

Modelowanie matematyczne w nauce i technice

LAB 13. Rozwiązywanie stacjonarnych problemów konwekcji-dyfuzji metodą elementów skończonych, z użyciem stabilizacji metodą SUPG

Wstęp

Zagadnienia hiperboliczne i równania konwekcji-dyfuzji z dominującą konwekcją stanowią trudny problem przy próbach modelowania klasycznymi metodami różnic skończonych i elementów skończonych. Standardowe algorytmy zastosowane bezpośrednio do dyskretyzacji równań prowadzą często w praktycznych zastosowaniach do rozwiązań niestabilnych, tracących z tego powodu dokładność, a nierzadko wręcz zmierzających do nieskończoności. Jednym ze sposobów radzenia sobie z tą sytuacją w metodzie elementów skończonych jest dodanie do standardowego sformułowania słabego dodatkowych wyrazów, odpowiadających członom eliptycznym (zawierającym pochodne drugiego rzędu, jak w wyrazach naturalnej dyfuzji). Uzyskiwane sformułowania nazywane bywają metodami sztucznej dyfuzji lub sztucznego rozpraszania (w mechanice płynów sztucznej lepkości). Bardziej wyrafinowane spośród nich stosują specjalne formy dodanych wyrazów, z jednej strony wprowadzające dyfuzję tylko w kierunkach wymaganych dla stabilizacji rozwiązania, a z drugiej opierające się na residuum oryginalnego rozwiązywanego problemu, co gwarantuje spójność (zgodność, *consistency*) schematu numerycznego. Jedną z takich metod jest metoda zaimplementowana w programie ModFEM, nazywana metodą *Streamline Upwind Petrov-Galerkin (SUPG)* lub *Streamline Diffusion (SD)*.

Zadaniem Państwa będzie przeprowadzenie modelowania metodą elementów skończonych prostego zadania konwekcji-dyfuzji w jednym wymiarze przestrzennym i zaobserwowanie wpływu stabilizacji oraz innych parametrów symulacji na uzyskiwane rozwiązania.

Rozwiązywanym zadaniem będzie równanie różniczkowe konwekcji-dyfuzji:

$$-k \frac{d^2 u}{dz^2} + v \frac{du}{dz} = 0$$

ze współczynnikiem dyfuzji (przewodnictwa cieplnego) k - modyfikowanym w trakcie laboratorium oraz współczynnikiem konwekcji (prędkością) v - w rozważanym przykładzie na stałe równym 1. Problem brzegowy posiada warunki Dirichleta: $u(0) = 1$, $u(1) = 0$, co prowadzi do dokładnego rozwiązania problemu w postaci funkcji:

$$u_{ex} = 1 - \frac{\exp\left(\frac{z}{k}\right) - 1}{\exp\left(\frac{1}{k}\right) - 1}$$

Jednym z obserwowanych parametrów w zadaniu będzie tzw. elementowa liczba Pecleta (*element Peclet number*):

$$Pe = v \cdot h / (2 \cdot k)$$

która mierzy relację prędkości (konwekcji), z uwzględnieniem rozmiaru elementów, do współczynnika dyfuzji (w zagadnieniu przewodzenia ciepła będzie to współczynnik przewodnictwa cieplnego). Dla zagadnień z dominującą dyfuzją ($Pe < 1$) standardowe metody powinny prowadzić do stabilnych rozwiązań, dla problemów z dominującą konwekcją ($Pe > 1$) rozwiązania standardowe stają się niestabilne.

1. **Zadanie 1. (obowiązkowe) Rozwiązanie stacjonarnego liniowego problemu jednowymiarowej konwekcji-dyfuzji, standardową aproksymacją MES, na siatkach o zmiennym rozmiarze elementów**

- 1.1. Proszę utworzyć katalog **lab_13**
- 1.2. Punktem wyjścia dla badań w niniejszym laboratorium jest zadanie o nazwie **1D_CONV_DIFF_Z** z laboratorium 5. Proszę przekopiować pliki konfiguracyjne tego zadania (**problem_heat.dat**, **bc_heat.dat**) oraz odpowiedni plik siatki (typu **B**) do katalogu **lab_13**.
- 1.3. W pliku siatki nie należy dokonywać żadnych zmian poza liczbą warstw (m.in. pozostać mają odpowiednie numery warunków brzegowych oraz położenie dolnej warstwy **z=0.0** i górnej warstwy **z=1.0**). Podobnie jak w laboratorium 5 liczba warstw (4 parametr w drugiej linii pliku siatki) będzie jedynym zmienianym parametrem. Grubość pojedynczego elementu wzdłuż osi z będzie pełniła rolę parametru dyskretyzacji **h**, **h=1.0/liczba_warstw** (rozmiary elementów w płaszczyźnie xy nie mają znaczenia - zadanie jest w rzeczywistości jednowymiarowe, rozwiązania są stałe względem x i y).
- 1.4. W pliku **bc_heat.dat**, na brzegach bocznych obszaru należy zadać warunki zerowania strumienia ciepła (co gwarantuje stałość rozwiązania w przekrojach równoległych do płaszczyzny xy). Na brzegu dolnym i górnym należy zadać warunek Dirichleta, **1** dla **z=0** i **0** dla **z=1**.
- 1.5. W podstawowym pliku sterującym **problem_heat.dat** należy dokonać następujących ustawień:
 - a) **name = "1D_CONV_DIFF_Z"**; - nazwa problemu musi mieć postać, która uruchamia w kodzie podstawienie jako rozwiązania dokładnego (zwracanego przez funkcję **pdr_exact_sol**) funkcji:

$$u_{ex} = 1 - \frac{\exp\left(\frac{z}{k}\right) - 1}{\exp\left(\frac{1}{k}\right) - 1}$$

gdzie k - jest współczynnikiem dyfuzji (przewodnictwa cieplnego), zadany w pliku jako **thermal_conductivity** (parametry **density** i **specific_heat** muszą mieć wartość 1.0)

- b) **mesh_type = "j"**; **mesh_file_in = "...jk"**; - plikiem siatki ma być plik utworzony w ramach laboratorium 2, jako siatka typu **B**
- c) **field_file_in = "i"**; - wartości w węzłach mają zostać zainicjowane przez wywołanie funkcji **pdr_heat_initial_condition**, w której dla nazwy "1D_CONV_DIFF_Z" jest wywoływana funkcja **pdr_exact_sol**
- d) **materials_file = ""**; - pozostawienie pustej nazwy pliku z danymi materiałowymi powoduje przyjęcie we wszystkich elementach danych materiałowych znajdujących się poniżej w pliku **problem_heat.dat** (parametry **thermal_conductivity**, **density** i **specific_heat**)
 - na potrzeby niniejszego laboratorium **proszę nadać indywidualną, dowolną wartość współczynnika dyfuzji (przewodnictwa cieplnego, thermal_conductivity) z zakresu 0.01-0.02**
 - **parametry density i specific_heat mają mieć wartości 1.0**
- e) pozostałe parametry nie mają znaczenia dla ćwiczenia i można je pozostawić bez zmian
- f) właściwe ustawienia znajdują się także w pliku **problem_heat.dat** na stronie przedmiotu (bez nazwy pliku **jk** i wartości współczynnika dyfuzji - przewodnictwa cieplnego)

1.6. Pierwszym krokiem zadania jest sprawdzenie poprawności działania kodu:

- a) w pliku siatki należy zadać liczbę warstw 1024
- b) należy uruchomić program (**MOD_FEM_heat_prism_std** lub **MOD_FEM_heat_prism2d_std**) i sprawdzić poprawność zadania warunków brzegowych oraz innych parametrów sterujących wykonaniem
 - w sprawozdaniu powinien znaleźć się odpowiedni zrzut ekranu zawierający co najmniej nadany indywidualnie współczynnik dyfuzji (przewodnictwa cieplnego)
- c) po wczytaniu siatki i interpolacji warunku początkowego należy obliczyć błąd interpolacji na podstawie znajomości rozwiązania dokładnego - opcja **e**
- d) należy dokonać zapisu pliku do wizualizacji w ParaView - opcja **v** (powinno się od razu dokonać zmiany nazwy pliku - wskazując, że jest to interpolacja warunku początkowego)
- e) następnie należy rozwiązać zadanie - opcja **s** i zapisać za pomocą opcji **v** wynik w odpowiednim pliku **.vtu**, zmieniając mu nazwę, tak aby wskazywała na aproksymację metodą stabilizowaną
- f) po rozwiązaniu obliczyć błąd aproksymacji MES na podstawie znajomości rozwiązania dokładnego - opcja **e**
 - **sprawdzenie poprawności na tym etapie polega na ustaleniu, że błędy aproksymacji i interpolacji są do siebie zbliżone i małe - w normie $L_2 < 0.001$, w normie $H_1 < 1.0$.**

g) następnym krokiem jest rekompilacja kodu z wyłączoną stabilizacją
[Najlepiej przed rekompilacją zapisać wszystkie pliki binarne MOD_FEM_... w nowo utworzonym katalogu lab_14 , który będzie używany w kolejnym laboratorium. W trakcie obecnych zajęć dokonywane będą modyfikacje kodu i tworzone nowe pliki binarne. Na potrzeby lab_14 można użyć zapisanych plików binarnych, ewentualnie po zakończeniu ćwiczenia z powrotem włączyć stabilizację w kodzie i dokonać rekompilacji kodu]

- w celu rekompilacji z wyłączoną stabilizacją należy w pliku **src/pdd_heat/weak_formulation/pds_heat_weakform.c** (względem katalogu podstawowego **ModFEM**), w linii ok. 453 odkomentować zerowanie parametru stabilizacji (**tau_therm = 0.0;**)
 - do uzyskania nowych plików binarnych wystarczy rekompilacja za pomocą **make** w odpowiednim podkatalogu **bin_cmake**
- h) po wyłączeniu stabilizacji należy ponownie uruchomić kod, rozwiązać to samo zadanie i obliczyć błąd aproksymacji oraz zapisać plik do wizualizacji, **nadając mu nazwę wskazującą na użycie standardowej aproksymacji bez stabilizacji**
- **sprawdzenie poprawności po wyłączeniu stabilizacji polega ponownie na ustaleniu, że błędy aproksymacji i interpolacji są do siebie zbliżone i małe - w normie $L_2 < 0.001$, w normie $H_1 < 1.0$.**
- i) w sprawozdaniu należy umieścić:
- zrzuty ekranu z informacjami o błędach interpolacji i aproksymacji,
 - jeden wykres typu "**Plot Over Line**", wzdłuż linii od **z=0** do **z=1**, z trzema krzywymi: dla interpolacji, oraz dla obu aproksymacji
 - poprawne krzywe powinny praktycznie się pokrywać, stanowiąc dla dalszej części laboratorium ilustracje rozwiązania dokładnego

2. Zadanie 2. (obowiązkowe) Badanie rozwiązań stacjonarnego liniowego problemu jednowymiarowej konwekcji-dyfuzji, standardową aproksymacją MES, na siatkach o zmiennym rozmiarze elementów

- 2.1. Proszę przeprowadzić serię eksperymentów dla kodu z wyłączoną stabilizacją SUPG ($\tau_{therm}=0.0$) posługując się siatkami o zmiennej liczbie warstw (grubość warstwy jest parametrem dyskretyzacji h)
- 2.2. Dla dwóch siatek: z 8 warstwami oraz z liczbą warstw najbliższą liczbie Pecleta równej 1, przeprowadź wizualizację wyników "Plot Over Line", tak jak w p. 1 dla rozwiązania z 1024 warstwami
 - [liczbę warstw należy obliczyć korzystając z wzoru na liczbę Pecleta oraz założenie $h=1.0/liczba_warstw$: $Pe = v / (2*k*liczba_warstw)$
 - a) najlepiej umieścić krzywe dla wszystkich trzech siatek na jednym wykresie co ułatwi analizę i wyciągnięcie wniosków
 - b) oznacz krzywe na wykresie wartością elementowej liczby Pecleta dla każdej z nich (liczbę Pecleta oblicz na podstawie wartości h , k i v)
 - **zaobserwuj jak manifestuje się utrata stabilności dla standardowej aproksymacji MES w przypadku liczby Pecleta większej od 1**
- 2.3. Kolejnym krokiem jest stworzenie wykresu zbieżności MES (w sformułowaniu bez stabilizacji) dla badanego problemu. Należy użyć siatek z liczbą warstw 1,2,4,8,16,32,64,128 (co najmniej 8 siatek – dodatkowo można dołączyć wyniki dla siatek z 256 i 512 warstwami oraz dla siatki z 1024 warstwami z zadania 1)
- 2.4. Dla każdej siatki należy przeprowadzić sekwencję operacji:
 - a) uruchomienie kodu (z automatycznym zadaniem warunku początkowego)
 - b) obliczenie błędu interpolacji warunku początkowego na siatce MES
 - na podstawie znajomości rozwiązania dokładnego – opcja **e**
 - c) rozwiązanie zadania – opcja **s**
 - d) obliczenie błędu aproksymacji MES
 - na podstawie znajomości rozwiązania dokładnego – opcja **e** (opcja **s** dla tego zadania powoduje automatyczne wypisanie tego błędu po zakończeniu obliczeń)
 - za pomocą oszacowania metodą Zienkiewicza-Zhu (ZZ) – opcja **z**
[uwaga: metoda ZZ nie działa dla jednej warstwy – konieczna jest liczba warstw równa co najmniej 2]
- 2.5. Dla uzyskanych danych należy utworzyć wykres zbieżności interpolacji i aproksymacji MES. **Na osi poziomej powinna znaleźć się liczba Pecleta (obliczona na podstawie grubości warstw, jako parametru dyskretyzacji h), a na osi pionowej wartość błędu. Należy użyć na obu osiach skali logarytmicznej i umieścić na wykresie pięć krzywych – dwie dla normy **L2**: interpolacji oraz aproksymacji, dwie dla **półnormy H1**: interpolacji oraz aproksymacji, piąta krzywa powinna odpowiadać oszacowaniu błędu metodą ZZ. Wykres można utworzyć w **gnuplocie** lub dowolnym innym programie – powinien**

jednak mieć na tyle gęstą siatkę, żeby umożliwić odczytanie rzędu zbieżności w każdej z norm.

- a) **zaobserwuj jaka jest relacja pomiędzy obliczonym błędem H1 interpolacji rozwiązania dokładnego na siatce MES, obliczonym błędem aproksymacji MES w normie H1 oraz oszacowaniem błędu metodą ZZ dla kolejnych siatek – swoje wnioski opisz w sprawozdaniu**
 - b) **zaobserwuj dla jakiej wartości liczby Pecleta zbieżność rozwiązań MES staje się zgodna z teoretycznymi oszacowaniami dla zadań eliptycznych – swoje wnioski opisz w sprawozdaniu**
3. **Zadanie 3. (4.0). Porównanie rozwiązań stacjonarnego liniowego problemu jednowymiarowej konwekcji-dyfuzji, uzyskanych za pomocą aproksymacji MES z włączoną i wyłączoną stabilizacją SUPG**
- 3.1. Pierwszym krokiem jest przywrócenie stabilizacji poprzez zmianę pliku **src/pdd_heat/weak_formulation/pds_heat_weakform.c** - ponowne wykomentowanie zerowania parametru stabilizacji w linii 453, a następnie rekompilacja kodu
 - 3.2. następnie należy uzyskać rozwiązania dla dwóch siatek: z 8 warstwami oraz z liczbą warstw najbliższą liczbie Pecleta równej 1, dla każdej z nich po zapisaniu wyniku w odpowiednim pliku do wizualizacji, stworzenie wykresu **"Plot Over Line"**
 - a) najlepiej umieścić krzywe dla wszystkich trzech siatek (łącznie z siatką z 1024 elementami) na jednym wykresie co ułatwi analizę i wyciągnięcie wniosków
 - b) oznacz krzywe na wykresie wartością elementowej liczby Pecleta dla każdej z nich
 - **porównaj wykres z rozwiązaniami dla sformułowania ze stabilizacją z wykresem rozwiązań bez stabilizacji**
 - **omów czym różnią się wykresy aproksymacji rozwiązania dokładnego od wykresów interpolacji tej samej funkcji otrzymanymi w laboratorium 5**
4. **Zadanie 4. (5.0). Badanie zbieżności rozwiązań stacjonarnego liniowego problemu jednowymiarowej konwekcji-dyfuzji, uzyskanych za pomocą aproksymacji MES ze stabilizacją SUPG, na siatkach o zmiennym rozmiarze elementów**
- 4.1. zadanie polega na wykonaniu tych samych kroków co dla algorytmu bez stabilizacji w punktach 2.3-2.5, tym razem dla algorytmu ze stabilizacją
 - **porównaj krzywe zbieżności dla obu przypadków**
 - **zaobserwuj czy stabilizacja (dodatkowe wyrazy w sformułowaniu słabym) powoduje zwiększenie błędu aproksymacji lub pogorszenie rzędu zbieżności rozwiązania przy malejącym rozmiarze elementów**
 - **we wnioskach powiąż powyższe obserwacje z faktem, że sformułowanie ze stabilizacją jest spójne z problemem analitycznym (rozwiązanie dokładne spełnia sformułowanie słabe w granicy rozmiaru elementów dążącego do zera)**

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 (skrócony opis)	OCENA własna w % (0-100)	OCENA prowadzącego w % (0-100)
Zadanie 1 - wstępne symulacje		
Zadanie 2 - symulacje bez stabilizacji (+ zbieżność)		
Zadanie 3 - symulacje ze stabilizacją		
Zadanie 4 - zbieżność ze stabilizacją		
ŁĄCZNIE (400):		

Sprawozdanie powinno zawierać opis realizacji wszystkich zadań zawartych w temacie, wraz z omówieniem podstaw teoretycznych, odpowiedziami na pytania, wydrukami kodu i plików konfiguracyjnych oraz zamieszczonymi zrzutami ekranu - zgodnie z regulaminem laboratoriów. Opis realizacji każdego zadania może kończyć się wnioskami wynikającymi z przebiegu realizacji, całe sprawozdanie powinno zawierać wnioski dotyczące całości tematu.