

Descripción diagrama de FEM

Santiago Echeverri Chacón

22 de septiembre de 2011

Resumen

Se pretende hacer una descripción del procedimiento que se plantea en el diagrama sobre la solución de problemas de valores propios con el método elementos finitos.

1. Introducción

La particularidad del procedimiento planteado es que parte de una programación modular. Esto significa que el algoritmo a desarrollar lo separaremos en bloques o módulos que serán independientes pero compatibles entre sí. Estos bloques podrán ser llamados por separado desde un programa o script principal que hará las veces de usuario.

Cada módulo representa una de las etapas tradicionales del método de elementos finitos:

- Preprocesamiento
- Procesamiento
- Postprocesamiento

Con esto se espera lograr un conjunto de códigos que son más versátiles, fáciles de depurar, ampliar y optimizar.

2. Preprocesamiento

La primera etapa llamada “*preprocesamiento*”, es la etapa en la cual definimos nuestro sistema y le asignamos las condiciones que lo rigen. Para nuestro caso esto consiste en:

1. Definir el dominio espacial del sistema y discretizarlo de acuerdo a la precisión que se dese. El resultado de la discretización será un conjunto de subdominios llamados *elementos* y en adelante se llamará *mall* al conjunto de elementos que constituyen al dominio inicial.

Para el caso de la ecuación de Schrödinger en 1D, definir el dominio significa asumir un segmento de recta con una longitud dada, y discretizarlo implicará seccionar esa recta en una cantidad dada de subdivisiones.

En el problema 2D la longitud dada puede hacer referencia al lado de un pozo cuadrado, o al radio de un pozo circular, y el número de divisiones del dominio es la cantidad de segmentos de área que representan el problema

2. Establecer las condiciones del problema que están asociadas al dominio del problema, entre ellas:

- Potencial
- Fuentes o sumideros

Para el caso de la ecuación de Schrödinger en 1D, las condiciones implementadas serán del tipo potencial. Esto se traduce en asignar un valor de potencial a cada punto o elemento de la mall dada una función continua o a tramos que describe la naturaleza del fenómeno. Por ejemplo un pozo infinito, un oscilador armónico o un pozo del tipo Kronig Penney.

Una vez realizados estos dos pasos tendremos la información fundamental del problema en una representación discreta que es compatible con el método de solución implementado en la etapa de procesamiento. Esto, a nivel de programación significará que la salida de la etapa de preprocesamiento son dos matrices que contienen la mall y el potencial evaluado en los elementos de la mall.

Estas matrices deberán poderse escribir en archivos con un formato predefinido que sea compatible con archivos procedentes de algún modulo de preprocesamiento externo, por ejemplo, **Gmsh**.

3. Procesamiento

Siguiendo al preprocesamiento está la etapa de procesamiento, que es la etapa donde se aplica el método de solución dados, el dominio, sus propiedades y una ecuación que define el tipo de problema.

Dado que las etapas del procedimiento deben sucederse, es claro que algunos de los argumentos de entrada de la etapa de procesamiento sean los argumentos de salida de la etapa de preprocesamiento, específicamente las matrices que definen el dominio y sus propiedades. Y teniendo en cuenta que para el método de elementos finitos la construcción de las matrices globales y su solución dependen de la ecuación que se esté tratando y de las condiciones de frontera, al modulo de procesamiento se le debe ingresar un tercer argumento que permita seleccionar entre distintas operaciones.

Para el caso de la ecuación de Schrödinger se plantean 3 algoritmos distintos que hacen referencia la solución por FEM asumiendo condiciones de frontera que permiten describir un problema en su forma local o bajo dos condiciones de periodicidad distintas. Con ello adquirimos una herramienta que permite describir situaciones cuánticas en materiales cristalinos, y compararlas con sus equivalentes locales o no periódicos. Por otra parte, y sabiendo que la ecuación de Schrödinger se traduce en un problema de valores y vectores propios con una superposición de infinitas soluciones, se plantea el argumento de entrada `nVals`, como indicador de la cantidad de soluciones a evaluar.

Finalmente, en la etapa de procesamiento se