Sesión 2. Multifísica en Elmer (II)

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

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. Modelos físicos disponibles en ELMER
   - Modelos disponibles en Elmer
   - Acoplamiento de modelos en Elmer
2. Esquemas numéricos disponibles en ELMER
   - Discretización de elementos finitos
   - Métodos numéricos básicos
3. Desarrollo de un nuevo *solver* en ELMER
   - Programación de nuevo modelo

Plan

Plan

Dinámica de fluidos

Navier-Stokes (compresible/incompresible)

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \rho(\vec{u} \cdot \nabla)\vec{u} - div\sigma = \rho\vec{f}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla)\rho + \rho(\nabla \cdot \vec{u}) = 0$$

- posibilidad de superficie libre
- fluidos no newtonianos
- con modelos de turbulencia: $k - \epsilon$, $k - \omega$, $v^2 - f$, etc

Otros modelos

ecuación de Reynolds
ecuación de Richards

Transmisión de calor y transporte de masa

Ecuación del calor

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) T \right) - \nabla \cdot (k \nabla T) = \sigma : \epsilon + \rho h$$

- posibilidad de cambio de fase
- radiación (factores de visión)

Ecuación de convección-difusión-reacción

$$\rho \frac{\partial c_i}{\partial t} + \rho(\vec{v} \cdot \nabla) c_i - \rho \nabla \cdot (D_i \nabla c_i) = S_i$$

Mecánica de sólidos

Ecuación dinámica de sólidos

$$\rho \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2} - div\sigma = \vec{f}$$

- elasticidad lineal (isótropa/anisótropa)
- elasticidad no lineal (tensor de deformación no lineal)
- tensiones/deformaciones planas en 2D

Otros modelos

- modelos de placas (Mindlin-Reissner)
- modelos de láminas (*)

Electromagnetismo

Ecuaciones de Maxwell

Ley de Gauss	$div\vec{D} = \rho$
Ley de Gauss	$div\vec{B} = 0$
Ley de Faraday	$\vec{\mathrm{rot}}\vec{E} = -\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}$
Ley de Ampère	$\vec{\mathrm{rot}}\vec{H} = \vec{J} - \frac{\partial\vec{D}}{\partial t}$

Ecuación de continuidad

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + div\vec{J} = 0$$

Electrostática

Ecuaciones de Maxwell

Ley de Gauss $\quad div\vec{D} = \rho$

Ley de Faraday $\quad \vec{\mathrm{rot}}\vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$

Modelo electrostático

De ley de Faraday: $\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi$

De ley de Gauss:

$$-div(\epsilon\vec{\nabla}\Phi) = \rho$$

Conducción eléctrica (DC)

Ecuaciones de Maxwell y continuidad

Ley de Faraday	$\vec{\mathrm{rot}}\vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$
Ec. continuidad	$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div\vec{J} = 0$

Modelo conducción eléctrica

De ley de Faraday: $\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi$
Ley de Ohm: $\vec{J} = \sigma\vec{E}$
De ec. de continuidad:

$$-div(\sigma\vec{\nabla}\Phi) = 0$$

Modelos magnéticos simplificados

Ecuaciones de Maxwell

Ley de Gauss $div\vec{B} = 0$

Ley de Ampère $\vec{\mathrm{rot}}\vec{H} = \vec{J} - \frac{\partial\vec{D}}{\partial t}$

Modelo magnético a baja frecuencia

De ley de Gauss: $\vec{B} = -\vec{\mathrm{rot}}\vec{A}$

De ley de Ampère:

$$-\vec{\mathrm{rot}}(\frac{1}{\mu}\vec{\mathrm{rot}}\vec{A}) = \vec{J}$$

- axisimétrico / tridimensional
- estacionario / armónico

Modelos de magenohidrodinámicos

Ecuaciones de Maxwell y ley de Ohm en fluidos

Ley de Ampère	$\vec{\mathrm{rot}}\vec{H} = \vec{J} - \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$
Ley de Ohm	$\vec{J} = \sigma(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$

Modelo de corrientes inducidas

De Ley de Ampère (baja frecuencia) y Ley de Faraday:

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} + \frac{1}{\sigma\mu}\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{B} - \vec{\nabla} \times (\vec{v} \times \vec{B}) = \vec{0}$$

- acoplamiento con dinámica del fluido / ec. de energía
- axisimétrico / tridimensional

Fenómenos electrocinéticos

Ecuación de Poisson-Boltzman

cargas libres movidas (exclusiv.) por potencial electrostático:

$$-div(\epsilon\vec{\nabla}\Phi) = \rho_0 - 2ezn_0\sinh(\frac{ez\Phi}{k_B T})$$

Velocidades de deslizamiento y efecto Joule

- velocidad de Helmholtz-Smoluchowski

$$\vec{u}_{tang} = \frac{\epsilon_f \epsilon_0 \zeta}{\mu_f} \vec{E}_{tang}$$

- disipación por efecto Joule

$$h = \frac{1}{\rho} \sigma \vec{E} \cdot \vec{E}$$

Acústica

Ecuación de Helmholtz

$$\Delta p + (k^2 - \mathrm{i}kd)p = 0$$

- módulo de elementos finitos
- módulo de elementos de contorno

(Mucha) más información en...

documento `Elmer Models Manual`

Plan

1. Modelos físicos disponibles en ELMER
   - Modelos disponibles en Elmer
   - Acoplamiento de modelos en Elmer
2. Esquemas numéricos disponibles en ELMER
   - Discretización de elementos finitos
   - Métodos numéricos básicos
3. Desarrollo de un nuevo *solver* en ELMER
   - Programación de nuevo modelo

Algunos acoplamientos programados

Problemas termofluidodinámicos

- velocidades en ecuación de Energía
- fuerzas de flotación en Navier-Stokes

Problemas termomecánicos

- tensiones térmicas en ecuación de elasticidad

Problemas termoeléctricos

- disipación por efecto Joule

Algunos acoplamientos programados (cont.)

Problemas electro-magneto-fluidodinámicos

- disipación por efecto Joule
- fuerzas electromagnéticas
- condiciones de deslizamiento (electrocinética)

Observaciones

Se activan a través de palabras clave:

- más información en `Elmer Models Manual`

Otros términos de acoplamiento en las ecuaciones ...

- deben ser programados (ensamblado de vector de carga)

Acoplamientos a través de coeficientes variables

Acoplamientos posibles

Cualquier coeficiente puede depender de cualquier variable(s)

Alternativas para su definición

- a través de tablas
- mediante expresiones con lenguaje propio (MATC)
- mediante UDF (User Def'd Functions) compiladas

Más información en ...

documento `ElmerSolver Manual` (ver cap. 1)

Plan

Plan

Discretización de elementos finitos

Elementos finitos disponibles

- 2D: triángulos/cuadrángulos
- 3D: tetraedros/prismas/hexaedros
- elementos de orden arbitrario
- grado de libertad: nodos/aristas/caras/burbujas

Técnicas de estabilización (térm. convectivos)

- Streamline Upwing Petrov-Galerkin (SUPG)
- Elementos burbuja
- Galerkin discontinuo

Discretización de elementos finitos (cont.)

Técnicas de adaptación

- se pueden definir estimadores propios
- adaptación de malla/remallado completo

Mallas múltiples (multifísica)

- cada modelo puede resolverse sobre una malla

Manipulación de matrices

- imposición de condiciones Dirichlet mediante eliminación
- condiciones de contorno periódicas
- imposición de cargas nodales
- cálculo de reacciones nodales

Discretización de elementos finitos (cont.)

Level sets

- herramientas aproximación de fronteras libres
- incorporadas en módulo de Navier-Stokes

Moving meshes / ALE

- actualizaciones de malla para formulación ALE

Más información en ...

- documento `ElmerSolver Manual`
- documento `Elmer Tutorials`
- foro de Elmer: `www.elmerfem.org/forum`

Plan

Métodos numéricos básicos

Sistemas de ecuaciones lineales

- métodos directos: método mutifrontal (UMFPACK)
- métodos iterativos (Krylov)
  - gradiente (bi)conjugado precondicionado
  - GMRES
- métodos multimalla
  - geométrico/algebraico

precondicionadores en métodos iterativos

- Jacobi
- factorizaciones incompletas (ILU)
- multimalla geométrico/algebraico

Métodos numéricos básicos (cont.)

Sistemas de ecuaciones no lineales

- métodos Newton/Picard
- Newton con paso amortiguado (fijo)

integración temporal

- métodos BDF (adaptación paso para orden 1)
- Crank-Nicolson
- Bossak (ecuaciones orden 2)

Cálculo de autovalores

- método de Arnoldi (ARPACK)

Plan

Plan

1. Modelos físicos disponibles en ELMER
   - Modelos disponibles en Elmer
   - Acoplamiento de modelos en Elmer
2. Esquemas numéricos disponibles en ELMER
   - Discretización de elementos finitos
   - Métodos numéricos básicos
3. Desarrollo de un nuevo *solver* en ELMER
   - Programación de nuevo modelo

Estructura de módulo de resolución

Subrutina

- inicialización
- inicio bucle de iteración no-lineal
    - [-] inicio de bucle en elementos
        - ensamblado matriz y vector
    - [-] fin de bucle en elementos
    - [-] inicio de bucle en frontera
        - ensamblado matriz y vector
    - [-] fin de bucle en frontera
    - [-] se fijan condiciones Dirichlet
    - [-] se resuelve sistema
- fin de bucle de iteración no lineal

Escritura de nuevo módulo

Documento `ElmerSolver Manual`

Capítulo 11 (*Basic Programming*) contiene información detallada sobre:

- funciones y estructuras básicas de Elmer
- intercambio de información entre módulos
- escritura de nuevas funciones
- escritura de nuevo módulo (con ejemplo detallado)

Nuevo modelo de desarrollo de Elmer

Alternativas de desarollo de módulos

1. diseño monolítico (implementación actual)
2. diseño modular (nueva implementación)

Ventajas de nuevo enfoque

- mayor sencillez de implementación
- posibilidad de emplear algoritmos genéricos

Estructura de nuevo modelo

Subrutina de ensamblado en dominio

- inicio de bucle en elementos (sólidos)

    ensamblado matriz y vector

- fin de bucle en elementos

Subrutina de ensamblado en frontera

- inicio de bucle en elementos (frontera)

    ensamblado matriz y vector

- fin de bucle en elementos