

Equazione di Poisson 3D

Formulazione debole e soluzione FEM

Ing. Carlo Forestiere

21 Dicembre 2009

Formulazione Matematica

Sia Ω un aperto limitato di \mathcal{R}^3 ed $f \in \mathcal{L}^2(\Omega)$, è lecito cercare una $u \in \mathcal{H}_0^1$ che soddisfi l'equazione:

$$\nabla^2 u = -f \quad \text{nel senso delle distribuzioni} \quad (1)$$

dove l'operatore Laplaciano ∇^2 in coordinate cartesiane si scrive:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (2)$$

e le derivate seconde nel senso delle distribuzioni sono i funzionali definiti da:

$$\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}, \phi \right) = \int_{\Omega} v \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} d\Omega \quad \forall \phi \in \mathcal{C}_0^\infty(\Omega). \quad (3)$$

Ricordando la definizione di derivata prima debole:

$$\left(\frac{\partial v}{\partial x}, \psi \right) = - \int_{\Omega} v \frac{\partial \psi}{\partial x} d\Omega \quad \forall \psi \in \mathcal{C}_0^\infty(\Omega). \quad (4)$$

e scegliendo tra tutte le possibili test funzioni una $\psi = \frac{\partial \phi}{\partial x}$ e sostituendola nella (4) si ottiene:

$$\left(\frac{\partial v}{\partial x}, \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) = - \int_{\Omega} v \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} d\Omega \quad \forall \phi \in \mathcal{C}_0^\infty(\Omega). \quad (5)$$

Combinando la (5) e la (3) si ottiene:

$$\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}, \phi \right) = - \left(\frac{\partial v}{\partial x}, \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \quad \forall \phi \in \mathcal{C}_0^\infty(\Omega). \quad (6)$$

Procedendo analogamente anche nelle coordinate y ed z si arriva alla scrittura dell'operatore laplaciano nel senso delle distribuzioni:

$$(\nabla^2 v, \phi) = - \int_{\Omega} \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial \phi}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial \phi}{\partial z} d\Omega \quad \forall \phi \in \mathcal{C}_0^\infty(\Omega). \quad (7)$$

Dunque il problema (1) diventa:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial \phi}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial \phi}{\partial z} d\Omega = \int_{\Omega} f \phi d\Omega \quad \forall \phi \in \mathcal{C}_0^{\infty}(\Omega). \quad (8)$$

Osservando, inoltre che: $\mathcal{H}_0^1 = \bar{\mathcal{C}}_0^{\infty}$ ¹ è lecito scrivere:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial \phi}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial z} \frac{\partial \phi}{\partial z} d\Omega = \int_{\Omega} f \phi d\Omega \quad \forall \phi \in \mathcal{H}_0^1(\Omega). \quad (9)$$

L'esistenza e l'unicità della soluzione del problema (1) ci sono garantite dalla Analisi Funzionale².

Metodo di Galerkin

Ci poniamo ora il problema di trovare una approssimante \hat{u} della soluzione u del problema (1) in uno sottospazio $\mathcal{U}_M \subset \mathcal{H}_0^1$ di dimensione finita $M \in \mathbb{N}$. Essendo $U_M \subset \mathcal{H}_0^1 \subset \mathcal{C}^0 \cap \mathcal{L}^2$ queste funzioni dovranno essere quantomeno continue e di quadrato sommabile. In altri termini si chiede di trovare, se esiste, una soluzione $\hat{u} \in U_M$ tale che:

$$\int_{\Omega} \nabla \hat{u} \cdot \nabla \hat{\phi} d\Omega = \int_{\Omega} f \hat{\phi} d\Omega \quad \forall \hat{\phi} \in \mathcal{U}_M(\Omega). \quad (10)$$

Si introduca una base di \mathcal{U}_M

$$\mathcal{B}_M = \{w_1, w_2, w_3, \dots, w_M\} \quad (11)$$

Si noti, inoltre, che verificare la relazione (10) per tutti i possibili $\hat{\phi} \in \mathcal{U}_M$ equivale a verificarla per gli M vettori di base. Essendo $\hat{u}, \hat{\phi} \in \mathcal{U}_M$, potranno essere scritti come combinazione lineare degli elementi di base:

$$\hat{u} = \sum_{h=1}^M a_h w_h \quad (12)$$

Sostituendo la (12) in (10) si perviene a:

$$\sum_{h=1}^M a_h \int_{\Omega} \nabla w_h \cdot \nabla w_k d\Omega = \int_{\Omega} f w_k d\Omega \quad \forall w_k \in \mathcal{B}_M(\Omega) \quad (13)$$

che, introducendo la *stiffness matrix* \mathbf{L} , definita da:³

$$l_{hk} = \int_{\Omega} \nabla w_h \cdot \nabla w_k d\Omega \quad (14)$$

¹Per il teorema di caratterizzazione dei chiusi ciò equivale a dire che ogni elemento di \mathcal{H}_0^1 è il limite di una successione di elementi di \mathcal{C}_0^{∞} .

²Si applichi a tale scopo il Teorema di Ritz. Si consulti ad esempio il testo *Dunford-Schwartz, Linear Operators*.

³ $\int_{\Omega} \nabla w_h \cdot \nabla w_k d\Omega$ è il prodotto scalare definito in \mathcal{H}_0^1 , ovvero $(\omega_h, \omega_k)_{\mathcal{H}_0^1}$

e il *load vector* \mathbf{b}

$$b_k = \int_{\Omega} f w_k d\Omega \quad (15)$$

diventa il sistema lineare

$$\mathbf{L}\mathbf{u} = \mathbf{b} \quad (16)$$

Essendo la matrice simmetrica e definita positiva, il sistema lineare (16) e dunque il problema approssimato (10) ammettono una ed una sola soluzione. La proprietà dell'esistenza e unicità è dunque preservata dal metodo di Galerkin.

Metodo degli Elementi Finiti

Si consideri, ora, una particolare partizione \mathcal{G} del dominio $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ che abbia la seguente proprietà: quando due elementi della partizione si intersecano o lo fanno in corrispondenza di una loro faccia o di nodo ma mai da altre parti; una partizione siffatta si definisce *griglia o mesh conforme* del dominio Ω .

Il *metodo degli elementi finiti* è un caso particolare del metodo di Galerkin quando lo spazio a dimensione finita \mathcal{U}_M coincide con lo spazio costituito da funzioni continue polinomiali a tratti $\mathcal{P}_{\mathcal{G}}^M$ ⁴, ovvero funzioni continue che, ristrette ad un generico elemento della mesh, assumono la forma di un polinomio di ordine M ⁵.

Nel seguito si considererà una griglia strutturata \mathcal{T} costituita unicamente da tetraedri, e si indicherà con $\mathcal{V}_N = \{v_1, v_2, \dots, v_N\}$ l'insieme dei suoi N nodi. Si fissi inoltre lo spazio ove si intende cercare la soluzione approssimata: $\mathcal{U}_M = \mathcal{P}_{\mathcal{T}}^1$, ovvero le funzioni continue e lineari a tratti su \mathcal{T} .

Introduciamo la base di $\mathcal{P}_{\mathcal{T}}^1$ detta *lagrangiana o nodale* che soddisfi cioè la proprietà:

$$\mathcal{B}_{\mathcal{P}} = \{\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N \in \mathcal{P}_{\mathcal{T}}^1 : \psi_i(\mathbf{r}_j) = \delta_{ij} \quad \forall i, j \in \mathcal{V}_N\} \quad (17)$$

dove δ_{ij} è la delta di Kronecker.⁶ La funzione di base ψ_h , associata al nodo \mathbf{r}_h , ristretta al tetraedro $t_i \in \mathcal{T}$ di vertici $\{\mathbf{r}_h, \mathbf{r}_k, \mathbf{r}_r, \mathbf{r}_s\}$ è una funzione lineare affine che ammette l'espressione:

$$\psi_h^{(i)} = \alpha_h^{(i)} x + \beta_h^{(i)} y + \gamma_h^{(i)} z + \delta_h^{(i)} \quad (18)$$

dove i coefficienti $\alpha_h^{(i)}, \beta_h^{(i)}, \gamma_h^{(i)}, \delta_h^{(i)}$ sono definiti univocamente dalla (17), che esplicitata diventa:

$$\begin{cases} \psi_h^{(i)}(\mathbf{r}_h) &= 1 \\ \psi_h^{(i)}(\mathbf{r}_k) &= 0 \\ \psi_h^{(i)}(\mathbf{r}_r) &= 0 \\ \psi_h^{(i)}(\mathbf{r}_s) &= 0 \end{cases} \quad (19)$$

⁴Il pedice \mathcal{G} indica che tale definizione dipende dalla particolare scelta della griglia.

⁵Si lascia al lettore la dimostrazione, basata sul principio di induzione, che $\mathcal{P}_{\mathcal{G}}^M$ è uno spazio vettoriale

⁶Nel caso si fosse scelto lo spazio $\mathcal{P}_{\mathcal{T}}^2$ si sarebbe dovuto imporre il valore 0 anche sui baricentri delle facce.

risolvendo il sistema lineare, che si ottiene sostituendo la (18) nelle (19) si ha:

$$\alpha_h^{(i)} = \frac{\mathbf{m}_h^{(i)} \cdot \hat{\mathbf{x}}}{\det(A)} \quad (20)$$

$$\beta_h^{(i)} = \frac{\mathbf{m}_h^{(i)} \cdot \hat{\mathbf{y}}}{\det(A)} \quad (21)$$

$$\gamma_h^{(i)} = \frac{\mathbf{m}_h^{(i)} \cdot \hat{\mathbf{z}}}{\det(A)} \quad (22)$$

$$\delta_h^{(i)} = \frac{\mathbf{r}_k \cdot \mathbf{r}_r \times \mathbf{r}_s}{\det(A)} \quad (23)$$

ove è stato definito il vettore

$$\mathbf{m}_h^{(i)} = \mathbf{r}_r \times \mathbf{r}_s + \mathbf{r}_s \times \mathbf{r}_k + \mathbf{r}_k \times \mathbf{r}_r \quad (24)$$

mentre A indica la seguente matrice:

$$A = \begin{pmatrix} x_h & y_h & z_h & 1 \\ x_k & y_k & z_k & 1 \\ x_r & y_r & z_r & 1 \\ x_s & y_s & z_s & 1 \end{pmatrix} \quad (25)$$

il cui determinante è legato al volume del tetraedro t_i

$$\text{mis}\{t_i\} = \frac{1}{6} |\det(A)| \quad (26)$$

Definendo i supporti in termini dei tetraedri che li costituiscono:

$$\text{supp}\{\psi_h\} \cap \text{supp}\{\psi_k\} = t_1 \cup t_2 \cup \dots \cup t_j \dots \cup t_J \quad (27)$$

$$\text{supp}\{\psi_k\} = t_1 \cup t_2 \cup \dots \cup t_i \dots \cup t_I \quad (28)$$

dove $i, j \in \mathbb{N}$. L'espressione della *stiffness matrix* diventa

$$l_{hk} = \int_{\Omega} \nabla \psi_h \cdot \nabla \psi_k d\Omega = \sum_{i=1}^I \int_{t_i} \nabla \psi_h^{(i)} \cdot \nabla \psi_k^{(i)} dt_i = \sum_{i=1}^I \frac{\mathbf{m}_h^{(i)} \cdot \mathbf{m}_k^{(i)}}{36 \text{mis}\{t_i\}} \quad (29)$$

mentre per il *load vector* si ha:

$$b_k = \int_{\Omega} f \psi_k d\Omega = \sum_{j=1}^J \int_{t_j} f \psi_k^{(j)} dt_j = \sum_{j=1}^J \int_{t_j} \left(\alpha_k^{(j)} x + \beta_k^{(j)} y + \gamma_k^{(j)} z + \delta_k^{(j)} \right) f dt_j \quad (30)$$

Definito $\mathbf{r}_b^{(j)}$ il baricentro del tetraedro j-esimo ed utilizzando un' integrazione numerica al primo ordine si ha:

$$\int_{t_j} \left(\alpha_k^{(j)} x + \beta_k^{(j)} y + \gamma_k^{(j)} z + \delta_k^{(j)} \right) f dt_j = \frac{1}{4} f \left\{ r_b^{(j)} \right\} \text{mis}\{t_j\} \quad (31)$$

sostituendo la eq. (31) in (30) si ottiene l'espressione approssimata al primo ordine per b_k :

$$b_k = \sum_{j=1}^J \frac{1}{4} f \left\{ r_b^{(j)} \right\} \text{mis} \{t_j\} \quad (32)$$

Introduzione a Gmsh

Il meshatore che useremo nel seguito si può scaricare gratuitamente sul sito <http://www.geuz.org/gmsh/>. Su tale sito è presente un esteso manuale di utilizzo nonché un' esercitazione guidata, che si suggerisce caldamente di riprodurre passo passo. Nel seguito si mostrerà come realizzare un dominio a forma di cubo.

Per costruire la geometria desiderata in Gmsh si usa un approccio bottom-

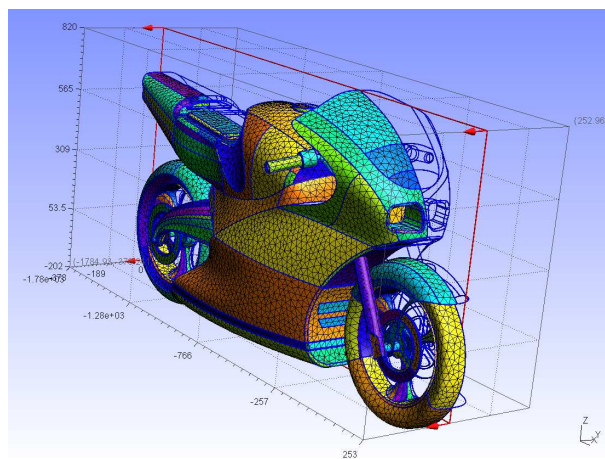


Figura 1: Esempio delle potenzialità di Gmsh - tratto da <http://www.geuz.org/gmsh/screenshot>

up: si parte dagli elementi più semplici, i punti, da essi si costruiscono segmenti poi, al livello gerarchico ancora superiore le superfici ed infine i volumi.

Applicando tale approccio al nostro esempio si inseriscano i 4 punti della faccia di base con il comando:

- Geometry \Rightarrow Elementary entities \Rightarrow Add \Rightarrow New \Rightarrow Point

poi si congiungano i punti per formare i 4 lati

- Geometry \Rightarrow Elementary entities \Rightarrow Add \Rightarrow New \Rightarrow Straight line

e selezionare poi 2 punti tra i quali si vuole tracciare il segmento. Selezionando i lati perimetrali è possibile definire una superficie:

- Geometry \Rightarrow Elementary entities \Rightarrow Add \Rightarrow New \Rightarrow Plane Surface

Si trasli la superficie appena selezionata

- Geometry \Rightarrow Elementary entities \Rightarrow Extrude \Rightarrow Traslate

e si definisca il volume da essa generato:

- Geometry \Rightarrow Elementary entities \Rightarrow Add \Rightarrow New \Rightarrow Volume

infine meshando il volume si ottiene il risultato mostrato in fig. .

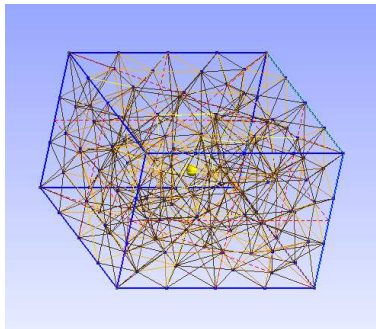


Figura 2: Mesh del cubo di lato 2.

Soluzione di Benckmark

Fissato il seguente aperto di \mathbb{R}^3 (*sfera unitaria*)

$$\Omega = \{\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 : r < 1\} \quad (33)$$

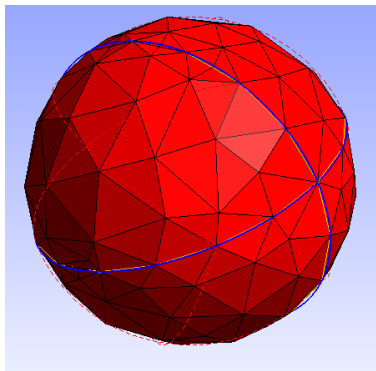


Figura 3: Mesh della sfera unitaria.

si consideri il problema di Poisson con condizioni al contorno di tipo Dirichlet:

$$\nabla^2 u = -1 \quad \text{nel senso delle distribuzioni} \quad (34)$$

$$u|_{\partial\Omega} = 0 \quad (35)$$

Tale problema ammette la seguente soluzione, che è anche soluzione in senso forte:

$$u(\mathbf{r}) = \frac{1 - x^2 - y^2 - z^2}{6} \quad \mathbf{r} \in \Omega \quad (36)$$

Codice Matlab

Il codice Poisson3D.m, riportato nel seguito, riceve in ingresso le seguenti variabili⁷:

- **Matrice p**: matrice dei nodi della mesh $\in \mathbb{R}^{3,N_p}$. Le colonne rappresentano le coordinate x, y e z rispettivamente. L'indice di riga della matrice fornisce la numerazione dei nodi.
- **Matrice t**: matrice dei tetraedri. Le sue colonne forniscono, rispettivamente:
 - *reg-phys* - rappresenta l'entità fisica a cui appartiene l'elemento.
 - *reg-elem* - fornisce il numero dell'entità elementare a cui appartiene l'elemento.
 - *number-of-node* - rappresenta il numero di nodi dell'elemento n-esimo.
 - *node-number-list* - è la lista dei nodi per l'elemento n-esimo.
- **Vettore fr**: vettore dei nodi di frontiera. Le righe rappresentano gli indici dei nodi di frontiera.

```
function u=Poisson3D(p,fr,t)

Nt = length(t);           % Numero di tetraedri
Np = length(p);           % Numero di nodi
Nfr= length(fr);          % Numero di nodi di frontiera
L  = sparse(Np,Np);        % Matrice di Stiffness (sparsa)
b  = zeros(Np, 1);         % Load Vector

for ii=1:Nt %Ciclo sui tetraedri

    %indici dei vertici del tetraedro ii-esimo
    nh = t(ii,5);
    nk = t(ii,6);
    nr = t(ii,7);
    ns = t(ii,8);
    % coordinate dei vertici del tetraedro ii-esimo
    rh = p(nh,:);
    rk = p(nk,:);
    rr = p(nr,:);
```

⁷si utilizzi il codice read_mesh.m presente sul sito del corso per convertire l'output di Gmsh in questo formato

```

rs = p(ns,:);
D = [rh 1; rk 1; rr 1; rs 1]; % calcolo volume del tetraedro ii-esimo
misT = abs(det(D))/6;
% Costruzione della matrice di stiffness
mh = (cross(rr,rs) + cross(rs,rk) + cross(rk,rr));
mk = -(cross(rr,rs) + cross(rs,rh) + cross(rh,rr));
mr = (cross(rk,rs) + cross(rs,rh) + cross(rh,rk));
ms = -(cross(rk,rr) + cross(rr,rh) + cross(rh,rk));
L(nh,nh) = L(nh,nh) + dot(mh,mh)/misT;
L(nh,nk) = L(nh,nk) + dot(mh,mk)/misT;
L(nh,nr) = L(nh,nr) + dot(mh,mr)/misT;
L(nh,ns) = L(nh,ns) + dot(mh,ms)/misT;
L(nk,nh) = L(nh,nk);
L(nk,nk) = L(nk,nk) + dot(mk,mk)/misT;
L(nk,nr) = L(nk,nr) + dot(mk,mr)/misT;
L(nk,ns) = L(nk,ns) + dot(mk,ms)/misT;
L(nr,nh) = L(nh,nr);
L(nr,nk) = L(nk,nr);
L(nr,nr) = L(nr,nr) + dot(mr,mr)/misT;
L(nr,ns) = L(nr,ns) + dot(mr,ms)/misT;
L(ns,nh) = L(nh,ns);
L(ns,nk) = L(nk,ns);
L(ns,nr) = L(nr,ns);
L(ns,ns) = L(ns,ns) + dot(ms,ms)/misT;
rb = (rh+rk+rr+rs)/4.0; % Baricentro del tetraedro ii-esimo
b([nh nk nr ns]) = b([nh nk nr ns]) + 1/4*f_fun(rb)*misT;% Costruzione load vector

end

L = L/36;

% Si impongono le condizioni al contorno
for ii=1:Nfr % Ciclo sui nodi di frontiera

    index = fr(ii);
    L(index,:) = 0;
    L(index,index) = 1;
    b(index) = g_fun(p(index,:));

end

u = L\b; % Inversione matrice e calcolo della soluzione numerica
end

```

Nella **red section** vengono definiti i parametri e le variabili. In particolare sono introdotti il numero di tetraedri N_t , di nodi N_p e di nodi di frontiera N_{fr} . Sono definite ed inizializzate anche la *stiffness matrix* L e il *load vector* b .

Nella **green section**, inclusa in un ciclo *for* che scorre tutti i tetraedri della mesh, vengono esplicitati gli indici n_h, n_k, n_r, n_s dei vertici del tetraedro ii -esimo, le cui coordinate cartesiane $\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_h, \mathbf{r}_r, \mathbf{r}_s$ vengono poi estratte dalla matrice p .

Nella **black section**, inclusa nel medesimo ciclo *for*, viene costruita la matrice di stiffness L . In particolare si calcolano, come spiegato in (24), i vettori $\mathbf{m}_h, \mathbf{m}_k, \mathbf{m}_r, \mathbf{m}_s$ associati alla restrizione al tetraedro ii -esimo delle funzioni di base $\phi_h, \phi_k, \phi_r, \phi_s$ rispettivamente e, attraverso questi ultimi si perviene agli elementi della *stiffness matrix* attraverso l'espressione specificata in (29).

Nella **violet section** viene computato il *load vector* integrando al primo ordine il prodotto della funzione di base e del termine noto dell'equazione di Poisson. A tal proposito si ricorda al lettore che la funzione di base valutata nel baricentro di qualsivoglia tetraedro assume valore $\frac{1}{4}$.

Nella **blue section** le condizioni al contorno vengono imposte direttamente sui nodi di frontiera.

Il passo finale consiste nella soluzione del sistema lineare attraverso un'inversione della *stiffness matrix* L .

Riferimenti bibliografici

- [1] R. Fiorenza, *Appunti delle lezioni di Analisi Funzionale*.
- [2] G. Miano, *Note di Modelli Numerici per i Campi*.
- [3] M.S. Gockenback, *Understanding and Implementing the Finite Element Method*, Society for Industrial and Applied Mathematics (2006).
- [4] C.C. Geuzaine and J.-F. Remacle, *Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, Volume 79, Issue 11, pages 1309-1331, 2009.
- [5] M. d'Aquino, *Problema di Dirichlet per l'equazione di Poisson 2D*.