

Corso di Laurea Specialistica in Ingegneria Chimica

Progetto numerico al calcolatore

Parte II

Topologia ed assemblaggio della matrice di rigidezza globale

Indice

1	Costruzione della topologia della matrice di rigidezza	1
2	Assemblaggio della matrice di rigidezza dai contributi locali	6
2.1	La matrice di puntatori TRIJA	8

1 Costruzione della topologia della matrice di rigidezza

Il metodo degli elementi finiti applicato alla soluzione di un'equazione differenziale lineare e stazionaria, cioè indipendente dal tempo, genera un sistema lineare la cui soluzione rappresenta il vettore dei valori che la funzione incognita assume sui nodi con i quali è stato discretizzato il dominio di integrazione. La matrice di tale sistema è generalmente chiamata *matrice di rigidezza* e nel seguito verrà indicata con il simbolo H . Ad esempio, nella soluzione del problema dell'equilibrio elastico di una struttura gli elementi di H corrispondono alle rigidezze associate ai nodi della griglia di calcolo e risultano funzione del modulo di Young e del rapporto di Poisson del materiale che costituisce il corpo in esame. Analogamente, nella soluzione di un problema di flusso H contiene i termini di trasmissività del corpo drenante, funzione della permeabilità e degli spessori associati a ciascun nodo della griglia.

La topologia della matrice di rigidezza, vale a dire l'ubicazione dei coefficienti non nulli in H , descritta nella memorizzazione compatta CRS dai vettori interi \mathbf{JA} e \mathbf{IA} , è determinata univocamente dalla mesh di calcolo con cui si è discretizzato il dominio di interesse. In particolare, è la rete dei contatti nodali nella maglia computazionale a stabilire la posizione degli elementi non nulli di H . Gli elementi non nulli della riga i corrispondono infatti agli indici di colonna j dei nodi con cui i risulta in contatto.

Per chiarire il concetto, ci si riferisca al patch di elementi riportato in Figura 1. Ad esempio, nella riga 7, relativa al valore assunto dalla funzione incognita nel nodo 7, gli elementi di H non nulli saranno:

$$h_{7,3} \quad h_{7,6} \quad h_{7,7} \quad h_{7,8} \quad h_{7,11} \quad h_{7,12}$$

Ciò è naturale conseguenza del fatto che i polinomi che interpolano la soluzione approssimata in

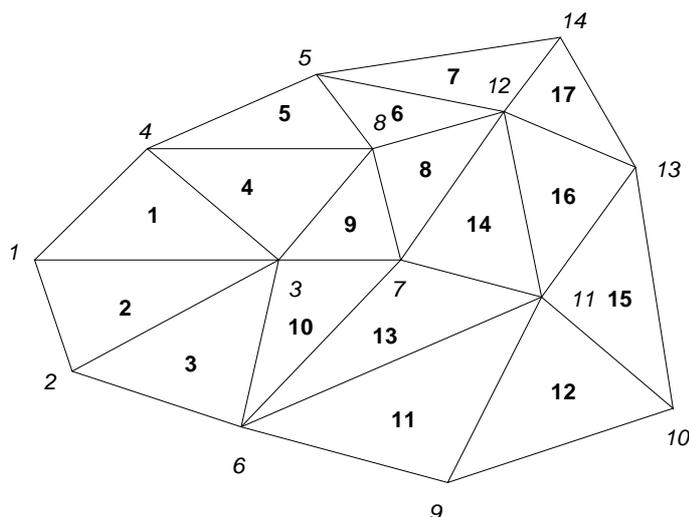


FIGURA 1: Patch di elementi triangolari. In corsivo sono indicati gli indici dei nodi ed in grassetto gli indici degli elementi.

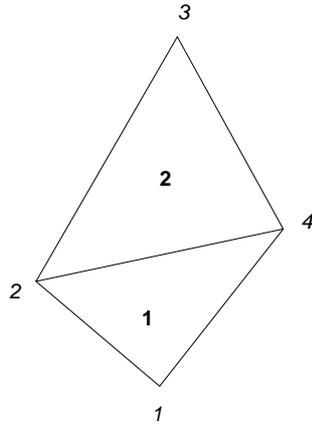


FIGURA 2: Patch di due elementi triangolari.

ciascun elemento finito hanno supporto locale. È ovvio che se il nodo i è in contatto con il nodo j , anche j sarà in contatto con i , e quindi la matrice H avrà una topologia simmetrica. Si osservi che, tuttavia, la simmetria della topologia non implica necessariamente la simmetria di H che, invece, nei casi di nostro interesse è assicurata dalla forma dei contributi locali, come si vedrà meglio in seguito. Risulta pertanto sufficiente memorizzare le posizioni $h_{i,j}$ per cui $j \geq i$.

A partire dalla tabella dei contatti nodali, definita dalla maglia computazionale, è dunque possibile costruire i vettori \mathbf{JA} e \mathbf{IA} che individuano la topologia di H . Vediamo nel dettaglio l'implementazione di questa procedura sull'esempio di Figura 2. La mesh di calcolo viene descritta dalla successione dei nodi e dalla topologia degli elementi. Avremo pertanto in input le seguenti strutture dati:

- coordinate nodali (es. file `coord` generato da MeshMaker):

```

4          : numero di nodi  $n$ 
1   $x_1$    $y_1$ 
2   $x_2$    $y_2$ 
3   $x_3$    $y_3$ 
4   $x_4$    $y_4$ 

```

- successione dei nodi in senso antiorario e indice di zona per ciascun elemento (es. file `topol` generato da MeshMaker):

```

2          : numero di elementi  $ne$ 
1  2  1  4  1
2  4  3  2  1

```

Dai contatti nodali, si deduce che la matrice di rigidezza, di dimensione $n \times n$, avrà la seguente

struttura:

$$\begin{bmatrix} h_{1,1} & h_{1,2} & 0 & h_{1,4} \\ h_{2,1} & h_{2,2} & h_{2,3} & h_{2,4} \\ 0 & h_{3,2} & h_{3,3} & h_{3,4} \\ h_{4,1} & h_{4,2} & h_{4,3} & h_{4,4} \end{bmatrix}$$

Grazie alla simmetria di H , si memorizza la sola parte triangolare alta inclusa la diagonale principale. Si verifica immediatamente che il vettore **JA** degli indici di colonna di $nt = 9$ componenti risulta:

$$\mathbf{JA} = 1 \ 2 \ 4 \ 2 \ 3 \ 4 \ 3 \ 4 \ 4$$

mentre il vettore **IA** di $n + 1 = 5$ componenti contenente le posizioni in **SYSMAT**, e quindi in **JA**, degli elementi diagonali è :

$$\mathbf{IA} = 1 \ 4 \ 7 \ 9 \ 10$$

Applichiamo ora una procedura automatica che consenta di costruire **JA** dal file **topo1**. Definiamo $n1$ come il massimo numero di contatti nodali ammessi dalla griglia del problema, cioè il massimo numero di elementi non nulli che possiamo trovare su ciascuna riga di H . Nel caso in esame, $n1 = 4$ e di conseguenza il massimo numero di elementi non nulli da memorizzare sarà $nt = n1 \cdot n = 16$. Il vettore **JA** viene generato come una successione di nt componenti intere, inizialmente nulle, che possiamo interpretare come n celle, corrispondenti alle n righe di H , ciascuna composta di $n1$ elementi. In esse andranno inseriti gli indici di colonna degli elementi non nulli incontrati in ciascuna riga:

$$\boxed{0 \ 0 \ 0 \ 0} \mid \boxed{0 \ 0 \ 0 \ 0} \mid \boxed{0 \ 0 \ 0 \ 0} \mid \boxed{0 \ 0 \ 0 \ 0}$$

Il primo elemento di ogni cella corrisponde all'elemento diagonale, il cui indice di colonna j è uguale all'indice di riga i . Ciò significa che la prima componente di ogni cella deve essere pari all'indice della cella stessa, cioè sarà 1 nella prima cella, 2 nella seconda, e così via:

$$\boxed{1 \ 0 \ 0 \ 0} \mid \boxed{2 \ 0 \ 0 \ 0} \mid \boxed{3 \ 0 \ 0 \ 0} \mid \boxed{4 \ 0 \ 0 \ 0}$$

Per determinare i vari contatti nodali si esegue un ciclo sugli elementi della griglia di calcolo. Si consideri il triangolo **1** definito dalla successione di nodi $2, 1, 4$. Poiché nella cella i vanno inseriti solamente i contatti nodali relativi alla parte triangolare alta di H , cioè gli indici j tali che $j \geq i$, conviene ordinare gli indici dei nodi in senso crescente:

$$2 \ 1 \ 4 \Rightarrow 1 \ 2 \ 4$$

Si osservi che tale successione ordinata è utile solamente ai fini della determinazione della topologia di H , mentre per il calcolo dei contributi locali va mantenuta la successione originaria in senso antiorario. È consigliabile, pertanto, fare uso di un vettore ausiliario locale **I1(3)** in cui memorizzare provvisoriamente la sequenza nodale ordinata in senso crescente. Con un ciclo sulle componenti di **I1** appare

ora chiaro che nella prima cella vanno aggiunti i contatti nodali 2 e 4, nella seconda va aggiunto il contatto 4 e nella quarta non va aggiunto nulla:

1	2	4	0	2	4	0	0	3	0	0	0	4	0	0	0
---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---

Seguiamo la medesima procedura per il triangolo **2**. Viene creato il vettore **I1** con la sequenza nodale ordinata in senso crescente:

$$4 \ 3 \ 2 \Rightarrow 2 \ 3 \ 4$$

Nella seconda cella vanno aggiunti i contatti ai nodi 3 e 4. A causa del modo in cui vengono memorizzati gli indici di colonna in **JA**, l'intero 3 va inserito fra il 2 ed il 4 già presenti, spostando quindi l'ultimo indice avanti di una posizione. Inoltre, poiché il contatto con il nodo 4 è già stato individuato, null'altro va aggiunto alla seconda cella. Infine, nella terza cella va introdotto il contatto con il nodo 4:

1	2	4	0	2	3	4	0	3	4	0	0	4	0	0	0
---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---

Va da sé che nell'ultima cella non andrà mai aggiunto nessun contatto. Si noti ora che il vettore così determinato corrisponde, a meno degli zeri, al vettore **JA** cercato.

La procedura seguita per la costruzione di **JA** può quindi essere riassunta nel seguente algoritmo:

```

001       $nt := n1 \cdot n$ 
002      Per  $i = 1, nt$ 
003           $JA(i) := 0$ 
004      Fine Per
005      Per  $i = 1, nt$  con passo  $n1$ 
006           $JA(i) := (i + n1 - 1) / n1$ 
007      Fine Per
008      Per  $k = 1, ne$ 
009          ordinamento nodi in senso crescente in I1(3)
010          Per  $j = 1, 2$ 
011               $m := (I1(j) - 1) \cdot n1 + 1$ 
012              Per  $i = j + 1, 3$ 
013                   $m := m + 1$ 
014                  Se  $JA(m) = 0$ 
015                       $JA(m) := I1(i)$ 
016                      vai all'istruzione 030
017                  Fine Se
018                  Se  $JA(m) < I1(i)$ 

```

```

019                vai all'istruzione 013
020                Fine Se
021                Se  $\mathbf{JA}(m) > \mathbf{I1}(i)$ 
022                    sposta gli elementi della cella una posizione in avanti
023                    controlla che la posizione dell'ultimo elemento sia  $< n1 \cdot \mathbf{I1}(i)$ 
024                     $\mathbf{JA}(m) := \mathbf{I1}(i)$ 
025                    vai all'istruzione 030
026                Fine Se
027                Se  $\mathbf{JA}(m) = \mathbf{I1}(i)$ 
028                    vai all'istruzione 030
029                Fine Se
030                continua
031                Fine Per
032            Fine Per
033        Fine Per

```

La costruzione del vettore \mathbf{IA} è ora quasi immediata. La posizione dell'elemento diagonale della riga i corrisponde, infatti, al primo elemento della cella i in \mathbf{JA} , vale a dire $(i - 1) \cdot n1 + 1$. Il valore così determinato va quindi depurato del numero di zeri rimasti nelle celle precedenti. Il corrispondente algoritmo può pertanto essere scritto nel modo seguente:

```

001         $\mathbf{IA}(1) := 1$ 
002        Per  $i = 1, nt$  con passo  $n1$ 
003             $m := 0$ 
004            Per  $j = 1, n1$ 
005                Se  $\mathbf{JA}(i + j - 1) \neq 0$ 
006                     $m := m + 1$ 
007            Fine Se
008            Fine Per
009             $k := (i + n1 - 1) / n1 + 1$ 
010             $\mathbf{IA}(k) := \mathbf{IA}(k - 1) + m$ 
011        Fine Per

```

Si noti che mediante l'algoritmo appena riportato la componente $n+1$ -esima di \mathbf{IA} viene calcolata

automaticamente.

Infine, è necessario compattare il vettore \mathbf{JA} eliminando tutti gli zeri in esso contenuti. Per far questo è sufficiente scorrere le componenti di \mathbf{JA} e, quando si incontra una componente nulla, spostare tutte le successive indietro di una posizione. Il numero di termini non nulli di \mathbf{JA} , che alla fine della procedura sono raggruppati nelle prime posizioni, è il vero nt .

Per eseguire in modo più efficiente questa operazione conviene, mano a mano che si scorrono le componenti di \mathbf{JA} , contare i termini non nulli e spostare l' m -esimo termine diverso da zero in posizione m . Tale posizione sarà necessariamente minore o tutt'al più uguale all'indice della componente raggiunta nello scorrimento. Per effettuare la compattazione di \mathbf{JA} si può pertanto utilizzare il seguente algoritmo:

```
001       $m := 0$ 
002      Per  $i = 1, nt$ 
003          Se  $\mathbf{JA}(i) \neq 0$ 
004               $m := m + 1$ 
005               $\mathbf{JA}(m) := \mathbf{JA}(i)$ 
006          Fine Se
007      Fine Per
008       $nt := m$ 
```

Poiché sappiamo che $\mathbf{IA}(n + 1)$ deve essere uguale a $nt + 1$, ma i due termini sono stati calcolati indipendentemente uno dall'altro, è sempre consigliabile controllare la consistenza della procedura verificando che effettivamente tale condizione sia rispettata.

Un'implementazione efficiente degli algoritmi per la costruzione della topologia della matrice di rigidezza è proposta nella subroutine `TOPOL.F`, messa a disposizione dello studente.

2 Assemblaggio della matrice di rigidezza dai contributi locali

Definita la topologia della matrice di rigidezza H mediante la costruzione dei vettori \mathbf{JA} e \mathbf{IA} , è ora necessario ricavare il vettore dei coefficienti non nulli `SYSMAT`. Come si vedrà meglio in seguito, la matrice globale H si ottiene da un processo di assemblaggio dei contributi locali calcolati su ciascun elemento finito che viene generalmente indicato con la seguente simbologia:

$$H_{i,j} = \sum_e H_{i,j}^{(e)}$$

I contributi locali sono contenuti in una matrice $H^{(e)}$ di dimensione $n^{(e)} \times n^{(e)}$, dove $n^{(e)}$ è il numero di nodi individuati nell'elemento finito prescelto. Ad esempio, con una griglia triangolare la matrice di rigidezza locale $H^{(e)}$ ha dimensione 3×3 .

Si consideri il generico elemento triangolare di nodi i, j, m , in cui i è il primo nodo, j il secondo ed m il terzo. L'operazione di assemblaggio viene eseguita collegando a ciascun elemento della matrice locale la posizione corrispondente nella matrice globale. Ad esempio, il coefficiente locale $h_{1,1}^{(e)}$, che si riferisce al primo nodo dell'elemento e , andrà collegato al coefficiente diagonale globale $h_{i,i}$, mentre il coefficiente $h_{1,2}^{(e)}$, che si riferisce all'interazione del primo col secondo nodo di e , va collegato ad $h_{i,j}$, e così via. Poiché ad uno stesso nodo concorrono più elementi finiti, ci sono più termini locali provenienti da diversi elementi che andranno collegati al medesimo termine globale. Essi perciò andranno sommati ai valori precedentemente accumulati nella matrice di rigidezza globale.

Per chiarire il concetto, si consideri nuovamente il patch di elementi di Figura 1. Supponiamo di eseguire l'assemblaggio del contributo locale dell'elemento **13** caratterizzato dalla successione nodale **7, 6, 11**. La matrice di rigidezza locale si collega ai nodi globali secondo il seguente schema:

	7	6	11
7	$h_{1,1}^{(13)}$	$h_{1,2}^{(13)}$	$h_{1,3}^{(13)}$
6	$h_{2,1}^{(13)}$	$h_{2,2}^{(13)}$	$h_{2,3}^{(13)}$
11	$h_{3,1}^{(13)}$	$h_{3,2}^{(13)}$	$h_{3,3}^{(13)}$

da cui si evince immediatamente che $h_{1,1}^{(13)}$ andrà collegato all'elemento $h_{7,7}$, $h_{1,2}^{(13)}$ all'elemento $h_{7,6}$, $h_{1,3}^{(13)}$ all'elemento $h_{7,11}$, e così via. Si osservi che, peraltro, a causa della simmetria di H , vengono memorizzati solo gli elementi relativi alla parte triangolare alta della matrice globale, per cui del contributo locale dato dal triangolo **13** interesseranno solamente gli elementi diagonali e quelli relativi ad $h_{6,7}$, $h_{6,11}$ ed $h_{7,11}$.

Come precedentemente accennato, per calcolare i termini globali di H si sommano i termini locali che concorrono al medesimo nodo. Ad esempio, l'assemblaggio del termine diagonale $h_{7,7}$ viene effettuato sommando tutti i contributi locali derivanti dagli elementi che afferiscono al nodo 7. Nel caso in esame, si tratta degli elementi **8, 9, 10, 13** e **14**, descritti nel file `topo1` nel modo seguente:

...
8 8 7 12 1
9 8 3 7 1
10 3 6 7 1
...
13 7 6 11 1
14 7 11 12 1
...

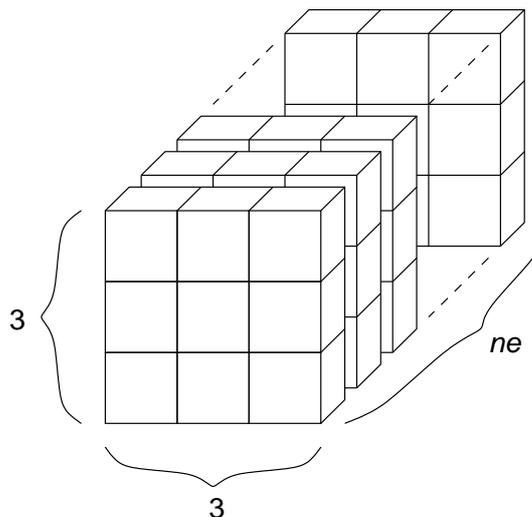


FIGURA 3: *Struttura della matrice tridimensionale dei puntatori TRIJA.*

L'elemento globale $h_{7,7}$ risulterà pertanto:

$$h_{7,7} = h_{2,2}^{(8)} + h_{3,3}^{(9)} + h_{3,3}^{(10)} + h_{1,1}^{(13)} + h_{1,1}^{(14)}$$

Ad esempio, l'elemento extra-diagonale $h_{7,11}$ riceverà un contributo dai soli elementi che hanno in comune il lato definito dai nodi 7 e 11, cioè i triangoli **13** e **14**. Dunque si avrà :

$$h_{7,11} = h_{1,3}^{(13)} + h_{1,2}^{(14)}$$

2.1 La matrice di puntatori TRIJA

L'operazione di assemblaggio della matrice di rigidezza globale è resa più complessa dalla memorizzazione compatta di H . L'elemento globale $h_{i,j}$ va, infatti, sempre cercato nel vettore **SYSMAT** a partire dalla posizione $\mathbf{IA}(i)$ attraverso lo scorrimento delle componenti di **JA**. Per facilitare tale operazione, si può definire una matrice tridimensionale di puntatori denominata **TRIJA** (Figura 3).

La matrice tridimensionale **TRIJA** è un insieme di matrici 3×3 generate per ciascun elemento triangolare. L'elemento $\mathbf{TRIJA}(i, j, k)$ individua l'indice *ind* della componente del vettore **SYSMAT** relativo alla matrice globale H a cui va aggiunto il contributo locale $h_{i,j}^{(k)}$, cioè il termine in posizione (i, j) della matrice locale generata sull'elemento k .

Determiniamo, ad esempio, la componente della matrice **TRIJA** relativa all'elemento **2** della patch riportata in Figura 2. Data la successione dei nodi $4, 3, 2$, il contributo locale alla matrice di rigidezza possiede la seguente struttura:

	4	3	2
4	$h_{1,1}^{(2)}$	$h_{1,2}^{(2)}$	$h_{1,3}^{(2)}$
3	$h_{2,1}^{(2)}$	$h_{2,2}^{(2)}$	$h_{2,3}^{(2)}$
2	$h_{3,1}^{(2)}$	$h_{3,2}^{(2)}$	$h_{3,3}^{(2)}$

La corrispondente matrice $\text{TRIJA}(i, j, 2)$ avrà coefficienti non nulli solo nei termini per cui, detti ii e jj gli indici globali dei nodi, vale $jj \geq ii$. Ad esempio, l'elemento $h_{1,1}^{(2)}$ corrisponde ad $ii = jj = 4$, cioè all'elemento diagonale della matrice globale $h_{4,4}$. La posizione ind in **SYSMAT** di tale elemento è individuata da $\text{IA}(ii)$, vale a dire 9 nel caso in esame. Agli elementi $h_{1,2}^{(2)}$, $h_{1,3}^{(2)}$ e $h_{2,3}^{(2)}$ corrispondono indici $jj < ii$ e pertanto gli elementi ad essi collegati in **TRIJA** sono nulli. L'elemento $h_{2,1}^{(2)}$ contribuisce, invece, al termine globale $h_{3,4}$, la cui posizione ind in **SYSMAT** è determinata partendo da $\text{IA}(3)$ e scorrendo **JA** fintantoché si trova l'indice 4. Nel caso in esame, quindi, l'elemento corrispondente in **TRIJA** è 8. Proseguendo in questo modo per gli altri contributi locali, si trova $\text{TRIJA}(i, j, 2)$:

9	0	0
8	7	0
6	5	4

La procedura appena descritta può essere implementata mediante il seguente algoritmo:

```

001      Per  $k = 1, ne$ 
002          trasferimento nodi dell'elemento  $k$  in  $\text{I2}(3)$ 
003          Per  $i = 1, 3$ 
004               $ii := \text{I2}(i)$ 
005              Per  $j = 1, 3$ 
006                   $jj := \text{I2}(j)$ 
007                   $\text{TRIJA}(i, j, k) := 0$ 
008                  Se  $jj \geq ii$ 
009                       $ind := \text{IA}(ii)$ 
010                      Se  $\text{JA}(ind) = jj$ 
011                           $\text{TRIJA}(i, j, k) := ind$ 
012                      Altrimenti
013                           $ind := ind + 1$ 
014                          vai all'istruzione 010
015                      Fine Se
016                  Fine Per
017          Fine Per

```

018 **Fine Per**

019 **Fine Per**

Determinata la matrice dei puntatori TRIJA, l'operazione di assemblaggio dei contributi locali sulla matrice globale diventa pressoché immediata.