有限元算法说明

这里处理的方程组为

|  |  |
| --- | --- |
|  | (0) |

# 关于边界条件的处理

## 第二类边界条件

(0)🡪

🡪

注意到有以下向量恒等式：

🡪

(散度定理) 🡪

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1-1) |

🡪

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

这里的表示面元的外法向。

若选取一组空间基函数，将待求函数展开为：

则(1-1)式可以改写为线性方程组：

🡪

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1-2) |

包含了第二类边界条件信息。如果矩阵具有以下形式：

其中为标量函数，为不依赖于空间坐标的常数矩阵。则可以将矩阵简化为：

其中

于是矩阵可以用直积来构造：

所以多分量方程组系数矩阵可以按如下步骤构造：

1. 构造单分量方程的系数矩阵；
2. 通过直积得到多分量方程组的系数矩阵。

问题：当Ndomains比较小时，MP是一个稠密的矩阵，此时用sparse存储MG并不划算，矩阵运算效率较低。Python有Block Sparse Matrix(BSR格式)，但MATLAB没有。。。

## 第一类边界条件

（咨询过张老师，他表示这种方法没人研究过，不保证收敛。事实证明程序写出来计算结果是发散的。）

注意到有以下向量恒等式：

* 1. 🡪

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1-3) |

若同样选取前述的展开方式：

则(1-3)式可以改写为线性方程组：

🡪

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1-4) |

这里的矩阵与上一小节相同。包含了第一类边界条件信息。

## 第三类(Robin)边界条件

假设边界条件的形式为

其中是一个矩阵，可以依赖于空间坐标和时间。则(1-1)式

可改写为：

写成矩阵形式：

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1-5) |

其中

## 关于第一类边界条件的物理含义(proposed by 陈劲夫)

气体原子是不能穿过气室壁的，在热平衡条件下，也不应该吸附在气室壁上。所以应该有：

另一方面，如果我们还希望指定第一类边界条件：

那么将导致边界条件超出定解的要求，方程不一定有解。实际上，边界上的总原子密度

并不是已知的，我们希望给定的边界条件仅仅是而已。所以第一类边界条件应该改写为：

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1-6) |

满足的方程直接由(0)式给出：

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1-7) |

实际上，我们的矩阵总是满足：

所以(1-7)式简化为：

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1-8) |

如果我们给定的初态刚好就是稳态解，那么边界条件(1-6)就重新简化为原来的第一类边界条件：

另外，从方程(1-8)可以看出，激光并不会改变总原子密度的分布。

# 基的选取(Lobatto)

采用直积形式的基：

中的函数是在给定格点为1，其余格点为零的线性函数：

中的函数是在给定区间上的Lobatto函数：

当均来自时，为nodal基，它在与格点相邻的8个区域内都是非零的；

当中有两个来自时，为edge基，它在与边相邻的4个区域内都是非零的；

当中有三个来自时，为surface基，它在与面相邻的2个区域内都是非零的；

当全部来自时，为domain基，它仅在1个区域内有非零值。

边界基仅包含nodal、edge和surface基。

## 基的遍历方法

对于每一个domain，使用一个三重循环来遍历所有在这个domain中有非零值的基：

for ix=1:K+2

for iy=1:K+2

for iz=1:K+2

countPoint = count(ix<3, iy<3, iz<3);

if countPoint == 3

% nodal basis

elseif countPoint == 2

% edge basis

elseif countPoint == 1

% surface basis

else

% domain basis

end

end

end

end

ix=1和ix=2对应的两个基属于，其中ix=1的基在处取得最大值；ix=2的基在处取得最大值。ix>2对应的基为，属于。iy，iz与此类似。

## 基的内积

设

则有：

也就是说为了计算系数矩阵，实际上我们只需要知道等单轴基函数之间的内积就足够了。矩阵由于涉及未知的权函数，需要使用数值积分。

下面来计算在区间上的值。为了精确起见，这里重新对记号进行说明：

