

Método de los elementos finitos

**Carolina Herrera S.
David Silva S.**

**Física Computacional II
Medellín
2020**

TABLA DE CONTENIDOS



Introducción

- ¿Qué es?
- ¿Por qué es importante?
- Aplicación en Cristalografía



Explicación del método

- Introducción.
- Definiendo los elementos.
- Triangulación de la región.



Implementación

- Métodos numéricos.
- Repositorio.
- Método de los elementos finitos.



Ejemplo

- La temperatura y la Ec. de Laplace.
- Preparando la región.
- Resultados.

INTRODUCCIÓN

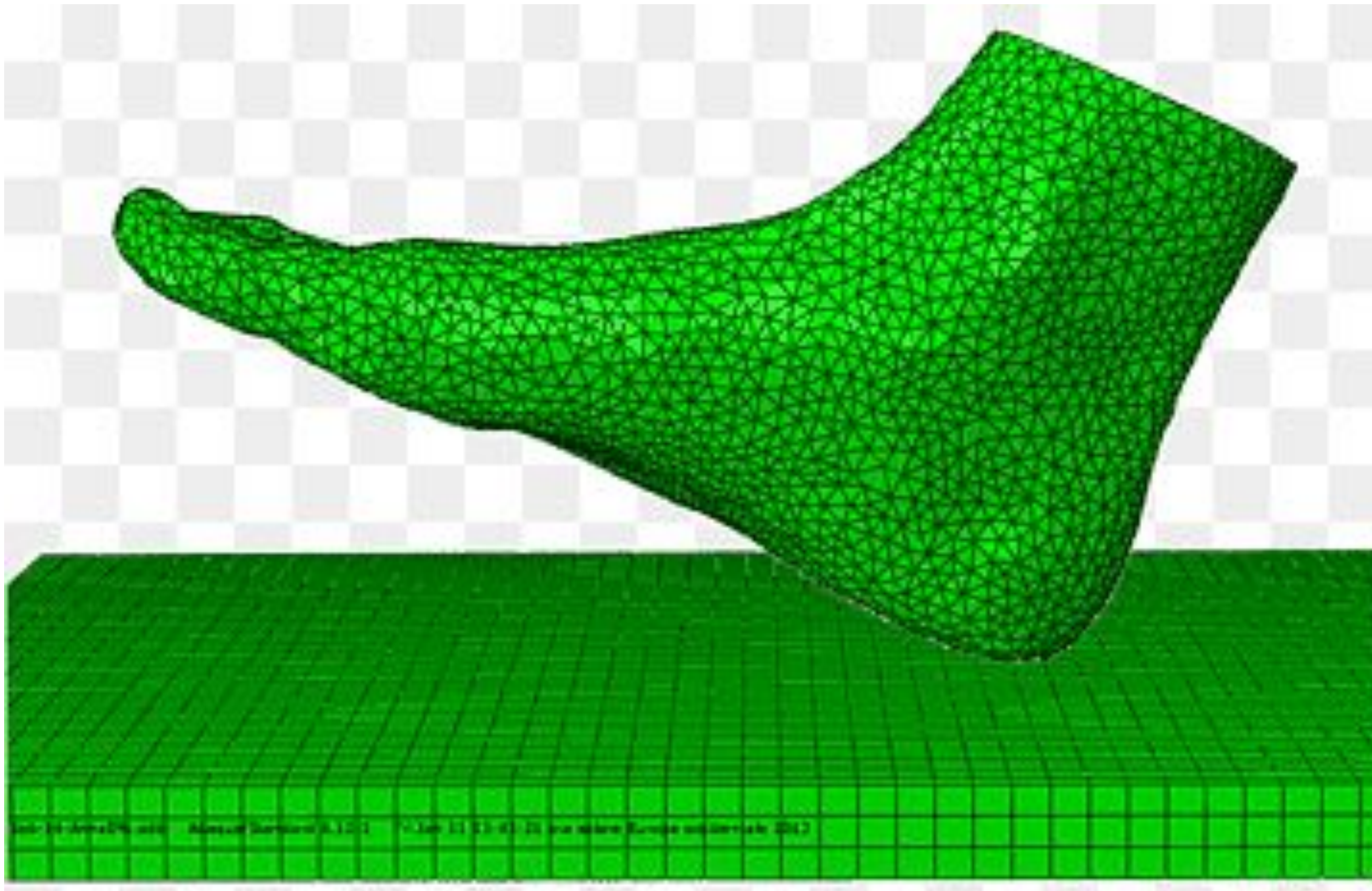
¿Qué es?

El método de los elementos finitos consiste en solucionar una ecuación diferencial parcial con condiciones de frontera en un cuerpo arbitrario.



INTRODUCCIÓN

¿Qué es?

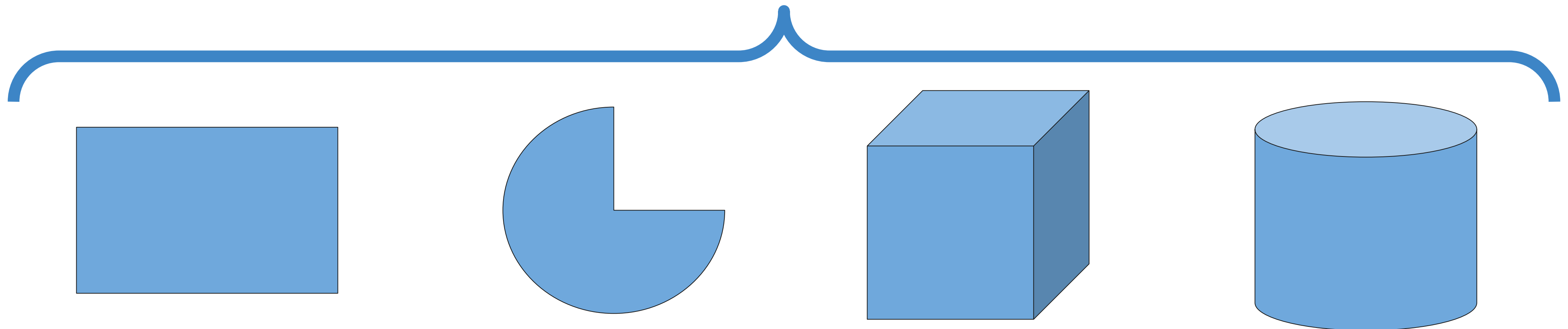


El espacio se subdivide en elementos regulares y se resuelve la ecuación para cada uno de ellos.

INTRODUCCIÓN

¿Por qué es importante?

El método es importante, principalmente, porque es virtualmente aplicable para cualquier superficie y un alto rango de ecuaciones diferenciales parciales con condiciones de frontera.



INTRODUCCIÓN

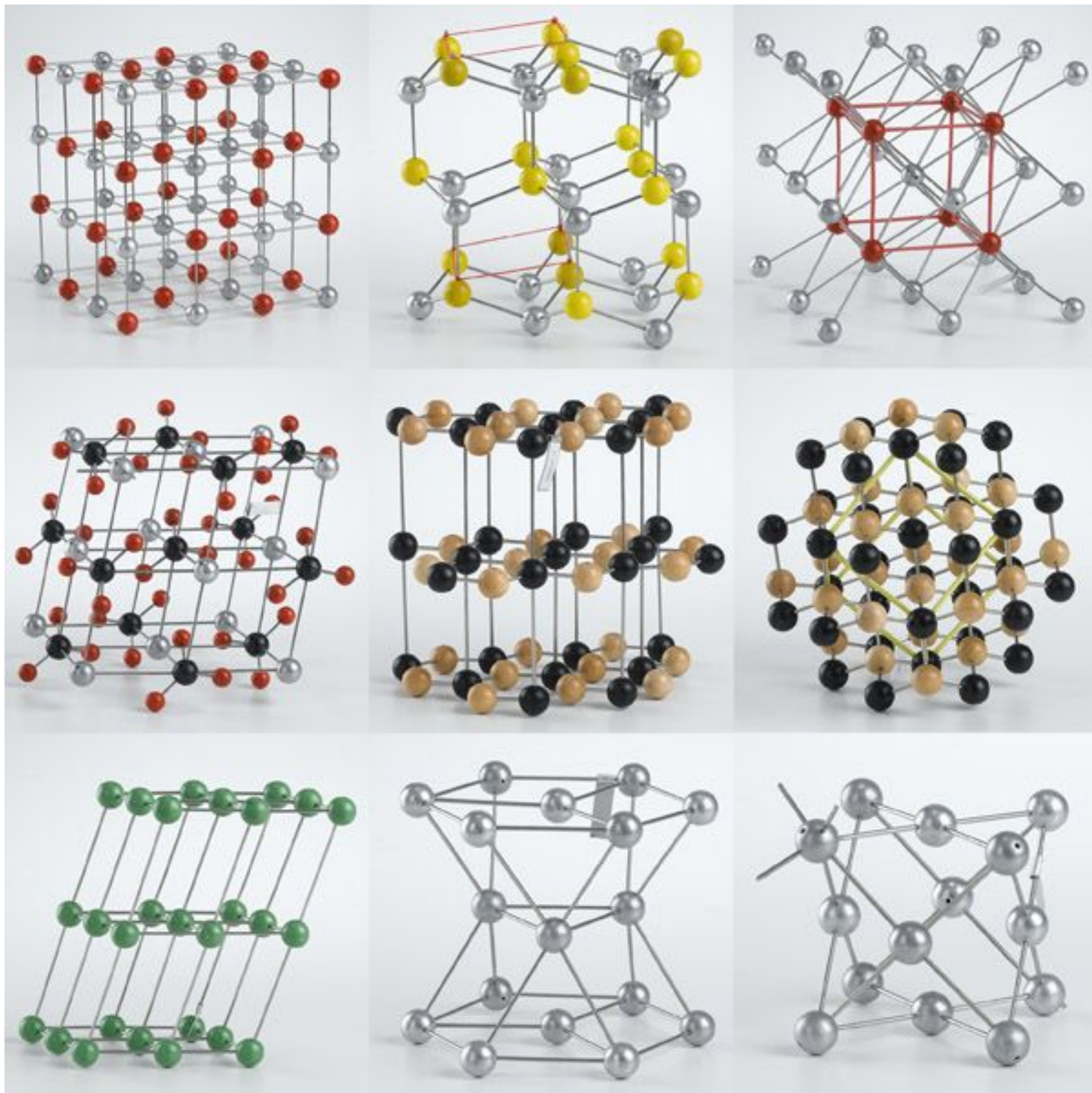
¿En qué se aplica?

El método es aplicado en todas las áreas relacionadas con matemática aplicada. Sin embargo, fue diseñado para ingeniería civil. En física, una aplicación importante surge en sistemas cristalinos:

Tadmor, E. B., Smith, G. S., Bernstein, N., & Kaxiras, E. (1999). Mixed finite element and atomistic formulation for complex crystals. Physical Review B, 59(1), 235.

INTRODUCCIÓN

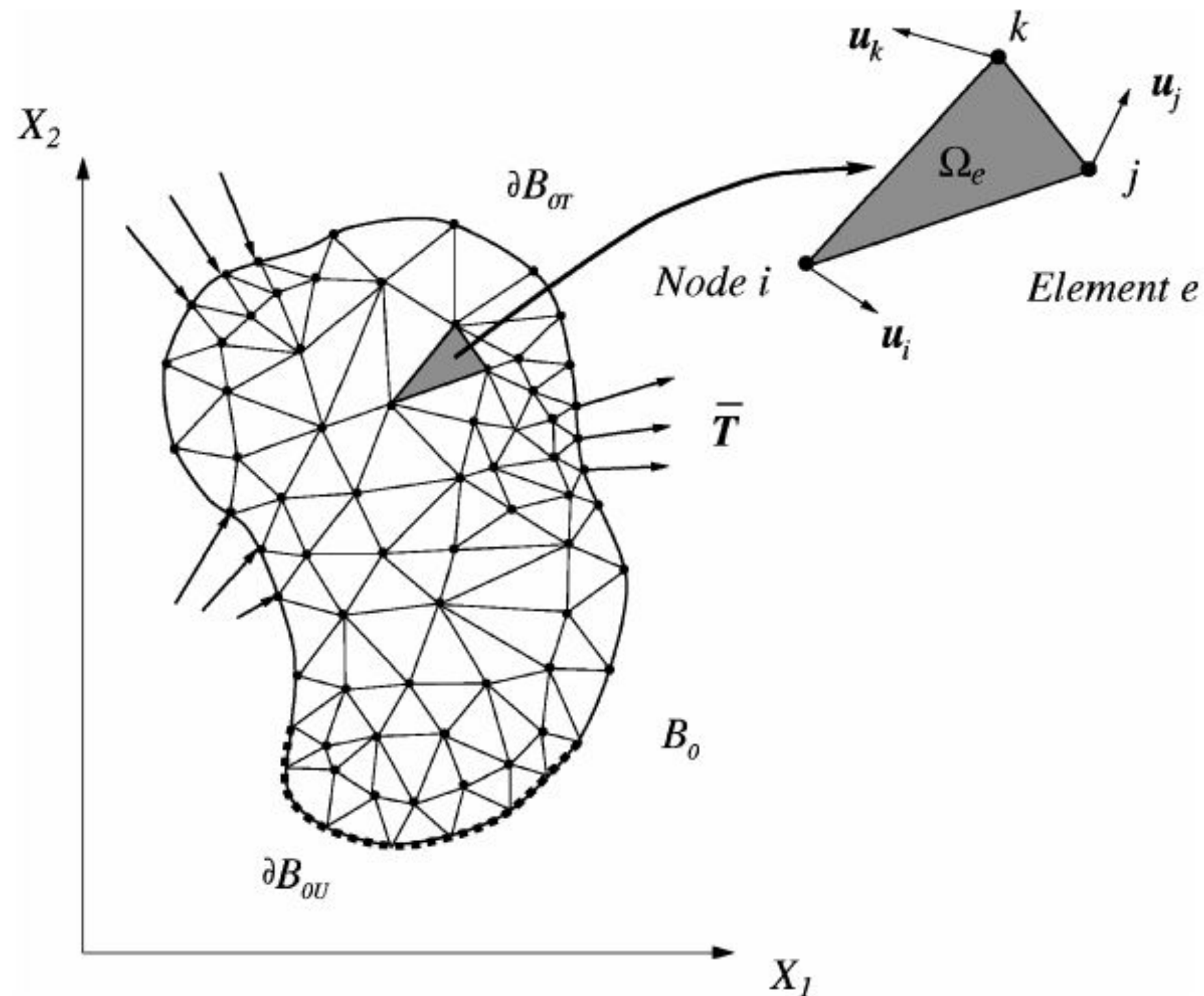
Aplicación en Cristalografía



Un cristal es un sistema interesante pues consiste de un sistema macroscópico con propiedades que dependen de cada uno de los cuerpos discretos que lo componen.

INTRODUCCIÓN

Aplicación en Cristalografía



Este método se acopla muy bien a la física de este sistema, pues permite integrar en un sistema continuo y a la vez obtener información de cada sub-sistema discreto que lo compone.

EXPLICACIÓN DEL MÉTODO

Introducción

Para este caso se soluciona la siguiente ecuación diferencial parcial (PDF) en dos dimensiones:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(p(x, y) \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(q(x, y) \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} \right) + r(x, y)u(x, y) = f(x, y) \quad (1)$$

Con $(x, y) \in D$, donde D es una región plana con frontera S .

EXPLICACIÓN DEL MÉTODO

Introducción

La PDF debe satisfacer las siguientes condiciones de frontera:

$$g(x, y) \quad (2)$$

para una porción S_1 de la frontera y la siguiente ecuación para el resto de la frontera, la cual se denomina S_2 :

$$p(x, y) \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} \cos(\theta_1) + q(x, y) \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} \cos(\theta_2) + g1(x, y)u(x, y) = g2(x, y) \quad (3)$$

EXPLICACIÓN DEL MÉTODO

Introducción

Se parte de que una solución de la ecuación (1) minimiza el funcional:

$$I[w] = \int \int_D \left\{ \frac{1}{2} \left[p(x, y) \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + q(x, y) \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} - r(x, y) w^2 \right] + f(x, y) w \right\} dx dy$$
$$+ \int_{S_2} \left\{ -g_2(x, y) w + \frac{1}{2} g_1(x, y) w^2 \right\} dS \quad (4)$$

EXPLICACIÓN DEL MÉTODO

Escogiendo los elementos

Para simplificar el problema, se busca una solución aproximada $\phi(x,y)$ a $\mathbf{u}(x,y)$. Para encontrar esta función se divide la región en M elementos discretos y se aproxima a una sumatoria de la solución en cada elemento. Esto es:

$$u(x, y) \approx \Phi(x, y) = \sum_{i=1}^m \gamma_i \Phi_i(x, y) \quad (5)$$

donde cada ϕ_i es un polinomio, cuya forma depende de cómo se divide la región.

EXPLICACIÓN DEL MÉTODO

Escogiendo los elementos

La idea del método es minimizar el funcional **I**, por lo que se debe cumplir para cada γ_i :

$$\frac{\partial I}{\partial \gamma_i} = 0 \quad (6)$$

Derivando la ecuación 4 y reemplazando en la ecuación 5, se obtiene un sistema de ecuaciones lineal **Ac = b**, cuya solución son los γ_i .

EXPLICACIÓN DEL MÉTODO

Escogiendo los elementos

Para facilitar la comprensión del algoritmo, se mostrará a qué corresponde cada elemento de la matriz **A** y cada elemento del vector **b**.

$$\alpha_{ij} = \iint_{\mathcal{D}} \left[p(x, y) \frac{\partial \phi_i}{\partial x}(x, y) \frac{\partial \phi_j}{\partial x}(x, y) + q(x, y) \frac{\partial \phi_i}{\partial y}(x, y) \frac{\partial \phi_j}{\partial y}(x, y) \right. \\ \left. - r(x, y) \phi_i(x, y) \phi_j(x, y) \right] dx dy + \int_{\mathcal{S}_2} g_1(x, y) \phi_i(x, y) \phi_j(x, y) dS$$

EXPLICACIÓN DEL MÉTODO

Escogiendo los elementos

Para facilitar la comprensión del algoritmo, se mostrará a qué corresponde cada elemento de la matriz **A** y cada elemento del vector **b**.

$$\beta_i = - \iint_{\mathcal{D}} f(x, y) \phi_i(x, y) \, dx \, dy + \int_{\mathcal{S}_2} g_2(x, y) \phi_i(x, y) \, dS - \sum_{k=n+1}^m \alpha_{ik} \gamma_k,$$

EXPLICACIÓN DEL MÉTODO

Escogiendo los elementos

Para el caso de regiones triangulares los ϕ_i vienen dados por:

$$\Phi_i(x, y) = a + bx + cy \quad (7)$$

EXPLICACIÓN DEL MÉTODO

Triangulando la región

A continuación se introduce la notación que se usará en el algoritmo. Se divide la región en M triángulos T_i . Cada triángulo tiene tres vértices:

$$V_j^{(i)}(x_j^{(i)}, y_j^{(i)}), \text{ para } j = 0, 1, 2$$

A cada lado de T_i se le asocia un polinomio $N_j^{(i)}$ que está directamente relacionado con ϕ_i definidos anteriormente.

EXPLICACIÓN DEL MÉTODO

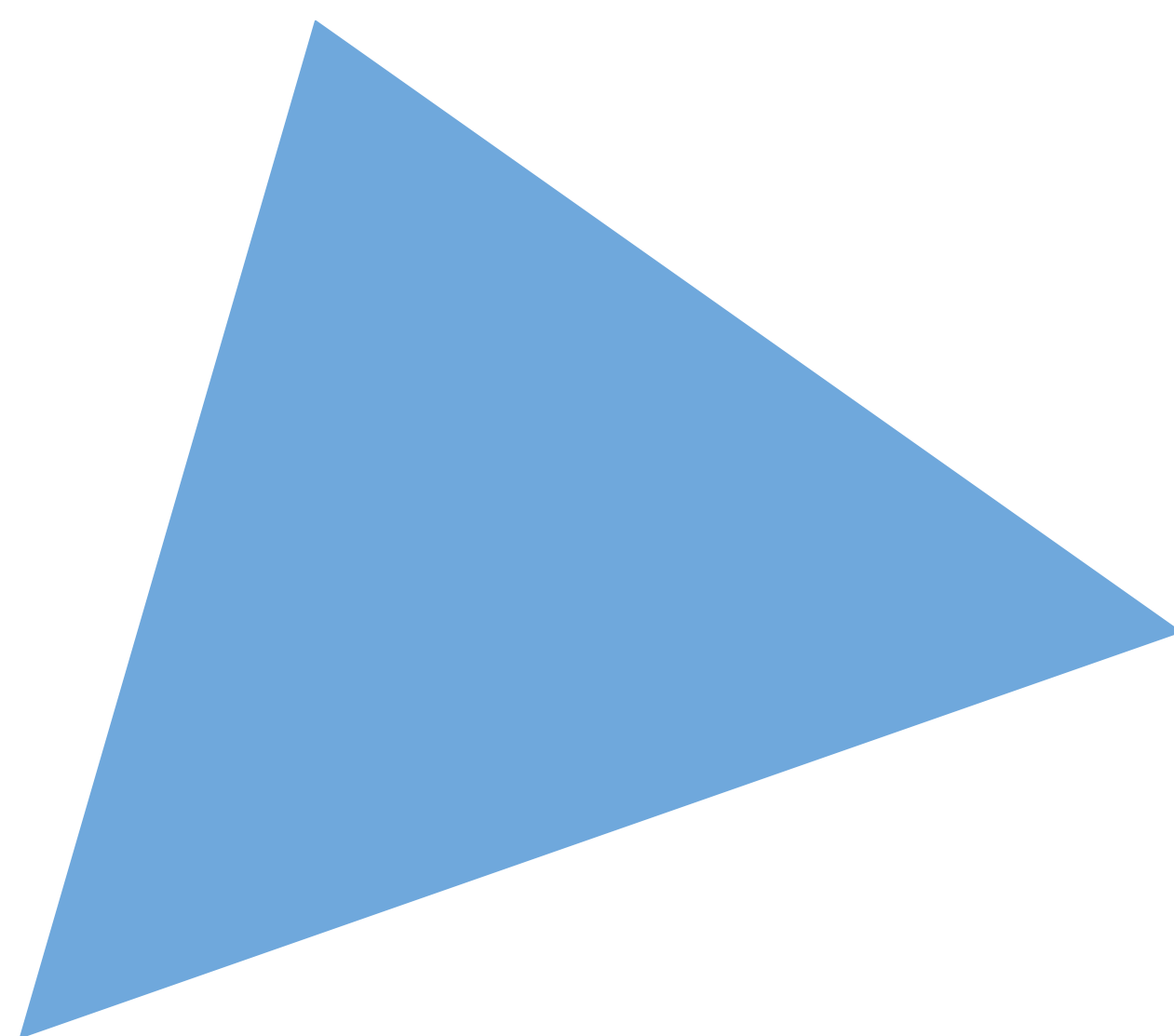
Triangulando la región

- T_0, \dots, T_{K-1} : triángulos internos.
- T_K, \dots, T_{N-1} : triángulos con al menos un eje en S2.
- T_N, \dots, T_{M-1} : triángulos con al menos un eje en S1.
- E_0, \dots, E_{p-1} : nodos en S2 que no están en una frontera con S1.
- E_p, \dots, E_{n-1} : nodos internos.
- E_n, \dots, E_{m-1} : nodos en S1.

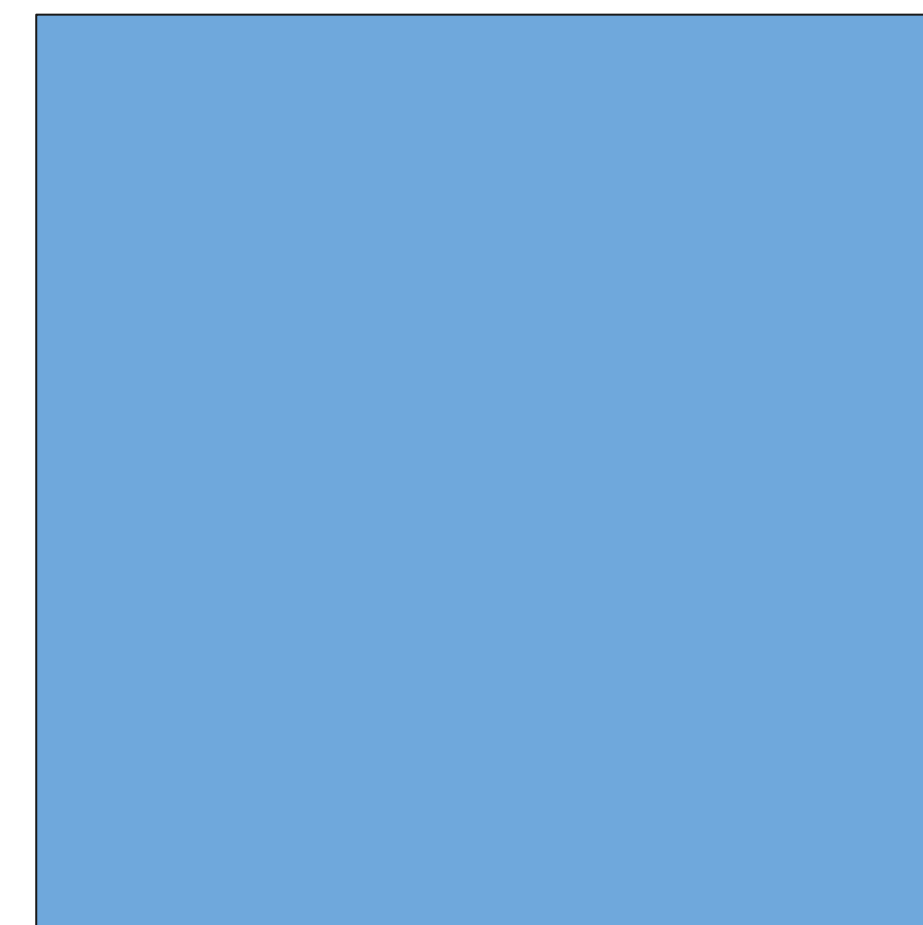
IMPLEMENTACIÓN

Métodos numéricos: Integrales dobles

Dado que las integrales dobles siempre son en un triángulo, es necesario desarrollar un método que integre en un triángulo arbitrario de la forma más sencilla posible.



Triángulo arbitrario



Cuadrado unitario

IMPLEMENTACIÓN

Métodos numéricos: Integrales dobles

¿Cómo se logra esta transformación?

Dados los tres vértices del triángulo (x_1, y_1) , (x_2, y_2) , (x_3, y_3) , sean (u, v) las coordenadas del cuadrado. Podemos obtener **x** e **y** con:

$$x = (1 - u) * x_1 + u * ((1 - v) * x_2 + v * x_3)$$

$$y = (1 - u) * y_1 + u * ((1 - v) * y_2 + v * y_3)$$

IMPLEMENTACIÓN

Métodos numéricos: Integrales dobles

¿Cómo se logra esta transformación?

El Jacobiano de la transformación viene dado por:

$$dJ = |[(1 - v) * x_2 + v * x_2 - x_1][u * x_3 - u * x_2] \\ - [(1 - v) * y_2 + v * y_2 - y_1][u * y_3 - u * y_2]| dudv$$

IMPLEMENTACIÓN

Métodos numéricos: Integrales dobles

Juntando todo lo anterior se obtiene:

$$\iint_{T_i} f(x, y) dx dy \rightarrow \int_0^1 \int_0^1 f(x(u, v), y(u, v)) dJ$$

IMPLEMENTACIÓN

Métodos numéricos: Integrales de línea

Afortunadamente, todas las integrales de línea para este método se hacen sobre una línea recta. Recordando que dados dos puntos (x_1, y_1) , (x_2, y_2) , las variables \mathbf{x} e \mathbf{y} se pueden parametrizar en términos de un parámetro $t \in [0, 1]$

$$x = t * (x_2 - x_1) + x_1$$

$$y = t * (y_2 - y_1) + y_1$$

$$dJ = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2} dt$$

IMPLEMENTACIÓN

Métodos numéricos: Integrales de línea

Se obtiene entonces:

$$\int_{L_i} f(x, y) dS \rightarrow \int_0^1 f(x(t), y(t)) dJ$$

IMPLEMENTACIÓN

Métodos numéricos: Integrales

Para obtener las integrales de las diapositivas anteriores se utiliza el método compuesto de Simpson propuesto en [1] tanto para 1D como para 2D.

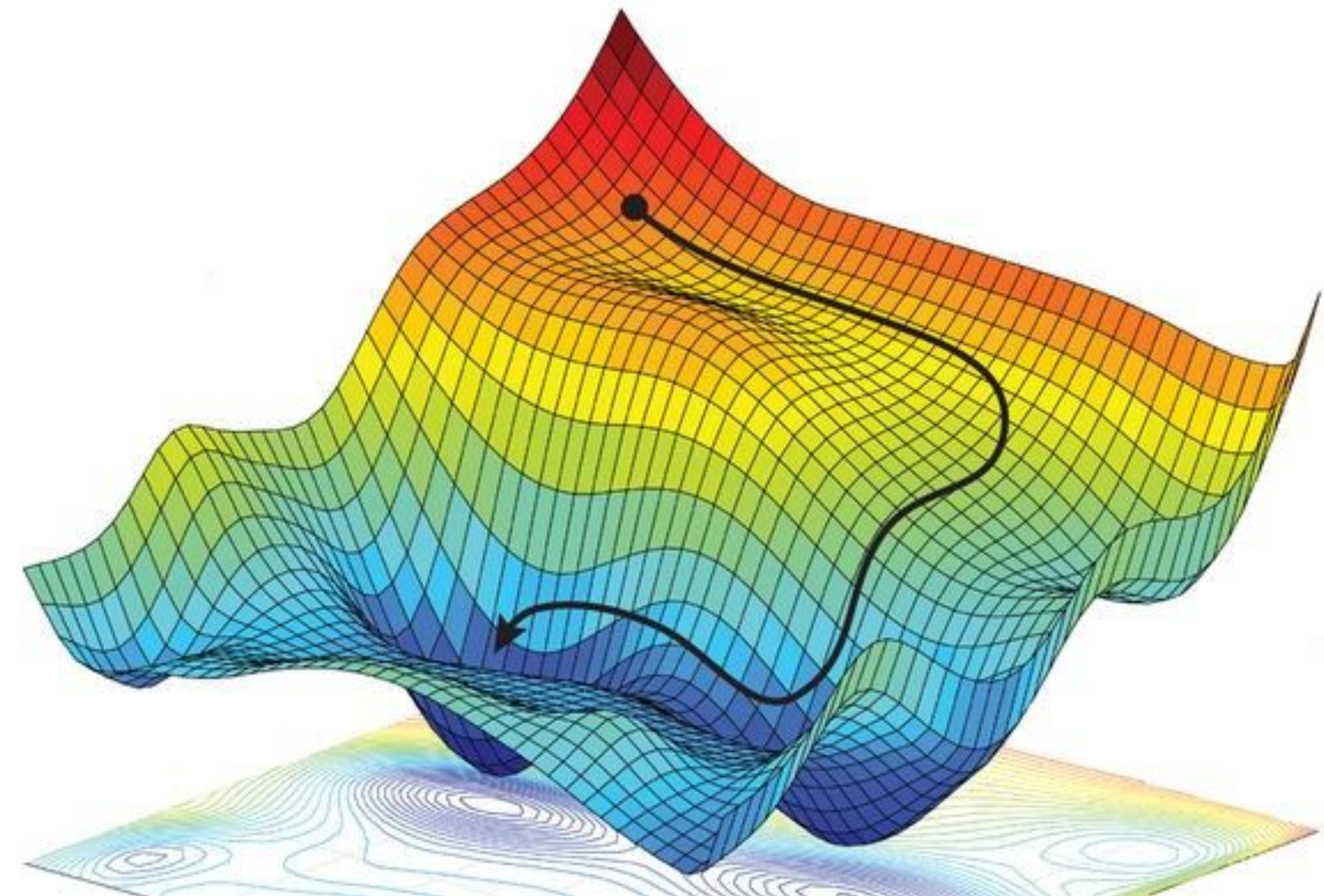
- [1] Burden, R., & Faires, J. D. (2004). *Numerical analysis*. Cengage Learning.

IMPLEMENTACIÓN

Métodos numéricos: Sistema de Ecuaciones Lineales

Para solucionar el sistema de ecuaciones lineales se utiliza el método **SOR**, también propuesto en [1].

SOR es, por sus siglas en inglés, successive over-relaxation.



IMPLEMENTACIÓN

Métodos numéricos: método de los elementos finitos

Veamos el [repositorio](#)



EJEMPLO

La temperatura y la ecuación de Laplace

$$\frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} = 0$$

EJEMPLO

La temperatura y la ecuación de Laplace

Con condiciones de frontera:

$$u(x, y) = 4,$$

para $(x, y) \in L_6, \dots, L_{11}$

$$\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}}(x, y) = x,$$

para $(x, y) \in L_2, L_4$

$$\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}}(x, y) = y,$$

para $(x, y) \in L_3$

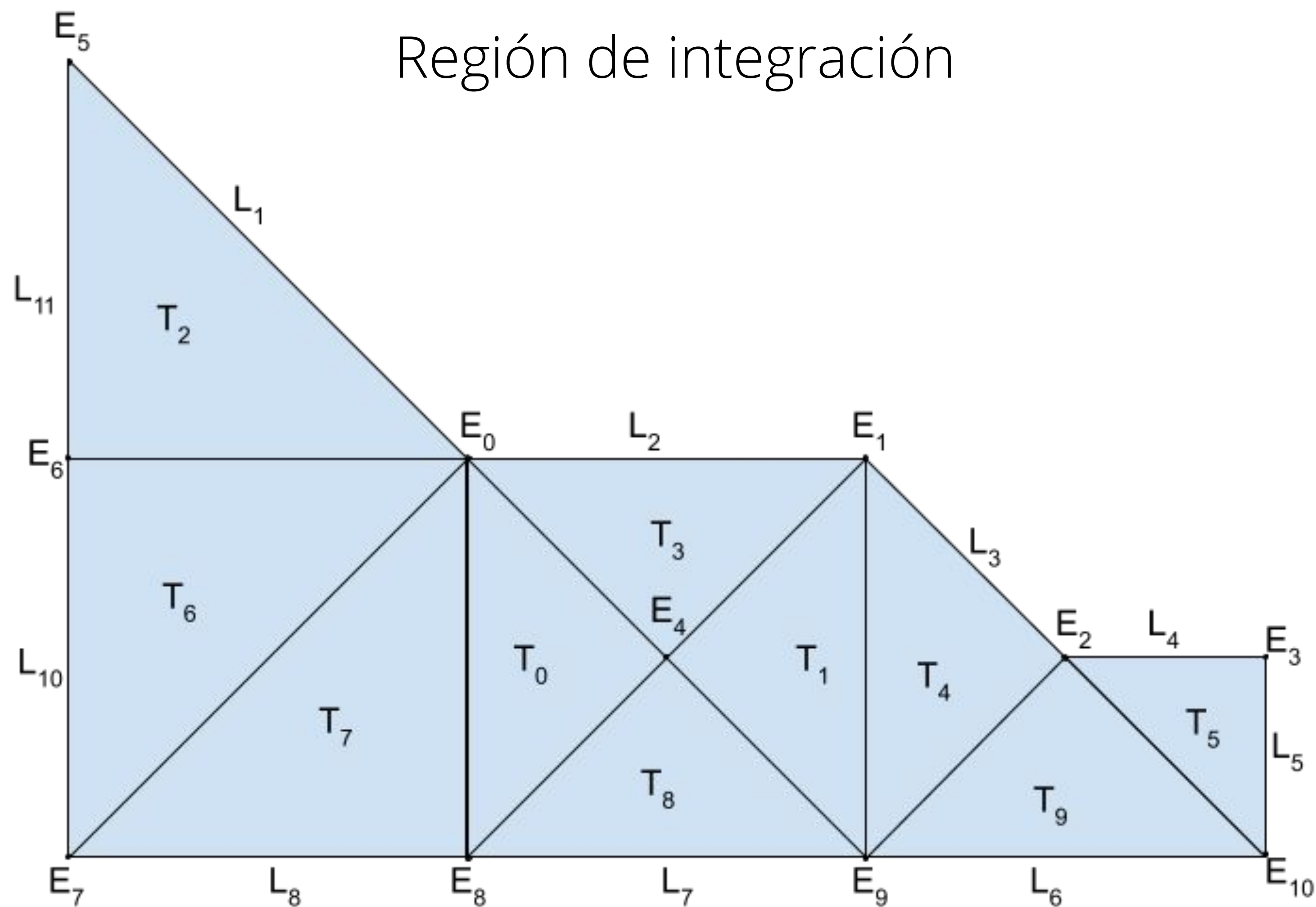
$$\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}}(x, y) = \frac{x + y}{\sqrt{2}},$$

para $(x, y) \in L_1, L_3$

EJEMPLO

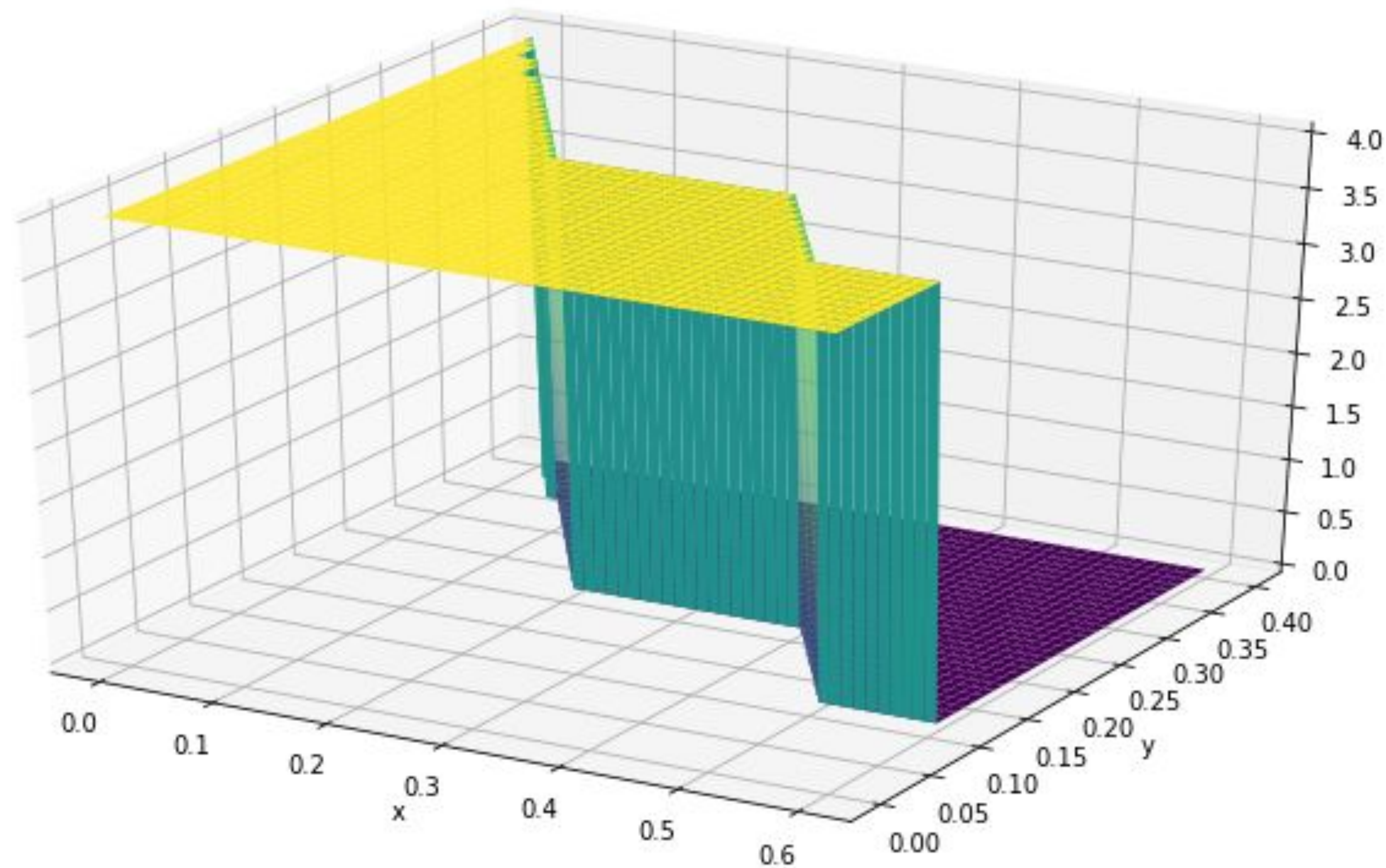
La temperatura y la ecuación de Laplace

Región de integración



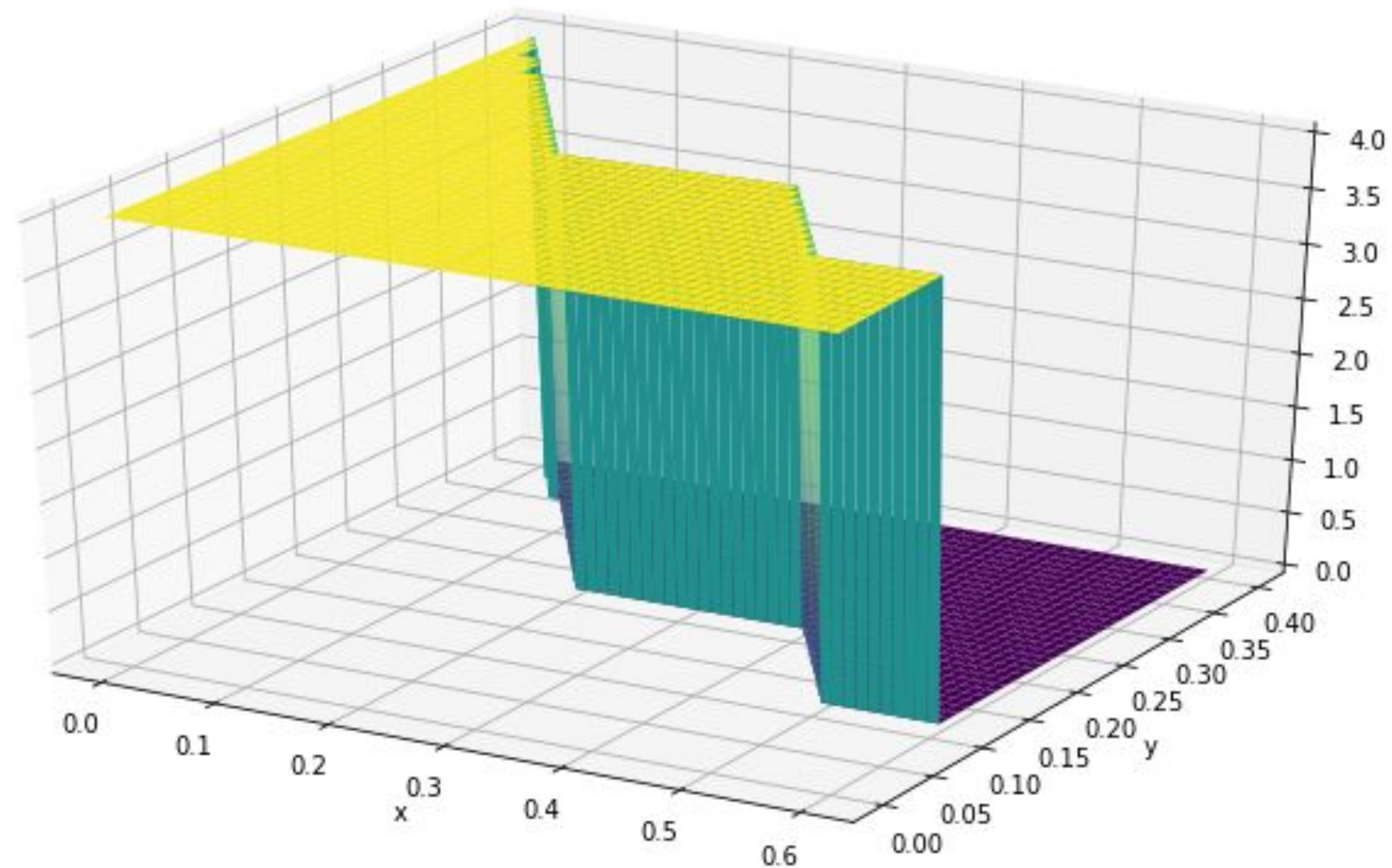
EJEMPLO

La temperatura y la ecuación de Laplace: Resultado Aproximado



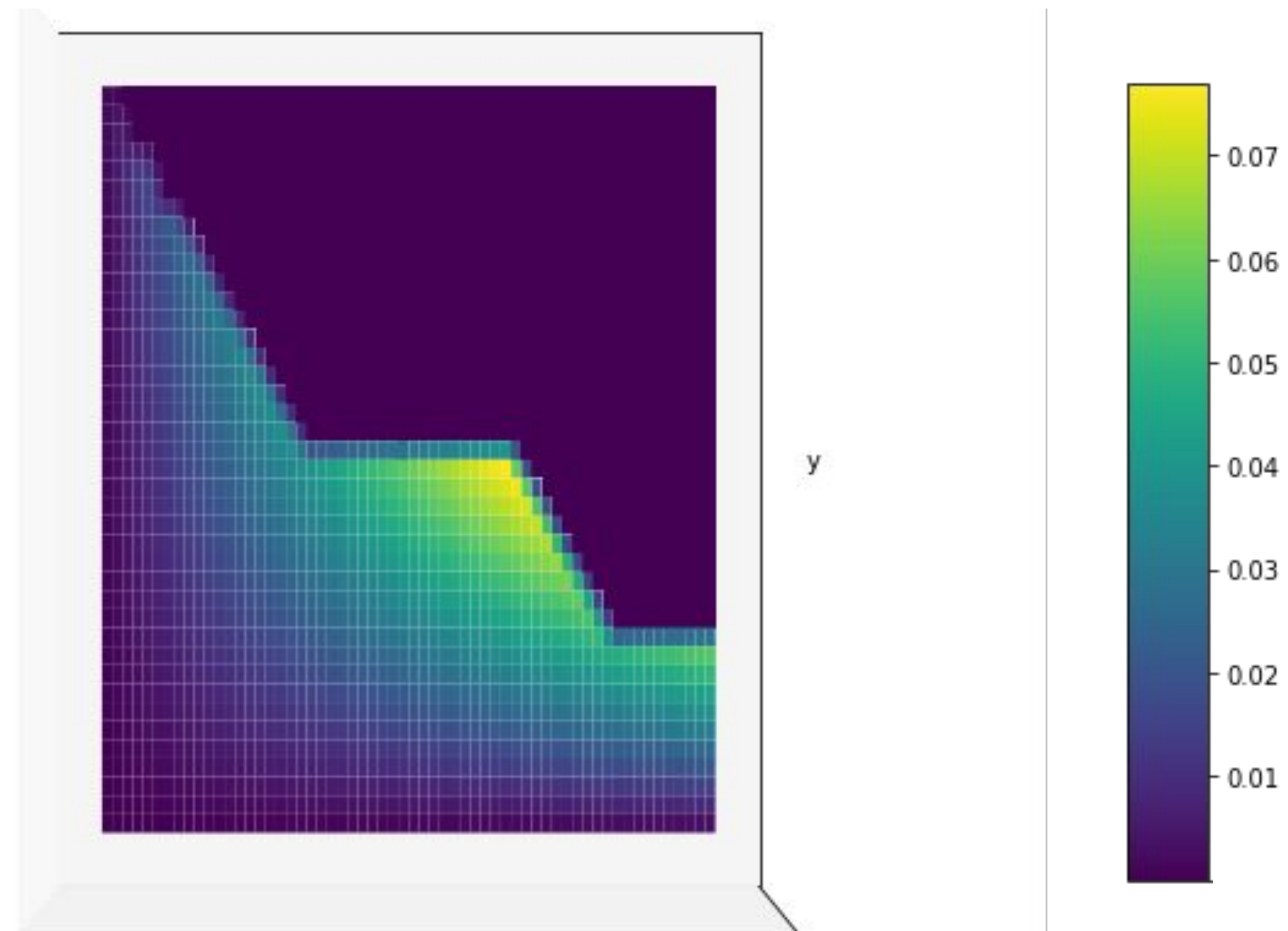
EJEMPLO

La temperatura y la ecuación de Laplace: Solución Exacta



EJEMPLO

La temperatura y la ecuación de Laplace: Error



Bibliografía

- [1] Burden, R., & Faires, J. D. (2004). *Numerical analysis*. Cengage Learning.
- [2] Tadmor, E. B., Smith, G. S., Bernstein, N., & Kaxiras, E. (1999). Mixed finite element and atomistic formulation for complex crystals. *Physical Review B*, 59(1), 235.
- [3] Integrales dobles en un triángulo:
<http://connor-johnson.com/2014/03/09/integrals-over-arbitrary-triangular-regions-for-fem/>
- [4] Determinar si un punto está dentro de un triángulo:
<https://stackoverflow.com/questions/2049582/how-to-determine-if-a-point-is-in-a-2d-triangle>