

Modelowanie matematyczne w nauce i technice

LAB 03

1 Wstęp

Poprawnie zdefiniowane zadanie obliczeniowe w programie „ModFEM” składa się z następujących elementów (w nawiasach przykładowe pliki dla zadania rozchodzenia się (przewodzenia) ciepła):

- **Pliku konfiguracyjnego dla zadania obliczeniowego (problem_heat.dat)**
- **Pliku zawierającego siatkę obliczeniową (w formacie JK lub w bezpośrednim formacie struktur danych ModFEM - format i nazwa pliku określone są w pliku konfiguracyjnym problem_heat.dat)**
- **Pliku zawierającego informację o warunkach brzegowych (o nazwie zwyczajowo przyjmowanej jako bc_heat.dat, ale możliwej do dowolnego ustalenia w pliku konfiguracyjnym problem_heat.dat)**
- **Opcjonalnie** pliku z danymi materiałowymi - jest konieczny do rozwiązania zadań z nieliniowością materiałową oraz wieloma materiałami, w dalszych przykładach, w przypadku takiej potrzeby, wykorzystywany będzie plik o nazwie materials.dat
- **Opcjonalnie:** plików konfiguracyjnych modułów rozwiązywania układów równań liniowych (solwerów liniowych - nazwy plików określone są w pliku konfiguracyjnym problem_heat.dat, w dalszych przykładach, w przypadku takiej potrzeby, wykorzystywane będą pliki konfiguracyjne: solwera iteracyjnego o nazwie mkb.dat oraz solwera bezpośredniego pardiso.dat)

W trakcie dzisiejszych zajęć zapoznacie się Państwo z tworzeniem plików siatek w tzw. formacie "JK" i plików konfiguracyjnych zawierających informację o warunkach brzegowych. Ustalenie warunków brzegowych jest niezbędne do przeprowadzenia obliczeń MES, określa zachowanie niewiadomych na brzegu obszaru obliczeniowego i interakcję obiektu z otoczeniem. Rodzaje warunków brzegowych dla problemu brzegowego drugiego rzędu (przypomnienie z wykładu dla przykładowego zadania 1D):

- Warunek brzegowy Dirichleta - ustalenie stałej wartości na brzegu (np. wartość funkcji $u(0)=a$, np. temperatury).
- Warunek brzegowy Neumanna - wartość na brzegu jest pochodną funkcji (np. $u'(0)=a$), ewentualnie strumieniem (po pomnożeniu przez odpowiedni współczynnik zależny od problemu), warunek w tej postaci może modelować np. dopływ / odpływ ciepła o stałej intensywności.

- Warunek brzegowy mieszany, Robinia – bardziej złożony przypadek będący połączeniem dwóch powyższych ($u'(0) = c * (u(0) - u_{out})$) – pochodna lub strumień są zależne od różnicy wartości niewiadomej na brzegu obszaru i pewnej zadanej wartości, np. związanej z otoczeniem), ten warunek nadaje się do modelowania tzw. konwekcji ciepła, kiedy intensywność strumienia ciepła zależy od różnicy temperatur między obiektem a otoczeniem

Celem laboratorium będzie realizacja następujących kroków:

- Przygotowanie pliku do tworzenia siatki 3D na podstawie siatki 2D
- Przygotowanie i konfiguracja warunków brzegowych dla siatek obliczeniowych utworzonych w trakcie poprzednich zajęć
- Wprowadzenie do programu Paraview
- Wczytywanie siatek obliczeniowych do programu „ModFEM”, zadawanie przez program warunków brzegowych (przypisywanie numerów warunków brzegowych ścianom elementów)
- Eksportowanie siatek i warunków brzegowych w formacie Paraview
- Przeglądanie utworzonych siatek z zadanymi warunkami brzegowymi w programie Paraview

2 Punktem wyjścia laboratorium są siatki w formacie NASTRAN-a utworzone w ramach laboratorium 2. (Osoby, które nie mają własnych utworzonych siatek mogą w trakcie zajęć korzystać z pliku [L_shape_2D.nas](#) na stronie przedmiotu – co jednak skutkuje obniżeniem oceny, **w ostatecznym sprawozdaniu konieczne jest przedstawienie efektów pracy dla własnego pliku siatki**)

3 Proszę utworzyć **na serwerze** katalog roboczy dla laboratorium, np. ‘lab_03’ i skopiować do niego plik siatkinas

4 **Zadanie 1:** Przygotowanie siatek obliczeniowych (na serwerze HONORATA lub lokalnie)

4.1 Tworzenie plików JK :

4.1.1 Opis tworzenia pliku JK (jako uzupełnienie niniejszej instrukcji (http://ww1.metal.agh.edu.pl/~banas/MMNT/tworzenie_siatek_jk_za_pomoca_gmsh.pdf))

4.1.2 Narzędzie do konwertowania plików NAS do JK (na serwerze HONORATA w katalogu

/home/students_mm/ModFEM/nas_to_jk_util/)

- **nas2D2jk.c** – plik źródłowy kodu w C (powinien kompilować się na dowolnej maszynie)

- **nas2D2jk.exe** – wersja skompilowana dla serwera HONORATA

1.1.1 Proszę utworzyć pliki JK dla siatek z laboratorium 2 (powinny mieć nazwy według konwencji: **nazwisko_imie_An_x_y.jk**). Plik siatki w formacie "JK" uzyskuje się z odpowiedniego pliku w

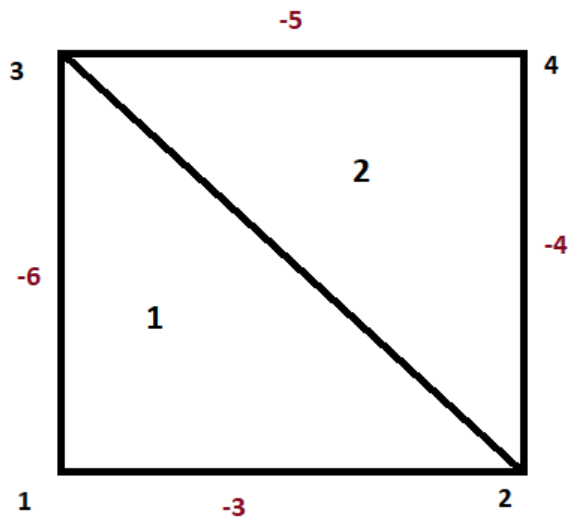
formacie NASTRAN-a `nazwisko_imie_An_x_y.nas` przez wywołanie:

```
./nas2D2jk.exe nazwisko_imie_An_x_y
```

Format "JK" - jest jednym z formatów plików siatek odczytywanych przez program 'ModFEM'.

- 5 **Po wygenerowaniu pliku siatki w formacie jk należy zmodyfikować jego pierwsze dwie linie, stosownie do warunków rozwiązywanego zadania. W szczególności należy nadać numery warunkom brzegowym na dolnej i górnej ścianie oraz ustalić grubość obszaru obliczeniowego i liczbę warstw elementów tworzących siatkę.** Poniżej znajduje się zawartość pliku dla prostej siatki 2D:

```
4500 20000 24000 9000
4 0.0 1.0 2 21 22
0 0 1 0 0 1 1 1
2
1 1 2 3
-3 2 -6
1 2 4 3
-4 -5 1
```



Kolejne linijki pliku zawierają:

- przepis na alokację struktur danych w programie ModFEM:

`4500 20000 24000 9000` - maksymalna liczba: wierzchołków / krawędzi / ścian / elementów

- przepis na tworzenie siatki 3D (składającej się z szeregu warstw wzdłuż osi z) z siatki 2D (na płaszczyźnie xy):

`4 0.0 1.0 2 21 22` - liczba wierzchołków w siatce 2D / współrzędna z dolnej ściany / współrzędna z górnej ściany / **liczba warstw** / numer warunku brzegowego ściana dolna / numer warunku brzegowego ściana górna

[uwaga: numery warunków brzegowych na dolnej i górnej ścianie obszaru obliczeniowego powinny być różne od numerów zadanych przy tworzeniu siatek programem gmsht . Dla rozważanych przykładowych prostych siatek wystarczające będzie przyjęcie np. wartości 21 i 22 (liczba krawędzi obszaru 2D powinna być mniejsza niż 20)]

- opis siatki 2D (**nie należy go modyfikować**):

`0 0 1 0 0 1 1 1` - współrzędne x, y kolejnych wierzchołków

`2` - liczba elementów

`1 1 2 3` - numer materiału / lista wierzchołków

`-3 2 -6` - wartość ujemna - numer warunku brzegowego / wartość dodatnia - numer sąsiadującego elementu

6 Zadanie 2: konfiguracja warunków brzegowych w pliku 'bc_heat.dat'

6.1 Przykładowy, dostarczony na stronie przedmiotu plik zawiera następujące linie:

<pre>bc: (/*--- BOUNDARY ---*/ { bcnum:1; // bottom side //isothermal:{temp = 1.0; }; // temperature value //radconv:{T_out = 20.0; alfa=100.0; eps = 0.0;}; //normal_heat_flux:{flux = 0.0;}; }, // ... dalsze warunki brzegowe ...);</pre>	<p>- blok kodu zawierający warunki brzegowe</p> <p>→ nowy warunek brzegowy: { }, → numer warunku brzegowego</p> <p>→ isothermal – zadanie określonej temperatury (warunek Dirichleta)</p> <p>→ radconv – zadanie warunku radiacji / konwekcji (transfer ciepła, sterowany parametrem alpha – współczynnik transferu ciepła) (warunek Robina) [t_inf lub T_out jest opcjonalnym parametrem temperatury zewnętrznej, w przypadku jego braku jako zewnętrzna jest przyjmowana temperatura otoczenia ambient_temperature z pliku problem_heat.dat] [eps jest współczynnikiem radiacji przyjętym jako 0]</p> <p>→ normal_heat_flux – określenie strumienia ciepła (0.0 oznacza izolację) (warunek Neumanna) → koniec warunku brzegowego</p> <p>→ po ostatnim warunku brak przecinka !!!</p>
--	---

(jako wskazówki wypełniania pól można także użyć pliku warunków brzegowych z lab_01)

6.2 W ramach zadania 2 należy skopiować plik ze strony przedmiotu do katalogu roboczego i zmodyfikować go, zadając warunki brzegowe w taki sposób, aby odwzorowywały warunki brzegowe przedstawione na rysunkach zadanych dla siatek w ramach laboratorium 2.

- 6.2.1 Każda krawędź obszaru 2D ma swój numer warunku brzegowego (jest to numer linii zadany w programie **gms**)
- 6.2.2 Numer zadany dla krawędzi obszaru przenosi się na ściany elementów powstałych nad krawędzią
- 6.2.3 Dodatkowo w pliku siatki *jk* znajdują się numery warunków brzegowych dla dolnej i górnej powierzchni obszaru obliczeniowego (np. 21 i 22 - patrz p.5)
- 6.2.4 Każdemu numerowi warunku brzegowego należy przyporządkować odpowiedni typ warunku i wartości parametrów (na razie wartości są dowolne)
- 6.2.5 Warunek grzania należy zrealizować jako warunek Dirichleta z odpowiednio wysoką temperaturą, np. 450 (z założenia temperatura jest wyrażana w Kelvinach)
- 6.2.6 Warunek chłodzenia należy zrealizować jako warunek Robina z odpowiednio niską temperaturą otoczenia (np. 300), zadaną w pliku warunków brzegowych jako *T_out* (możliwa różna temperatura dla każdego warunku brzegowego) lub w pliku problemowym jako *ambient_temperature* (taka sama wartość dla wszystkich warunków brzegowych) . Współczynnik transferu ciepła można przyjąć równy np. 1000
- 6.2.7 Warunek izolacji na ściankach bocznych oraz dolnej i górnej należy przyjąć jako zadawany przez zerowanie strumienia ciepła (warunek Neumanna)

7 Przygotowanie programu ModFEM [wykonywane na serwerze]

7.1 Do wykonania zadania potrzebny jest program do symulacji zagadnienia rozchodzenia się ciepła utworzony w ramach *lab_01*

7.2 Przygotowanie modułu problemowego

7.2.1 na stronie przedmiotu (dla *lab_01*) znajduje się plik konfiguracyjny ModFEM dla problemu rozchodzenia się ciepła '**problem_heat.dat**'

7.2.2 Plik należy skopiować do katalogu roboczego i dokonać edycji linii:

<code>mesh_type = "j";</code>	Typ siatki - upewnić się, że jest typ JK: „j”.
<code>mesh_file_in = "nazwa utworzonego pliku JK";</code>	Wprowadzić nazwę pliku JK utworzonego wcześniej (w przypadku trudności można skorzystać z pliku L_shape_2D.jk ze strony przedmiotu - co skutkuje jednak obniżeniem oceny

7.3 Proszę uruchomić program '**MOD_FEM_heat_prism_std**' w katalogu roboczym **lab_03** (z plikami utworzonymi dla przykładu) :

```
~/ModFEM/bin_cmake/imie_nazwisko_nompi_none_gcc_g++/MOD_FEM_heat_prism_std .
```

7.3.1 Wydruk pojawiający się bezpośrednio po uruchomieniu (powyżej menu głównego) zawiera szereg zadanych parametrów kontrolnych, między innymi wszystkie warunki brzegowe:

BOUNDARY CONDITIONS

boundary conditions configuration file: bc_heat.dat
number of BCs: 9

BC ID: 1
BC type: 4 - BC_HEAT_NORMAL_HEAT_FLUX
flux: 0.000000

itd.

7.3.2 Należy sprawdzić poprawność zadania parametrów warunków brzegowych

7.3.3 Informacja o zadaniu warunków brzegowych dla ścian zewnętrznych obszarów potwierdzana jest napisem:

MESH
Read mesh file
Boundary conditions specified for all boundary faces

7.3.4 Poniżej napisu znajduje się informacja o wczytanej siatce (liczba elementów, boków, krawędzi i wierzchołków)

7.4 Po ukazaniu się menu należy wygenerować pliki Paraview – opcja 'v'. Można także najpierw rozwiązać zadanie – opcja 's', dzięki czemu będzie można oglądać nie tylko numery warunków brzegowych, ale także rozwiązanie z zadanymi warunkami brzegowymi (umożliwi to np. sprawdzenie czy temperatury na ścianach z warunkiem Dirichleta mają właściwe wartości itp.). Po zakończeniu zadania (wyjście z programu opcja 'q') powinny się pojawić pliki:

```
|— heat_0000.pvd  
|— heat_000000.partmesh  
|— heat_000000.vtu  
|— heat_000000_BC.vtu
```

Powyższe pliki zawierają zrzut rozwiązania dla programu ParaView. W dalszej części laboratorium wykorzystywany jest plik zawierający tylko zapis numerów warunków brzegowych: „heat_000000_BC.vtu”, który należy przekopiować na maszynę, na której uruchamiany jest ParaView. (W przypadku uwzględnienia oglądania rozwiązania potrzebny jest także plik heat_000000.vtu – w dalszym ciągu tematu traktowane jest to jako zadanie dodatkowe).

8 Zadanie 3: Praca z programem PARAVIEW.

8.1 Proszę odnaleźć w systemie, ewentualnie pobrać i zainstalować program PARAVIEW (<https://www.paraview.org/>)

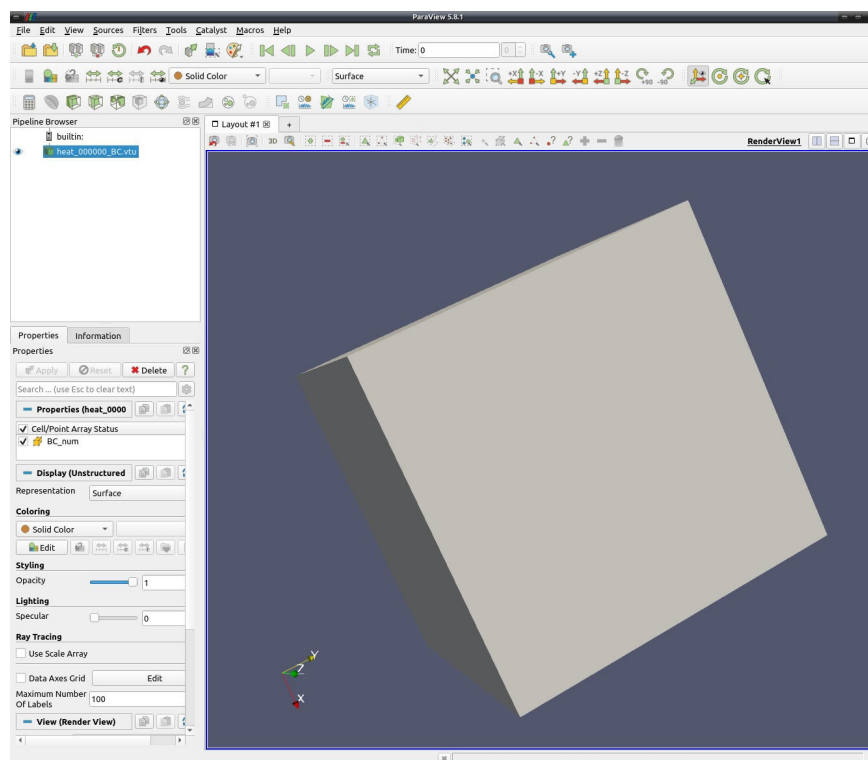
8.2 Proszę uruchomić program PARAVIEW i otworzyć plik

„heat_000000_BC.vtu”

(**File** -> **Open** – inne sposoby mogą wyłączać pewne opcje Paraview).

8.3 W celu wyświetlenia obszaru należy wcisnąć przycisk "Apply"

- 8.4 Domyślnie wyświetlany jest tylko obszar obliczeniowy (pole "Solid Color"),
- 8.5 Dla ułatwienia znalezienia zasięgu obszaru obliczeniowego można w widoku obszaru w Paraview włączyć opcje widoczności siatki (Cube axes lub Data Axes Grid lub Axes Grid – w lewym panelu Properties – różne opcje w zależności od wersji Paraview, szczegółowe parametry widoku można dodatkowo edytować)
- 8.6 Proszę rozwinąć pole „**Solid Color**” i wybrać „**BC_num**” – ta opcja pozwala przeglądać warunki brzegowe (mają one numery takie jak w pliku „**bc_heat.dat**”, którym przyporządkowane są kolory)
- 8.7 Można dokonać zmiany kolorów:
(**View -> Color Map Editor**)
przycisk **Choose Preset**, wybór np. **Blue to Red Rainbow** ;
blok **Color Discretization -> Number Of Table Values**
- 8.8 Proszę wykonać zrzuty ekranu z warunkami brzegowymi i umieścić je w sprawozdaniu.
- 8.8.1 Kolory ścian na wizualizacji odpowiadają numerom warunków brzegowych – czyli zawartości plikujk
- 8.8.2 Typy i parametry warunków zapisane w pliku **bc_heat.dat** funkcjonują tylko w programie, nie są wizualizowane – ich działanie można zweryfikować po rozwiązaniu problemu



Okno programu PARAVIEW

9 Dalszą pracę z programem Paraview można kontynuować posługując się dokumentacją programu ewentualnie instrukcjami na stronie w pliku:
http://ww1.metal.agh.edu.pl/~banas/MMNT/wizualizacja_Paraview.pdf

10 **Podsumowanie realizacji zadań (poniższa tabelka ma znaleźć się w sprawozdaniu bezpośrednio po wnioskach, a przed załącznikami - numeracja punktów realizacji kolejnych kroków laboratorium i załączników ma odpowiadać numeracji poniższych zadań)**

Zadanie (skrótowy opis)	OCENA własna studenta w % (0-100)	OCENA prowadzącego w % (0-100)
Zad. 1 – utworzenie plików siatek i umieszczenie na serwerze HONORATA, kilka pierwszych linijek pliku powinno znaleźć się w sprawozdaniu		
Zad. 2 – przygotowanie pliku z warunkami brzegowym i umieszczenia go na serwerze HONORATA, opis pliku w sprawozdaniu		
Zad. 3 – utworzenie zrzutów ekranu z programu Paraview oraz umieszczenie ich wraz z opisem w sprawozdaniu		
Zad. 4 - dodatkowa praca z programem Paraview (odpowiednie zrzuty ekranu powinny znaleźć się w sprawozdaniu)		
ŁĄCZNIE (400):		
OCENA KOŃCOWA:	----- -----	

Sprawozdanie powinno zawierać opis pliku siatki z załączonym wydrukiem kilku pierwszych linii oraz krótki opis rodzajów warunków brzegowych wraz z ich zdefiniowaniem w pliku konfiguracyjnym „ModFEM”. Do zadania 3 należy przygotować zrzuty ekranu z Paraview zawierające widoki na warunki brzegowe dla wszystkich ścian (widoki: z góry / z dołu / z przodu / z tyłu / z lewej / z prawej strony, ewentualnie odpowiednie widoki 3D).

- 11 Pomocne strony internetowe:
- **PARAVIEW** - [<https://www.paraview.org/>] - strona główna programu Paraview.
 - **Kurs PARAVIEW** - [https://www.paraview.org/Wiki/The_Paraview_Tutorial] - kurs / tutorial – wprowadzenie do Paraview.