



ELMER

-predstavitev in uporaba na HPC-

Kampus Šola HPC 2014

Fakulteta za strojništvo in FIŠ Novo mesto

7–11 July 2014

mag. Andrej Vihtelič
andrej.vihtelic@planet.si

ELMER

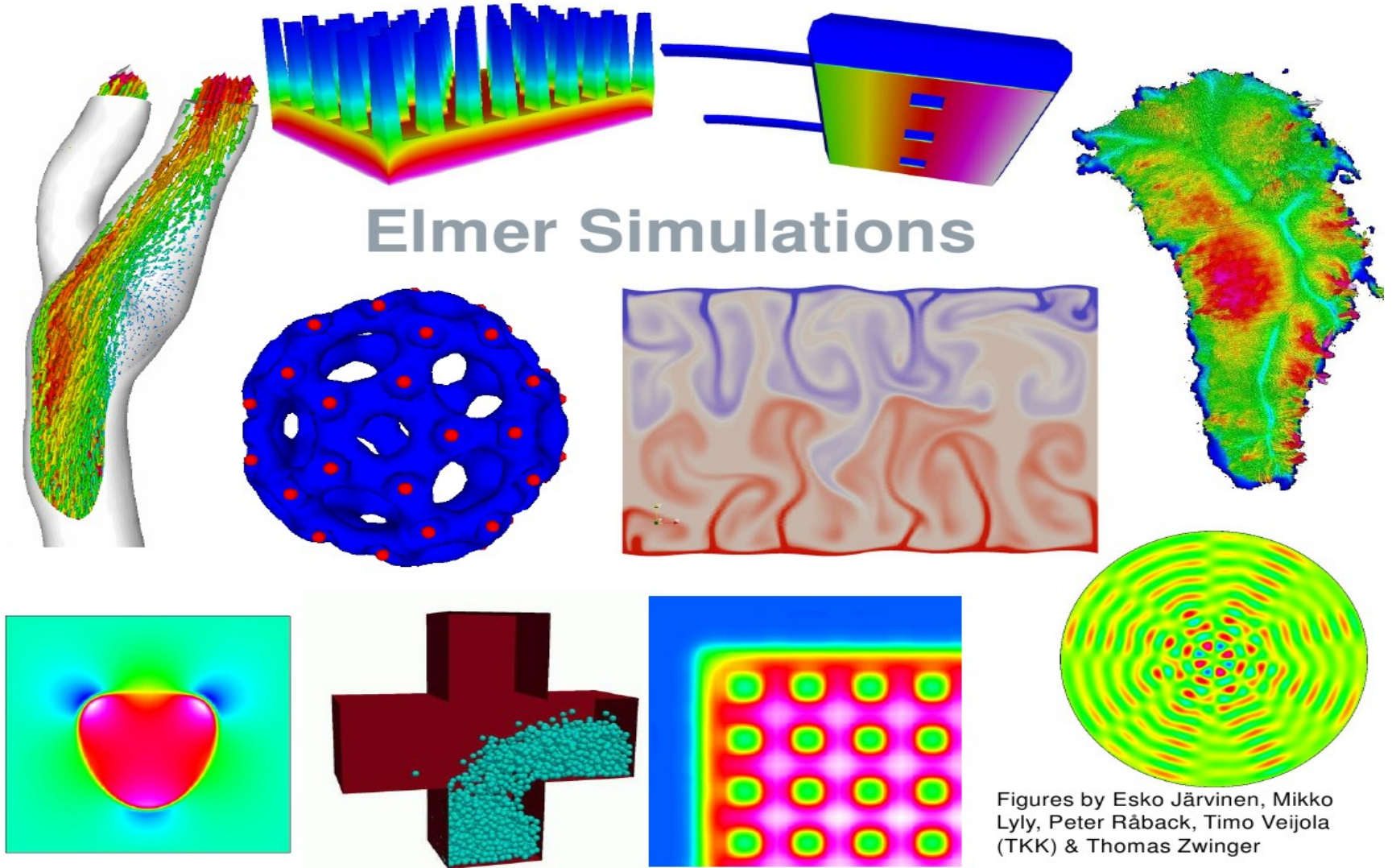
Elmer oziroma Elmer FEM je odprtokodna programska oprema za multi-fizikalne simulacije z metodo končnih elementov.

Razvit je bil v CSC (CSC- IT Center for Science Ltd) iz Finske, v sodelovanju z Finskimi univerzami, raziskovalnimi laboratoriji in industrijo. Razvoj se je začel leta 1995, leta 2005 pa je bil objavljen kot prostokodna programska oprema in razvoj Elmerja je tako postal mednaroden.

Veljajo pravila GNU General Public License (GPL), različica 2 ali kasnejša.

Programska oprema deluje na Unix in in tudi Windows platformah in se lahko prevede s pomočjo številnih prevajalnikov. ElmerSolver se lahko uporablja tudi v vzporednem načinu na platformah, ki podpirajo MPI.

ELMER



Elmer Simulations

Figures by Esko Järvinen, Mikko Lyly, Peter Råback, Timo Veijola (TKK) & Thomas Zwinger

ELMER

Fizikalni modeli vključeni v program Elmer:

- prenos toplote kondukcija, radiacija in fazna sprememba
- dinamika tekočin Navier-Stokes (2&3D), Stokes in Reynolds, k- ϵ model
- elastičnost generalna elastična enačba (anizotropna, lin.&non.lin.),
▫ dimenzijsko reducirani modeli za plošče in lupine
- akustika Helmholtz, lineariziran Navier-Stokes,
- elektro magnetizem elektrostatika, magnetostatika, indukcija
- species transport generična konvekcijsko-difuzična enačba
- mikrofluidi pogoji zdrsa, Poisson-Boltzmann
- Levelset metoda Eulerjevi brezrobni problemi
- kvantna mehanika teorija Kohn-Sham
- ...

Modeli so opisani z parcialnimi diferencialnimi enačbami, katere Elmer rešuje z metodo končnih elementov (MKE).

ELMER

Fizikalni modeli so opisani z parcialnimi diferencialnimi enačbami, katere Elmer rešuje z metodo končnih elementov (MKE).

$$[\mathbf{K}]\{\mathbf{u}\} = \{\mathbf{F}\} \quad \Rightarrow \quad \{\mathbf{u}\} = [\mathbf{K}]^{-1}\{\mathbf{F}\}$$

Property Behavior Action

Unknown

	Property $[\mathbf{K}]$	Behavior $\{\mathbf{u}\}$	Action $\{\mathbf{F}\}$
Elastic	stiffness	displacement	force
Thermal	conductivity	temperature	heat source
Fluid	viscosity	velocity	body force
Electrostatic	dielectric permittivity	electric potential	charge

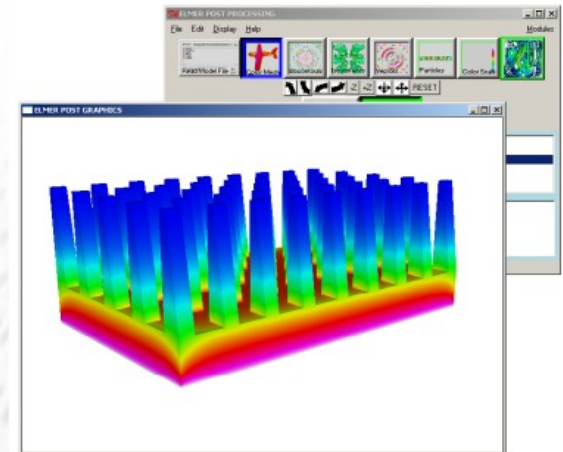
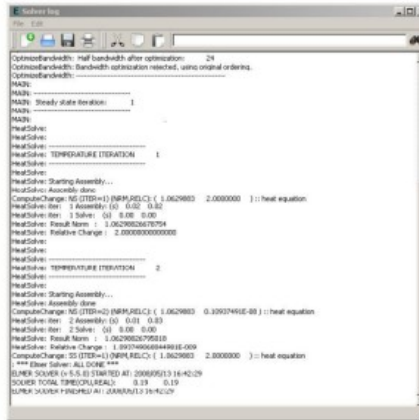
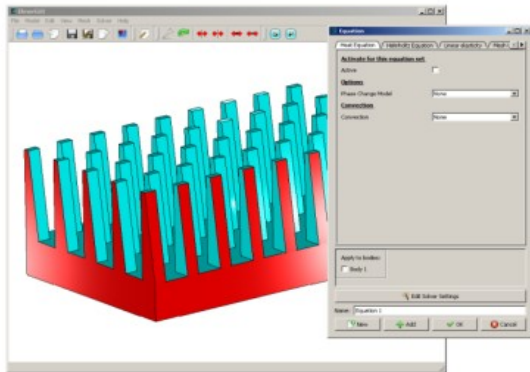
ELMER

Programi paketa Elmer (se lahko uporabljajo samostojno - razen ViewFactors):

Program	Namen
ElmerGUI	Predprocesor: omogoča definicijo fizikalnega modela in robnih pogojev. Iz ElmerGUI-a se kličejo tudi drugi programi.
ElmerSolver	Program za reševanje predhodno definirane modela.
ElmerSolver_mpi	MPI verzija ElmerSolverja
ElmerPost	Postprocesor: omogoča vizualizacijo rezultatov.
ElmerGrid	Utility program za generacijo enostavnih mrež, enostavnejšo manipulacijo mrež in razdelitev mreže za paralelno reševanje ali za uvoz mrež ustvarjenih z drugim generatorji mrež.
ElmerFront	star grafični vmesnik – zamenjal ga je ElmerGUI se več ne razvija.
Mesh2D	Deaunay triangulator – privzet generator za prilagodljive primere
ViewFactors	Uporablja pri izračunu določenih radiacijskih problemov,

ELMER

Elmer – A finite element software for multiphysical problems



ElmerGUI + ElmerSolver + ElmerPost
ElmerGrid
ElmerFront

ELMER

ElmerSolver oziroma ElmerSolver_mpi predstavljata jedro paketa

Paket programov Elmer ne vključuje programa za generiranje geometrije.

Vse programe lahko kličemo tudi iz programa ElmerGUI

Elmer omogoča uporabo alternativnih programov za pred- in post-procesiranje.

Predprocesiranje – npr: Netgen, Ansys, Abaqus, Fidap, Comsol, Gmsh, ...

Postprocesiranje – npr.: paraview, visit, ..

ELMER

ElmerSolver – pomembne vodne datoteke:

Ukazna datoteka

*.sif

Generirana z ElmerGUI ali tekst editorjem

Datoteke mreže

mesh.* - locirane v enem direktoriju (serial concept)

mesh.header

mesh.nodes

mesh.elements

mesh.boundary

ElmerSolver izhodna datoteka

*.ep ... in vhodna za ElmerPost

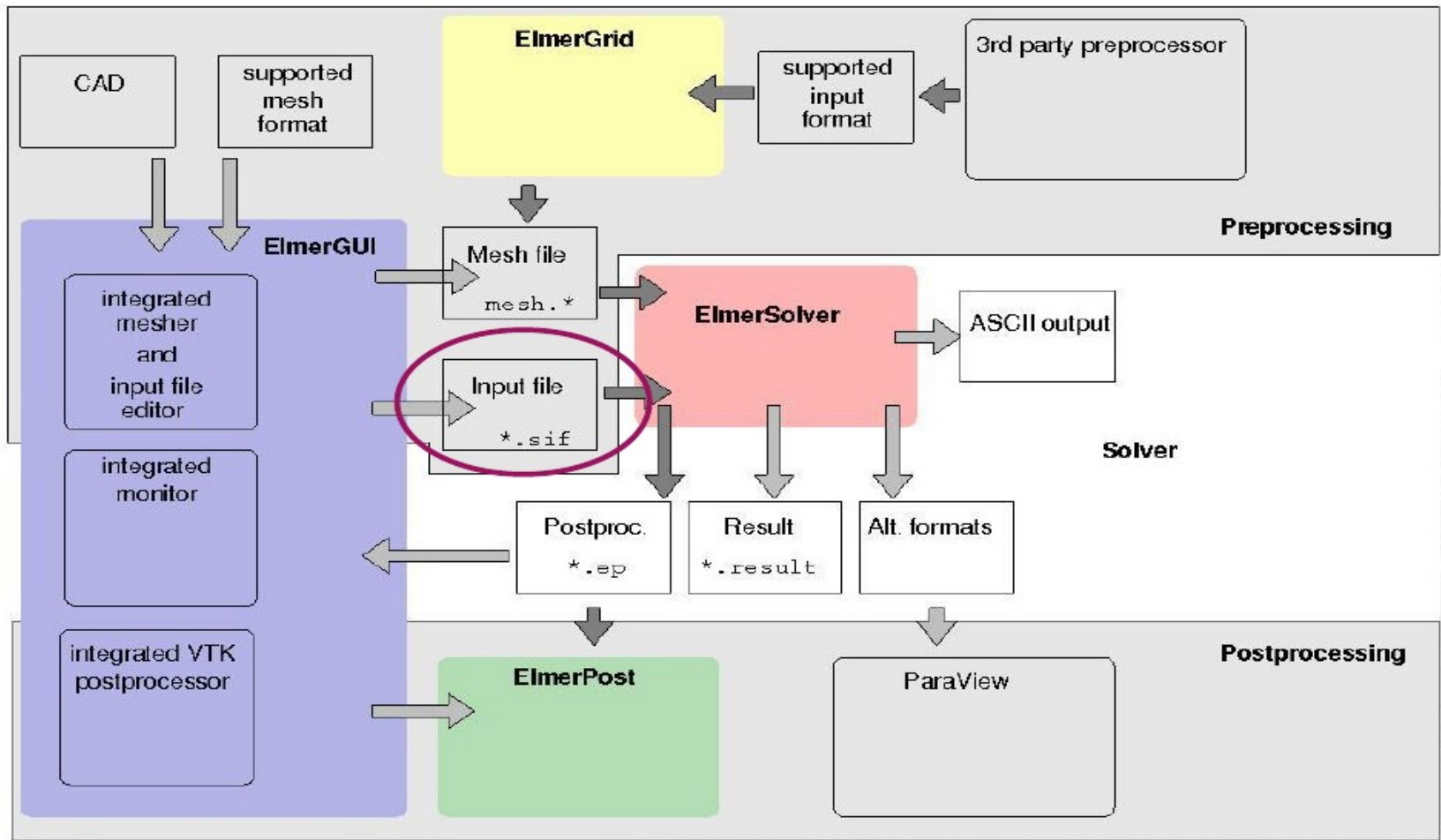
ali

*.vtu ... in vhodna za ParaView, VisIt,...

*.vtk in *.Gid format

ELMER

Elmer - Modules



ELMER

Datoteke z končnico SIF (*.sif)

*.sif datoteka

Je vhodna datoteka programa ElmerSolver oz ElmerSolver_mpi

Vsebuje potrebne podatke za izračun

Lahko jo ustvarimo s programom ElmerGUI (tudi z ElmerFront)...

Sif datoteko lahko napišemo tudi v tekst editorju

Pravila:

Komentarji se začno z !

Ne smemo uporabljati tabulatorjev

Poglavje se vedno konča z ključno besedo END

Parametri (razen iz Elmer baze ključnih besed) morajo imeti določen tip (must be casted) , kot npr: Integer, Real, Logical, String, File

Parametername(n,m) nakazuje na polje dimenzij $n \times m$

ELMER

Vhodna datoteka ElmerSolverja je razdeljena na poglavja:

- Header
- Constants
- Simulation
- Solver
- Body
- Equation
- Bodyforce
- Material
- Initial Conditions
- Boundary Conditions

Vsebina posameznega poglavja je med gornjo ključno besedo in ključno besedo END: Nekatera poglavja z gornjo ključno besedo se lahko tudi ponavljajo, vendar takrat za ključno besedo sledi zaporedna številka poglavja npr 'Solver 2'..

ELMER

Zgradba oziroma poglavja SIF datoteke

Poglavje	Določa
Header	pot in ime direktorija mreže
Constants	konstante dosegljive podprogramom solverjev in robnih pogojev
Simulation	deklaracije za simulacijo, kot npr: izbiro koordinatnega sistema, določitev časovne odvisnosti simulacije, ime vhodne in izhodne datoteke, ipd
Solver	deklaracije za izbran način reševanja sistema v sif datoteki lahko definiramo več poglavij: Solver 1, Solver 2, ...
Body	dodeli enačbe, material, obremenitve in začetne pogoje telesu v sif datoteki lahko definiramo več poglavij: Body 1, Body 2, ...
Equation	aktivne načine reševanja (solverje) in njihovo definicijo
Bodyforce	za izbran način reševanja določa desno stran enačbe (obtežbo) obtežba je lahko tudi odvisna funkcija (MATC)
.....	

ELMER

Zgradba oziroma poglavja SIF datoteke - nadaljevanje

Poglavje

Določa

.....

Material

določa materialne lastnosti telesa

Številčijo se od 1 do n materialov

Materialne lastnosti so lahko skalar ali tenzor ipd

Lahko so podane kot odvisne funkcije ali izrazi (MATC)

Initial Condition

Določa začetne pogoje telesa

Številčijo se od 1 do n začetnih pogojev

Lahko so podane kot odvisne funkcije ali izrazi (MATC)

Boundary Conditions

Določa pogoje robov z podanimi robnimi pogoji.

Številčijo se od 1 do n robnih pogojev.

Lahko so podane kot odvisne funkcije ali izrazi (MATC)

ELMER

ELMER MATC knjižnica za numerično evaluacijo matematičnih izrazov

Uporabljamo v:

sif datoreki za uporabo v ElmerSolverju (tudi preko ElmerGUI) ali ukazni vrstici postprocesorja

Primeri uporabe:

Enostavno vrednotenje numeričnega izraza:

Viscosity Exponent = Real MATC "1.0/3.0"

Viscosity Exponent = Real \$1.0/3.0

Kot izraz v odvisnosti od spremenljivke:

Heat Capacity = Variable Temperature

Real MATC "2.1275D03 + 7.253D00*(tx - 273.16)"

Kot izraz v odvisnosti od večih spremenljivk

Temp = Variable Latitude, Coordinate 3

Real MATC "49.13 + 273.16 - 0.7576 * tx(0) - 7.992E-03 * tx(1)"

Kot funkcija ali subrutina definirana na začetku sif datoteke

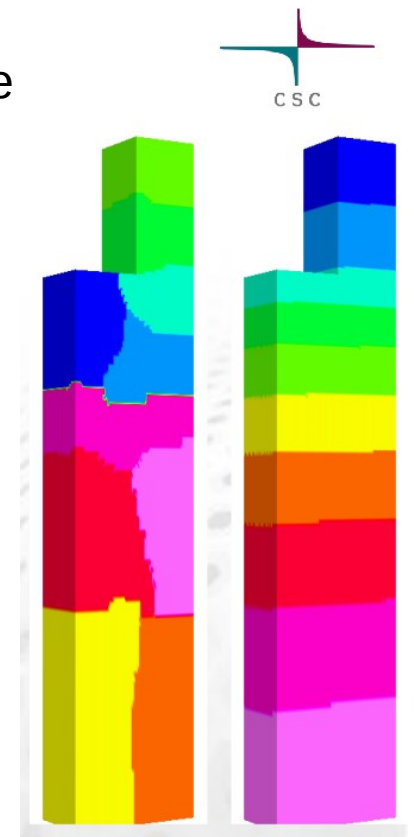
Glej Elmer dokumentcijo

ELMER

ElmerGrid

Utility program za generacijo enostavnih mrež, enostavnejšo manipulacijo mrež in razdelitev mreže za paralelno reševanje ali za uvoz mrež ustvarjenih z drugim generatorji mrež:

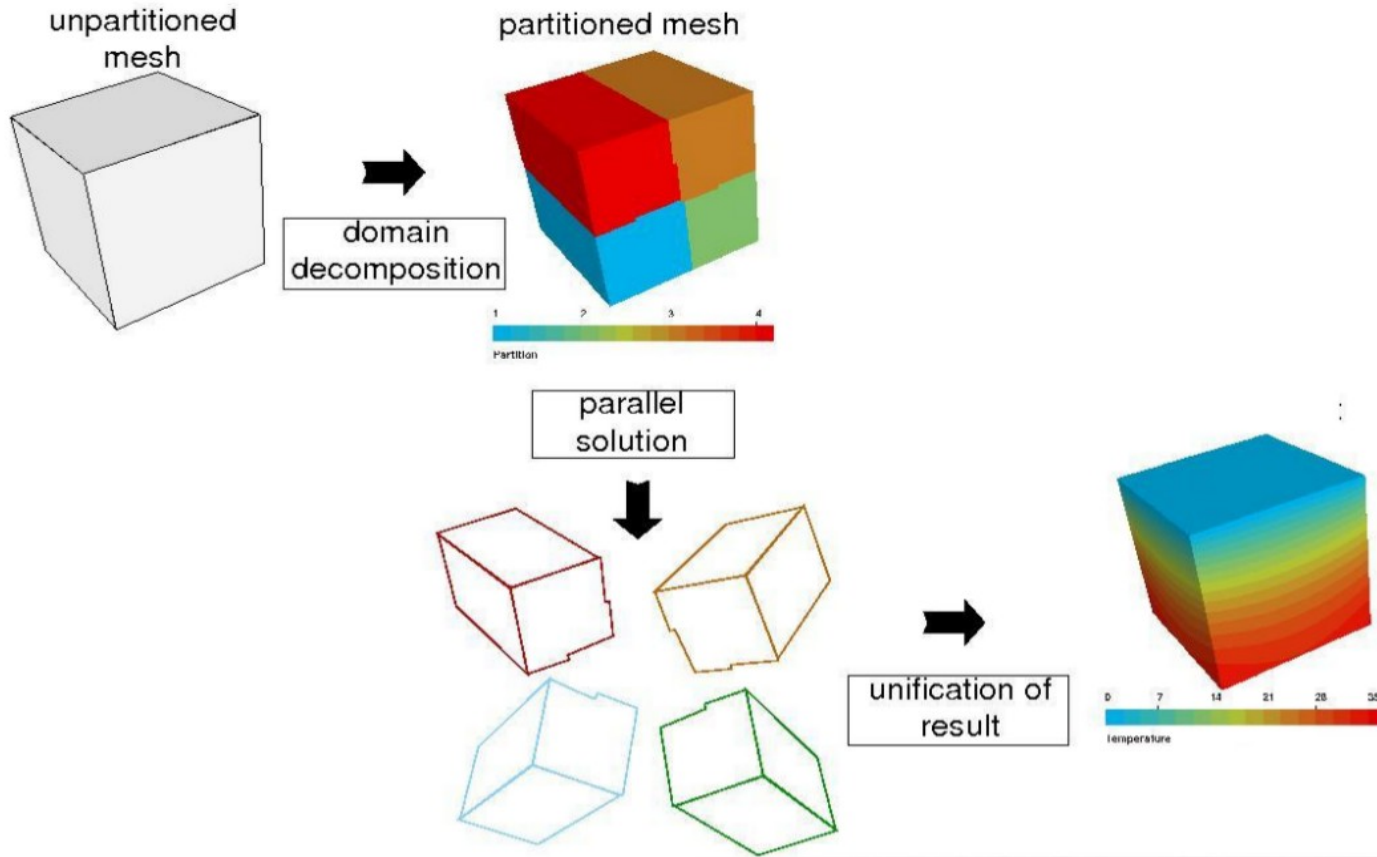
- Kreiranje 2D in 3D strukturirane mreže
 - temelječe na pravokotnih oblikah
 - razširjanje, rotiranje
 - enostavni algoritmi
- Uvoz mreže
- Približno 10 različnih formatov:
 - c
- Manipulacija mreže
 - povečevanje/zmanjševanje, rotacija, premik
- Delitev mreže
 - Delitev na osnovi enostavne geometrije
 - Metis partitioning (\$ ElmerGrid 1 2 step -metis 10)
- Uporaben preko ElmerGUI (ne za vse funkcije)



ELMER



Parallel Concept of Elmer



ELMER

Elmer - struktura mreže za parralelne simulacije:

- ime_direktorija_mreze/partitioning.N/
 - Header file:
 - part.1.header, part.2.header. ..., part.N.header
 - Vozlišča (nodes)
 - part.1.nodes, part.2.nodes, ..., part.N.nodes
 - Elemnti (elements) - (bulk)
 - part.1.elements, part.2.elements, ..., part.N.elements
 - Mejni elementi (boundary elements)
 - part.1.boundary, part.2.boundary, ..., part.N.boundary

Med particijami deljena vozlišča (shared nodes)

- part.1.shared, part.2.shared, ..., part.N.shared

-

ELMER

Elmer – kreiranje mreže za parralelne simulacije:

- Potrebujemo običajno mrežo (serial mesh)

Običajni način delitve mreše

- običajna mreža (serial mesh) -> ElmerGrid -> paralelna mreža
- Sintaksa (N je število procesorjev)
- ElmerGrid 2 2 existing_meshdir [patooption]
- ElmerGrid 2 2 existing_meshdir –metis N 3 –partdual
- Tehnike delitve
 - Vzdlž osi koordinatnega sistema (enostavna geometrija in tipologija)
 - Z uporabo METIS knjižnice
- Primere tehnik delitve podajamo v nadaljevanju

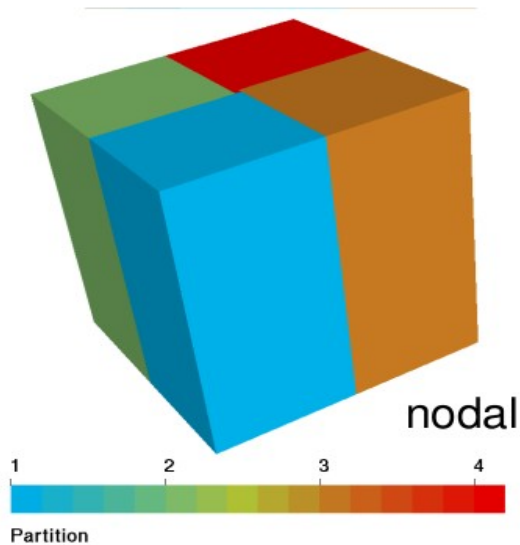
ELMER



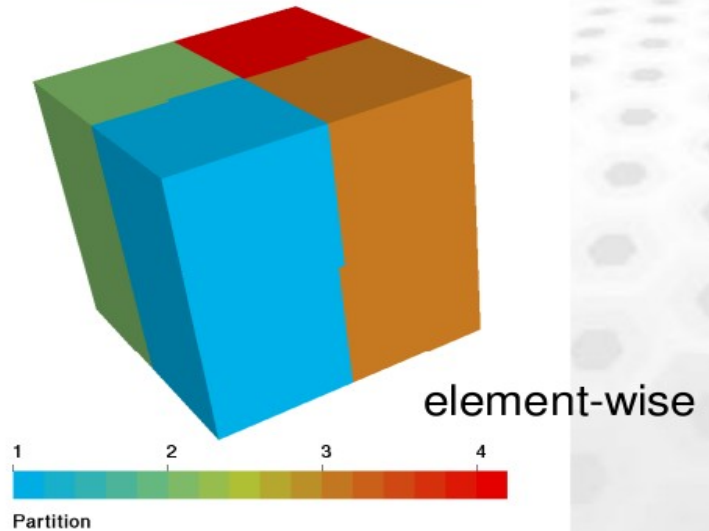
Elmer parallel mesh

Directional decomposition:

```
ElmerGrid 2 2 dir -partition  $N_x$   $N_y$   $N_z$   $F$ 
```



```
-partition 2 2 1 0
```



```
-partition 2 2 1 1
```

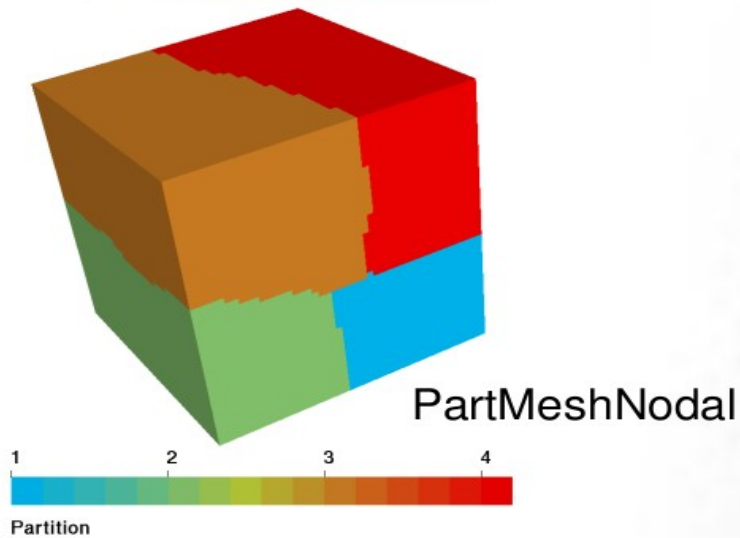
ELMER



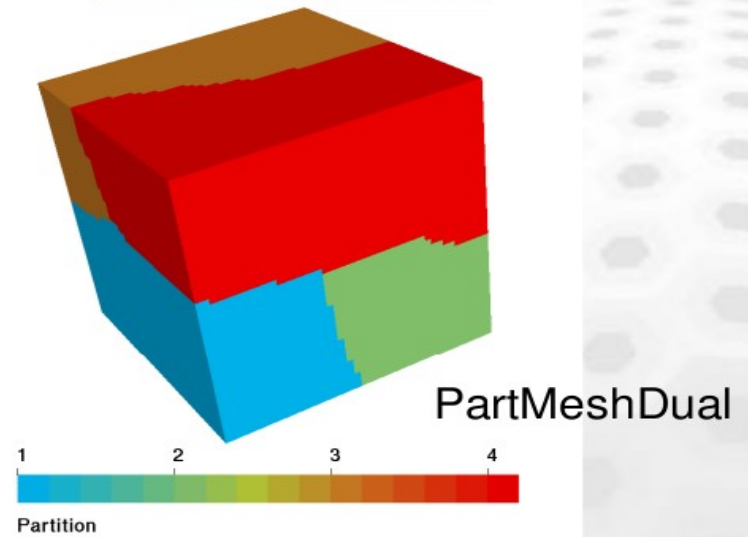
Elmer parallel mesh

METIS:

```
ElmerGrid 2 2 dir -metis N Method
```



```
-metis 4 0
```



```
-metis 4 1
```

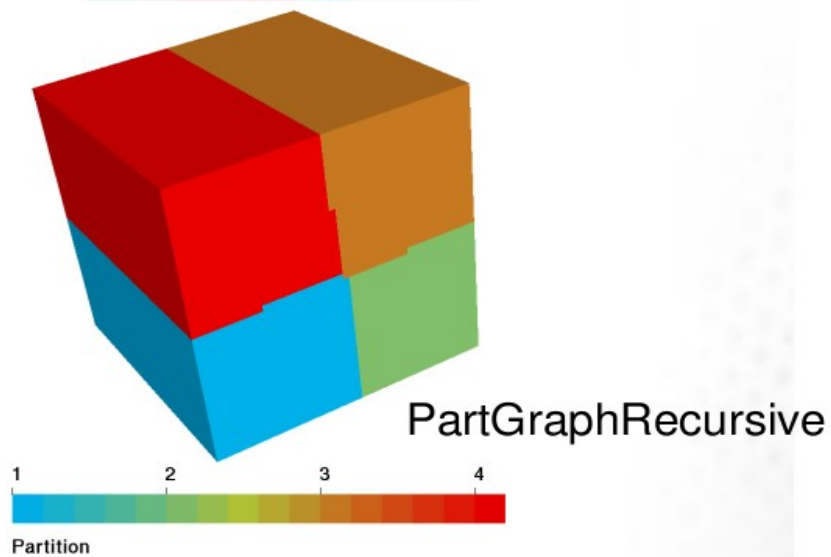
ELMER



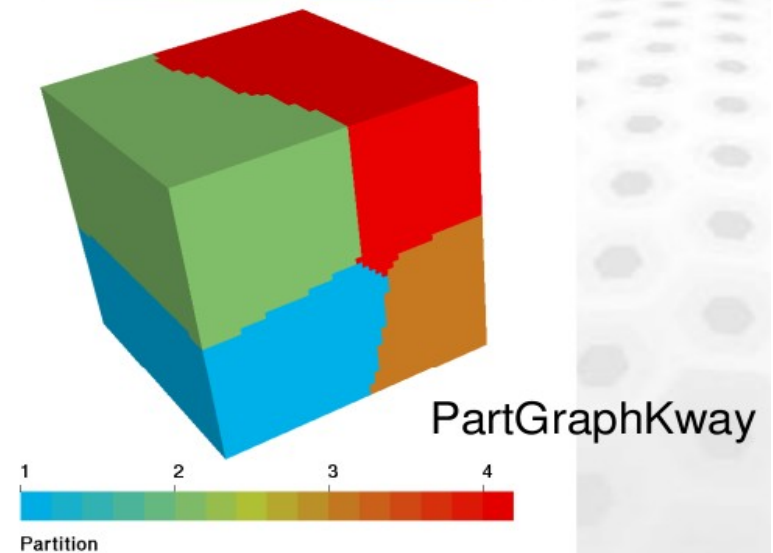
Elmer parallel mesh

METIS:

```
ElmerGrid 2 2 dir -metis N Method
```



```
-metis 4 2
```



```
-metis 4 3
```

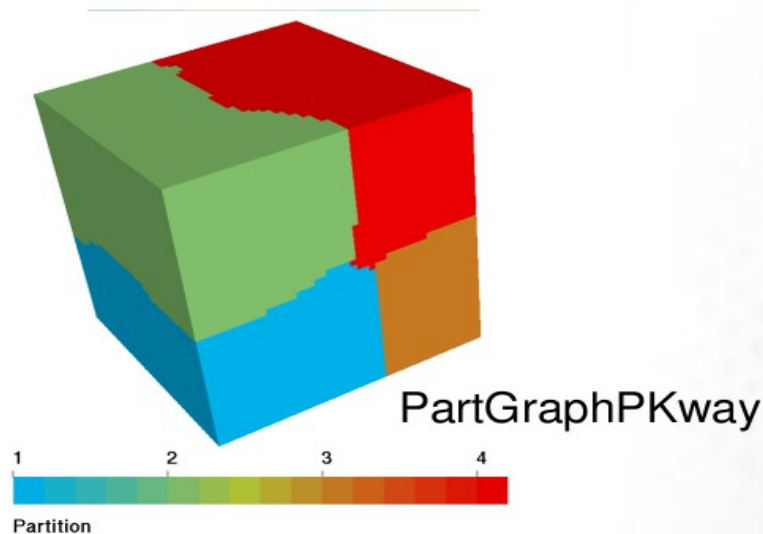
ELMER



Elmer parallel mesh

METIS:

```
ElmerGrid 2 2 dir -metis N Method
```



METIS knjižnica ima še druge metode:

- hallo
- indirect
- periodic
- partoptim
- partbw

```
-metis 4 4
```

ELMER

ElmerSolver parallel (ElmerSolver_mpi)

- Na prelogu ga zaženemo z ukazom (kjer je N število procesorjev):
bsub -n N ElmerSolver_mpi

Potrebujemo na N delov deljeno mrežo

N mora biti enako številu procesorjev uporabljenih v računu

- Potrebuje datoteko ELMERSOLVER_STARTINFO,
- ki vsebuje ime ukazne sif datoteke primera

- Opcijske knjižnice:
 - Hypre
 - MUMPS

ELMER

Elmer aktiulana dokumentacija

ElmerguiManual.pdf	Podroben opis grafičnega vmesnika
ElmerSolverManual.pdf	Opis možnosti solverja
ElmerModelsManual.pdf	Opis fizikalnih modelov, ki jih rešuje solver
ElmerTutorials.pdf	Primeri.
ElmerGridManual.pdf	Navodila za uporabo programa ElmerGrid
MATCManual.pdf	Navodila za uporabo jezika MATC vgrajenega v ElmerSolver in ElmerPOst
ElmerOverview.pdf	Kratek pregled Elmerja

ELMER

Elmer linki:

CSC – IT Center for Science

<http://www.csc.fi/english>

Elmer stran : <http://www.csc.fi/english/pages/elmer> (video prezentacija)

Elmer dokumentacija: <http://www.csc.fi/english/pages/elmer/documentation>

<http://www.elmerfem.org/>

Elmer Forum: <http://www.elmerfem.org/forum/index.php>

Elmer Wiki: http://www.elmerfem.org/elmerwiki/index.php?title=Main_Page

Elmer Doxygen: <http://www.elmerfem.org/doxygen/>

Elmer/ICE: <http://elmerice.elmerfem.org/>

YouTube <http://www.youtube.com> (išči elmerfem)

ELMER

HVALA ZA POZORNOST

mag. Andrej Vihtelič
andrej.vihtelic@planet.si