

第五章 有限元素方法

§ 5.1 有限元素方法的基本思想

有限元素法是一套求解微分方程的系统化数值计算方法。它比传统解法具有理论完整可靠，物理意义直观明确，适应性强，形式单纯、规范，解题效能强等优点。

从数学上来说，有限元素方法是基于变分原理。它不象差分法那样直接去解偏微分方程，而是求解一个泛函取极小值的变分问题。有限元素法是在变分原理的基础上吸收差分格式的思想发展起来的。

采用有限元素法还能使物理特性基本上被保持，计算精度和收敛性进一步得到保证。

有限元素法优点：

- 降低实验所需成本
- 减少试验对象的变异困难
- 方便参数控制
- 可获得实验无法获得的信息

有限元素法基本概念：

元素(element)，节点(node)，連結元素

有限元素法的基本思想：

- **实际的物理問題很难利用单一的微分方程式描述，更无法順利求其解析解。**
- **有限元素法是将复杂的几何外型結構的物体切割成许多简单的几何形状称之为元素。**
- **元素与与元素间以“节点”相连。**
- **由于元素是简单的几何形状，故可以順利地写出元素的物理方程式，並求得节点上的物理量。**
- **采用內插法求得元素內任意点的物理量。**

例如：考虑一个球形金属导体静电势的问题，球形金属导体的半径为 r_0 ，球外距离球中心 r 处的电位为 $\varphi(r)$ 。假定在这个导体外的空间中的体电荷密度到处为零。则在此空间中的能量为

$$U(\varphi) = \frac{\varepsilon}{2} \int_{r_0}^{+\infty} E^2 dV = \frac{\varepsilon}{2} \int_{r_0}^{+\infty} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial r} \right)^2 4\pi r^2 dr = 2\varepsilon\pi \int_{r_0}^{+\infty} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial r} \right)^2 r^2 dr. \quad (5.1.1)$$

同时该系统的能量应当取最小值，即该系统的能量变分应当满足

$$\delta U(\varphi(r)) = 4\varepsilon\pi \int_{r_0}^{+\infty} r^2 \frac{\partial \varphi}{\partial r} \frac{\partial(\delta\varphi)}{\partial r} dr = 4\varepsilon\pi \left(r^2 \frac{\partial \varphi}{\partial r} \delta\varphi \Big|_{r_0}^{+\infty} - \int_{r_0}^{+\infty} \left\{ \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) \right\} \delta\varphi dr \right) = 0. \quad (5.1.2)$$

这里 ε 为介质的相对介电常数，积分是对导体外的空间进行的。因为导体边界上的电位为常数 φ_0 ，无穷远处的电位为零。则从公式(5.1.2)可以得到将能量 $U(\varphi)$ 取最小值的势函数 φ 必须满足特定的边界条件和如下球坐标下径向的微分方程：

$$\nabla^2 \varphi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) = 0. \quad (5.1.3)$$

因此，求此微分方程解的问题，可以在数学上等价于找到一个势函数 φ ，使得积分 $U(\varphi)$ 取极小值的问题。

薛定格方程则可以写为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} \right] \psi(r, \theta, \varphi) = (E - V) \psi(r, \theta, \varphi).$$

波函数 $\psi(r, \theta, \varphi)$ 与极角 θ ($-\pi/2 \leq \theta \leq \pi/2$) 和方位角

φ ($0 \leq \varphi \leq \pi$) 的关联是由算符 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 决定的。假定满足薛

定格方程的本征波函数 $\psi(r, \theta, \varphi)$ 可以分离变量表示为

$$\psi(r, \theta, \varphi) \equiv R(r)Y(\theta, \varphi) \equiv R(r)\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi).$$

$\hat{L}_z$ 在球坐标系中可以表示为： $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$ 。该算符的本

征值由求解本征方程

§ 5.2 二维场的有限元素方法

1. 场域划分的约定

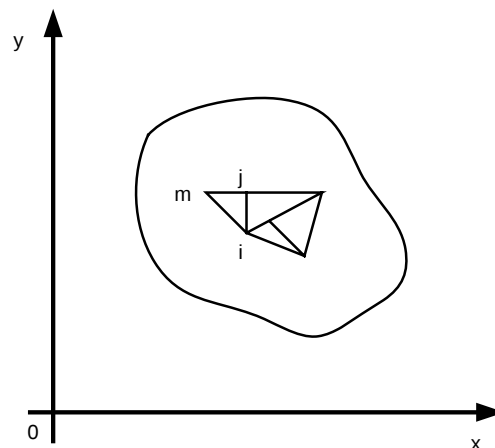
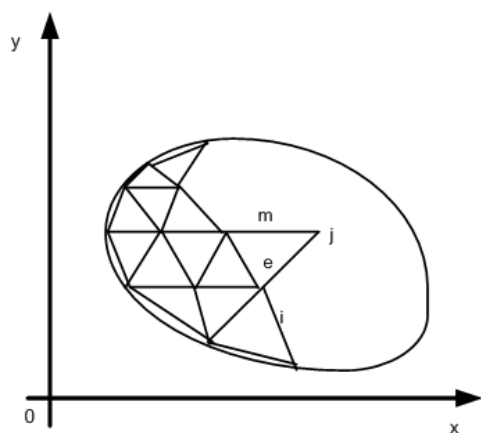
- **三角形元素。**三角形元素越小，场域的分割就越细，计算的精度就会越高。因而在实际应用中是按精度的要求来决定场域内各处三角形元素的大小。
- **一般规定每个三角形元素的三个边的边长尽量地接近，尽量避免三角形元素具有大的钝角，一般最长的一条边不得大于最短边的三倍。**
- **在分割场域时要求各三角形元素之间只能以顶点相交，即两相邻的三角形元素有两个公共的顶点及一条等长的公共边。不能把一个三角形的顶点取在另一个三角形的边上。**
- **划分时还应当注意要尽量地使由相邻边界节点之间的线段所近似构成的曲线足够光滑。**
- **如果在场域 D 内有不同的介质，则需要将介质的交面线选为分割线。**

● 对场域进行了三角形划分后，还要对场域内所有元素和节点分别进行统一的编号。函数 $\varphi(x, y)$ 在节点处 ($l = i, j, m$) 的值 $\varphi(x_l, y_l)$ 称为节点参数。

● 为了计算的简便和格式的统一，各个元素节点的编号顺序要一致，一般规定各个元素的节点编号顺序选取逆时针的方向。

完成场域的划分之后，等效的泛函就可以是各个三角形单元泛函的和

$$I(\varphi) = \sum_{e=1}^{e_0} I_e(\varphi^{(e)}). \quad (5.2.1)$$



2. 计算格式的建立

$\varphi_l^{(e)} \equiv \varphi^{(e)}(x_l, y_l)$ ($l = i, j, m$) 标记三角形元素 (e) 三个顶点上的函数值

函数 $\varphi(x, y)$ 在 (e) 内近似认为是随 x, y 线性变化的。这相当于在这个局域范围内，场可以看成是近似均匀的。这样我们可以用线性插值法来构造在元素 (e) 内部任一点上的势函数值 $\varphi(x, y)$ ，即

$$\varphi = \varphi(x, y) = g_1 + g_2 x + g_3 y. \quad (5.2.2)$$

其中 g_1, g_2 和 g_3 由元素 (e) 上的三个节点的函数值来决定。

$$\left. \begin{aligned} g_1 + g_2 x_i + g_3 y_i &= \varphi(x_i, y_i) = \varphi_i \\ g_1 + g_2 x_j + g_3 y_j &= \varphi(x_j, y_j) = \varphi_j \\ g_1 + g_2 x_m + g_3 y_m &= \varphi(x_m, y_m) = \varphi_m \end{aligned} \right\}.$$

由此很容易解出：

$$\left. \begin{aligned} g_1 &= (a_i \varphi_i + a_j \varphi_j + a_m \varphi_m) / 2\Delta \\ g_2 &= (b_i \varphi_i + b_j \varphi_j + b_m \varphi_m) / 2\Delta \\ g_3 &= (c_i \varphi_i + c_j \varphi_j + c_m \varphi_m) / 2\Delta \end{aligned} \right\}. \quad (5.2.3)$$

$$\Delta = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & x_i & y_i \\ 1 & x_j & y_j \\ 1 & x_m & y_m \end{vmatrix} = \frac{1}{2} (b_i c_j - b_j c_i) \quad (\text{e) 元素的三角形面积})$$

$$\left. \begin{aligned} a_i &= x_j x_m - x_m x_j \\ b_i &= y_j - y_m \\ c_i &= x_m - x_j \end{aligned} \right\} . \quad (5.2.4)$$

其余的 a_j, b_j, c_j 及 a_m, b_m, c_m 则可以由公式 (5.2.5) 按下标 (i, j, k) 的顺序轮换得到。

三角形型函数 (the shape functions for the triangle):

$$N_l(x, y) \equiv (a_l + b_l x + c_l y) / 2\Delta, \quad (l = i, j, m). \quad (5.2.5)$$

利用上式, 并将 (5.2.3) 式代入 (5.2.1) 式中就得到了(e) 元素内任意一点 (x, y) 的势函数的插值

$$\varphi(x, y) = \sum_{l=i}^{j,m} N_l \varphi_l. \quad (5.2.6)$$

在三角形元素(e)内任意一点的函数值 $\varphi(x, y)$ 是由该元素的三个节点参数 $\varphi(x_l, y_l) (l = i, j, k)$ 唯一确定下来的

第一类边值的两维平面场的变分问题:

$$\begin{cases} \delta I(\varphi) = 0 \\ I(\varphi) = \iint_D \left\{ \frac{\varepsilon}{2} \left[\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 \right] - \rho \varphi \right\} dx dy. \\ \varphi|_L = \varphi_0 \end{cases} \quad (5.2.7)$$

即

$$\begin{aligned} I(\varphi) &= \sum_{e=1}^{e_0} \left\{ \iint_e \frac{\varepsilon}{2} \left[\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 \right] dx dy - \iint_e \rho \varphi dx dy \right\} \\ &= \sum_{e=1}^{e_0} [I_{1e}(\varphi) - I_{2e}(\varphi)] = I_1(\varphi) - I_2(\varphi). \end{aligned} \quad (5.2.8)$$

用向量记法表示，定义列向量

$$(\Phi)_e = \begin{pmatrix} \varphi_i \\ \varphi_j \\ \varphi_m \end{pmatrix}, \quad (N)_e = \begin{pmatrix} N_i \\ N_j \\ N_m \end{pmatrix}.$$

则公式 (5.2.6) 可以写为

$$\varphi(x, y) = (N)_e^T (\Phi)_e = (\Phi)_e^T (N)_e. \quad (5.2.9)$$

由公式 (5.2.6) 可以求得在元素 (e) 内对函数 φ 的偏微商为

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{1}{2\Delta} \sum_{l=i}^{j,m} b_l \varphi_l, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{1}{2\Delta} \sum_{l=i}^{j,m} c_l \varphi_l \quad (5.2.10)$$

若记列向量

$$(\nabla \varphi)_e = \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \\ \frac{\partial \varphi}{\partial y} \end{pmatrix},$$

并定义

$$(B)_e = \frac{1}{2\Delta} \begin{pmatrix} b_i & b_j & b_m \\ c_i & c_j & c_m \end{pmatrix}.$$

则公式 (5. 2. 10) 可以改写为

$$(\nabla \varphi)_e = (B)_e (\Phi)_e. \quad (5. 2. 11)$$

于是有

$$\begin{aligned} I_{1e} &= \int_e \frac{\varepsilon}{2} (\nabla \varphi)_e^T (\nabla \varphi)_e dx dy = \frac{\varepsilon}{2} \iint_e [(B)_e (\Phi)_e]^T [(B)_e (\Phi)_e] dx dy \\ &= \frac{1}{2} (\Phi)_e^T \left[\iint_e \varepsilon (B)_e^T (B)_e dx dy \right] (\Phi)_e = \frac{1}{2} (\Phi)_e^T (K)_e (\Phi)_e. \end{aligned} \quad (5. 2. 12)$$

在 (5. 2. 12) 式中我们定义了

$$(K)_e = \iint_e \varepsilon (B)_e^T (B)_e dx dy. \quad (5. 2. 13)$$

$$\begin{aligned}
(K)_e &= \begin{pmatrix} K_{ii}^e & K_{ij}^e & K_{im}^e \\ K_{ji}^e & K_{jj}^e & K_{jm}^e \\ K_{mi}^e & K_{mj}^e & K_{mm}^e \end{pmatrix} \\
&= \frac{\varepsilon}{4\Delta} \begin{pmatrix} b_i^2 + c_i^2 & b_i b_j + c_i c_j & b_i b_m + c_i c_m \\ b_j b_i + c_j c_i & b_j^2 + c_j^2 & b_j b_m + c_j c_m \\ b_m b_i + c_m c_i & b_m b_j + c_m c_j & b_m^2 + c_m^2 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{5.2.14}$$

由此可见 $(K)_e$ 是一个三阶正定对称方阵，它的一般形式可以写为

$$K_{rs}^e = K_{sr}^e = \frac{\varepsilon}{4\Delta} (b_r b_s + c_r c_s), \quad (r, s = i, j, m). \tag{5.2.15}$$

则 $I_1(\varphi)$ 的向量表示为

$$I_1(\varphi) = \sum_{e=1}^{e_0} I_{1e}(\varphi) = \frac{1}{2} \sum_{e=1}^{e_0} (\Phi)_e^T (K)_e (\Phi)_e. \tag{5.2.16}$$

假定三角形元素足够小， ρ 可以取平均值。

$$I_{2e} = \iint_e \rho \varphi dx dy = \iint_e \rho_e (\Phi)_e^T (N)_e dx dy = (\Phi)_e^T \iint_e \rho_e (N)_e dx dy. \tag{5.2.17}$$

定义 $(P)_e \equiv \iint_e \rho_e (N)_e dx dy. \tag{5.2.18}$

于是(5. 2. 17)式可以写为

$$I_{2e} = (\Phi)_e^T (P)_e = (\Phi)_e^T \frac{\Delta}{3} \rho_e \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} . \quad (5. 2. 19)$$

$$t_k^{(e)} = \iint_e N_k dx dy = \frac{\Delta}{3} , \quad (k = i, j, m) . \quad (5. 2. 20)$$

从(5. 2. 19)式中可以看出

$$(P)_e = \begin{pmatrix} p_i^{(e)} \\ p_j^{(e)} \\ p_m^{(e)} \end{pmatrix} = \frac{\Delta}{3} \rho_e \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} . \quad (5. 2. 21)$$

最后我们得到 $I_2(\varphi)$ 的向量记法为：

$$I_2(\varphi) = \sum_{e=1}^{e_0} I_{2e}(\varphi) = \sum_{e=1}^{e_0} (\Phi)_e^T (P)_e . \quad (5. 2. 22)$$

综合(5. 2. 16)和(5. 2. 22)式，我们就得到泛函表达式

$$\begin{aligned} I(\varphi) &= I_1(\varphi) - I_2(\varphi) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{e=1}^{e_0} (\Phi)_e^T (K)_e (\Phi)_e - \sum_{e=1}^{e_0} (\Phi)_e^T (P)_e . \end{aligned} \quad (5. 2. 23)$$

如果要将元素(e)上的表示用总体向量来表示, 我们引入一个 $3 \times n$ 阶的辅助矩阵 $(R)_e$, n 为总的节点数。

$$(R)_e = \begin{pmatrix} 0 & 0\dots & 1\dots & 0\dots & 0\dots & \dots & 0 \\ 0 & 0\dots & 0\dots & 1\dots & 0\dots & \dots & 0 \\ 0 & 0\dots & 0\dots & 0\dots & 1\dots & \dots & 0 \end{pmatrix},$$

$$\begin{matrix} & | & & | & & | & \\ & i & & j & & m & \end{matrix} \quad (5.2.24)$$

则有

$$(\Phi)_e = (R)_e (\Phi). \quad (5.2.25)$$

场域内所有节点上的函数值向量表示为

$$(\Phi) = (\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n)^T. \quad (5.2.26)$$

这样就可以将公式(5.2.23)的泛函重新表示为

$$\begin{aligned} I(\varphi) &= \frac{1}{2} (\Phi)^T \left[\sum_{e=1}^{e_0} (R)_e^T (K)_e (R)_e \right] (\Phi) - (\Phi)^T \left[\sum_{e=1}^{e_0} (R)_e^T (P)_e \right] \\ &= \frac{1}{2} (\Phi)^T (K) (\Phi) - (\Phi)^T (P). \end{aligned} \quad (5.2.27)$$

其中 (P) 是场域内所有节点上与 ρ 的值相关的向量, 它表示为

$$(P) = (P_1, P_2, \dots, P_n)^T \quad (5.2.28)$$

当对公式 (5.2.27) 所示泛函取极值, 就需要满足条件

$$\frac{d}{d\varphi_i} (I(\varphi)) = 0, \quad (i = 1, 2, \dots, n). \quad (5.2.29)$$

由微分方程 (5.2.29) 可以得到必须满足的线性代数方程组

$$(K)(\Phi) = (P). \quad (5.2.30)$$

显然对 $\rho = 0$ 时对应的方程为拉普拉斯方程。公式 (5.2.30) 中的向量 (P) 为 (0) 零向量, 即拉普拉斯方程对应的有限元素方程为齐次线性代数方程组。

$$(K)(\Phi) = (0). \quad (5.2.31)$$

3. 边界条件处理

第一类边界条件 $\varphi|_L = \varphi_0$,

通过在对节点编号时, 使 n 个总节点中的前 n_0 个为内部节点, 从 $n_0 + 1$ 到 n 为边界节点。即

$$\varphi_{n_0+i} = \varphi_0, \quad (i = 1, 2, \dots, n - n_0) \quad . \quad (5.2.33)$$

公式 (5.2.33) 可以改写为向量形式。为此定义

$$(\Phi_2) \equiv (\varphi_{n_0+1}, \varphi_{n_0+2}, \dots, \varphi_n)^T, \quad (\Phi_0) \equiv (\varphi_{01}, \varphi_{02}, \dots, \varphi_{0(n-n_0)})^T \quad . \quad (5.2.34)$$

上面的 (5.2.33) 式就可写为

$$(\Phi_2) = (\Phi_0) \quad . \quad (5.2.35)$$

我们进一步再定义

$$(\Phi_1) \equiv (\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_{n_0})^T \quad . \quad (5.2.36)$$

把 $(K), (P)$ 都写成相应的分块形式, 则线性代数方程组 (5.2.30) 变为

$$\begin{pmatrix} (K_{11}) & (K_{12}) \\ (K_{21}) & (K_{22}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\Phi_1) \\ (\Phi_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (P_1) \\ (P_2) \end{pmatrix} \quad . \quad (5.2.37)$$

它的第一个方程为：

$$(K_{11})(\Phi_1) = (P_1) - (K_{12})(\Phi_2) . \quad (5.2.38)$$

根据边界条件，我们可以强制性地命令上式中 $(\Phi_2) = (\Phi_0)$ ，得到了强加边界条件处理后的有限元方程：

$$\left. \begin{aligned} (K_{11})(\Phi_1) &= (P_1) - (K_{12})(\Phi_2) \\ (\Phi_2) &= (\Phi_0) \end{aligned} \right\}, \quad (5.2.39)$$

显式地写出公式(5.2.39)的第一个方程为

$$\begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} & \dots & K_{1n_0} \\ K_{21} & K_{22} & \dots & K_{2n_0} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ K_{n_0 1} & K_{n_0 2} & \dots & K_{n_0 n_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \varphi_{n_0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_{(1)} - K_{1(n_0+1)}\varphi_{01} - K_{1(n_0+2)}\varphi_{02} - \dots - K_{1n}\varphi_{0(n-n_0)} \\ P_{(2)} - K_{2(n_0+1)}\varphi_{01} - K_{2(n_0+2)}\varphi_{02} - \dots - K_{2n}\varphi_{0(n-n_0)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ P_{(n_0)} - K_{n_0(n_0+1)}\varphi_{01} - K_{n_0(n_0+2)}\varphi_{02} - \dots - K_{n_0 n}\varphi_{0(n-n_0)} \end{pmatrix}, \quad (5.2.40)$$

公式(5.2.40)还可以简单地记为

$$(K_1)(\Phi_1) = (P'_1) . \quad (5.2.41)$$

4. 有限元方程的求解

通常我们仍使用迭代法来求解。对高斯-赛德尔迭代法有如下公式

$$\varphi_i^{(m+1)} = - \left(\sum_{j=1}^{i-1} K_{ij} \varphi_j^{(m+1)} + \sum_{j=i+1}^{n_0} K_{ij} \varphi_j^{(m)} - p_i \right) / K_{ii}, \quad (i = 1, 2, \dots, n_0). \quad (5.2.42)$$

采用超松弛迭代法时，有公式

$$\begin{aligned} \varphi_i^{(m+1)} &= \varphi_i^{(m)} + \omega R_i^{(m)} \\ &= \varphi_i^{(m)} + \omega \left[\left(- \sum_{j=1}^{i-1} K_{ij} \varphi_j^{(m+1)} - \sum_{j=i+1}^{n_0} K_{ij} \varphi_j^{(m)} + p_i \right) / K_{ii} - \varphi_i^{(m)} \right] \\ &= (1 - \omega) \varphi_i^{(m)} + \omega \left[\left(- \sum_{j=1}^{i-1} K_{ij} \varphi_j^{(m+1)} - \sum_{j=i+1}^{n_0} K_{ij} \varphi_j^{(m)} + p_i \right) / K_{ii} \right]. \end{aligned} \quad (5.2.43)$$

求解方程组(5.2.41)采用超松弛迭代法更为有效。

由于有限元素法处理复杂边界条件时具有很好的灵活性，并且在划分三角形元素时人们还可以增加在函数变化剧烈的区域内节点的密度，以得到较高精度的数值结果，因而这种方法的优点是十分显著的。

5. 有限元素法的一般步骤

总结有限元素法计算步骤：

- 推导出与给定边界条件的偏微分方程等价的泛函表示；
- 把求解的区域用三角形元素划分为小的单元。然后对每个节点和三角形元素按照约定的规则分别进行编号。
- 利用公式 (5.2.14-15) 和 (5.2.18-21)，计算出各个三角形元素的系数矩阵。
- 将各个三角形单元的系数矩阵装配成总矩阵，形成有限元方程组，然后利用强加边界条件法对有限元方程组进行修正。
- 利用超松弛迭代法求解有限元方程组，则得到域内各个节点上的函数值。

§ 5.3 有限元素法与有限差分法的比较

- 有限元素法实际上是基于数学上的变分原理
- 这两种方法在处理物理问题的求解时，在处理问题的数学方法上有较大的差别。
- 有限差分法和有限元素法在对区域的离散化方法上也有明显差别。
- 有限元素法的节点配置比较任意，计算格式就要复杂得多。但这并不会影响它的实际应用。
- 有限差分法则是孤立地对微分方程及定解条件分别列差分方程，因而各节点精度总体上不够一致。
- 有限元素法要求的计算机内存量比较大。
- 有限差分法的适用范围要比有限元素法广泛得多。有很多物理问题不能用有限元素法求解，但总是可以采用有限差分法。

The End