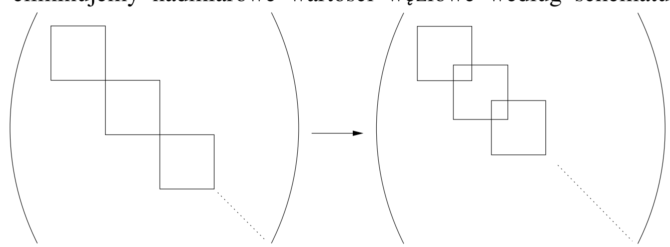
Funkcjonał możemy wyrazić wzorem

$$\begin{pmatrix} \psi_1^{(1)} \\ \psi_2^{(1)} \\ \psi_1^{(2)} \\ \psi_2^{(2)} \\ \vdots \end{pmatrix}^{\mathrm{T}} \begin{pmatrix} \mathbf{I}_1^{(1)} - \lambda \mathbf{I}_2^{(1)} & & \\ & \mathbf{I}_1^{(2)} - \lambda \mathbf{I}_2^{(2)} & \\ & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1^{(1)} \\ \psi_2^{(1)} \\ \psi_1^{(2)} \\ \psi_2^{(2)} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Ze względu na warunek

$$\psi_2^{(l)} = \psi_1^{(l+1)}$$

eliminujemy nadmiarowe wartości węzłowe według schematu



Ostatecznie

$$I = \vec{\psi}^{\,\mathrm{T}}(\mathbf{S}_1 - \lambda \mathbf{S}_2)\vec{\psi}$$

$$\vec{\psi}^{\,\mathrm{T}} = \left(\psi_1^{(1)}, \psi_2^{(1)}, \psi_2^{(2)}, \psi_2^{(3)}, \psi_2^{(4)}\right)$$

$$\mathbf{S}_1 = \frac{1}{2h}\begin{pmatrix} 1 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & -1 & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{S}_2 = \frac{h}{2}\begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{6} & & & \\ \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & & \\ & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & \\ & & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \\ & & & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

Warunek $\delta I = 0$ prowadzi do zagadnienia na wartości własne

$$\left(\mathbf{S}_2^{-1}\mathbf{S}_1 - \lambda \mathbb{I}\right)\vec{\psi} = 0$$

Ponieważ funkcja falowa znika na granicach studni potencjału (bo studnia jest nieskończona), więc

$$\vec{\psi}^{\,\mathrm{T}} = \left(0, \psi_2^{(1)}, \psi_2^{(2)}, \psi_2^{(3)}, 0\right) \equiv \vec{\psi}_{BC}^{\,\mathrm{T}}$$

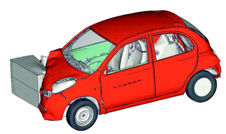
Wówczas

$$\mathbf{S}_1^{BC} = \frac{1}{2h}\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}_2^{BC} = \frac{h}{2}\begin{pmatrix} \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & 0 \\ \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \\ 0 & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

$$\left[(\mathbf{S}_2^{BC})^{-1}\mathbf{S}_1^{BC} - \lambda \mathbb{I}\right]\vec{\psi}^{\,BC} = 0$$

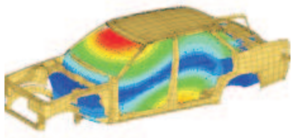
Crash–testy

- 1995 - 15000 elementów
- 1998 - 82000 elementów
- 2000 - 160000 elementów



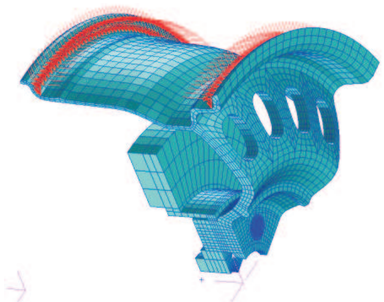
(http://www.esi-group.com)

Akustyka



(http://www.apex-technologies.fr)

Analiza strukturalna



(http://www.simtop.fgh.de/cgi-bin/rmcat?1000hz01)