Introducció elemental i exemple d'elements finits

Josep Planelles

September 22, 2011

1 Problema de la partícula en una caixa 1D ressolta amb elements finits

En aquestes notes, no entrem en el problema de l'optimització de la xarxa d'elements finits, perquè únicament volem mostrar de que va el mètode, sense pretendir donar receptes de com usar-lo de manera òptima. Programes com ara COMSOL ho fan per a 2D i 3D d'una manera molt eficient. Ací fins i tot per a un cas 1D considerem una xarxa equiespaiada com indica la figura 1.

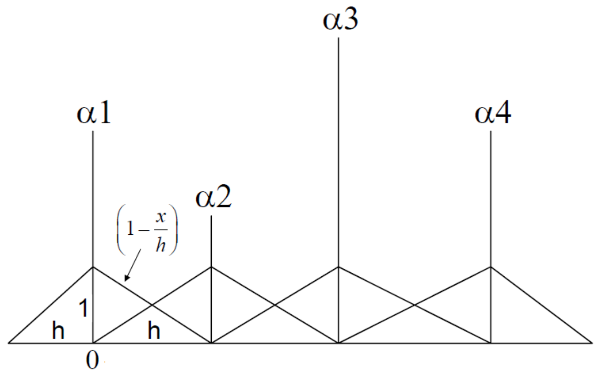

Figure 1: xarxa equiespaiada

El problema que volem ressoldre és el de la partícula en una caixa monodimensional de longitud π i massa 1/2, del qual coneixem que els autovalors són, en a.u., n^2 amb $n = 1, 2, 3, 4.....$ També coneixem la forma de les funcions pròpies. La corresponent equació diferencial és $-y" = \lambda y$ amb les condicions frontera $y(0) = y(\pi) = 0$.

Per a poder aplicar elements finits, multipliquem l'equació diferencial per una funció arbritrària $v(x)$ i integrem:

$$-\int_0^\pi v(x) \cdot y"(x)dx = \lambda \int_0^\pi v(x) \cdot y(x)dx \tag{1}$$

Integrant per parts la integral de l'esquerra, tenint en compte les condicions frontera, $y(0) = y(\pi) = 0$, trobem:

$$\int_0^\pi v'(x) \cdot y'(x)dx = \lambda \int_0^\pi v(x) \cdot y(x)dx \tag{2}$$

Tot seguit, considerem una sèrie de funcions (com indica la figura 1). Si centrem el zero en la posició d'un vertex (vegeu figura 1), la funció té valors fins a h, donats per la recta que uneix el punt d'alçada unitat en la posició de zero fins el punt d'alçada zero en la posició h: $v_i = 1 - x/h$, i també cap a l'esquerra fins a $-h$, de manera semblant. Si usem N funcions per a cobrir la distància π tenim que $h = \pi/(N + 1)$.

Aproximem ara:

$$y = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i v_i \tag{3}$$

i subtituïm l'eq. 3 en 2 obtenint:

$$\sum_{i=1}^{N} \alpha_i \int_0^{\pi} v'(x) \cdot v_i'(x) dx = \lambda \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \int_0^{\pi} v(x) \cdot v_i(x) dx \tag{4}$$

Com $v(x)$ és arbritrària triem $v(x) = v_k(x)$ (per a qualsevol $k = 1, \ldots N$). Aleshores l'equació anterior es converteix en:

$$\sum_{i=1}^{N} \alpha_i \int_0^{\pi} v_k'(x) \cdot v_i'(x) dx = \lambda \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \int_0^{\pi} v_k(x) \cdot v_i(x) dx \tag{5}$$

Cal fer una sèrie d'integrals immediates (vegeu figura 1):

$$A = \int_0^{\pi} v_i(x) \cdot v_i(x) dx = 2 \int_0^{h} (1 - \frac{x}{h})^2 dx = \frac{2}{3}\, h$$

$$B = \int_0^{\pi} v_i'(x) \cdot v_i'(x) dx = 2 \int_0^{h} (-\frac{1}{h})^2 dx = \frac{2}{h}$$

$$a = \int_0^{\pi} v_i(x) \cdot v_{i\pm1}(x) dx = \int_0^{h} (1 - \frac{x}{h})(\frac{x}{h}) dx = \frac{1}{6}\, h$$

$$b = \int_0^{\pi} v_i'(x) \cdot v_{i\pm1}'(x) dx = \int_0^{h} (-\frac{1}{h})(\frac{1}{h}) dx = -\frac{1}{h}$$

la resta són zero, com es pot veure en la figura esmentada.

Trobem, doncs, un conjunt de N equacions amb N incógnites:

$$\begin{aligned}
k = 1 \qquad & \alpha_1 B + \alpha_2 b = \lambda\,(\alpha_1 A + \alpha_2 a) \\
k = 2 \qquad & \alpha_1 b + \alpha_2 B + \alpha_3 b = \lambda\,(\alpha_1 a + \alpha_2 A + \alpha_3 a) \\
& \ldots \\
k = N \qquad & \alpha_{N-1} b + \alpha_N B = \lambda\,(\alpha_{N-1} a + \alpha_N A)
\end{aligned} \tag{6}$$

que en forma matricial queda

$$\begin{bmatrix} B & b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ b & B & b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & B & b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & \ldots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b & B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \ldots \\ \alpha_N \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} A & a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & A & a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a & A & a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & \ldots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a & A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \ldots \\ \alpha_N \end{bmatrix} \tag{7}$$

que no és més que una equació d'autovalors amb mètrica: $\mathbf{B}\alpha = \lambda \mathbf{A}\alpha$.

En la pàgina seguent mostrem la implementació matlab i el output dels quatre primers autovectors. Els autovaors que s'obtenen amb aquesta (molt pobre) discretitzacio són 1.0003, 4.0053, 9.0267 i 16.0844.