Advanced Computational Techniques

LAB 10

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:

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

ze współczynnikiem dyfuzji (przewodnictwa cieplnego) k i współczynnikiem konwekcji (prędkością) v (w rozważanym przykładzie na stałe równym 1) oraz z warunkami brzegowymi **`u(0)=1, u(1)=0`**, posiadające rozwiązanie dokładne:

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

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

`Pe = v*h/2*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_10***

1.2. Punktem wyjścia dla badań w niniejszym laboratorium jest zadanie o nazwie **`1D_CONV_DIFF_Z`** (jednowymiarowe zadanie konwekcji-dyfuzji). Proszę przekopiować ze strony przedmiotu pliki konfiguracyjne tego zadania (**`problem_heat.dat, bc_heat.dat`**) oraz odpowiedni plik siatki (typu **B**) do katalogu **`lab_10.`**

1.3. W pliku siatki nie należy dokonywać żadnych zmian (położenie dolnej warstwy ***z=0.0*** i górnej warstwy ***z=1.0****).* Zmienianym parametrem będzie liczba warstw. Grubość pojedynczego elementu wzdłuż osi *z* będzie parametrem dyskretyzacji **h** (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:

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

gdzie k - jest współczynnikiem dyfuzji (przewodnictwa cieplnego), zadanym 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, dowolna 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

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 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 L2 < 0.001, w normie H1 < 1.0.**

g) następnym krokiem jest rekompilacja kodu z wyłączoną stabilizacją
   - w tym celu należy w pliku **`src/pdd_heat/weak_formulation/pds_heat_weakform.c`** (względem katalogu podstawowego **`ModFEM/modfem2015`**), w linii 453 odkomentować zerowanie parametru stabilizacji (**`tau_therm = 0.0;`**)

[Po zakończeniu ćwiczenia koniecznie trzeba z powrotem włączyć stabilizację w kodzie - jej brak uniemożliwia poprawne rozwiązywanie większości zadań, w tym np. zadań z kolejnych laboratoriów]

   - 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 wskazująca 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 L2 < 0.001, w normie H1 < 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*)

[Po zakończeniu ćwiczenia koniecznie trzeba z powrotem włączyć stabilizację w kodzie - jej brak uniemożliwia poprawne rozwiązywanie większości zadań, w tym np. zadań z lab 14]

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

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**

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)**

Tabela podsumowująca

Zadanie (skrócony opis)	stopień realizacji w % (0-100)
Zadanie 1	
Zadanie 2	
Zadanie 3	
Zadanie 4	

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. Opis realizacji każdego zadania może kończyć się wnioskami wynikającymi z przebiegu realizacji, całe sprawozdanie powinno kończyć się wnioskami dotyczącymi całości tematu.