

## Sesión 2. Análisis multifísico con Elmer

M. Meis y F. Varas

Departamento de Matemática Aplicada II  
Universidad de Vigo

Introducción a Elmer, software libre  
de simulación numérica multifísica  
A Coruña, 26 de Junio al 1 de Julio de 2011

# Plan

- 1 Multifísica en Elmer
  - Modelos disponibles en Elmer
  - Acoplamiento de modelos en Elmer
- 2 Métodos numéricos en Elmer
  - Discretización de elementos finitos
  - Métodos numéricos básicos
  - Programación de nuevo modelo

- 1 Multifísica en Elmer
  - Modelos disponibles en Elmer
  - Acoplamiento de modelos en Elmer
- 2 Métodos numéricos en Elmer
  - Discretización de elementos finitos
  - Métodos numéricos básicos
  - Programación de nuevo modelo

# Dinámica de fluidos

## Navier-Stokes (compresible/incompresible)

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

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

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

## Otros modelos

- ecuación de Reynolds (lubricación)
- ecuación de Richards (medios porosos no saturados)

# 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

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

# Mecánica de sólidos

## Ecuación dinámica de sólidos

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

- 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  $\operatorname{div} \vec{D} = \rho$

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

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

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

## Ecuación de continuidad

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

# Electrostática

## Ecuaciones de Maxwell

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

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

## Modelo electrostático

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

De ley de Gauss:

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

# Conducción eléctrica (DC)

## Ecuaciones de Maxwell y continuidad

$$\begin{aligned} \text{Ley de Faraday} \quad \text{rot} \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \text{Ec. continuidad} \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{J} &= 0 \end{aligned}$$

## Modelo conducción eléctrica

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

$$\text{Ley de Ohm: } \vec{J} = \sigma \vec{E}$$

De ec. de continuidad:

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

# Modelos magnéticos

## Ecuaciones de Maxwell

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

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

## Modelo magnético a baja frecuencia

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

De ley de Ampère:

$$-\operatorname{rot} \left( \frac{1}{\mu} \operatorname{rot} \vec{A} \right) = \vec{J}$$

- axisimétrico / tridimensional
- estacionario / armónico

# Modelos de inducción electromagnética

## Ecuaciones de Maxwell y ley de Ohm en fluidos

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

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:

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

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

# Fenómenos electrocinéticos

## Ecuación de Poisson-Boltzman

cargas libres movidas (exclusiv.) por potencial electrostático:

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

## 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

$$\Delta p + (k^2 - ikd)p = 0$$

- módulo de elementos finitos
- módulo de elementos de contorno

## Otros modelos recientes

- dinámica de partículas
- Maxwell en formulación potencial vector

## Para más información

Elmer Models Manual

- 1 Multifísica en Elmer
  - Modelos disponibles en Elmer
  - Acoplamiento de modelos en Elmer
- 2 Métodos numéricos en Elmer
  - Discretización de elementos finitos
  - Métodos numéricos básicos
  - Programación de nuevo modelo

# Algunos acoplamientos programados

## Problemas termofluidodinámicos

- velocidades en ecuación de Energía
- fuerzas de flotación en Navier-Stokes (Boussinesq)

## 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)

- 1 Multifísica en Elmer
  - Modelos disponibles en Elmer
  - Acoplamiento de modelos en Elmer
- 2 Métodos numéricos en Elmer
  - Discretización de elementos finitos
  - Métodos numéricos básicos
  - Programación de nuevo modelo

# 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 (térn. 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

### Level sets

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

### Moving meshes / ALE

- actualizaciones de malla para formulación ALE

# Discretización de elementos finitos (cont.)

## Manipulación de matrices

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

## Otras utilidades

- cálculo de variables derivadas:  
flujos, esfuerzos, divergencia, líneas de corriente ...
- proyección, filtrado ...

## Discretización de elementos finitos (cont.)

### Más información en ...

- documento ElmerSolver Manual
- documento Elmer Tutorials
- foro Elmer discussion forum  
<http://www.elmerfem.org/forum/>
- wiki Elmer wiki  
<http://www.elmerfem.org/wiki>

- 1 Multifísica en Elmer
  - Modelos disponibles en Elmer
  - Acoplamiento de modelos en Elmer
  
- 2 **Métodos numéricos en Elmer**
  - Discretización de elementos finitos
  - **Métodos numéricos básicos**
  - Programación de nuevo modelo

# Métodos numéricos básicos

## Sistemas de ecuaciones lineales

- métodos directos: método multifrontal (UMFPACK)
- métodos iterativos (Krylov): PCG, BiPCG, GMRES
- métodos multimalla geométrico/algebraico
- preconditionadores:  
Jacobi, ILU, multimalla (geométrico/algebraico)

## Fácil enlace a bibliotecas externas

- métodos directos: MUMPS y SuperLU
- métodos iterativos: HYPRE

# Métodos numéricos básicos (cont.)

## Sistemas de ecuaciones no lineales

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

## integración temporal

- métodos BDF (con adaptación de paso)
- Crank-Nicolson
- Bossak (ecuaciones orden 2)

## Cálculo de autovalores

- método de Arnoldi (ARPACK)

- 1 Multifísica en Elmer
  - Modelos disponibles en Elmer
  - Acoplamiento de modelos en Elmer
- 2 Métodos numéricos en Elmer
  - Discretización de elementos finitos
  - Métodos numéricos básicos
  - 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 12 (*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 desarrollo 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