Sesión 2. Multifísica en Elmer (I)

M. Meis[1,2] y F. Varas[1,3]

[1]Universidad de Vigo, [2]Vicus Desarrollos Tecnológicos, S.A.,
[3]Universidad Politécnica de Madrid

Introducción a la Simulación Numérica Multifísica con ELMER
28–29 de enero de 2015

PROGRAMA COOPERACIÓN TRANSFRONTERIZA ESPAÑA – PORTUGAL COOPERAÇÃO TRANSFRONTEIRIÇA 2007 – 2013

CloudPYME

Unión Europea
FEDER
Invertimos en su futuro

iTMATI

Proyecto CloudPYME

El proyecto CloudPYME (ID 0682_CLOUDPYME2_1_E) está cofinanciado por la Comisión Europea a través del Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER), dentro de la tercera convocatoria de proyectos del Programa Operativo de Cooperación Transfronteriza España–Portugal 2007–2013 (POCTEP).

PROGRAMA
COOPERACIÓN TRANSFRONTERIZA
ESPAÑA – PORTUGAL
COOPERAÇÃO TRANSFRONTEIRIÇA
2007 – 2013

CloudPYME

Unión Europea
FEDER
Invertimos en su futuro

Plan

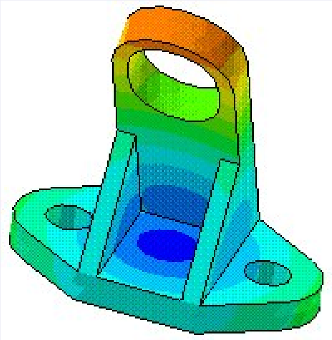
1. Método de elementos finitos en un modelo simple
   - Análisis lineal con elementos finitos
   - Análisis no lineal con elementos finitos
   - Análisis dinámico con elementos finitos
2. Método de elementos finitos en multifísica
   - Un problema multifísico en MEMS
   - Modelado con elementos finitos

Plan

Plan

Un problema elemental

Análisis térmico estacionario



- Balance de energía:

$$\mathrm{div}\vec{q} = 0 \qquad \text{en } \Omega$$

- Ley constitutiva:

$$\vec{q} = -k\vec{\nabla} T$$

- Condiciones de contorno:
  - $\vec{q} \cdot \vec{n} = h(T - T_{amb})$ en Γ_1
  - $T = T_c$ en Γ_2
  - $\vec{q} \cdot \vec{n} = 0$ en Γ_3
  - $\vec{q} \cdot \vec{n} = q_n$ en Γ_4

Un problema elemental (cont.)

Formulación variacional

V: espacio de funciones admisibles ($T = T_c$ en Γ_2)

$$\int_\Omega k\vec{\nabla}T\vec{\nabla}v d\Omega = -\int_{\Gamma_1} h(T - T_{amb})vdS + \int_{\Gamma_4} q_n vdS$$

$$\forall\ v \in V_0 (v = 0\ en\ \Gamma_2)$$

Forma abstracta

Encontrar T en V tal que

$$a(T, v) = l(v) \qquad \forall\ v \in V_0$$

Análisis estático lineal

Hipótesis de análisis lineal

coeficientes independientes de temperatura:

- conductividad térmica (k)
- coeficiente de película (h)
- flujo de calor en frontera (q_n)

Sobre forma abstracta

- $a(T, v) = \int_\Omega k\vec{\nabla} T \vec{\nabla} v d\Omega + \int_{\Gamma_1} hTvdS$ lineal en T
- $a(T, v)$ y $l(v) = \int_{\Gamma_1} hT_{amb} vdS + \int_{\Gamma_4} q_n vdS$ lineales en v

Análisis estático lineal (cont.)

Formulación abstracta (problema continuo)

Encontrar $T \in V$ tal que: $a(T, v) = l(v) \qquad \forall\, v \in V_0$

Aproximación de campos (discretización)

$T_h \simeq T$ tal que $T_h(\vec{x}) = \sum_{j=1}^{N} T_j \varphi_j(\vec{x})$

Formulación abstracta (problema discreto)

Encontrar $\{T_i\}_{i=1}^{N}$ tal que

$$\sum_{j=1}^{N} T_j \underbrace{a(\varphi_j, \varphi_i)} = \underbrace{l(\varphi_i)} \qquad \forall\, i \in \{1, 2, \ldots N\}$$

En elementos finitos (lagrangianos) T_i corresponde a (aproximación de) temperatura en nodo $\vec{x}_i$

Análisis estático con elementos finitos

Resolución mediante elementos finitos

1. Generación de mallado de pieza
2. Hipótesis campos de temperatura ($V_h \subset V$)
3. Ensamblado de matriz de rigidez y vector de carga
4. Resolución de sistema de ecuaciones lineales
5. Reconstrucción del campo de temperatura

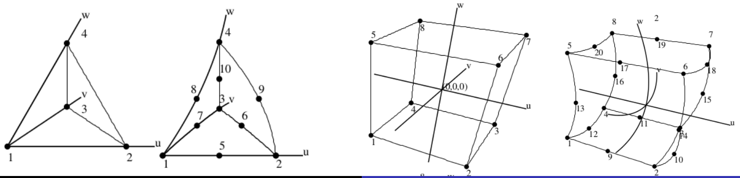
Análisis estático con MEF

1. Generación de mallado de pieza

- A partir de geometría CAD
- Mediante herramienta de preproceso
- Numerosas familias de elementos (poliedros)

2. Hipótesis sobre campos de temperatura ($V_h \subset V$)

- En MEF campos polinómicos (a trozos)
- Numerosas familias de elementos (grados de polinomios)



Análisis estático con MEF

Problema discreto: encontrar T tal que $KT = b$ con:

$$K_{ij} = \int_{\Omega} k\vec{\nabla}\varphi_j\vec{\nabla}\varphi_i d\Omega + \int_{\Gamma_1} h\varphi_j\varphi_i dS$$

$$b_i = \int_{\Gamma_1} hT_{amb}\varphi_i dS + \int_{\Gamma_4} q_n\varphi_i dS$$

3. Ensamblado de matriz de rigidez y vector de carga

Sobre mallado de Ω (descomposición en poliedros Ω_i):

- se recorren poliedros para calcular contribuciones a K
- se recorren caras/aristas sobre Γ_1 y Γ_4 para calcular contribuciones a K y b

Análisis estático con MEF

4. Resolución del sistema de ecuaciones

- en práctica: matriz K grande y hueca
- sistemas no muy grandes: métodos directos (factorizaciones LU, Cholesky)
- sistemas muy grandes: métodos iterativos (tipo Krylov o multimalla)

Tratamiento de restricciones (temperatura impuesta):

- penalización o *stiff spring* (HTC muy elevado)
- eliminación
- multiplicadores de Lagrange (flujos de calor)

Análisis estático con MEF

5. Reconstrucción del campo de temperatura

A partir de $\{T_i\}_{i=1}^{N}$ (vector solución) se reconstruye:

- campo de temperatura T_h: $T_h(\vec{x}) = \sum_{j=1}^{N} T_j \varphi_j(\vec{x})$
- variables derivadas

Mediante herramienta de postproceso

Plan

Formulación de problema estacionario no lineal

Modelo con coductividad térmica variable

Balance de energía:

$$-\text{div}(k(T)\vec{\nabla} T) = 0 \qquad \text{en } \Omega$$

Condiciones de contorno:

- $-k(T)\vec{\nabla} T \cdot \vec{n} = h(T - T_{amb})$ en Γ_1
- $T = T_c$ en Γ_2
- $-k(T)\vec{\nabla} T \cdot \vec{n} = 0$ en Γ_3
- $-k(T)\vec{\nabla} T \cdot \vec{n} = q_n$ en Γ_4

Formulación de problema estacionario no lineal (cont.)

Formulación variacional

V: espacio de funciones admisibles ($T = T_c$ en Γ_2)

$$\int_\Omega k(T)\vec{\nabla} T \vec{\nabla} v d\Omega = -\int_{\Gamma_1} h(T - T_{amb}) v dS + \int_{\Gamma_4} q_n v dS$$

$$\forall\, v \in V_0 (v = 0 \ en\ \Gamma_2)$$

Forma abstracta

Encontrar T en V tal que

$$a(T, v) = l(v) \qquad \forall\, v \in V_0$$

donde $a(T, v)$ es no lineal en T

Análisis estacionario MEF no lineal

Aproximación de campos (discretización)

$T_h \simeq T$ tal que $T_h(\vec{x}) = \sum_{j=1}^{N} T_j \varphi_j(\vec{x})$

Formulación (discreta) del problema no lineal

Encontrar $\{T_i\}_{i=1}^{N}$ tal que:

$$a(\sum_{j=1}^{N} T_j \varphi_j, \varphi_i) = l(\varphi_i) \qquad \forall\, i \in \{1, 2, \ldots N\}$$

Resolución del problema no lineal

Formulación vectorial como: $F(T) = b$
Necesariamente pasa por un esquema iterativo

Análisis estacionario MEF no lineal

No linealidad originada por $k(T)$

Alternativa 1. Esquema de punto fijo

Idea: se evalúa $k(T)$ para aproximación de T en paso anterior

1. Se construye una aproximación inicial de T: T_0
2. Para $n = 0, 1, 2, 3...$ se hace:
    - se evalúa $k(T_n)$
    - se ensambla la matriz de rigidez K_n
    - se ensambla el vector b
    - se resuelve $K_n T_{n+1} = b$

Se podría ensamblar b solamente una vez

Análisis estacionario MEF no lineal

Problema no lineal genérico: $F(T) = b$

Alternativa 2. Método de Newton

Idea: se construye un problema linealizado con información del paso anterior

1. Se construye una aproximación inicial de T: T_0
2. Para $n = 0, 1, 2, 3...$ se hace:
   - se calcula linealización: $F(T_n) + DF(T_n)(T_{n+1} - T_n) = b$
   - se ensambla la matriz de rigidez (tangente) $DF(T_n)$
   - se ensambla el vector de carga (residuo) $b - F(T_n)$
   - se resuelve $DF(T_n)(T_{n+1} - T_n) = b - F(T_n)$

$$F(T_{n+1}) \simeq F(T_n) + DF(T_n)(T_{n+1} - T_n)$$

Análisis estacionario MEF no lineal

método de Newton:

- converge rápidamente (converg. cuadrática)
- necesita estar cerca de solución

Una estrategia eficiente

- se comienza con método de punto fijo (más robusto)
- cerca de la solución se pasa a Newton (más rápido)
- en caso de problemas difíciles se usa relajación:
  1. se calcula iteración T^*_{k+1}
  2. se toma para siguiente paso:

$$T_{k+1} = (1 - \omega) T_k + \omega T^*_{k+1}$$

Análisis estacionario MEF no lineal

Otras alternativas (sobre método de Newton)

Mejora (local) de robustez de Newton

- Se combina dirección con máximo descenso (de residuo)
- Se ajusta paso (*line search*) con optimiz. unidimensional

$$DF(T_n)d_n = b - F(T_n)$$

$$T_{n+1} = T_n + \tau_n d_n$$

Mejora (global) de robustez de Newton

- carga incremental
- métodos de continuación (longitud de arco)

Plan

Análisis dinámico con modelos de elementos finitos

Descripción de un problema dinámico

Balance de energía:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} - \text{div}(k\vec{\nabla} T) = 0 \qquad \text{en } \Omega$$

Condiciones de contorno:

- $-k\vec{\nabla} T \cdot \vec{n} = h(T - T_{amb})$ en Γ_1
- $T = T_c$ en Γ_2
- $-k\vec{\nabla} T \cdot \vec{n} = 0$ en Γ_3
- $-k\vec{\nabla} T \cdot \vec{n} = q_n(t)$ en Γ_4

Condición inicial:

$$T(\cdot, t_0) = T_0(\cdot) \qquad \text{en } \Omega$$

Formulación del problema dinámico

Formulación variacional

V: espacio de funciones admisibles ($T = T_c$ en Γ_2)

$$\int_\Omega \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} v d\Omega + \int_\Omega k \vec{\nabla} T \vec{\nabla} v d\Omega = -\int_{\Gamma_1} h(T - T_{amb}) v dS + \int_{\Gamma_4} q_n(t) v dS$$

$$\forall\ v \in V_0 (v = 0\ en\ \Gamma_2)$$

Forma abstracta

Encontrar $T : (t_0, t_f) \rightarrow V$ tal que:

$$b(\frac{\partial T}{\partial t}, v) + a(T, v) = l(v) \qquad \forall\ v \in V_0\ y\ \forall t \in (t_0, t_f)$$

$$T(\cdot, t_0) = T_0(\cdot)$$

Formulación del problema dinámico (cont.)

Aproximación de campos (discretización)

$T_h(\vec{x},t) \simeq T(\vec{x},t)$ tal que $T_h(\vec{x},t) = \sum_{j=1}^{N} T_j(t)\varphi_j(\vec{x})$

Formulación abstracta (problema discreto)

Encontrar $\{T_i(t)\}_{i=1}^{N}$ tal que

$$\sum_{j=1}^{N} \frac{dT_j(t)}{dt} \underbrace{b(\varphi_j,\varphi_i)} + \sum_{j=1}^{N} T_j(t)\, \underbrace{a(\varphi_j,\varphi_i)} = \underbrace{l(\varphi_i)}$$

$$\forall\, i \in \{1,2,\dots N\} \text{ y } \forall t \in (t_0,t_f)$$

$$T_i(t_0) = T_{0,i} \qquad \forall\, i \in \{1,2,\dots N\}$$

Análisis dinámico con MEF

Problema en forma matricial

$$M\frac{dT}{dt} + KT = b(t) \qquad \forall t \in (t_0, t_f)$$

$$T(t_0) = T_0$$

Integración con Euler implícito

1. Se toma condición inicial T_0
2. Para $i = 0, 1, 2, 3...$
   - se calculan/actualizan las matrices M_{i+1} y K_{i+1}
   - se ensambla el vector $b(t_{i+1})$
   - se resuelve el sistema de ecuaciones

$$M_{i+1}\frac{T_{i+1} - T_i}{\Delta t} + K_{i+1}T_{i+1} = b(t_{i+1})$$

Análisis con MEF

Recapitulación

1. En un problema estacionario lineal:
    - se ensambla **una** matriz y se resuelve **un** sistema
2. En un problema estacionario no lineal:
    - se itera para resolver la no linealidad
    - en **cada** iteración: se ensambla/actualiza **una** matriz y se resuelve **un** sistema
3. En un problema evolutivo (lineal)
    - se itera para avanzar en tiempo
    - en **cada** paso: se ensambla/actualiza **una** matriz y se resuelve **un** sistema

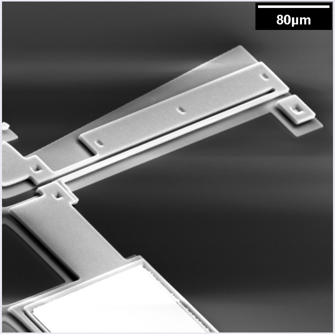
Plan

1. Método de elementos finitos en un modelo simple
   - Análisis lineal con elementos finitos
   - Análisis no lineal con elementos finitos
   - Análisis dinámico con elementos finitos
2. Método de elementos finitos en multifísica
   - Un problema multifísico en MEMS
   - Modelado con elementos finitos

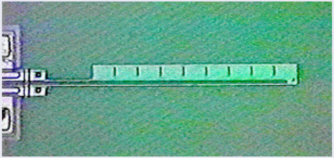
Plan

Actuador microelectromecánico

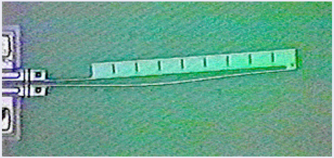
Guckel electro-thermal actuator (MEMS)



Sin tensión eléctrica

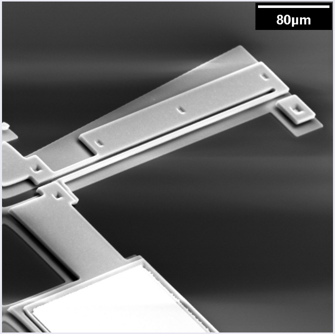


Con tensión eléctrica



Actuador microelectromecánico (II)

Guckel electro-thermal actuator (MEMS)

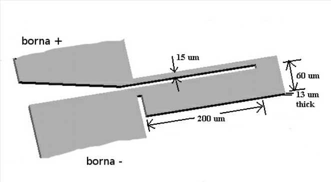


- problema eléctrico
- problema térmico (disipación Joule)
- problema mecánico (tensiones térmicas)

Plan

Actuador microelectromecánico (III)

Problema eléctrico



$$div(k_e \vec{\nabla} V) = 0$$

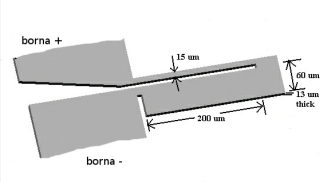
$$V = 0 \qquad \text{en borna -}$$
$$V = V_f \qquad \text{en borna +}$$
$$k_e \vec{\nabla} V \cdot \vec{n} = 0 \qquad \text{en resto}$$

Modelo de elementos finitos

$$K_e V_h = b_e$$

Actuador microelectromecánico (IV)

Problema térmico



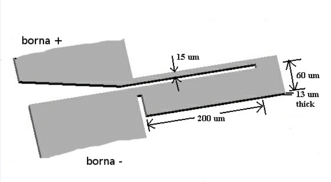
$$-div(k_t \vec{\nabla} T) = q_J$$
$$\text{con } q_J = k_e ||\vec{\nabla} V||^2$$
$$T = T_b \qquad \text{bornas}$$
$$-k_t \frac{\partial T}{\partial n} = h(T - T_{aire}) \qquad \text{resto}$$

Modelo de elementos finitos

$$K_t T_h = b_t(V_h)$$

Actuador microelectromecánico (V)

Problema mecánico



$$-div\sigma = \vec{f}$$
$$\text{con } \sigma = C\epsilon(\vec{u}) - \alpha(T - T_{aire})I$$
$$\vec{u} = \vec{0} \qquad \text{bornas}$$
$$\sigma\vec{n} = \vec{0} \qquad \text{resto}$$

Modelo de elementos finitos

$$K_m u_h = b_m(T_h)$$

Actuador microelectromecánico (VI)

Modelo de elementos finitos completo

modelo eléctrico	$K_e V_h = b_e$
modelo térmico	$K_t T_h = b_t(V_h)$
moddelo mecánico	$K_m u_h = b_m(T_h)$

Estrategia de resolución

Resolución (segregada) secuencial

- se calcula potencial V_h en modelo eléctrico
- se calcula temperatura T_h en modelo térmico
- se calcula desplazamiento u_h en modelo mecánico

Actuador microelectromecánico (VII)

Modelo más realista

conductividad eléctrica dependiente de temperatura

Modelo de elementos finitos completo

modelo eléctrico	$K_e(T_h)V_h = b_e$
modelo térmico	$K_t T_h = b_t(V_h)$
modelo mecánico	$K_m u_h = b_m(T_h)$

Actuador microelectromecánico (VIII)

Problema termo-eléctrico

modelo eléctrico $K_e(T_h)V_h = b_e$
modelo térmico $K_t T_h = b_t(V_h)$

Resolución *segregada*

Estimaciones iniciales: V_h^0 y T_h^0
Resolver hasta convergencia:

1. Calcular V_h^{n+1} en modelo eléctrico: $K_e(T_h^n)V_h^{n+1} = b_e$
2. Calcular T_h^{n+1} en modelo térmico: $K_t T_h^{n+1} = b_t(V_h^{n+1})$
3. En caso preciso volver a [1]

Actuador microelectromecánico (IX)

Resolución *global*

Estimaciones iniciales: V_h^0 y T_h^0
Resolver hasta convergencia:

1. Calcular V_h^{n+1} y T_h^{n+1} en modelo termo-eléctrico (Newton)

$$\begin{pmatrix} K_e(T_h^n) & D_{T_h}K_e(T_h^n)V_h^n \\ -D_{V_h}b_T(V_h^n) & K_T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_h^{n+1} - V_h^n \\ T_h^{n+1} - T_h^n \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} -K_e(T_h^n)V_h^n + b_e \\ -K_T T_h^n + b_T(V_h^n) \end{pmatrix}$$

2. En caso preciso volver a [1]

Observaciones

Ventajas de resolución *global*

- mayor velocidad de convergencia (espec. Newton)

Ventajas de resolución *segregada*

- menor requerimientos de memoria
- mayor flexibilidad (programación/reutilización)