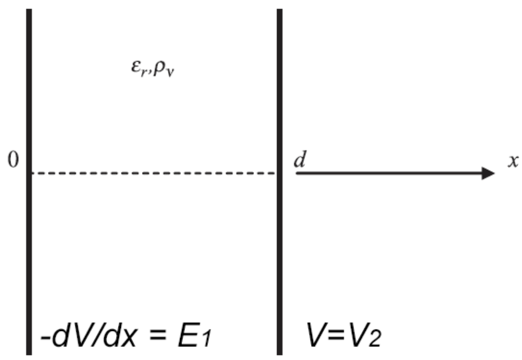
Végeselem modellezés alapjai 1. óra

Gyenge alak, Tesztfüggvény, Lagrange-féle alakfüggvény, Stiffness mátrix

Kivonat

Az óra célja, hogy megismertesse a végeselem módszer (FEM) alkalmazását egy egyszerű probléma, az 1D Poisson-egyenlet megoldását keresztül. Azért választjuk az 1D problémát, mert így elkerülhető a bonyolultabb 2D-3D geometriából adódó matematikai komplexitás, és a numerikus módszer lényegére tudunk fókuszálni.

1D Poisson egyenlet



1. ábra. Peremfeltételek és geometria

$$\nabla(\epsilon_0 \epsilon_r \nabla V) = -\rho$$
$$E = -\nabla V$$

A feladat egy peremérték feladat (1D boundary value problem - BVP), ahol egy inhomogén másodrendű differenciálegyenlet megoldását keressük, amelynek változója a $V(x)$ potenciálfüggvény, miközben ismerjük a térfogatban a ρ forrástagot, a jobb oldali peremen a függvény értékét (Dirichlet-feltétel), a bal oldali peremene pedigg annak hely szerinti deriváltját, a térerősséget (Neumann-feltétel). (Ha ezek kombinációját ismerjük, akkor azt vegyes peremfeltételnek hívjuk.)
Az egyszerű számolás kedvéért legyen $\epsilon_0 \epsilon_r = 1$, $\rho = 1$, $d = 5$.

1. Analitikus megoldás

$$\frac{d^2V}{dx^2} = -1 \qquad x \in [1, 5]$$

Peremértékek:

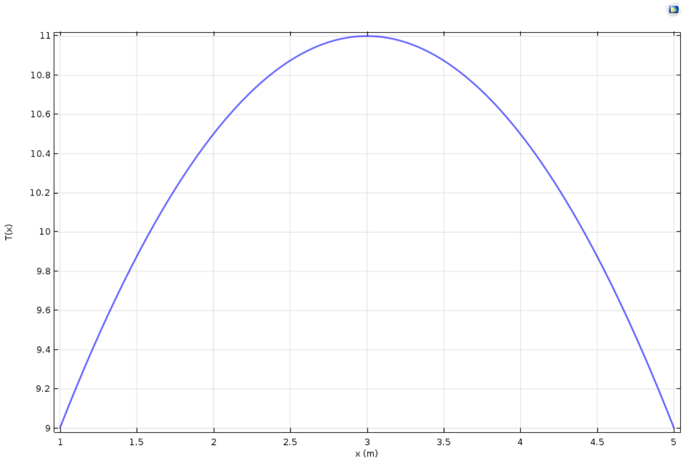
$$V|_{x=5} = 9 \quad , \quad E|_{x=1} = -\left.\frac{dV}{dx}\right|_{x=1} = -2$$

A megoldást integrálással kapjuk:

$$V(x) = -\frac{x^2}{2} + Ax + B$$

A peremértékek behelyettesítése után:

$$V(x) = -\frac{x^2}{2} + 3x + \frac{13}{2}$$



2. ábra. $V(x)$ analitikus megoldása

2. A differenciálegyenlet gyenge alakja

A legtöbb differenciálegyenlet első vagy másodrendű a fizikában. A másodrendű differenciálegyenlet numerikus megoldásának stabilitásának feltétele, hogy a megoldás függvénynek elegendően simának kell lennie, hogy a második derivált mindenhol értelmezhető legyen. Ha pl. a peremeken az első deriváltnak (általában ez egy fluxus vagy térerősség jellegű mennyiség) ugrása van, akkor a második derivált numerikusan nem számolható.

A gyenge alak mögötti ötlet az, hogy ha integrálegyenletté alakítjuk a differencálegyenletet, akkor magasabbrendű deriváltak pontos meghatározása numerikus formulákkal feleslegessé válik. Ezáltal a megoldó rutinunk kevésbé lesz érzékeny a próbafüggvény simaságára, és gyorsabban konvergál majd a megoldáshoz.

Erős alaknak hívjuk a diffegyenlet eredeti alakját. Tökéletes Φ megoldás esetén a bal oldalra rendezett egyenletünk a tartomány minden pontjában nulla jobb oldalt eredményez.
Nem tökéletes V megoldás esetén a bal oldalra rendezett egyenletünk nem nulla jobb oldalt eredményez. Ezt hívják reziduumnak (maradéktagnak).

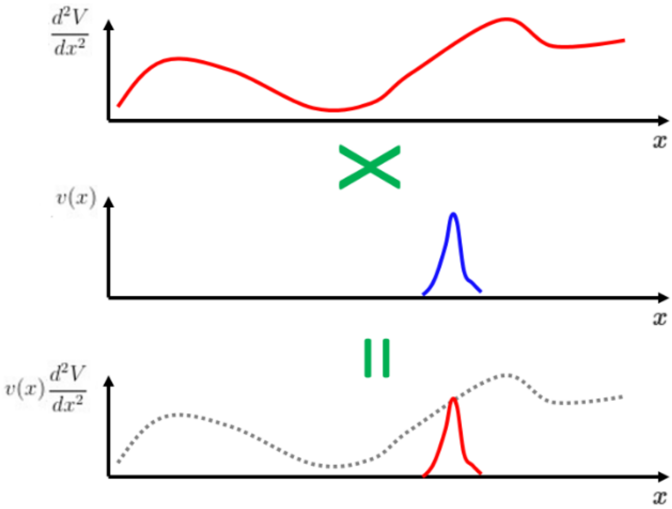
$$\frac{d^2V}{dx^2} + 1 = R \qquad \textit{(reziduum)}$$

Célunk olyan megoldásfüggvényt találni, amelyre a reziduum minimalis lesz min;l több helyen. Ha a 0-ra redukált egyenletünket integráljuk a teljes térfogatra, az egy "nagyon gyenge" feltételt jelent a megoldónknak. Ennek értelmében a reziduum átlagos értéke a teljes térfogatra egyenlő nullával.

$$\int_1^5 (\frac{d^2V}{dx^2} + 1)dx = 0$$

Ennél szigorúbb feltételt úgy kaphatunk, ha pici tartományokra bontjuk a teljes tartományt, és ezekre külön-külön írjuk elő a minimális reziduum feltétel teljesülését. Ennek gyakorlati megvalósítása a tesztfüggvényekkel lehetséges. A tesztfüggvények olyan függvények, amelyek csak egy szűk intervallumban vesznek fel nem nulla értéket ("háztető függvény"). A v tesztfüggvénnyel megszorozva az integrálegyenletünket, a minimális reziduum feltételünket csak egy szűk tartományra írjuk elő.

$$\int_1^5 v \cdot (\frac{d^2V}{dx^2} + 1)dx = 0$$



3. ábra. A tesztfüggvény hatása

A v tesztfüggvények teljes rendszerét alkalmazva az egész tartomány lefedhető.

A tesztfüggvények másik előnye, hogy a parciális integrálást felhasználva, a megoldásfüggényünk kétszeres deriváltja egyszeressé redukálható, azáltal, hogy a tesztfüggvényre "dobjuk át" a deriválást:

$$\int_1^5 \frac{d^2V}{dx^2} \cdot v(x)dx = -\int_1^5 1 \cdot v(x)dx$$

$$\left.\frac{dV}{dx}\right|_{x=5} \cdot v(x)|_{x=5} - \left.\frac{dV}{dx}\right|_{x=1} \cdot v(x)|_{x=1} - \int_1^5 \frac{dV}{dx} \cdot \frac{dv(x)}{dx} dx = -\int_1^5 v(x) \cdot 1dx$$

$$\int_1^5 \left(\frac{dV}{dx} \cdot \frac{dv(x)}{dx} - v(x)\right) dx = -\left.\frac{dV}{dx}\right|_{x=1} v(1) + \left.\frac{dV}{dx}\right|_{x=5} v(5)$$

Definíció szerint a peremeken mindig a kifelé mutató fluxusokat adjuk meg:

$$\Gamma_1 = \vec{n}\vec{E}_1 = +\left.\frac{dV}{dx}\right|_{x=1} \quad \textit{(balra mutató vektor)} \quad \Gamma_2 = \vec{n}\vec{E}_2 = -\left.\frac{dV}{dx}\right|_{x=5} \textit{(jobbra mutató vektor)}$$

Ezt felhasználva írható:

$$\int_1^5 \left(\frac{dV}{dx} \cdot \frac{dv(x)}{dx} - v(x)\right) dx = -\Gamma_1 v(1) - \Gamma_2 v(5)$$

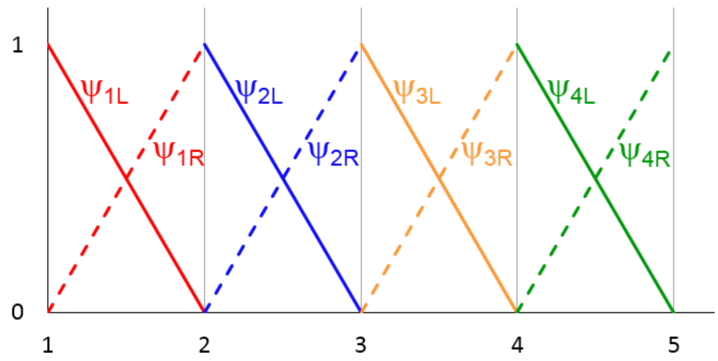
Vagy, ahogy a COMSOL szereti, jobb oldalra rendezve:

$$0 = -\int_1^5 \left(\frac{dV}{dx} \cdot \frac{dv(x)}{dx} + v(x)\right) dx - \Gamma_1 v(1) - \Gamma_2 v(5)$$

3. Lagrange-féle interpolációs polinomok

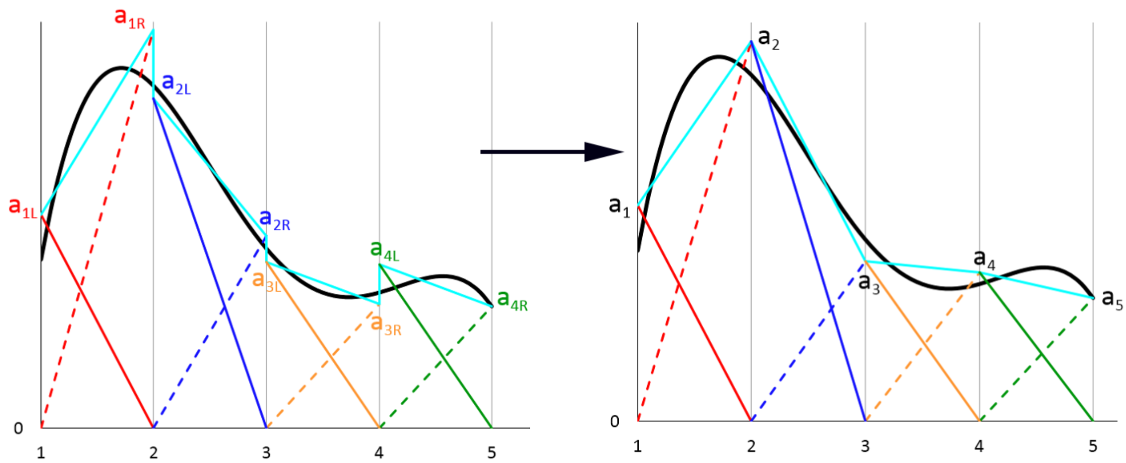
Osszuk a tartományunkat 4 elemre (véges elem = innen kapta a nevét a módszer). Elsőrendű polinomok (Lagrange interpolációs polinomok) segítségével minden elemben két tesztfüggvényt definiálhatunk, egy monoton csökkenőt és egy monoton növekvőt. A tesztfüggvények 1-et vesznek fel egy kitüntetett rácspontban, mndenhol máshol nulla az értékük. A potenciálfüggvény felírható a tesztfüggvények lineáris kombinációjával:

$$V(x) \approx a_{1L}\Psi_{1L}(x) + a_{1R}\Psi_{1R}(x) + a_{2L}\Psi_{2L}(x) + \cdots$$



4. ábra. Lagrange-féle interpolációs polinomok

Az a_{1L},a_{1R},a_{2L} együtthatókat úgy állítjuk be, hogy a $V(x)$ a rácspontokban folytonos legyen:



5. ábra. Az együtthatók illesztése után a közelítő megoldásfüggvény (cián) folytonos

$$a_1 = a_{1L} \qquad a_2 = a_{1R} = a_{2L} \qquad a_3 = a_{2R} = a_{3L}$$

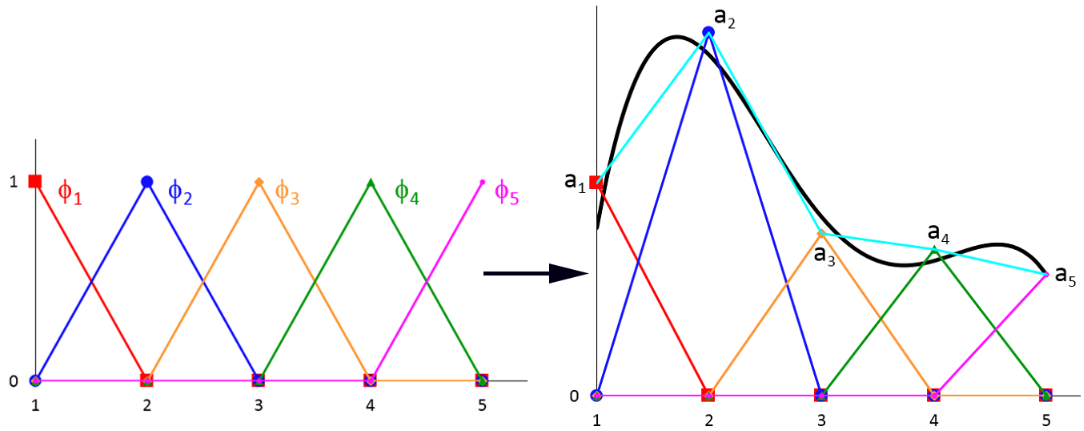
$$a_4 = a_{3R} = a_{4L} \qquad a_5 = a_{4R} = a_{5L}$$

Így kapjuk a Φ háztető alakú tesztfüggvényeket.

Ezeket felhasználva kapjuk:

$$V(x) \approx \sum_{i=1}^{i=5} a_i \Phi_i(x)$$

$$\frac{dV(x)}{dx} \approx \sum_{i=1}^{i=5} a_i \frac{d\Phi_i(x)}{dx}$$



6. ábra. A közelítő megoldásfüggvény (cián) kifejtése a háztető függvényekkel

Ezt beírva a gyenge alakba:

$$\int_1^5 \sum_{i=1}^{i=5} a_i \frac{d\Phi_i(x)}{dx} \cdot \frac{dv(x)}{dx} dx - \int_1^5 v(x)dx = -\Gamma_1 v(1) - \Gamma_2 v(5)$$

$$\sum_{i=1}^{i=5} a_i \int_1^5 \frac{d\Phi_i(x)}{dx} \cdot \frac{dv(x)}{dx} dx = \int_1^5 v(x)dx - \Gamma_1 v(1) - \Gamma_2 v(5)$$

4. Ritz-Gallerkin módszer, Stiffness mátrix

Az 5 db ismeretlen $(a_1, a_2, a_3, a_4, a_5)$ meghatározásához 5 db egyenletre van szükségünk. Ritz-Gallerkin módszer azt javasolja, hogy használjuk az $\Phi_i(x)$ háztető függvényeket tesztfüggvényként az egyenletünkben. Ez összesen 5 különböző egyenletet eredményez:

$$\sum_{i=1}^{i=5} a_i \int_1^5 \frac{d\Phi_i(x)}{dx} \cdot \frac{d\Phi_1(x)}{dx} dx = \int_1^5 \Phi_1(x)dx - \Gamma_1 \Phi_1(1) - \Gamma_2 \Phi_1(5)$$

$$\vdots$$

$$\sum_{i=1}^{i=5} a_i \int_1^5 \frac{d\Phi_i(x)}{dx} \cdot \frac{d\Phi_5(x)}{dx} dx = \int_1^5 \Phi_5(x)dx - \Gamma_1 \Phi_5(1) - \Gamma_2 \Phi_5(5)$$

$$\frac{d\Phi_1(x)}{dx} = \begin{cases} -1 & \text{ha } x \in [1,2] \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases}$$

$$\frac{d\Phi_2(x)}{dx} = \begin{cases} 1 & \text{ha } x \in [1,2] \\ -1 & \text{ha } x \in [2,3] \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases}$$

$$\longrightarrow \qquad \int_1^5 \frac{d\Phi_1(x)}{dx} \cdot \frac{d\Phi_1(x)}{dx} = 1 \quad ; \quad \int_1^5 \frac{d\Phi_2(x)}{dx} \cdot \frac{d\Phi_1(x)}{dx} = -1$$

Hasonlóan a többi függvényre kiszámolható. Az egyenletrendszer bal oldalára kapjuk:

$$\begin{bmatrix} a_1 - a_2 \\ -a_1 + 2a_2 - a_3 \\ -a_2 + 2a_3 - a_4 \\ -a_3 + 2a_4 - a_5 \\ -a_4 + a_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1.5 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0.5 - \Gamma_2 \end{bmatrix}$$

Ez az ún. "stiffness" együttható mátrix M_s és a jobb oldalon "load" vektor. A stiffness mátrix determinánsa nulla, ami ezt jelenti, hogy összefüggő egyenleteink vannak, egyelőre nincs egyértlemű megoldása az egyenletnek. Ez azért van, mert csak a fluxusokkal definiáltuk egyelőre a peremfeltételeket, és nem használtuk fel a rögzített peremfeltételt. Mindjárt látni fogjuk, hogy ez csökkenti majd a stiffness mátrix méretét, azáltal határozottá válik majd az egyenletrendszerünk..

5. Megoldás Dirichlet peremfeltétel alkalmazásával

a) Dirichlet erős feltétel alkalmazása (COMSOL: pointwise constraint)

$$V|_{x=5} = 9 \quad \Longrightarrow \quad \sum_{i=1}^{i=5} a_i \Phi_i(x)|_{x=5} = 9 \quad \Longrightarrow \quad a_5 = 9$$

Ezzel az utolsó sort és oszlopot kivehejük a stiffnes mátrixból, és a többi együttható mostmár egyértelműen kiszámolható. Az ismert a_5 együttható értékét be kell írnunk a jobb oldali oszlopvektorba.

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1.5 \\ 1 \\ 1 \\ 9 \end{bmatrix}$$

A megoldást az inverz mátrix-al való szorzás után kapjuk:

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9 \\ 10.5 \\ 11 \\ 10.5 \\ 9 \end{bmatrix}$$

b) Dirichlet gyenge feltétel Lagrange-féle multiplikátor alkalmazásával (COMSOL: weak contribution)

A Dirichlet feltételt egy újabb tesztfügvénnyel (lm) vesszük figyelembe:

$$\int_1^5 \left(\frac{dV}{dx} \cdot \frac{dv(x)}{dx} - v(x) \right) dx = -\Gamma_1 v(1) - \Gamma_2 v(5) - lm \cdot (V|_{x=5} - 9)$$

$$\int_1^5 \left(\frac{dV}{dx} \cdot \frac{dv(x)}{dx} - v(x) \right) dx = -\Gamma_1 v(1) - \Gamma_2 v(5) - lm \cdot (a_5 - 9)$$

lm egy új ismeretlen, fluxus jellegű mennyiségnek tekinthető.

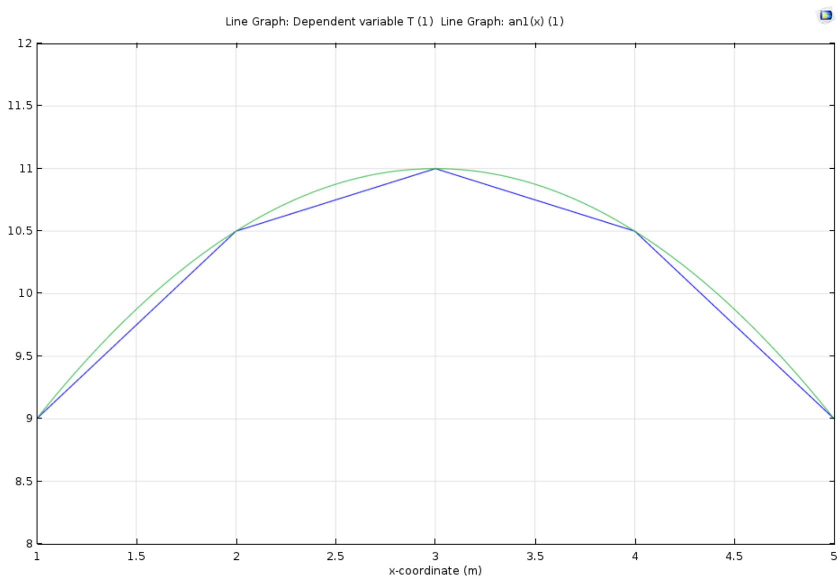
A tesztfüggvényekbe a táblázatban látható behellyetesítéseket alkalmazva, összesen 6 db egyenletet kapunk:

$\mathrm{V}(x)$	lm
$\phi_1(x)$	0
$\phi_2(x)$	0
$\phi_3(x)$	0
$\phi_4(x)$	0
$\phi_5(x)$	0
0	1

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_5 \\ \Gamma_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1.5 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0.5 \\ 9 \end{bmatrix}$$

A megoldást az inverz mátrix-al való szorzás után kapjuk:

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_5 \\ \Gamma_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9 \\ 10.5 \\ 11 \\ 10.5 \\ 9 \\ 2 \end{bmatrix}$$



7. ábra. Analitikus és numerikus megoldás