

# Advanced Computational Techniques

## 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 ćwiczeniach laboratoryjnych 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 ćwiczeniach laboratoryjnych wykorzystywany będzie plik konfiguracyjny solwera iteracyjnego o nazwie mkb.dat oraz plik konfiguracyjny solwera bezpośredniego pardiso.dat)

W trakcie dzisiejszych zajęć zapoznacie się Państwo z tworzeniem plików siatek w tzw. formacie "JK" oraz plików konfiguracyjnych zawierających informację o warunkach brzegowych dla programu ModFEM. Ustalenie warunków brzegowych jest niezbędne do obliczenia zadania 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 (wartość funkcji, np. temperatury).
- Warunek brzegowy Neumanna - wartość na brzegu jest pochodną funkcji), ewentualnie strumieniem (po pomnożeniu pochodnej przez odpowiedni współczynnik zależny od problemu), warunek w tej postaci może symulować np. dopływ / odpływ ciepła.

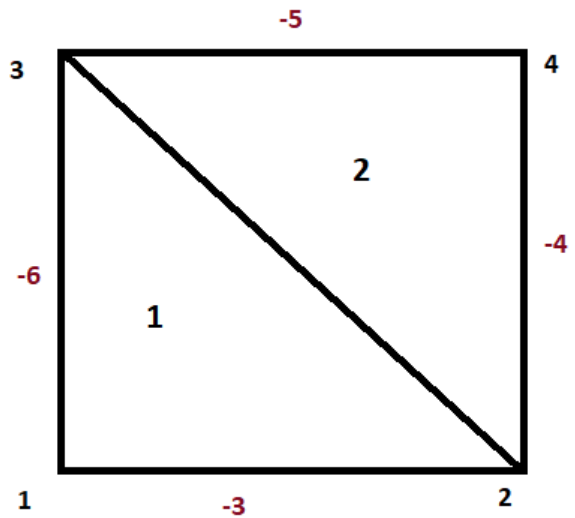
- Warunek brzegowy mieszany, Robina – bardziej złożony przypadek będący połączeniem dwóch powyższych (pochodna lub strumień są zależne od różnicy wartości niewiadomej na brzegu obszaru i pewnej zadanej wartości, np. związanej z otoczeniem), ten warunek nadaje się do modelowania tzw. konwekcji ciepła przez brzeg obszaru

Celem laboratoriów będzie:

- 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” i ich eksportowanie w formacie Paraview
  - Przeglądanie utworzonych siatek z 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](#) umieszczonego 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 siatki ....nas
- 4 Zadanie 1: Przygotowanie siatek obliczeniowych (na serwerze lub lokalnie)
- 4.1 Tworzenie plików JK w oparciu o dokumentację: ‘tworzenie\_siatek\_jk\_za\_pomoca\_gmsh.pdf’:
- 4.1.1 Opis tworzenia pliku JK ( odnośnik na stronie: "konwersja nas->jk" )
- 4.1.2 Narzędzie do konwertowania plików NAS do JK (na stronie przedmiotu)
- **nas2D2jk.c** – plik źródłowy kodu w C (powinien kompilować się na dowolnej maszynie)
  - **nas2D2jk.exe** – wersja skompilowana dla serwera
- 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'. Poniżej znajduje się zawartość pliku dla prostej siatki 2D:

```
4500 20000 24000 9000
4 0.0 10.0 2 1 2
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 10.0 2 1 2** – 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

- opis siatki 2D:

**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

5 Zadanie 2: konfiguracja warunków brzegowych w pliku 'bc\_heat.dat'

5.1 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;};</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</p>
---	---

<pre> //normal_heat_flux:{flux = 0.0;};  },  // ... dalsze warunki brzegowe ... ); </pre>	<p>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)</p> <p>→ koniec warunku brzegowego</p> <p>→ <b>po ostatnim warunku brak przecinka !!!</b></p>
---	---

5.2 W ramach zadania 2 należy skopiować plik 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.

5.2.1 Każda krawędź obszaru 2D ma swój numer warunku brzegowego (jest to numer linii zadany w programie **gms**)

5.2.2 Numer zadany dla krawędzi obszaru przenosi się na ściany elementów powstałych nad krawędzią

5.2.3 Każdemu numerowi należy przyporządkować odpowiedni typ warunku i wartości parametrów (na razie wartości są dowolne)

5.2.4 Warunek grzania lub chłodzenia można zrealizować jako warunek Dirichleta lub Neumanna - na razie nie ma to znaczenia, dla przetestowania można zadać na jednych brzegach jeden, na innych drugi

## 6 Przygotowanie programu ModFEM [wykonywane na serwerze]

6.1 Do wykonania zadania potrzebny jest program do symulacji zagadnienia rozchodzenia się ciepła utworzony w ramach laboratorium 1

6.2 Przygotowanie modułu problemowego

6.2.1 na stronie przedmiotu (dla lab\_01) znajduje się plik konfiguracyjny ModFEM dla problemu rozchodzenia się ciepła '**problem\_heat.dat**'

6.2.2 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 <a href="#">L_shape_2D.jk</a> ze strony przedmiotu - co skutkuje jednak obniżeniem oceny

6.3 Proszę uruchomić program 'MOD\_FEM\_heat\_prism\_std' w katalogu roboczym **lab\_04** (z plikami utworzonymi dla przykładu) :

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

6.3.1 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.

6.3.2 Należy sprawdzić poprawność zadania parametrów warunków brzegowych

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

```
MESH
Read mesh file ....
Boundary conditions specified for all boundary faces
```

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

6.4 Po ukazaniu się menu należy wygenerować pliki Paraview - opcja 'v' (wyjście z programu opcja 'q'). Po rozwiązaniu zadania powinny się pojawić pliki:

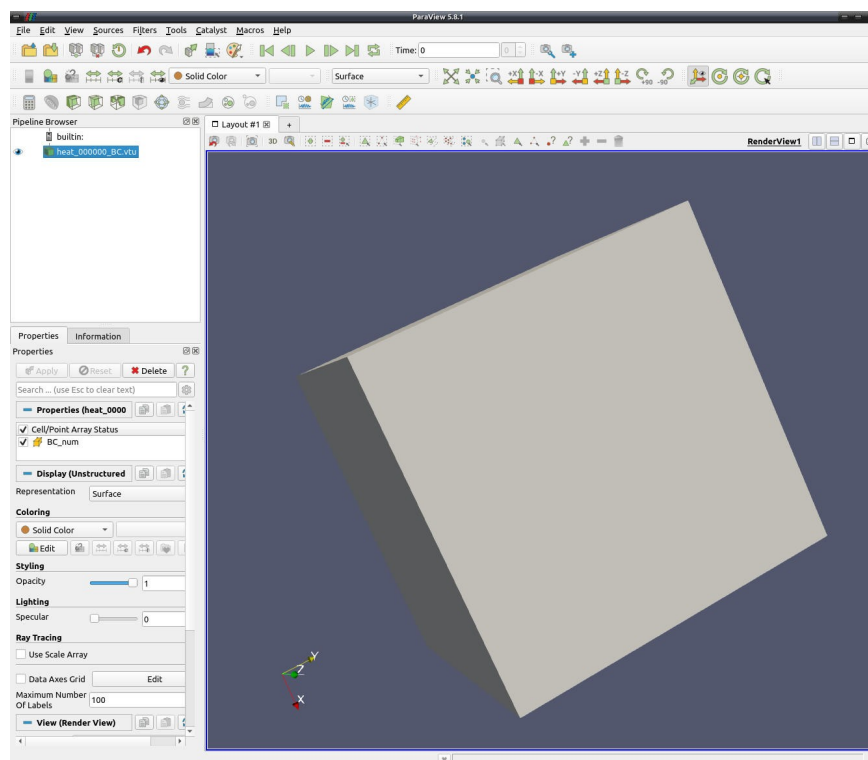
```
|— heat_0000.pvd
|— heat_000000.partmesh
|— heat_000000.vtu
|— heat_000000_BC.vtu
```

Powyższe pliki zawierają zrzut rozwiązania dla programu ParaView. W dalszej części laboratorium wykorzystywany jest plik „heat\_000000\_BC.vtu”, który należy przekopiować na maszynę, na której uruchamiany jest ParaView.

7 Zadanie 3: Praca z programem PARAVIEW.

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

- 7.2 Proszę uruchomić program PARAVIEW i otworzyć plik „heat\_000000\_BC.vtu”  
( **File -> Open** )
- 7.3 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)
- 7.4 Można dokonać zmiany kolorów:  
( **View -> Color Map Editor** )  
przycisk **Choose Preset**, wybór np. **Blue to Red Rainbow** ;  
blok **Color Discretization -> Number Of Table Values**
- 7.5 Proszę wykonać zrzuty ekranu z warunkami brzegowymi i umieścić je w sprawozdaniu.
- 7.5.1 Kolory ścian na wizualizacji odpowiadają numerom warunków brzegowych – czyli zawartości pliku ....jk
- 7.5.2 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

## 8 Podsumowanie zadań

Zadanie (skrótowy opis)	OCENA w % (0-100)
Zad. 1 – utworzenie plików siatek i umieszczenie na serwerze, kilka pierwszych linijek pliku powinno znaleźć się w sprawozdaniu	

Zad. 2 – przygotowanie pliku z warunkami brzegowym i umieszczenia go na serwerze, opis pliku w sprawozdaniu	
Zad. 3 – utworzenie zrzutów ekranu z programu Paraview oraz umieszczenie ich wraz z opisem w sprawozdaniu	
OCENA KOŃCOWA:	

Sprawozdanie powinno zawierać opis pliku siatki z dołączonym wydrukiem kilku pierwszych linii oraz krótki opis rodzajów warunków brzegowych wraz z ich definiowaniem 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).

9 Pomocne strony internetowe:

- **PARAVIEW** - [ <https://www.paraview.org/> ] - strona główna programu Paraview.
- **Kurs PARAVIEW** - [ [https://www.paraview.org/Wiki/The\\_ParaView\\_Tutorial](https://www.paraview.org/Wiki/The_ParaView_Tutorial) ] - kurs / tutorial – wprowadzenie do Paraview.