Manual CEOS

Autores: Bruno Klahr, Vinícius Rios Fuck, Thiago Carniel, Paulo Bastos, Jan Michel, Maurício Lazzari, Tarcísio Fischer

Data: 06/07/2017

Baixar

Versão estável do programa: CEOS-master

<https://github.com/grante-ufsc/CEOS>

**Configuração inicial projeto para executar solver e pós-processamento**

VisualStudio\_Intel.vproj

Project > VisualStudio\_Intel Properties

Debugging > Command Arguments

/settings Settings.dat /solve /postprocess post\_processing.post

Configuration > Debug > Command Arguments

/settings Settings.dat /solve /postprocess post\_processing.post

Curiosidades

Rotinas matemáticas advindas de um pacote da Intel MKL

**Recomendações**

Editor de texto: notepad ++ (<https://notepad-plus-plus.org/download/v7.4.2.html>)

CAD: SolidWorks

Pré Processamento: HyperMesh

Fortran: Intel Parallel Studio 2015

Compilador: Visual Studio 2012 ( Para escrita do código pode ser utilizado CodeBlocks)

Pós processamento: HyperView

**Observações quanto à utilização da Biblioteca OpenMP**

o Há configurações necessárias a serem realizadas no Visual Studio.

o Deve ser definido em Project – Properties:

§ Fortran

· Optimization: Maximize Speed (/O3)

· Prepocessor: OpenMP - Yes

· Language – Process OpenMP: Generate Parallel Code

· Libraries: Runtime Library: Multithread DLL ou Multithread: (Teste!!!)

· Libraries: Math Kernel Library: Parallel

Observações

Incompressibilidade, tetra10, K=10^4\*mi

\*\*\*\*\*\*\*Geometrias exportadas do CAD, \*.igs (IGES), \*.x\_t (PARASOLID) atentar para unidades

Geometrias exportadas do CAD, STEP 214

1. **Conteúdos das pastas do CEOS:**

* Checker: Possui arquivos de casos que são utilizados para checagem do programa após alguma modificação ou implementação;
* CodeBlocks: Possui o layout do CEOS para o CodeBlocks ( Esse programa pode ser utilizado para implementação, devido ou não preferência do programador).
* InterfaceAbaqus: Arquivos para interação com o Abaqus.
* InterfaceAnsys: Arquivos para interação com o Ansys.
* SourceCode: Possui os códigos fonte.
* VisualStudio\_Intel: Pasta do programa principal. Possui o arquivo MAIN do CEOS (VisualStudio\_Intel). Dentro da pasta VisualStudio\_Intel vão todos os dados de entrada do programa e onde são salvos os resultados.

1. **Noções gerais**

PARDISO: solver de sistema linear da Intel, roda em paralelo, esparso, full

Newton\_full: atualiza matriz em cada incremento

Settings.dat – configurações gerais do programa

\*.cdb – malha e condições de contorno gerada em Hypermesh (formato Ansys)

Nr material (quando há materiais distintos, mesmo ID Hypermesh e Settings), nr nós, conectividade

Time\_Discretization.dat – evolução temporal

\*.tab – carregamento nodal imposto

Post\_Processing.post – Results (campo) – Cauchy, Displacement

Probe (pontual)

1. **Dados de entrada**
2. Settings

Arquivo Settings.dat que possui informações iniciais para entrada do programa CEOS.

Informações do Settings.

* Opções da Análise: Utilizar apenas as opções presentes no arquivo, apenas comentando e descomentando.
* Linear Solver: PARDISO (solver de sistema linear da Intel, roda em paralelo, esparso, full).
* Nonlinear Solver: Newton\_Raphson\_Full
* Informações do Material: Informa-se dados do modelo material.
  + Material ID: Número de identificação do material ( O ID do material deve ser correspondente ao material imposto na malha no HyperMesh)
  + Nome do material
  + Propriedades do modelo material: São colocadas as propriedades requeridas pelo modelo material implementado.
* Mesh and Boundary Conditions:
  + - Arquivo da malha, feito no HyperMesh. Utilizado o arquivo nome.cdb. Neste arquivo estão informações da malha e condições de contorno.
  + - Time Discretization: Arquivo Time\_Discretization.dat, possui informações de como serão os incrementos de carga. Deve ser especificado:
    - Number of Load Cases: Em quantos casos o carregamento é dividido.
    - Para cada caso colocar tempo inicial, final e em quantos steps será dividido.
* Multiscale Settings (Apenas se for realizado análise multiescala)
  + Ativar análise multiescala.
  + Ativar no mínimo dois materiais (Pois a malha será composta de dois materiais no mínimo).
  + Informar o modelo multiescala utilizado (Linear ou Taylor).
  + Informar detalhadamente as componentes do gradiente de deformação macroscópico.

1. Post\_Processing.post

Arquivo Post\_Processing.post diretivas para pós processamento dos resultados.

Informações arquivo Post\_Processing.post

* Post Processor = HyperView 12 / GiD 7 (Programa usado para pós-processamento)
* Results = Displacements, Cauchy Stress (histórico de campos a ser plotado)
* File Name = hypermesh\_results.hwascii (arquivo de resultados para pós-processar)
* Number of Probes = quantidade de históricos pontuais requerida

Valores Nodais

* Location = Node (local avaliado)
* File Name = \*.probe (arquivo de tabela de saída, 1a coluna série temporal)
* Variable Name = Cauchy Stress / Displacements (variável a ser criada)
* Node = 682

OU

Valores Ponto Gauss

* Location = Gauss Point
* File Name = \*.probe (arquivo de tabela de saída, 1a coluna série temporal)
* Variable Name = Cauchy Stress / Displacements (variável a ser criada)
* Element = 1
* Gauss Point = 1
* Components = All !1 , 5 , 9 ! (componentes armazenadas, mapeamento de Voigt)

Vetores

|  |
| --- |
| 1 |
| 2 |
| 3 |

Tensores Arbitrários

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 1 | 4 | 7 |
| 2 | 5 | 8 |
| 3 | 6 | 9 |

Tensores Simétricos

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 1 | 4 | 6 |
|  | 2 | 5 |
|  |  | 3 |

Microescala

* Location = Micro Structure
* File Name = Homogenized\_F.probe
* Variable Name = Deformation Gradient
* Components = All !1 , 5 , 9 !

Para reações

* Location = Nodal Force
* File Name = \*.probe (arquivo de tabela de saída, 1a coluna série temporal)
* Load Collector = Reaction Force (variável já criada num modelo no Hypermesh)
* HyperMesh File = Malha\_Fibra\_Reta\_3\_Passos.cdb (arquivo do modelo)

1. Geometria - SolidWorks

Geometria 3D criada em software CAD (recomendado SolidWorks).

Recomenda-se salvar a geometria como nome .step, pois não carrega informações de unidades. Outros formatos podem ser utilizados mas deve-se tomar o cuidado com as unidades.

1. Modelo (malha e condições de contorno) - HyperMesh 13

* 1. Ao iniciar o programa, utilizar a Interface do Ansys.

User Profiles > Ansys

* 1. Importação da geometria

File (menu opções, superior) > Import > Geometry

Seleciona arquivo, import.

Aba Model (árvore, esquerda no meio)

Renomear componente importado para Geometria

* 1. Geração da malha bidimensional

Criar na árvore de Entities (esquerda no meio) outro componente para fazer a malha, assim a malha não fica vinculada à geometria.

Botão direito Create > Component, nomear Malha2D

(se preciso, make current Malha2D)

Módulo 2D (Canto inferior direito)

Automesh, surfs > by face (botão esquerdo seleciona, direito desconsidera), configura malha

Element size:

(se preciso, clique em “elems to surf comp” para trocar para a opção “elems to current comp”).

mesh (ajustes)

return

OBS1.: Caso queria mover elementos de um componente para outro:

(Módulo Tool) -> Organize > move > elems > all > move)

OBS2.: Salvar arquivo com malha 2D para geometrias complicadas.

OBS3.: Em caso de análise multiescala, haverá no mínimo dois materiais, logo deve ser feito malhas diferentes para cada material, ou seja, todos os passos descritos devem ser repetidos para a outra malha.

* 1. Extrusão da malha 2d para uma malha 3d

Módulo 3D (Canto inferior direito)

Solidmap, line drag, elems > all, lines (selecionar aresta), configura malha, mesh, return

Aba model (árvore, esquerda no meio)

Rename solidmap para Malha3D

Make current Malha3D

OBS.: Em caso de análise multiescala fazer duas malhas 3D.

Assim, repete-se o procedimento de extrusão para a segunda malha 2D.

Para evitar conflitos de numeração, deleta-se a(s) malha(s) 2D.

Delete Malha2D

OBS.: Para malhas com múltiplas regiões fechadas ou componentes, deve-se compatibilizar as malhas.

Módulo Geometry (Canto inferior direito)

Distance (medir distância entre nós)

Módulo Tool (Canto inferior direito)

Organize > edges, tolerance (adequada, levando em conta a distância medida),

Selecionar elementos: clique em elems > all

preview equiv TEM QUE VER COMO FAZ PARA MOSTRAR LABELS DOS NÓS

equivalence, compatibiliza

Para verificar se colar os elementos funcionou, verifique a numeração dos nós.

Módulo Tool (Canto inferior direito): numbers > nodes, display on

Caso tenha nós com mais de um número, significa que a equivalência não funcionou

Verificar número de elementos e nós

Módulo Tool (Canto inferior direito)

Count

* 1. Condições de contorno (valores nodais)
     1. Engaste

Módulo Analysis (Canto inferior direito)

Constraints, marcar dof1, dof2, dof3, tirar dof4, dof5, dof6, independe valor

Selecionar nós a serem engastados

Create

Return

Aba Model

Renomeie o load collector criado para “Fixed Supports” (É importante ser exatamente esse nome).

* + 1. Deslocamento prescrito

Aba Model (árvore, esquerda no meio)

Clique botão direito > Create > Load Collector

Renomeie o load collector para “Tabela\_Disp\_direcao” ( O deslocamento aplicado provém de uma tabela, que deve ter o mesmo nome do load collector)

Módulo Analysis (Canto inferior direito)

Constraints, marcar o grau de liberdade correspondente, desmarcar os demais. (o valor colocado não importa)

Selecionar nós a serem deslocados

Create

Return

* + 1. Força prescrita

Aba model (árvore, esquerda no meio)

Clique botão direito > Create > Load Collector

Renomeie o load collector para “Tabela\_Force\_direcao” ( A força aplicada provém de uma tabela, que deve ter o mesmo nome do load collector)

Módulo Analysis (Canto inferior direito)

Forces, Direcao-axis, valor informado não importa, pois os reais valores de força serão informados na tabela

Selecionar nós a serem carregados

Create

Return

OBS.: Até o presente momento apenas carregamentos nodais (deslocamentos e forças) são suportados pelo CEOS.

* + 1. Deslocamentos prescritos em caso de análise Multiescala

Módulo Analysis (Canto inferior direito)

Constraints, marcar apenas um GDL (Por exemplo dof1) independe do valor.

Selecionar nós a serem aplicados a condição de contorno:

Se for modelo de Taylor: Pegar todos os nós.

Se for modelo linear: Pegar todos os nós dos contornos;

Create

Return

Aba Model

Renomeie o load collector criado para “Boundary” (É importante ser exatamente esse nome).

* 1. Criação e designação de material e tipo de elemento ao modelo.

Tools (menu opções, superior) > Et types table, new, Element type, SOLIDS>SOLID185 (Hexa de 8 nós, linear), create, close, close

Aba Model (árvore, esquerda no meio)

Botão direito Create > Material

OBS.: Em caso de análise multiescala, criar dois materiais.

Tools (menu opções, superior) > Component table,seleciona Malha3D

Assign Values ET Ref. No., set, yes, Mat Set No., set, yes, X (close)

Definir tipo de elemento e material para a(s) malha(s) criada(s).

Renumerar os elementos

mesh (menu opções, superior) > Renumber > all

start with: 1

increment by: 1

Renumber > return

* 1. Exportação modelo \*.cdb

File (menu opções, superior) > Export > Solver Deck (ctrl+e)

1. Projeto VisualStudio\_Intel.vfproj

É importante lembrar que na primeira vez que for executar o CEOS em seu computador deve ser inserido uma linha de comando no Visual Studio.

Project > VisualStudio\_Intel Properties > Debbuging > Command Argumentss

/Settings Settings.dat /Solve /PostProcess Post\_Processing.post

(Habilitar ou desabilitar /Solve / Post\_Process, caso só deseje fazer uma das operações)

* 1. Compilar e executar (ctrl+F5)

OBS.: Antes de compilar, lembre-se de adequar os arquivos de entrada para sua simulação:

* Settings.dat
* Time\_Discretization.dat
* Post\_Processing.dat
* Tabelas de condição de contorno ( Disp e Force ou componentes de F em caso de análise multiescala).

1. Visualizador de resultados: Hyperview

load model \*.cdb

load results “hypermesh\_results.hwascii”

plotar deformada

ajustar velocidade

selecionar displacement

use corner\_data (transfere valores do ponto de Gauss)

Global\_system

Averaging Method: simple

1. **Criar um modelo constitutivo**

**Caminho: .\CEOS\SourceCode\ConstitutiveLibrary\ConstitutiveModelsLibrary\**

* 1. **criar arquivo ‘Modx.f90’**

**em que x é uma sigla que se refira ao modelo, sugere-se tomar como base um modelo já programado e fazer as adaptações pertinentes**

**trocar variáveis internas: strings, values, options, dimension(XX), Settings.dat**

* 1. **editar arquivo ‘ModConstitutiveModelLibrary.f90’**
  2. **adicionar arquivo ao projeto no VisualStudio**

**Solution Explorer > Source Files > ConstitutiveLibrary > ConstitutiveModelsLibrary, botão direito, add existing item, selecionar arquivo criado**

1. **Para realizar análises multiescala em estado de tensão macroscópica uniaxial, devem ser ajustados os seguintes parâmetros**

* **Ajuste de molas fracas para estabilização do modelo**

**Caminho: Source Files\Multiscale\ModMultiscaleBoundaryConditions.f90**

Na subrotina ApplyBoundaryConditionsMultiscaleMinimalLinearD1 existe um procedimento que soma termos às diagonais da matriz tangente:

**!Somando rigidez na diagonal principal**

**Kg%Val(PrescDispSparseMapDIAG) = Kg%Val(PrescDispSparseMapDIAG) + Kg%Val(PrescDispSparseMapDIAG)\*5.0d-4**

**O valor somado à diagonal é um múltiplo do seu valor original. O ajuste se dá pelo valor escalar que multiplica o termo diagonal. Como sugestão, manter o valor escalar em 1.0d-8, porém no caso de análises do tendão com ciclo de descarga, recomenda-se 5.0d-4.**

* **Escolha do modo de derivação do Primeiro Tensor de Elasticidade (Amat)**

**Caminho: Source Files\FEM\Elements\ElementMethod\ModElement.f90**

Na subrotina ElementBeMatrix existem 3 alternativas para cálculo da derivada de Amat, denominada de Bmat: Diferenças Finitas Centrais, Diferenças finitas à frente ou obter a derivada diretamente do ponto de Gauss, como propriedade inerente do modelo constitutivo.

Para análises em materiais com Amat contínuo, escolher uma das diferenças finitas, descomentando o procedimento entre as linhas que delimitam o início e o fim do procedimento, por exemplo:

**! \*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\* FORWARD FINITE DIFFERENCE \*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\***

**DESCOMENTAR LINHAS COMPREENDIDAS NESTE ESPAÇO**

**! \*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\* END OF FORWARD FINITE DIFFERENCE\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\***

Para o caso do tendão (matriz de células e fibras viscoelásticas), deixar comentadas as duas opções de diferenças finitas e descomentar o procedimento de cálculo da matriz Be a partir do ponto de Gauss (na versão do CEOS uniaxial, foram incorporadas rotinas para o cálculo da derivada de Amat diretamente no ponto de Gauss):

**! \*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\* DERIVATIVE OF TANGENT MODULUS GOT FROM GAUSS POINT \*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\***

**! Call derivative of tangent modulus**

**! Obs.: For materials with continuous tangent modulus (Neo-Hookean, Saint-Venan, etc), you can comment**

**! this call and uncomment one of the finite differences above. This was necessary because fibrous materials**

**! have discontinuous tangent modulus, so the its derivative was made directly in the gauss point.**

**call this%GaussPoints(gp)%GetDerivativeTangentModulus(Bmat)**

**do n=1,9**

**BG = Matmul(Bmat(:,:,n),Gv)**

**!call dgemm('N', 'N', 9, 24, 9, 1.0d0, Bmat(:,:,n), 9, Gv, 9, 0.0d0, BG, 9)**

**Be(:,:,n) = Be(:,:,n) + Matmul(transpose(Gv),BG)\*Weight(gp)\*detJX**

**!call dgemm('T', 'N', 24, 24, 9, Weight(gp)\*detJX, Gv, 9, BG, 9, 1.0d0, Be(:,:,n), 24)**

**! \*\*\*\* OBS: Matmul se mostrou mais rápido que dgemm neste caso\*\*\*\*\***

**enddo**

**!\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\***

* **Ajuste do critério de parada e tolerância do solver**

**Caminho: Source Files\Tools\MathTools\NonLinearSolver\ModNewtonRaphsonFull.f90**

Para análises multiescala em estado uniaxial de tensões, o resíduo é dividido e são especificadas tolerâncias de convergência diferentes para cada parte. Nestes casos, precisa-se descomentar a norma que será impressa na tela e a que comandará a parada do código. Para a análise de FEM puro, a tolerância é diretamente o valor máximo do resíduo, na multiescala é quantas ordens de grandeza cada parte deve reduzir com relação ao primeiro resíduo obtido do STEP corrente.

O critério de parada para análises por elementos finitos pura é lido diretamente do arquivo Settings. Porém, para análises multiescala, é necessário ajustar o critério de parada separadamente dentro do solver. A definição das tolerâncias está entre as linhas:

**!\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\* DEFINITION OF TOLERANCES \*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\***

**! Definition of tolerance for each residual type**

**tol\_force = 0.9d-3**

**tol\_def = 1.0d-4**

**tol\_disp = 0.5d0**

**tol\_stress = 0.5d-3**

**!Correction of tolerance for last steps of the viscoelastic unloading (stresses too close to zero)**

**if ( SOE%HomogenizedP(1) < 0.0d0) then**

**tol\_force = 0.4d-2**

**tol\_stress = 0.3d-2**

**endif**

**!\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\* END OF DEFINITION OF TOLERANCES \*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\***

A seleção da norma impressa na tela e do critério de parada se dá no procedimento situado entre as seguintes linhas, bastando deixar descomentado os IFs respectivos à análise realizada:

**!\*\*\*\*\* SELECTION OF NORM PRINTED ON THE SCREEN AND USED FOR CONVERGENCE CHECK \*\*\*\*\***

**! Uncomment the following IF for standard finite element**

**!if (this%ShowInfo) write(\*,'(12x,a,i3,a,e16.9)') 'IT: ',IT ,' NORM: ',normR**

**! Uncomment the following IF for multiscale**

**if (this%ShowInfo) write(\*,'(12x,a,i3,a,e11.4,2x,e11.4,2x,e11.4,2x,e11.4)') 'IT: ',IT ,' NORM: ',norm\_force, norm\_def, norm\_disp, norm\_stress**

**! Uncomment the following IF for standard finite element**

**!if (normR<this%tol) then**

**! Uncomment the following IF for multiscale**

**if ((norm\_force<tol\_force).AND.(norm\_def<tol\_def).AND.(norm\_stress<tol\_stress)) then**

**!\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*END OF NORM SELECTION \*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\***

1. **ANÁLISE BIFÁSICA**

Além das definições já utilizadas para uma análise de elementos finitos 3D, alguns outros passos devem ser executados, entre eles:

Arquivo Settings.dat

- Problem type: Biphasic.

- Material: Especificar as constantes do tensor de permeabilidade (modelo material).

**Criação do modelo no hypermesh:**

* Criação da malha tetra quadrática (Tetra 10):
  + Criação do elemento: ET type = Solid 92
  + Modificar para elemento quadrático (segunda ordem)
    - Preferences>Mesh Options: element order = second
  + Criar a malha
    - Módulo 3D>tetramesh>volume tetra
      * Definir element size
* Criação das condições de contorno de pressão e/ou fluxo:
  + Pressão:
    - Criar load collector denominado: Pressure
    - Criar arquivo Pressure.tab com os valores de pressão prescrita, análogo às tabelas de deslocamento.
    - Módulo Analysis>Constraints
      * Seleciona os nós
      * Marca a opção dof1
      * Em load types, seleciona a opção D\_PRES
  + Fluxo:
    - Criar load collector denominado: Fluxo
    - Criar arquivo Fluxo.tab com os valores de fluxo prescrito, análogo às tabelas de deslocamento.
    - Módulo Analysis>flux
      * Seleciona os nós
      * Em load types, seleciona a opção F\_FLOW (fluxo é normal a superfície).