

ELMER Solver — yleinen FEM-ratkaisija

Juha Ruokolainen ja Ville Savolainen

Juha.Ruokolainen@csc.fi, Ville.Savolainen@csc.fi

π

ELMER on yleiskäyttöinen elementtimenetelmään (FEM) pohjautuva ohjelmisto, joka koostuu esikäsittelijästä, ratkaisijasta ja jälkikäsittelijästä. ELMERin ratkaisija (ELMER Solver) sisältää muun muassa seuraavia tehtävätyyppejä kuvaavat yhtälöt: kokoonpuristumaton ja -puristuva virtaus, lämmönsiirto- ja säteilytehtävät, pienten ja suurten siirtymien elastisuusteoria sekä magneettinen induktioyhtälö. Yhtälöitä voi ratkaista kytketysti, esimerkiksi advektio ja diffuusio virtauksen mukana, virtauksen ja rakenteen vuorovaikutus, magnetohydrodynamiikan tehtävät ja lämpöjännitysten laskenta.

Ratkaisija on toteutettu pääosin Fortran 90:llä. ELMER Solver toimii Unix- (SGI, DEC ja Linux) ja Windows NT -ympäristöissä. CSC:n koneista ELMER Solver on asennettu Caperille ja Cedarille. ELMERin ratkaisija on kehitetty CSC:ssä.

Jälkikäsittelijää ELMER Post on esitelty edellisessä @CSC:n numerossa artikkelissa [RS99]. Kerromme seuraavassa numerossa ELMER Frontista, joka käsittelee ELMERin esikäsittelijän sekä käyttöliittymän ELMERin muihin osiin. Tämän artikkelin esimerkissä emme puutu malligeometriian emmekä verkon luontiin.

Ratkaisijan yleiskuvaus

ELMER Solverilla voi ratkaista osittaisdifferentiaaliyhtälöitä elementtimenetelmällä. Edellä lueteltujen tehtävätyyppien lisäksi käyttäjä voi lisätä joustavasti omia yhtälöratkaisijoitaan ELMER Solveriin. Virtausratkaisija perustuu stabiiloituun FEMiin.

Tehtäviä voi ratkaista ajasta riippuvina tai riippumattomina. Geometria ja ratkaisu voidaan esittää eri koordinaatistoissa, esimerkiksi karteesisessa 2D- ja 3D-koordinaatistossa, aksisymmetrisenä tai sylinterisymmetrisenä ja sylinterikoordinaatistossa. Ratkaisija on kirjoitettu mahdollistaen yleisen tensoriformulaation käytön.

Kaikki mallia kuvaava paikasta ja ajasta riippuva tieto, muun muassa materiaaliparametrit, reunaehdot ja systeemiä ajavat voimat, voidaan määrittellä joko vakioina, taulukoituna toisesta suureesta riippuvana tai käyttäjän määrittelemällä funktiolla.

Eri yhtälöille voi käyttää omia elementtiverkkoja, jolloin ratkaisija interpoloi tarvittaessa laskettuja suureita verkosta toiseen. Eri yhtälöiden vaatima

hilan yleinen tai paikallinen tarkkuus voi olla huomattavan erilainen, ja näin säästetään ratkaisuajassa.

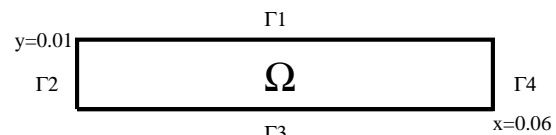
Ratkaisijan elementtityyppeinä on käytössä Lagrangen elementtiperhe: viiva-, kolmio- ja suorakulmio sekä tetraedri- ja tiiliskivielementit lineaarisilla, kvadraattisilla ja kolmannen asteen kantafunktiolla.

Lineaarinen yhtälöryhmä voidaan ratkaista sekä suorilla että iteratiivisilla menetelmillä. LU-hajotelmaan perustuvat menetelmät käyttävät joko nauhamatriisimuotoa (LAPACK) ja nauhanleveyden optimointia (Cuthill-McKee) tai harvamatriisimuotoa (SPARSE). Iteratiivinen ratkaisukirjasto HUTIter sisältää useita menetelmiä ja muutaman pohjustimen.

Esimerkkitehtävä

Esitämme Rayleigh'n ja Benardin konvektiota kuvaavan kytketyn virtaus- ja lämmönsiirtotehtävän.

Seuraava kuva esittää laskenta-alueen ja reunoja:



Ratkaistavat differentiaaliyhtälöt ovat kokoonpuristumattomat Navierin ja Stokesin yhtälöt sekä lämpöyhtälö:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) - \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla p = \rho \mathbf{g} (1 - \beta (T - T_0))$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T \right) - k \nabla^2 T = 0$$

Reunaehdot ovat

$$T = 10.0, \text{ reunalla } \Gamma_1$$

$$T = 10.5, \text{ reunalla } \Gamma_3$$

$$T = 10.0, \text{ alueessa } \Omega, \text{ kun } t = t_0$$

$$\mathbf{u} = 0, \text{ reunoilla } \Gamma_1, \Gamma_3 \text{ ja } \Gamma_4$$

$$u_x = 0, \text{ reunalla } \Gamma_2$$

$$\mathbf{u} = 0, \text{ alueessa } \Omega, \text{ kun } t = t_0$$

Muille parametreille käytetyt arvot SI-yksiköissä ovat:

Parametri	Arvo
Tiheys	$\rho = 998.2$
Ominaislämpökapasiteetti	$c_p = 4182.5$
Lämmönjohtavuus	$k = 0.597$
Viskositeetti	$\mu = 0.000993$
Lämpölaajenemiskerroin	$\beta = 0.00021$
Gravitaatiokiihtyvyys	$\mathbf{g} = (0, -9.81)$

Käsitlemme seuraavassa tämän matemaattisen mallin kuvaamisen ja numeeriseen ratkaisuun liittyvien parametrien ja valitsimien tärkeimpiä piirteitä ELMER Solverin kannalta.

Mallin vaatimat syöttötiedostot löytyvät kokonaisuudessaan hakemistosta

```
http://www.csc.fi/programming/examples/elmer/
```

Mallin verkko (elementit ja solmut) on määriteltä Elmerin käyttämässä muodossa tiedostoissa `mesh.boundary`, `mesh.header`, `mesh.elements` ja `mesh.nodes`. Tehtävä ratkaistaan 2646 bilineaarisesta nelikulmioelementistä koostuvalla verkolla.

Mallin muut ratkaisijan käyttämät määrittelyt ovat tiedostossa `RayleighBenard.sif`. Määrittelytiedosto on yksinkertainen tekstitiedosto, joka heijastaa simuloinnin rakennetta ratkaisijan kannalta. Tämä `.sif`-tiedosto luodaan ELMER Frontin käyttöliittymän kautta tai, käyttäjän niin halutessa, suoraan tekstieditorilla. Tärkeimmät periaatteet käyttäjän kannalta ovat seuraavat.

Geometria koostuu kappaleista `Body n`. Kuhunkin kappaleeseen liitetään ratkaistavat yhtälöt, materiaalmäärittelyt, tilavuuslähteet ja alkuehdot. Esimerkissämme on vain yksi kappale.

Kussakin kappaleessa ratkaistava yhtälöjoukko koostuu yksittäisten yhtälöiden ratkaisijoista, joista kukin määrittelyt ovat osiossa `Solver n`. Esimerkissämme tämä yhtälöjoukko koostuu ratkaisijoista `Heat Equation` (lämpöyhtälö) ja `Navier-Stokes` (liikemäärän ja massan säilymislait). Navierin ja Stokesin yhtälön komponentit ratkaistaan siis kerralla, vahvasti kytkettynä. Sen sijaan kahtaa ratkaisijaa iteroidaan keskenään.

Kunkin yhtälöratkaisijan `Solver`-osio `.sif`-tiedostossa määrittää tähän liittyvät lineaarisointimenetelmät, lineaarisen yhtälöryhmän ratkaisumenetelmät, iteraatiostrategian, konvergenssikriteerit jne. Esimerkissämme Navierin ja Stokesin yhtälöiden ratkaisua kuvaava `Solver`-osio näyttää seuraavalta:

```
Solver 2
Equation
String Navier-Stokes

Stabilize
Logical True
```

```
Nonlinear System Max Iterations
Integer 1

Nonlinear System Convergence Tolerance
Real 1.0e-6

Nonlinear System Newton After Iterations
Integer 3

Nonlinear System Newton After Tolerance
Real 1.0e-3

Nonlinear System Relaxation Factor
Real 1.

Linear System Solver
String Iterative

Linear System Iterative Method
String BiCGStab

Linear System Convergence Tolerance
Real 1.0e-9

Linear System Max Iterations
Integer 100

Linear System Preconditioning
String ILU

Steady State Convergence Tolerance
Real 1.0e-05

End
```

Kenttien nimet kuvaavat selkeästi niiden sisältöä kuten muissakin määrittelytiedoston osioissa. Esimerkiksi lineaarinen yhtälöryhmä ratkaistaan iteratiivisella menetelmällä (BiCGStab) tietyn normin mielessä määritellyllä konvergenssikriteerillä 10^{-9} ILU-pohjustimella. Ratkaisijan lukemia arvoja tiedostossa edeltää ELMERin käyttämä muuttujatyypin nimi. Vakiotyyppien `Real` tai `Integer` sijaan tässä voi käyttää myös taulukoitua riippuvuutta mistä hyvänsä muusta parametrilla tai käyttäjän määrittelemää mielivaltaista funktiota.

ELMER Solver käy läpi `Solver`-määrittelyt ja kutsuu yhtälöratkaisijoita vuorotellen. Nämä ratkaisevat mahdollisesti epälineaariset yhtälönsä. Tätä toistetaan aika-askeleen tai steady-state ratkaisijan sisällä, kunnes kytketyn tehtävän konvergenssikriteeri on täyttynyt. Koko kytketyn tehtävän ratkaisua toistetaan, kunnes kaikki aika-askeleet on käyty läpi. Aikaintegroinnin ja kytketyn tehtävän ratkaisua ohjaava parametrit määritellään `Simulation`-osiossa, joka sisältää myös koordinaatistoon ja tiedostoihin liittyvät määrittelyt.

Esimerkimmme ratkaistaan ajasta riippuvana (200 vakio pituista askelta $\Delta t = 2.0$) ja sen `Simulation`-osio on seuraavanlainen:

```
Simulation
Coordinate System
String Cartesian 2D

Simulation Type
String Transient
```



```
Steady State Max Iterations
Integer 10

Timestepping Method
String BDF

BDF Order
Integer 1

Timestep Intervals
Size 1
Integer 200

Timestep Sizes
Size 1
Real 2

Output Intervals
Size 1
Integer 1

Output File
File "RayleighBenard.result"

Post File
File "RayleighBenard.ep"
End
```

Aikaintegrointimenetelmä on 1. asteen BDF-menetelmä eli implisiittinen Eulerin menetelmä. Ratkaisu tulostetaan joka askeleelta tiedostoihin `RayleighBenard.result` (ELMER-formaatti) ja `RayleighBenard.ep` (ELMER Post -formaatti).

Kaikille yhtälöille yhteisesti on lisäksi mm. reunaehtojen määrittely. Esimerkiksi reunalla Γ_1 se näyttää seuraavalta:

```
Boundary Condition 1
Velocity 1
Real 0

Velocity 2
Real 0

Temperature
Real 10
End
```

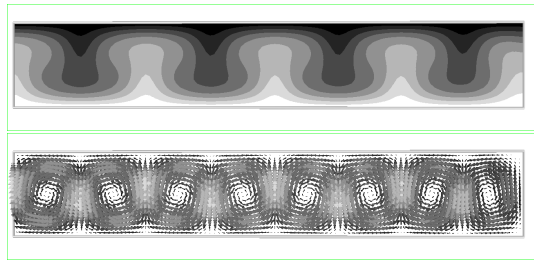
Ratkaisija käynnistetään joko ELMER Frontista tai komentoriviltä. Ratkaisun aikana tulostetaan tietoja muun muassa matriisin kokoamisesta ja konvergenssista. Yksinkertaisimmillaan lokitieto näyttää seuraavan tapaiselta:

```
-----
TEMPERATURE ITERATION          1
-----
```

```
Starting Assembly...
Assembly done
iter:  1 Assembly: (s)  0.52  0.52
iter:  1 Solve: (s)   0.03  0.03
Result Norm : 10.0406190118395
Relative Change : 3.790865626331908E-010
```

Seuraavat kuvat esittävät täysin kehittyneitä

lämpötila- ja nopeuskenttiä hetkellä $t = 400$.



Ratkaisijan palvelut

ELMER Solverin lähdekoodi on avoin. Valmiisiin ratkaisijoihin voi lisätä oman sovelluksen kannalta hyödyllisiä piirteitä, ja uusia yhtälöratkaisijoita on joustavaa lisätä.

Ohjelmoijalle ovat käytössä FEMin peruspalvelut elementtityyppeihin, kantafunktioihin, numeeriseen integrointiin, globaalin matriisin kokoamiseen ja reunaehtoihin liittyen. Elementteihin liittyviä tietoja (esimerkiksi solmupisteiden koordinaatit) ja eri parametrien kyselyä varten ohjelmakoodissa on omat rutiininsa.

ELMER Solverin tietorakenteet ja lähdekoodin modulaarisuus on toteutettu siten, että uutta yhtälöratkaisijaa kirjoitettaessa (oleellisesti jäykkymatriisin kokoaminen ja linearisointimenetelmien valinta) esimerkiksi ratkaisun aikana käytettävät elementtityypit ja numeeriset menetelmät ovat avoimia.

Lisätietoja

Lisätietoja ELMER Solverista ja ELMERistä voi tiedustella Juha Ruokolaiselta, puh. (09) 457 2723, sähköposti Juha.Ruokolainen@csc.fi. Ohjelmistojen asentamiseksi omalle koneelle tehdään CSC:n kanssa erillinen käyttösopimus. Uusinta ELMER-versiota voi tiedustella Jari Järviseltä, puh. (09) 457 2002, sähköposti Jari.Jarvinen@csc.fi. Akateemisille käyttäjille ELMER on maksuton.

Lisätietoja elementtimenetelmästä saa esimerkiksi CSC:n julkaisemasta oppaasta [HHL99]. *ELMER User's Guide* valmistuu kesän aikana.

Kirjallisuutta

- [RS99] Juha Ruokolainen ja Ville Savolainen, ELMER Post -visualisointiohjelmisto, @CSC, 1/2000, sivut 27–28.
- [HHL99] Juha Haataja, Jussi Heikonen, Yrjö Leino, Jussi Rahola, Juha Ruokolainen ja Ville Savolainen, *Numeeriset menetelmät käytännössä*. CSC–Tieteellinen laskenta Oy, 1999.