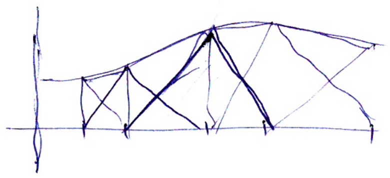
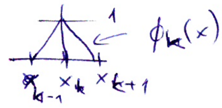
Metoda konečných prvků kombinovaná s reprezentací diskrétní proměnnou

- zkratka FEM-DVR z finite-element method - discrete variable representation

- konečné prvky = slabá formulace problému + vhodná báze s kompaktním nosičem



- jako báze slouží například



$$f(x) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\,\phi_i(x)$$

slabá formulace = integrální formulace PDR

od $-\frac{1}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2}\psi + \left(\frac{\ell(\ell+1)}{2\mu r^2} + V(r)\right)\psi = E\psi$ a $\psi = \sum_i c_i \phi_i(x)$

přejdeme k

$$\frac{1}{2\mu}\int_0^\infty \left(\frac{d\phi^*}{dr}\right)\left(\frac{d\psi}{dr}\right)dr + \int_0^\infty \phi^*\left(\frac{\ell(\ell+1)}{2\mu r^2} + V(r)\right)\psi(r)\,dr = E\int_0^\infty \phi(r)\psi(r)\,dr$$

a tedy v bázi dostaneme soustavu lineárních rovnic (problém vlastních čísel)

$$\sum_{j=1}^{n} H_{ij}\,c_j = E\,c_j$$

(předpokládáme ortonormální bázi $\int_0^\infty \phi_i^*\phi_j\,dr = \delta_{ij}$)

kde

$$H_{ij} = \frac{1}{2\mu}\int_0^\infty \left(\frac{d\phi_i^*}{dr}\right)\left(\frac{d\phi_j}{dr}\right)dr + \int_0^\infty \phi_i^*\left(\frac{\ell(\ell+1)}{2\mu r^2} + V(r)\right)\phi_j\,dr$$

pro obecnou bázi může jít o ošklivé integrály

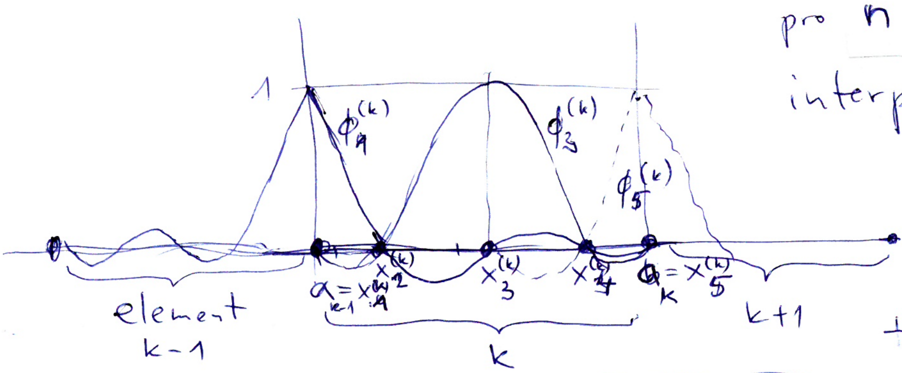
- trik: „DVR" = původně přechod od matice reprezentující operátor X diagonalizací s vlastními čísly λ_j: $\Lambda = VXV^\dagger$, ~~zpět~~ a vyčíslení $V(\Lambda)$ k matici repr. $V(X)$
  (předpoklad: maticové elementy X lze snáze počítat než $V(X)$)

zde se už ale nic nediagonalizuje, neboť volíme bázi tak, aby maticové elementy $V(X)$ byly nenulové pouze na diagonále, aproximuje-me li integrály vhodnou kvadraturou

- **konstrukce FEM-DVR báze**

 - myšlenka: zvolit na každém elementu (intervalu) bázi tak, aby vždy jednotlivé funkce byly nulové když prochází body Gaussovy-Lobattovy kvadratury vysokého řádu, abychom dostali dobrou aproximaci integrálů pomocí této kvadratury

 - báze na jednom intervalu (elementu)



pro n bodů použijeme Lagrangeovy interpolační polynomy jako bázi

$$\boxed{\phi_i^{(k)} = \frac{1}{\sqrt{w_i^{(k)}}} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} \frac{x - x_j^{(k)}}{x_i^{(k)} - x_j^{(k)}}}$$

tyto funkce jsou nulové ve všech bodech $x_j^{(k)}$, kromě $j=i$ kde nabývá hodnoty $\frac{1}{\sqrt{w_i^{(k)}}}$

tj. $$\boxed{\phi_i^{(k)}(x_j^{(k)}) = \frac{\delta_{ij}}{\sqrt{w_i^{(k)}}}}$$

Faktor $1/\sqrt{w_i^{(k)}}$ je „normalizace", a $w_i^{(k)}$ je váha Gaussovy-Lobattovy kvadratury na k-tém elementu v bodě $x_i^{(k)}$. Je zvolen tak, aby

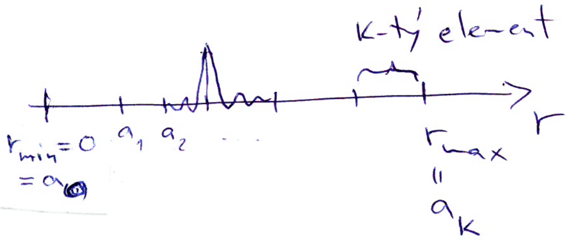
$$\int_{a_{k-1}}^{a_k} \phi_i^{(k)}(x)\phi_j^{(k)}(x)\,dx \underset{\substack{\uparrow \\ \text{aproximace} \\ \text{G-L kvadraturou}}}{\simeq} \sum_{s=1}^{n} w_s^{(k)} \phi_i^{(k)}(x_s^{(k)})\, \phi_j^{(k)}(x_s^{(k)}) =$$

$$= \sum_{s=1}^{n} w_s^{(k)} \frac{\delta_{is}}{\sqrt{w_s^{(k)}}} \frac{\delta_{js}}{\sqrt{w_s^{(k)}}} = \delta_{ij}$$

- **báze na celém intervalu rozděleném na K konečných elementů:**

 - v principu by na každém elementu mohl být různý počet bázových funkcí, ale chceme-li konzistentní přesnost, bereme vždy stejnou G-L kvadraturu o n bodech a tedy n bázových funkcí na element

• celý interval (typicky $\langle r_{min}=0, r_{max}\rangle$) rozdělíme na K elementů (mohou být různě velké)



na každém máme n funkcí, ovšem ~~...~~ celková báze musí být spojitá a proto vždy poslední funkci z k-tého elementu spojíme s první funkcí z $(k+1)$-ho elementu $\Rightarrow$ „bridging function"

celkem tedy máme funkcí
$(n-1)K + 1$ ← za tu poslední
↑
za jednu bridging funkci

a protože máme okrajové podmínky $\psi(r_{min}) = \psi(r_{max}) = 0$ a koeficienty u první a posl. bázové funkce jsou nulové (tedy musí být, protože to jsou jediné funkce, které jsou nenulové buď v r_{min}, nebo v r_{max})

stačí používat $(n-1)K-1$ funkcí

$$\varphi_1(r) = \begin{cases} \phi_2^{(1)}(r) & \text{pro } r \in \langle a_0, a_1\rangle \\ 0 & \text{pro } r > a_1 \end{cases}$$

$$\varphi_2(r) = \begin{cases} \phi_3^{(1)}(r) & \text{pro } r \in \langle a_0, a_1\rangle \\ 0 & \text{pro } r > a_1 \end{cases}$$

$\vdots$

$$\varphi_{n-1}(r) = \begin{cases} \left.\begin{array}{ll} \phi_n^{(1)}(r) & \text{pro } r \in \langle a_0, a_1\rangle \\ \phi_1^{(2)}(r) & \text{pro } r \in \langle a_1, a_2\rangle \end{array}\right\} \\ 0 \quad \text{pro } r > a_2 \end{cases}$$

ovšem zde (obecně pro bridging functions) musíme přenormalizovat pomocí celkového faktoru $\frac{1}{\sqrt{w_n^{(1)} + w_1^{(2)}}}$ místo jednotlivých $\frac{1}{\sqrt{w_n^{(1)}}}$ a $\frac{1}{\sqrt{w_1^{(2)}}}$

$$\varphi_n(r) = \begin{cases} \phi_2^{(2)}(r) & \text{pro } r \in \langle a_1, a_2\rangle \\ 0 & \text{jinde} \end{cases}$$

$\vdots$

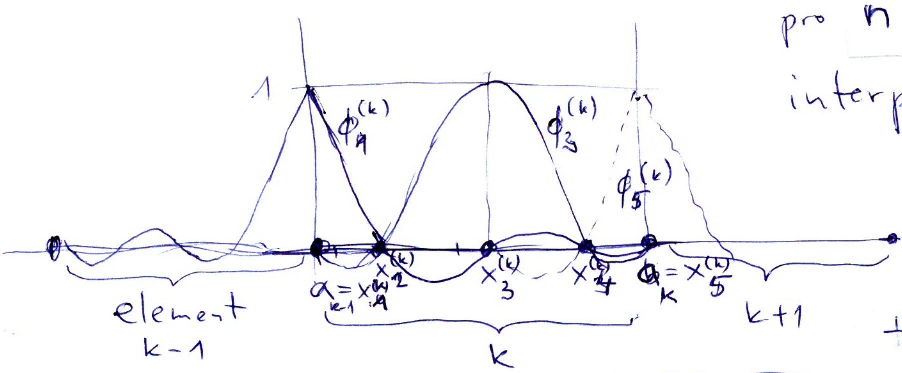
$$\varphi_{(n-1)K-1}(r) = \begin{cases} \phi_{n-1}^{(K)}(r) & \text{pro } r \in \langle a_{K-1}, a_K\rangle \\ 0 & \text{pro } r < a_{K-1} \end{cases}$$

takže i-tá funkce $\varphi_i(r)$ je dána funkcemi, pro které platí $\boxed{i = (k-1)(n-1) + j - 1}$

- konstrukce FEM-DVR báze

- myšlenka: zvolit na každém elementu (intervalu) bázi tak, aby vždy jednotlivé funkce byly nulové když prochází body Gaussovy-Lobattovy kvadratury vysokého řádu, abychom dostali dobrou aproximaci integrálů pomocí této kvadratury

- báze na jednom intervalu (elementu)



pro n bodů použijeme Lagrangeovy interpolační polynomy jako bázi

$$\boxed{\phi_i^{(k)} = \frac{1}{\sqrt{w_i^{(k)}}} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} \frac{x - x_j^{(k)}}{x_i^{(k)} - x_j^{(k)}}}$$

tyto funkce jsou nulové ve všech bodech $x_j^{(k)}$, kromě $j=i$ kde nabývá hodnoty $\frac{1}{\sqrt{w_i^{(k)}}}$

tj. $$\boxed{\phi_i^{(k)}(x_j^{(k)}) = \frac{\delta_{ij}}{\sqrt{w_i^{(k)}}}}$$

Faktor $1/\sqrt{w_i^{(k)}}$ je „normalizace", a $w_i^{(k)}$ je váha Gaussovy-Lobattovy kvadratury na k-tém elementu v bodě $x_i^{(k)}$. Je zvolen tak, aby

$$\int_{a_{k-1}}^{a_k} \phi_i^{(k)}(x)\,\phi_j^{(k)}(x)\,dx \underset{\uparrow}{\simeq} \sum_{s=1}^{n} w_s^{(k)} \phi_i^{(k)}(x_s^{(k)})\,\phi_j^{(k)}(x_s^{(k)}) =$$

aproximace G-L kvadraturou

$$= \sum_{s=1}^{n} w_s^{(k)} \frac{\delta_{is}}{\sqrt{w_s^{(k)}}} \frac{\delta_{js}}{\sqrt{w_s^{(k)}}} = \delta_{ij}$$

- báze na celém intervalu rozděleném na K konečných elementů:

- v principu by na každém elementu mohla být různý počet bázových funkcí, ale chceme-li konzistentní přesnost, bereme vždy stejnou G-L kvadraturu o n bodech a tedy n bázových funkcí na element

- pro správně normované „bridging functions",

platí ortonormalita pro celkovou bázi, tj.

$$\int_0^{r_{max}} \varphi_i(r)\varphi_j(r)\,dr \simeq \sum_{k=1}^{K}\sum_{s=1}^{n} w_s^{(k)}\,\varphi_i(x_s^{(k)})\,\varphi_j(x_s^{(k)}) = \delta_{ij}$$

(protože krajní body elementů se tady započítávají 2x)

- v kódech se většinou používá jediné pole vah w_i pro celý interval, přičemž každá váha odpovídá jednomu bodu a tedy jedné bázové funkci

$$w_1 = w_2^{(1)}, \ldots, w_{n-2} = w_{n-1}^{(1)}, \quad w_{n-1} = w_n^{(1)} + w_1^{(2)}, \; w_n = w_2^{(2)} \ldots$$

a integrály se počítají přiLo

$$\int_0^{r_{max}} f(r)\,dr \simeq \sum_{i=1}^{N_b} w_i\, f(x_i)$$

kde $N_b = (n-1)K + 1$ je počet bodů (bázových funkcí) a x_i jsou všechny body postupně na všech elementech, tedy $x_1 = x_2^{(1)}, \ldots, x_{n-1} = x_n^{(1)} = x_1^{(2)}, \ldots \quad x_{N_b} = x_{n-1}^{(k)}$

- maticové elementy pro potenciál jsou v této bázi jednoduché:

$$V_{ij} = \langle \varphi_i | V | \varphi_j \rangle \simeq \int_0^{r_{max}} \varphi_i(r)\,V(r)\,\varphi_j(r)\,dr \simeq$$

$$\simeq \sum_{k=1}^{N_b} w_k\,\varphi_i(x_k)\,V(x_k)\,\varphi_j(x_k) = \sum_{k=1}^{N_b} w_k \frac{\delta_{ik}}{\sqrt{w_k}}\,V(x_k)\,\frac{\delta_{jk}}{\sqrt{w_k}} = V(x_i)\,\delta_{ij}$$

tj. potenciál je diagonální matice!

- pro kinetickou energii ve slabé formulaci máme maticové elementy

$$T_{ij} = \frac{1}{2\mu}\int_0^{r_{max}} \frac{d\varphi_i(r)}{dr}\,\frac{d\varphi_j(r)}{dr}\,dr \simeq \frac{1}{2\mu}\sum_{k=1}^{K}\sum_{s=1}^{n} w_s^{(k)}\,\frac{d\varphi_i}{dr}(x_s^{(k)})\,\frac{d\varphi_j}{dr}(x_s^{(k)})$$

zde je nutno napočítat derivace zvlášť zleva a zprava v $x_1^{(k)}$

- obecně „matice tuhosti" $A_{ij} = \int_a^b \frac{d\phi_i}{dx}\frac{d\phi_j}{dx}\,dx$

se dá spočítat efektivně napočítáním derivací Lagrangeových interpolačních polynomů na intervalu $\langle -1,1\rangle$

$$l_i(x) = \prod_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} \frac{(x-x_j)}{(x_i-x_j)}$$

kde n je počet bodů x_j Gaussovy-Lobattovy kvadr. na $\langle -1,1\rangle$

dostaneme

$$\frac{dl_i(x)}{dx} = \sum_{\substack{s=1\\ s\neq i}}^{n} \frac{1}{(x_i-x_s)} \prod_{\substack{j=1\\ j\neq s,i}}^{n} \frac{(x-x_j)}{(x_i-x_j)}$$

aproximujeme-li integrál opět G-L kvadraturou, potřebujeme pouze

$$\left.\frac{dl_i(x)}{dx}\right|_{x=x_k} = \begin{cases} \displaystyle\sum_{\substack{s=1\\ s\neq i}}^{n} \frac{1}{x_i-x_s} & \text{pro } k=i \\ \displaystyle\frac{1}{x_i-x_k} \prod_{\substack{j=1\\ j\neq i,k}}^{n} \frac{(x_k-x_j)}{(x_i-x_j)} & \end{cases}$$

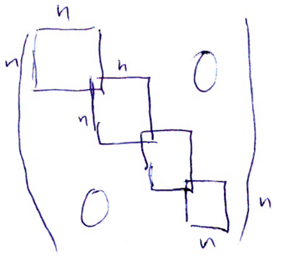
ze sumy $\sum_s$ je nenulový jen člen pro $s=k$

pokud potřebujeme derivace bázových funkcí na intervalu $\langle a,b\rangle$, pak ještě škálujeme faktorem $\frac{2}{(b-a)}$

kde 2 je za délku $\langle -1,1\rangle$

výsledná matice A_{ij} má formu

kde počet bloků = počet elementů



- vyjádření lib. funkce $f(x)$ na intervalu $\langle a,b\rangle$ v FEM-DVR bázi

$$f(x) = \sum_{i=1}^{N_b} f_i\,\varphi_i(x)$$

(N_b může, ale nemusí obsahovat krajní bázové funkce)

abychom získali koeficienty f_i rozvoje funkce $f(x)$ do báze násobíme $\varphi_j(x)$ a integrujeme:

$$\underbrace{\sum_{k=1}^{N_b} w_k f(x_k)\frac{\delta_{jk}}{\sqrt{w_k}}}_{\boxed{f(x_j)\sqrt{w_j} = f_j}} \approx \int f(x)\varphi_j(x)\,dx = \sum_{i=1}^{N_b} f_i \underbrace{\int_a^b \varphi_i(x)\varphi_j(x)\,dx}_{\delta_{ij} \text{ v aproximaci G-L kvadr.}} = f_j$$

a zpět se dostaneme přes $f(x_j) = \frac{f_j}{\sqrt{w_j}}$