Rozwiązanie problemu własnego operatora różniczkowego w MES 1D z funkcjami kształtu Lagrange'a

Tomasz Chwiej

24 października 2017

1 Wstęp

Przy użyciu metody elementów skończonych znajdziemy rozwiązania różniczkowego operatora energii oscylatora harmonicznego (problem własny):

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{1}{2}x^2u = Eu \tag{1}$$

Znane są jego rozwiązania analityczne tj. wartości własne energii $E_\mu = \mu + \frac{1}{2}$ oraz wektory własne $u_\mu(x) = H_\mu(x)\,exp(-x^2/2)$, gdzie: $x \in (-\infty, \infty)$, $\mu = 0, 1, 2, \ldots$, a $H_\mu(x)$ są wielomianami Hermite'a.

Rozwiązanie przybliżone w bazie (dajemy 3 funkcje bazowe/kształtu na jeden element) ma postać

$$u_\mu(x) \approx \sum_{p=1}^{N} c_p^{(\mu)} v_p(x) = \sum_{m=1}^{M}\sum_{i=1}^{3} c_{m,i}^{(\mu)} v_{m,i}(x) \tag{2}$$

gdzie: m indeksuje elementy, i to indeksy funkcji bazowych w elemencie oraz $N = 2M+1$ (liczba funkcji/węzłów). Relacja pomiędzy indeksem globalnym p (węzła/funkcji bazowej) a jego koordynatami lokalnymi (w elemencie m-tym) jest następująca:

$$p = 2\cdot m + (i-2), \quad m = 1, 2, \ldots, M, \quad i = 1, 2, 3 \tag{3}$$

Rozwiązań będziemy poszukiwać w ograniczonym zakresie $x \in [A, B]$. w tym celu wprowadzamy siatkę węzłów, których położenie określamy według wzoru:

$$x_k = x_{max}\cdot\left(\frac{|2\cdot k - N - 1|}{N}\right)^{\alpha}\cdot sign\left(\frac{2\cdot k - N - 1}{N}\right), \quad k = 1, 2, \ldots, N \tag{4}$$

gdzie: parametry α i x_{max} decydują o rozłożeniu węzłów na osi x, a funkcja $sign(x)$ określa znak argumentu x. Jako lewy i prawy kraniec w obliczeniach przyjmiemy: $A = x_1$ oraz $B = x_N$. Zastosowanie metody Galerkina pozwala problem różniczkowy (1) zapisać w postaci algebraicznej

$$Sc_\mu = E_\mu O c_\mu \tag{5}$$

gdzie: c_μ jest wektorem własnym odpowiadającym wartości własnej E_μ, S jest globalną macierzą sztywności, a O jest macierzą całek przekrywania. Elementy macierzy sztywności $S_{p,q}$ oraz $O_{p,q}$ [indeksy globalne (p,q) wyznaczamy według wzoru (3)] liczymy w przestrzeni referencyjnej

$$S_{p,q} = \sum_{m=1}^{M}\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\int_{-1}^{1}\frac{1}{2J_m}\frac{d\phi_i}{d\xi}\frac{d\phi_j}{d\xi} + \frac{1}{2}J_m x^2(\xi)\phi_i\phi_j\,d\xi \tag{6}$$

$$O_{p,q} = \sum_{m=1}^{M}\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\int_{-1}^{1} J_m\phi_i\phi_j\,d\xi \tag{7}$$

gdzie: $J_m = (x_{2m+1} - x_{2m-1})/2$ jest jakobianem, zależność $x(\xi)$ ma postać

$$x = \frac{x_{2m-1} + x_{2m+1}}{2} + \frac{x_{2m+1} - x_{2m-1}}{2}\xi \tag{8}$$

a funkcje kształu zdefiniowane są następująco

$$\phi_1(\xi) = \xi(\xi-1)/2 \tag{9}$$

$$\phi_2(\xi) = -(\xi+1)(\xi-1) \tag{10}$$

$$\phi_3(\xi) = \xi(\xi+1)/2 \tag{11}$$

Ostatecznie aby rozwiązać problem zdefiniowany równaniem (1) należy rozwiązać uogólniony problem własny dany wzorem (5).

2 Zadania do wykonania

W obliczeniach przyjąć $x_{max} = 6$ (wzór 4).

1. Zaprogramować obliczanie elementów macierzowych $S_{p,q}$ oraz $O_{p,q}$. Całkowanie wykonać numerycznie stosując kwadraturę Gaussa-Legendre'a (liczba węzłów kwadratury > 4, pod całką mamy maksymalnie wielomian 6 stopnia). Pochodne również należy obliczyć numerycznie z krokiem $\Delta\xi = 0.001$. W obu przypadkach można wykorzystać fragmenty kodu z poprzednich zajęć. Macierze S i O powinny być symetryczne - operator różniczkowy jest samosprzężony.

2. Dla $M = 5$ rozwiązać uogólniony problem własny (wzór 5) dla $\alpha \in [0.4, 2]$ z krokiem $\Delta\alpha = 0.05$. Należy sporządzić: (i) rysunek zawierający wykresy $E_\mu = f(\alpha)$ (zmiany kolejnych wartości własnych w funkcji parametru α - 50 pkt.) oraz (ii) rysunek pokazujący funkcje $u_\mu(x)$ dla $\alpha = 1.4$. Przyjąć $\mu = 1, 2, 3, 4, 5$. (30 pkt.)

3. Powtórzyć obliczenia z punktu 2 dla $M = 10, 30$. (20 pkt.)

3 Uwagi

1. Obliczenia proszę prowadzić w podówjnej precyzji, używając np. procedur diagonalizacyjnych z GSL-a lub LAPACK-a.

2. Macierze S oraz O są symetryczne o elementach rzeczywistych (co jest istotne przy wyborze procedury diagonalizacyjnej).

3. Wykresy proszę umieścić w jednym pliku graficznym (np. otoczenie *multiplot* w Gnuplocie) - łatwiej będzie je porównywać.

4. Proces wyznaczania niezerowych elementów macierzy S i O można zautomatyzować następująco ($p, q = 1, 2, 3, \ldots, N$):

```
for(m=1;m<=M;m++){
     for(i=1;i<=3;i++){
        for(j=1;j<=3;j++){
              p=2m+(i-2);
              q=2m+(j-2);
              xa=x_{2m-1};
              xb=x_{2m+1};
              Jm=(xb-xa)/2;
              S_pq+=......;
              O_pq+=......;
        }
    }
}
```

5. Rysowanie rozwiązań $u_p(x)$:

```
ustalamy: p
for(x=x_1;x<=x_N;x+=dx){
    for(m=1;m<=M;m++){
       xa=x_{2m-1};
       xb=x_{2m+1};
       Jm=(xb-xa)/2;
          if(xa<=x && x<xb){ //sprawdzamy w ktorym elemencie jestesmy
              u=0.;
              for(i=1;i<=3;i++){
                     k=2m+(i-2);
```

```
                xi=(x-xa/2-xb/2)/Jm;
               u=u+c_{k,p}fi(i,xi);
            }
            zapis: x,u
        }
    }
}
```