Soluzione numerica di Equazioni differenziali alle Derivate Parziali (PDE) con **COMSOL**

Laboratorio di Analisi Numerica BSB

A.A. 2011/2012 – II Ciclo

COMSOL fornisce un ambiente per lo studio e risoluzione di equazioni differenziali a derivate parziali in 1/2/3 dimensioni per lo spazio e il tempo. Le equazioni sono discretizzate mediante il metodo degli elementi finiti (FEM). Si può utilizzare il software sia interattivamente, sia in modalità batch di programmazione, ossia scrivendo il proprio codice MATLAB che richiama opportunamente le funzioni m-files del COMSOL.

Modelli PDE in COMSOL:

Equazioni PDE in COMSOL possono essere date nelle seguenti 3 forme: forma dei coefficienti, forma generale e forma debole (weak form). La forma dei coefficienti e' quella più utilizzata per lineari e quasi lineari. La forma generale è maggiormente utilizzata per PDE non lineari. La forma debole è, malgrado il suo nome, la più potente per PDE non lineari.

FORMA DEI COEFFICIENTI

Forma generale per una PDE stazionaria nella funzione incognita u:

$$\begin{cases} \nabla \cdot (-c\nabla u - \alpha u + \gamma) + \beta \cdot \nabla u + au = f & \text{in } \Omega \\ \mathbf{n} \cdot (c\nabla u + \alpha u - \gamma) + qu = g - h^T\mu & \text{on } \partial\Omega \\ hu = r & \text{on } \partial\Omega \end{cases}$$

Dominio di interesse Ω , la prima equazione è la PDE, la seconda e la terza rappresentano le condizioni di Neumann e di Dirichlet rispettivamente sul contorno.

PDE che dipendono dal tempo in forma coefficienti:

$$\begin{cases} d_a\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (-c\nabla u - \alpha u + \gamma) + \beta \cdot \nabla u + au = f & \text{in } \Omega \\ \mathbf{n} \cdot (c\nabla u + \alpha u - \gamma) + qu = g - h^T\mu & \text{on } \partial\Omega \\ hu = r & \text{on } \partial\Omega \end{cases}$$

FORMA GENERALE (adatta per problemi non lineari)

Forma generale, per una PDE stazionaria nella funzione incognita u:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \Gamma = F & \text{in } \Omega \\ -\mathbf{n} \cdot \Gamma = G + \left(\frac{\partial R}{\partial u}\right)^T\mu & \text{on } \partial\Omega \\ 0 = R & \text{on } \partial\Omega \end{cases}$$

PDE che dipendono dal tempo in forma generale:

$$\begin{cases} d_a\dfrac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma = F & \text{in } \Omega \\ -\mathbf{n} \cdot \Gamma = G + \left(\dfrac{\partial R}{\partial u}\right)^T \mu & \text{on } \partial\Omega \\ 0 = R & \text{on } \partial\Omega \end{cases}$$

Equazioni ellittiche:

$-\nabla \cdot (c\nabla u) + au = f \quad in \quad \Omega$

$-\nabla \cdot (c(u)\nabla u) + a(u)u = f(u) \quad in \quad \Omega$ non lineari

Equazioni paraboliche

$$d\frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (c\nabla u) + au = f \quad in \quad \Omega$$

Equazioni iperboliche

$$d\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \nabla \cdot (c\nabla u) + au = f \quad in \quad \Omega$$

Problema agli autovalori

$-\nabla \cdot (c\nabla u) + au = \lambda du \quad in \quad \Omega$

Si possono anche gestire sistemi di dimensioni arbitrarie, esempio sistema di dimensione 2:

$-\nabla \cdot (c_{11}\nabla u_1) - \nabla \cdot (c_{12}\nabla u_2) + a_{11}u_1 + a_{12}u_2 = f_1 \quad in \quad \Omega$

$-\nabla \cdot (c_{21}\nabla u_1) - \nabla \cdot (c_{22}\nabla u_2) + a_{21}u_1 + a_{22}u_2 = f_2 \quad in \quad \Omega$

Condizioni al contorno per funzioni incognite scalari u:

- Dirichlet: $hu = r \quad su \quad \partial\Omega$
- Neumann e miste: $\vec{n}(c\nabla u) + qu = g \quad su \quad \partial\Omega$

h,c,u,r,q,g saranno vettori e matrici nel caso di un sistema di 2 equazioni.

Come risolvere una PDE con COMSOL

Il procedimento risolutivo può essere schematizzato nei passi che seguono. Ad ogni passo corrisponde una modalità (mode) che bisogna attivare per gestire le azioni relative al corrispondente step.

1. **Definire il tipo di PDE considerata**
2. **Definire la geometria 2D del dominio (DRAW MODE)**
3. **Definire le condizioni al contorno (BOUNDARY MODE)**

   differenti tipi di condizioni su differenti sottodomini
4. **Definire il modello o i coefficienti della PDE (SUBDOMAIN MODE)**

   specifica i coefficienti della PDE. E' possibile specificare una diversa PDE per ogni sottodomio, rendendo in questo modo possibile specificare per esempio differenti proprietà del materiale in un modello PDE; questa modalità permette inoltre l'inserimento di condizioni iniziali per un problema time-dependent.
5. **Creare una mesh triangolare (MESH MODE)**

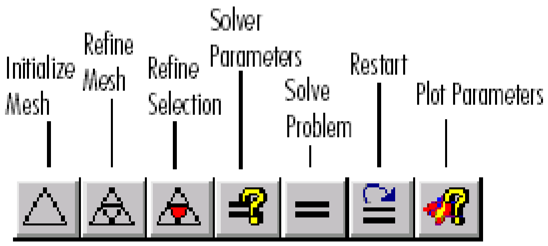
   per generare e visualizzare la mesh costruita sul dominio di valutazione
6. **Risolvere la PDE (SOLVE MODE)**

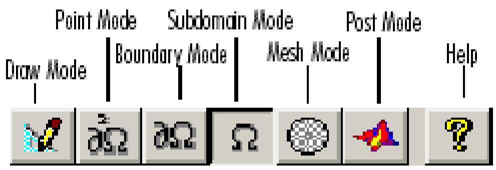
   per problemi ellittici è possibile controllare la non linearità e l'adattività, per problemi parabolici e iperbolici si possono specificare le condizioni iniziali e definire l'intervallo temporale durante il quale calcolare la soluzione, infine è possibile specificare l'intervallo nel quale cercare gli autovalori, per problemi agli autovalori.

7. **Visualizzare la soluzione ed altre proprietà fisiche calcolate dalla soluzione (POST MODE)**

possibilità di visualizzazione diversi grafici, mesh, contorni, superfici e , per problemi parabolici ed iperbolici , le relative animazioni della soluzione che cambia nel tempo.

Ad ogni modalità corrisponde anche un'icona sulla finestra principale di COMSOL





Esempio tutorial:
Vogliamo risolvere un semplice problema di Laplace su un rettangolo (x,y) = [0, 3] X [0, 1].
Lanciare il COMSOL da MATLAB.
Nel Model Navigator: dalla casella combinata **Space Dimension** selezionare **2D**; dall'elenco ad albero nel riquadro sottostante scegliere **Application Modes → COMSOL Multiphysics → PDE Modes → Classical PDEs → Laplace's Equation**

Draw mode:

- Nel menu **Options**, selezionare **Grid**; poi porre il limite degli assi a [-1 4] e [-1 2]. Quindi, click Apply e OK sulla finestra del limite degli assi.
- Nel menu **Draw**, selezionare **Rectangle/Square**. (non centrato)
- Nella finestra di disegno, click e trascinare il cursore da (0,1) nel punto di coordinate (3,0). La regione apparirà in rosa e marcata R1.

Boundary mode

- Impostare le boundary conditions: supponiamo di volere la funzione incognita u di valore +1 lungo i lati orizzontali e -1 lungo quelli verticali.

- Selezionare **Physics/Boundary settings**. Nella regione di disegno, click sul lato di sinistra del rettangolo e ctrl+mouse button dx per selezionare il lato destro. Nella finestra Boundary Settings cliccare sulla linguetta Coefficients: verrà portata in primo piano la scheda **Boundary conditions** dove il default è "Dirichlet boundary condition"; h=1 è OK; cambiare il valore di r a -1. Ripetere sui lati in alto e in basso, ponendo pero' r a +1.

Mesh mode:

- Generare la mesh: nel menu Mesh selezionare Initialize Mesh. Useremo questa volta la mesh di default.

Solve mode:

- Risolvere il problema con elementi finiti: Nel menu Solve, selezionare Solve Problem.

Post mode:

- Generare altri plots: nel menu **Postprocessing**, selezionare **Plot Parameters**; esplorare i differenti tipi di visualizzazione 2D e 3D. (es. Surface, Contour; per un grafico 3D cliccare la casella Height Data nella sottoscheda omonima della scheda Surface).
- Per migliorare l'accuratezza del plot, ritornare al menu **Mesh** e selezionare **Refine mesh**; poi nuovamente **Solve**; e si può chiaramente ripetere il raffinamento.

Risolviamo ora un problema simile sullo stesso rettangolo ma con differenti condizioni al contorno. Torniamo al **Boundary Setting** mode (nel menu **Physics**).

- Modificare le boundary conditions (coefficiente r). Lungo il lato corto cambiare r in 4*sin(pi*y).^2. Lungo i lati orizzontali: in basso r=-0.05 * x.^4 .* (3 - x).^2; in alto r=-.05*x.^2.*(3 - x).^4. Poi risolvere e visualizzare avendo ora fissato i parametri di plot a contour, ed height in surface.

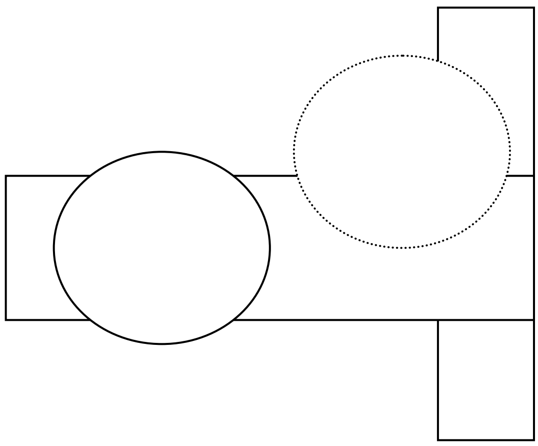
E' possible ora salvare il lavoro svolto in questa sessione: click su File, poi Save As... Salvare ad esempio con il nome `pdeintro.m` . Poi si può uscire da MATLAB, e riprendere in un secondo momento digitando `pdeintro` nel prompt di MATLAB.

Per creare una nuova sessione di lavoro e quindi un nuovo esempio selezionare File/New.

Esercizio 1: Costruzione di un dominio 2D con il toolbox

COMSOL utilizza il paradigma CSG (Constructive Solid Geometry) per la modellazione del dominio delle PDE. A partire quindi da semplici geometrie (cerchio, poligono, rettangolo, ellisse) alle quali vengono associati nomi unici, gli operatori +,*, e – permettono di comporre gli oggetti per ottenere il dominio dell'equazione.

Vogliamo risolvere l'equazione di Laplace di prima su un differente dominio. Questa volta vogliamo inserire l'equazione a partire dalla forma coefficienti dando opportuni coefficienti. Dopo **File/New** nella finestra **Model Navigator** selezionare quindi **PDE Modes/Coefficient** ok.
Definire ora il seguente dominio formato dall'unione degli oggetti solidi meno gli oggetti delimitati da tratteggio. Utilizzare **Draw/Create Composite Object**.



Rimuovere infine tutti i bordi dei sottodomini dalla figura risultante deselezionando **Keep interior boundaries** nella finestra di **Create Composite Object**. Si definiscano ora le condizioni al contorno solo per gli archi di cerchio a condizioni di Neumann $\partial u / \partial \vec{n} = -5$, (q=0). Modificare i coefficienti della nostra PDE da **Subdomain setting** (avendo prima selezionato tutto il dominio disegnato) in c=1, f=10, tutti gli altri parametri 0. Risolvere e visualizzare la soluzione.

Esercizio 2: Equazione di Poisson (o del potenziale) sul cerchio unitario (problema ellittico)

Risolvere il problema:

$-\Delta u = 1 \quad su \quad \Omega, \quad u = 0 \quad su \quad \partial\Omega, \quad \Omega$ cerchio unitario. In questo caso la soluzione esatta è data da: $u(x,y) = \dfrac{1 - x^2 - y^2}{4}$.

Risolvere e visualizzare la soluzione e l'errore commesso nella soluzione approssimata mediante l'ambiente FEMLAB.

NOTA: per sovrapporre due plot anzichè sovrascrivere un plot pre-esistente, selezionare la voce **Keep current Plot** in **Parameter Plot.**

Esercizio 3: Problema di superficie minima (problema ellittico)

Risolvere il problema:

$$-\nabla \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{1 + |\nabla u|^2}} \nabla u\right) = 0 \quad su \quad \Omega = \{(x,y) \mid x^2 + y^2 \le 1\}, \quad u = x^2 \quad su \quad \partial\Omega,$$

con la forma dei coefficienti.

In questo caso il problema è non lineare e quindi deve essere risolto con un solutore non lineare. Attenzione: in Subdomain Setting, le colonne di Γ sono le coord. spaziali x,y di Γ.

Risolvere e visualizzare la soluzione approssimata mediante l'ambiente COMSOL.

NOTA: Per modificare i solutori di sistemi lineari/nonlineari utilizzati nella fase di risoluzione del problema differenziale selezionare **Solve/Solver Parameters**. Da questo pannello di controllo si possono modificare metodi risolutivi, precondizionatori, numero di iterazioni, tolleranze, ... Provare a cambiare un solutore.

Esercizio 4: Equazione del calore (problema parabolico)

Risolvere il problema della diffusione del calore all'interno di un corpo:

$$d\frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u = 0 \quad su \quad \Omega$$

$$u = 100 \quad \textbf{sul lato sinistro di} \quad \partial\Omega,$$

$$\frac{\partial u}{\partial n} = -10 \quad \textbf{sul lato destro di} \quad \partial\Omega$$

$$\frac{\partial u}{\partial n} = 0 \quad \textbf{sugli altri lati di} \quad \partial\Omega$$

In questo caso il dominio è un blocco di metallo rettangolare con una cavità rettangolare nel mezzo. Occorre inoltre la temperatura iniziale del blocco di metallo al tempo iniziale t0. Supponiamo che la temperatura del blocco sia di zero gradi al momento in cui si inizia ad applicare calore. Specificare le condizioni iniziali in **Subdomain Setting**.

Studiare il comportamento del sistema nei primi 5 secondi di tempo. Selezionare Solve/Solver Parameters/times.

Risolvere e visualizzare la dinamica della soluzione approssimata mediante il check box **Animate** in **Plot Parameter.**

Esercizio 5: L'equazione delle onde (problema iperbolico)
Risolvere il problema:

$\frac{\partial u^2}{\partial t^2} - \Delta u = 0 \quad su \quad \Omega$, quadrato di vertici (-1,-1),(-1,1),(1,-1), e (1,1).

Con forma coefficienti (time dependent wave extension)

La membrana è fissata ai lati destro e sinistro (u=0), ed è invece libera ($\frac{\partial u}{\partial n} = 0$) nei lati in alto e in basso. Le condizioni inziali al tempo t=0, sono $u(0) = \arctan(\cos(\frac{\pi}{2}x)), \frac{\partial u(0)}{\partial n} = 3\sin(\pi x)e^{\sin(\frac{\pi}{2}y)}$. Risolvere in 20 passi equispaziati di 5 sec.

Risolvere e visualizzare la dinamica della soluzione utilizzando l'opzione **Plot in x-y grid**.

Esercizio 6: Un problema di Elettrostatica
Determinare il potenziale elettrostatico v in una struttura quadrata con una cavità quadrata al suo interno. Questo porta al problema di risolvere l'equazione di Laplace $\Delta v = 0 \quad su \quad \Omega, \quad v = 1000 \quad su \quad \partial\Omega$ **interno**, $v = 0 \quad su \quad \partial\Omega$ **esterno**, il dominio è definito da due quadrati concentrici con lati di lunghezza 0.2 e 0.5.

Risolvere il problema in modalità **Electromagnetics/Electrostatics** e visualizzare il potenziale elettrostatico v, il campo elettrico E e il campo di spostamento D (equazione di Maxwell: $\nabla D = r, D = \varepsilon E, \quad Poisson \quad -\nabla \cdot (\varepsilon \nabla v)0r$). Per una migliore visualizzazione delle linee di equipotenziale (esempio ogni 100 volt), selezionare un **contour plot** dalla **Plot Parameter** box e porre 0:100:1000 nel campo **contour plot levels.**

Esercizio 7: Diffusione (problema parabolico)
Poichè la conduzione di calore è un processo diffusivo, l'equazione generale di diffusione ha la stessa struttura dell'equazione del calore:

$\frac{\partial c}{\partial t} - \nabla \cdot (D\nabla c) = Q \quad su \quad \Omega$

dove c rapresenta la concentrazione, D è il coefficiente di diffusione e Q è una sorgente. Il procedimento di diffusione può essere anisotropo, in tal caso D è una matrice 2x2.
Risolvere in c su un dominio quadrato di lato 2, con condizioni di Dirichlet (concentrazione sul boundary) specificate.

Risolvere e visualizzare la dinamica della soluzione approssimata mediante il check box **Animate** in **Plot Parameter.**