

Goethe-Center for Scientific Computing (G-CSC)
Goethe-Universität Frankfurt am Main

Neurobioinformatik

(Übung NBI, WS 2018/19)

M. Huymayer, J. Wang, Dr. A. Nägel, Dr. M. Hoffer

Aufgabenblatt 8 Abgabe Montag, 4.2.2019, 16h

Im letzten Blatt haben Sie sich mit der Erstellung von räumlichen Gittern mit ProMesh beschäftigt. In diesem Blatt sollen Sie auf mit ProMesh erzeugten Gittern rechnen und erste Erfahrungen mit der Simulationsumgebung UG4 sammeln. Um Ihnen die Handhabung mit UG4 zu erleichtern, stellen wir Ihnen die Software mittels VRL-Plugin zur Verfügung. Laden Sie das VRL Projekt `ug4luashell-exported.vrlp` von der Homepage herunter und öffnen es mit VRL Studio. Die Plugins werden automatisch installiert. Das Projekt können Sie nach Neustart von VRL-Studio erneut öffnen. Laden Sie auch `ugroot.zip` herunter und entpacken es. In dem VRL-Projekt `ug4luashell-exported.vrlp` müssen Sie in der Komponente `UGConfigurator` die Pfade so anpassen, dass Ihr `ugroot` Ordner ausgewählt ist und danach noch `invoke` drücken. Passen Sie auch alle weiteren Pfade an. Nutzen Sie `ConvectionDiffusion` um das Problem aus der Vorlesung $-\Delta u = f$ zu lösen. In der Konvektions-Diffusionsgleichung

$$\partial_t(m \cdot c) - \nabla \cdot (D \nabla c) + r \cdot c = f$$

können Sie die Koeffizienten wie folgt setzen:

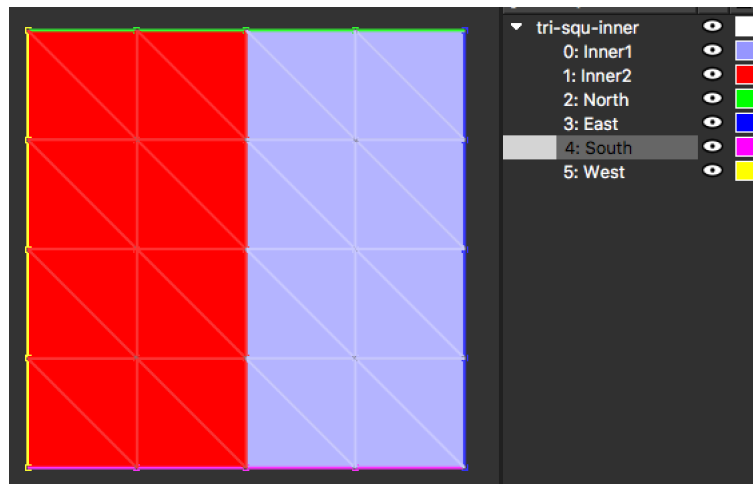
- m mit `set_mass_scale(double)`,
- D mit `set_diffusion(double)` bzw. `set_diffusion(matrix)`,
- r mit `set_reaction_rate(double)` sowie
- f mit `set_source(double)`.

Aufgabe 1 (2+6+1+7 P)

Laden Sie das Lua-Skript `laplace.lua` von der Vorlesungshomepage herunter und bearbeiten Sie es in dem Lua Editor von VRL-Studio.

- a) Erstellen Sie das dargestellte regelmäßige Dreiecksgitter mit 5×5 Knoten (Breite: 1, Höhe: 1, Zentrum: (0.5, 0.5)).

Nutzen Sie dazu das Tool `Remeshing-Triangulation-ConvertToTriangles` direkt nach dem Erstellen des Quadrats. Um die Richtung der Kanten wie auf der Abbildung zu erreichen, nutzen Sie: `Selection-Edges-Selection Edges by Direction` und `Remeshing-Edges-Swap Edges`. Erstellen Sie für den Innenraum 2 Subsets und benennen Sie die Subsets entsprechend der folgenden Abbildung: Speichern Sie die Geometrie unter `tri-squ-inner.ugx` ab.



Achten Sie auf die korrekte Zuweisung der Subsets und darauf dass jeder Knoten, jede Kante und jedes Flächenelement einem Subset zugewiesen sind.

- b) Passen Sie im Lua Skript die rechte Seite des Modells an, indem Sie in Zeile 77 die Anweisung

```
elemDisc:set_source(0)
```

durch

```
elemDisc:set_source(1)
```

ersetzen (statt $-\Delta u = 0$ betrachten wir also $-\Delta u = 1$). Für die östlichen Randwerte und westlichen Randbedingungen sollen folgende Dirichlet Randbedingungen gesetzt werden:

$$\text{West: } u(x = 0, y) = 0$$

$$\text{East: } u(x = 1, y) = 1$$

Passen Sie die Dirichlet Randbedingungen entsprechend im Skript an. Für die beiden Teilgebiete `Inner1` und `Inner2` soll sich außerdem der Diffusionstensor der Poisson-Gleichung unterscheiden. Legen Sie dazu sowohl für das Gebiet `Inner1` als auch `Inner2` ein Object `ConvectionDiffusion` an und setzen Sie den Diffusionstensor mit: `elemDisc:set_diffusion(double diffusion)`. Die Variable `diffusion` soll für `Inner1` auf 1 gesetzt werden und für `Inner2` variiert werden mit 0.01, 1 und 100.

Führen Sie das modifizierte Skript mit dem von Ihnen in Aufgabe 1 a erstellten Gitter zunächst ohne Verfeinerungen aus: In der Komponente `UGLuaShell` müssen Sie einen neuen Parameter setzen: wählen Sie die Funktion `set(String, double)` aus und setzen den Namen auf `numRefs` und den Wert zunächst auf 0.

Betrachten Sie die resultierende Matrix "Aufgabe1b_A2d.mat", sowie die rechte Seite "Aufgabe1b_rhs_laplace_2d.vec" mit dem `ConnectionViewer`. Nutzen Sie dazu entweder die VRL Komponente `ConnectionViewer Component` oder starten Sie den `ConnectionViewer` unter VRL Tools. Wie sieht der Stern im Zentrum (0.5, 0.5) aus. Wie in Punkt (0.25, 0.5) und Punkt (0.75, 0.5)? Vergleichen Sie die Matrix und rechte Seite qualitativ mit der in der Vorlesung besprochenen Finite Differenzen Methode. Wo sehen Sie Parallelen?

- c) Wie verhalten sich Matrix und rechte Seite in Abhängigkeit von der Gitterweite h , wenn Sie das Problem mit höherer Feinheit lösen (-numRefs 1, -numRefs 2, -numRefs 3, -numRefs 4)? Mit welchem Faktor müssten Sie A multiplizieren, damit die Matrix mit der der aus der Vorlesung bekannten zugehörigen Finite Differenzen Methode übereinstimmen würde? Geben Sie diesen Faktor in Abhängigkeit von `numRefs` für das Gitter an.
- d) Wiederholen Sie den Test mit Viereckselementen statt Dreieckselementen. Beschreiben Sie den Stern in denselben Punkten. Geben Sie die resultierenden `ConnectionViewer` Dateien als "Aufgabe1d_quadr_A2d.mat" und "Aufgabe1d_quadr_rhs_laplace_2d.vec" ab.

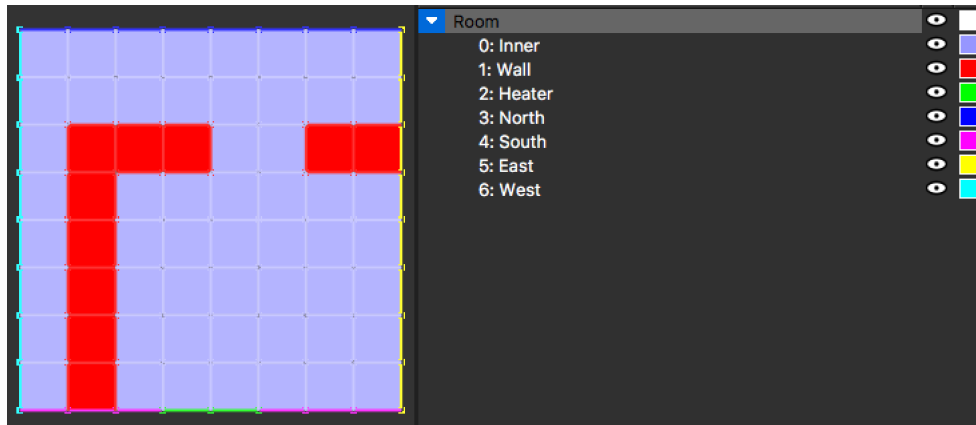
Aufgabe 2 (3 + 4 + 4 + 2 + 3 P)

In dieser Aufgabe sollen Sie sich der Wärmeleitungsgleichung zuwenden:

$$\frac{\partial}{\partial t}u(t, \mathbf{x}) - \alpha\Delta u(t, \mathbf{x}) = 0 \quad (1)$$

wobei Sie diese in zwei Raumdimensionen lösen. Es geht dabei darum die Wärmeverteilung in einem Raum zu untersuchen.

- a) Erstellen Sie nachfolgende Geometrie in ProMesh, mit 5×5 Knoten (Breite: 1, Höhe: 1, Zentrum: $(0.5, 0.5)$).



Erstellen Sie eine zweite Geometrie, indem Sie die Lücke in der Wand durch eine Tür ersetzen. Bezeichnen Sie dieses Subset mit "Door".

- b) Implementieren Sie nun die Wärmeleitungsgleichung in dem lua Skript "heat_equation.lua", das wir Ihnen zur Verfügung gestellt haben. Implementieren Sie die Diskretisierung für die beiden Bereiche. Bei Ihrem α handelt es sich dabei um die Temperaturleitfähigkeit, die für unterschiedliche Materialien unten angeführt wurde. Um die zeitliche Veränderung zu simulieren, setzen Sie bitte $m = 1.0$. Als Randbedingung für **East** und **South** sollen Neumann-Null-Randbedingungen gelten. Für **North**, **West** und **Heater** setzen Sie Dirichlet-Randbedingungen:

$$\begin{array}{ll}
 \text{North:} & \text{temp}(x, y) = 4^{\circ}\text{C} & x \in [0, 1], y = 1 \\
 \text{West:} & \text{temp}(x, y) = 4^{\circ}\text{C} & x = 0, y \in [0, 1] \\
 \text{Heater:} & \text{temp}(x, y) = 30^{\circ}\text{C} & x \in [0.375, 0.625], y = 0
 \end{array}$$

Simulieren Sie zunächst die Wärmeverteilung im Raum ohne Tür. Setzen Sie den Anfangswert für die Luft (Inner) auf 4°C und die Wand auf 0°C . Insgesamt sollen Sie einen Tag (24 h) simulieren. Ihre Wand sei aus Beton. Nutzen Sie folgende Temperaturleitfähigkeiten:

| Material | α in $10^{-6}m^2/s$ |
|-----------------|----------------------------|
| Beton | 0.994 |
| Luft | 20 |
| Holz | 0.12 |

Nutzen Sie eine Schrittweite von 0.01 h.

- c) Simulieren Sie nun einen abgeschlossenen Raum, d.h. ihr Raum ist durch eine Holztür von dem Außenbereich getrennt. Der Anfangswert Ihrer Tür soll dabei auf 4 °C gesetzt werden. Was beobachten Sie im Vergleich zu der Simulation aus Aufgabe 1b? Beschreiben Sie Ihre Beobachtung.
- d) Berechnen Sie den stationären Zustand.
- e) Untersuchen Sie Ihre Lösung mit unterschiedlichen Verfeinerungsgraden: 2, 3 und 4. Nutzen Sie in ParaView die Funktion Warp by Scalar (Skalierungsfaktor 0.1) und lassen Sie sich das Gitter als "Surface with Edges" anzeigen. Vergleichen Sie die unterschiedlichen Lösungen. Was können Sie beobachten?

Anmerkung: Senden Sie den Quelltext als VRL-Studio Projekt (.vrlp Datei) und als Lua Skripte (.lua Datei), die erstellten Geometrien (.ugx), die ConnectionViewer Dateien (.mat und .vec), ParaView Ergebnisse als Screenshots und die Antworten zu den Fragen am besten als Word oder PDF Datei. Plots senden Sie bitte als pdf oder png Dateien und Daten Ausgaben als Text Dateien.

Senden Sie Ihre Lösungen an practical.sim1@gcsc.uni-frankfurt.de. Abgabe bis spätestens Montag, 4.2.2019, 16h.