Sesión 1. Simulación numérica multifísica

M. Meis y F. Varas

Departamento de Matemática Aplicada II
Universidad de Vigo

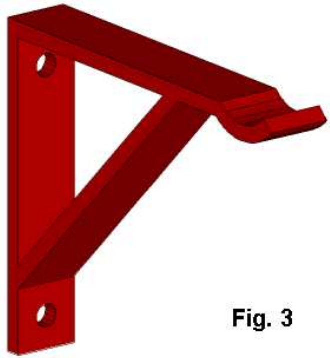
Introducción a Elmer, sofware libre
de simulación numérica multifísica
A Coruña, 26 de Junio al 1 de Julio de 2011

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

Un problema elemental

Cálculo estático de una pieza



Descripción del problema

- Geometría
- Ley constitutiva
- Cargas
- Restricciones cinemáticas

Formulación del problema estático

Formulación clásica (ecuación de equilibrio)

- Equilibrio de fuerzas:

$$-\mathrm{div}\sigma = -\rho g \vec{e}_3 \qquad \text{en } \Omega$$

- Ley constitutiva:

$$\sigma = \sigma(\epsilon(\vec{u}))$$

- Cargas y restricciones cinemáticas:

$$\begin{array}{lll} \sigma\vec{n} = \vec{F} & \text{en } \Gamma_1 & \text{(cargas contacto)} \\ \sigma\vec{n} = \vec{0} & \text{en } \Gamma_2 & \text{(caras libres)} \\ \vec{u} = \vec{0} & \text{en } \Gamma_3 & \text{(cara empotrada/fijada)} \end{array}$$

Formulación del problema estático (II)

Formulación variacional (principio trabajos virtuales)

V: campos de desplazamientos admisibles
(energía finita + restricciones cinemáticas)

$$\int_\Omega \sigma(\epsilon(\vec{u})) : \epsilon^{lin}(\vec{v})d\Omega = -\int_\Omega \rho g\vec{e}_3 \cdot \vec{v}d\Omega + \int_{\Gamma_1} \vec{F} \cdot \vec{v}dS$$

$$\forall\, \vec{v} \in V$$

Forma abstracta del principio de los trabajos virtuales

Encontrar $\vec{u}$ en V tal que

$$a(\vec{u}, \vec{v}) = l(\vec{v}) \qquad \forall\, \vec{v} \in V$$

Análisis estático lineal

Hipótesis de análisis lineal

- Hipótesis de pequeños desplazamientos y deformaciones (linealidad geométrica)
- Hipótesis de comportamiento elástico lineal (linealidad material)

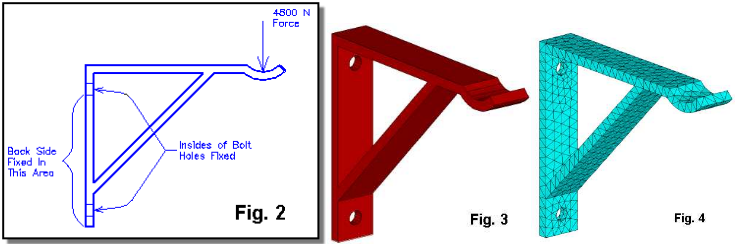
Ley de comportamiento lineal

- Elasticidad lineal: $\sigma(\epsilon(\vec{u})) = C\epsilon(\vec{u})$
- Pequeños desplazamientos: coordenadas eulerianas
- Pequeñas deformaciones: $\epsilon(\vec{u}) = \epsilon^{lin}(\vec{u}) = \frac{1}{2}(D\vec{u} + (D\vec{u})^T)$

Análisis estático con elementos finitos

Elaboración de un modelo de elementos finitos

1. Generación de mallado de pieza
2. Hipótesis campos de desplazamiento ($V_h \subset V$)
3. Ensamblado de matriz de rigidez y vector de carga



Obtención de un modelo de elementos finitos

Formulación variacional (Principio trabajos virtuales)

Encontrar $\vec{u} \in V$ tal que

$$\int_\Omega \sigma(\epsilon(\vec{u})) : \epsilon^{lin}(\vec{v}) d\Omega = -\int_\Omega \rho g \vec{e}_3 \cdot \vec{v} d\Omega + \int_{\Gamma_1} \vec{F} \cdot \vec{v} dS$$

$$\forall\ \vec{v} \in V$$

Ley de comportamiento

Elasticidad lineal + pequeños desplazamientos y deformaciones:

$$\sigma(\epsilon(\vec{u})) = C\epsilon^{lin}(\vec{u})$$

Obtención de un modelo de elementos finitos (cont.)

Campo de desplazamiento en modelo de elementos finitos

$$\vec{u}_h = \sum_{j=1}^{N} u_j \vec{\varphi}_j$$

Principio trabajos virtuales:

Encontrar $\{\vec{u}_i\}_{i=1}^{N}$ (desplazamientos nodales) tal que

$$\sum_{j=1}^{N} u_j \underbrace{\int_{\Omega} \sigma(\epsilon^{lin}(\vec{\varphi}_j)) : \epsilon^{lin}(\vec{\varphi}_i) d\Omega} = \underbrace{-\int_{\Omega} \rho g \vec{e}_3 \cdot \vec{\varphi}_i d\Omega + \int_{\Gamma_1} \vec{F} \cdot \vec{\varphi}_i dS}$$

$$\forall\, i \in \{1, 2, \ldots N\}$$

Formulación abstracta del análisis estático

Principio de los trabajos virtuales: caso continuo

Encontrar $\vec{u} \in V$ tal que

$$a(\vec{u}, \vec{v}) = l(\vec{v}) \qquad \forall\, \vec{v} \in V$$

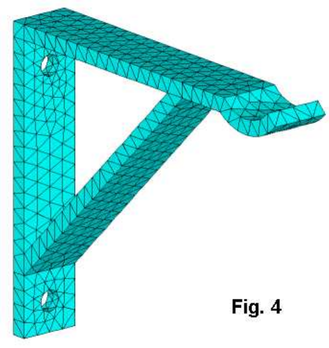
Principio de los trabajos virtuales: caso discreto

Encontrar $\{\vec{u}_i\}_{i=1}^{N}$ tal que

$$\sum_{j=1}^{N} u_j \, \underbrace{a(\vec{\varphi}_j, \vec{\varphi}_i)} = \underbrace{l(\vec{\varphi}_i)} \qquad \forall\, i \in \{1, 2, \ldots N\}$$

Análisis estático con MEF

Modelo de elementos de finitos



$$Ku = f$$

- K: matriz de rigidez
- f: vector de cargas (nodales)
- u: vector de desplazam. (nodales)

Resolución de modelo de elementos finitos

Resolución del sistema de ecuaciones

- matriz K simétrica y definida positiva
- en práctica: matriz K grande y hueca
- método (multi)frontal (p.e. `UMFPACK`)

Tratamiento de restricciones cinemáticas

- penalización / *stiff spring*
- eliminación
- multiplicadores de Lagrange (reacciones)

Formulación del problema estático no lineal

Principio de los trabajos virtuales

$$\int_\Omega \sigma(\epsilon(\vec{u})) : \epsilon^{lin}(\vec{v}) d\Omega = - \int_\Omega \rho g \vec{e}_3 \cdot \vec{v} d\Omega + \int_{\Gamma_1} \vec{F} \cdot \vec{v} dS$$

$$\forall \, \vec{v} \in V$$

Ley de comportamiento $\sigma = \sigma(\epsilon(\vec{u}))$

- no linealidad material (elast. no lineal, plasticidad, etc.) dependencia no lineal $\sigma(\epsilon)$
- no linealidad geométrica (grandes desplaz. / deformac.) tensor de deformaciones $\epsilon(\vec{u})$ no lineal

Problemas con grandes desplazamientos

Formulación con coordenadas lagrangianas

Modelo de elementos finitos en análisis no lineal

Campo de desplazamientos en modelo de elementos finitos

$$\vec{u}_h = \sum_{j=1}^{N} u_j \vec{\varphi}_j$$

Principio de los trabajos virtuales (caso discreto)

Encontrar $\{\vec{u}_i\}_{i=1}^{N}$ (desplazamientos nodales) tal que

$$\int_\Omega \sigma(\epsilon(\sum_{j=1}^{N} u_j \vec{\varphi}_j)) : \epsilon^{lin}(\vec{\varphi}_i) d\Omega = -\int_\Omega \rho g \vec{e}_3 \cdot \vec{\varphi}_i d\Omega + \int_{\Gamma_1} \vec{F} \cdot \vec{\varphi}_i dS$$

$$\forall\, i \in \{1, 2, \ldots N\}$$

Análisis estático MEF no lineal

Modelo de elementos finitos

Encontrar $\vec{u}$ tal que

$$\vec{F}(\vec{u}) = \vec{f}$$

donde:

- $\vec{F}(\vec{u})$: balance de fuerzas internas ($\vec{F}(\vec{u}) \neq K\vec{u}$)
- $\vec{f}$: fuerzas externas (sobre nodos)

Linealización del modelo de elementos finitos

Si $\vec{u} \simeq \vec{u}_0$ y $\vec{F}$ es regular:

$$\vec{F}(\vec{u}) \simeq \vec{F}(\vec{u}_0) + D\vec{F}(\vec{u}_0)(\vec{u} - \vec{u}_0)$$

Resolución de modelo elementos finitos no lineal

Resolución con método de Newton

1. Se toma $\vec{u}_0$ *cerca* de solución:
2. Se itera hasta convergencia:

$$\underbrace{D\vec{F}(\vec{u}_n)}(\vec{u}_{n+1} - \vec{u}_n) = \underbrace{\vec{f} - \vec{F}(\vec{u}_n)}$$

Iteracion del método de Newton

- ensamblado de matriz de rigidez tangente
- ensamblado de vector de cargas desequilibradas

Resolución de modelo elementos finitos no lineal (cont.)

Mejora (local) de robustez de Newton

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

$$D\vec{F}(\vec{u}_n)\vec{d}_n = \vec{f} - \vec{F}(\vec{u}_n)$$

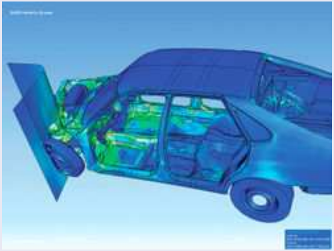
$$u_{n+1} = u_n + \tau_n \vec{d}_n$$

Mejora (global) de robustez de Newton

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

Análisis dinámico con modelos de elementos finitos

Descripción de un problema dinámico



- Geometría
- Ley constitutiva
- Cargas (temporales)
- Restricciones cinemáticas (temporales)

Formulación del problema dinámico

Formulación clásica (ecuación de equilibrio)

- Ecuación dinámica

$$\rho \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2} - \mathrm{div} \sigma = -\rho g \vec{e}_3 \qquad \text{en} \Omega$$

- Ley constitutiva: $\sigma = \sigma(\epsilon(\vec{u}))$
- Cargas y restricciones cinemáticas:

$$\begin{array}{lll} \sigma \vec{n} = \vec{F}(t) & \text{en } \Gamma_1 & \text{(cargas contacto)} \\ \sigma \vec{n} = \vec{0} & \text{en } \Gamma_2 & \text{(caras libres)} \\ \vec{u} = \vec{0} & \text{en } \Gamma_3 & \text{(cara empotrada/fijada)} \end{array}$$

- Condiciones iniciales: $\vec{u}(\cdot, t) = \vec{u}_0 \qquad \frac{\partial \vec{u}}{\partial t}(\cdot, t) = \vec{v}_0$

Formulación del problema dinámico (cont.)

Formulación variacional

Encontrar $\vec{u}(\cdot, t) \in V$ tal que

$$\int_\Omega \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2} \cdot \vec{v} d\Omega + \int_\Omega \sigma(\epsilon(\vec{u})) : \epsilon^{lin}(\vec{v}) d\Omega =$$

$$\int_\Omega \rho \vec{f} \cdot \vec{v} d\Omega + \int_{\Gamma_1} \vec{F} \cdot \vec{v} dS \qquad \forall\, \vec{v} \in V \quad \forall\, t \in (0, T)$$

con condiciones iniciales

Observación

En pequeños desplazamientos: Ω independiente del tiempo

$$\int_\Omega \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2} \cdot \vec{v} d\Omega = \frac{d^2}{dt^2} \int_\Omega \vec{u} \cdot \vec{v} d\Omega$$

Análisis dinámico con MEF (II)

Campo de desplazamientos en modelo de elementos finitos

$$\vec{u}_h(t) = \sum_{j=1}^{N} u_j(t)\vec{\varphi}_j$$

Principio trabajos virtuales (caso discreto)

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

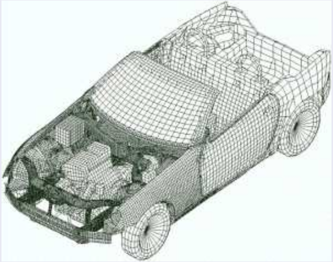
$$\sum_{j=1}^{N} \frac{d^2 u_j}{dt^2} \int_\Omega \vec{\varphi}_j \cdot \vec{\varphi}_i d\Omega + \int_\Omega \sigma(\epsilon(\sum_{j=1}^{N} u_j \vec{\varphi}_j)) : \epsilon^{lin}(\vec{\varphi}_i) d\Omega = -\int_\Omega \rho g \vec{e}_3 \cdot \vec{\varphi}_i d\Omega +$$

$$\forall\, i \in \{1, 2, \ldots N\} \quad \forall\, t \in (0, T)$$

con condiciones iniciales

Análisis dinámico con MEF (III)

Modelo elementos finitos dinámico



Modelo de elem. finitos:

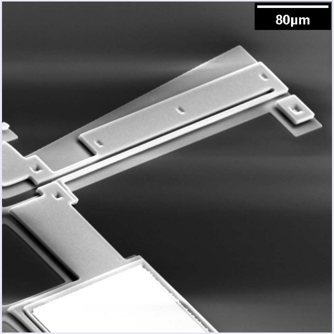
$$M\frac{d^2u}{dt^2} + F(u) = f(t)$$

$$u(0) = u_0$$

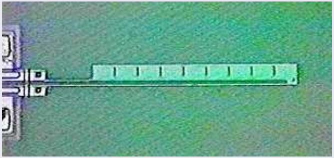
$$\frac{du}{dt}(0) = v_0$$

Actuador microelectromecánico

Guckel electro-thermal actuator (MEMS)



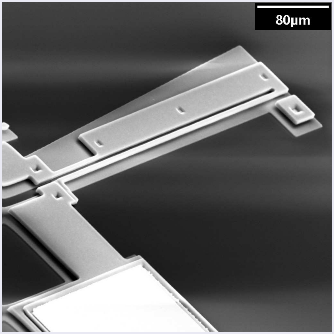
Sin tensión eléctrica



Con tensión eléctrica

Actuador microelectromecánico (II)

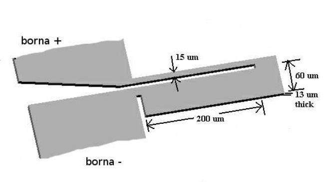
Guckel electro-thermal actuator (MEMS)



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

Actuador microelectromecánico (III)

Problema eléctrico



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

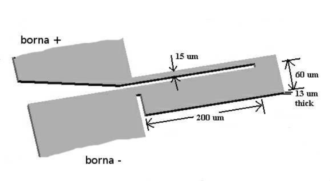
$V = 0$	en borna -
$V = V_f$	en borna +
$k_e \vec{\nabla} V \cdot \vec{n} = 0$	en resto

Modelo de elementos finitos

$$K_e V_h = b_e$$

Actuador microelectromecánico (IV)

Problema térmico



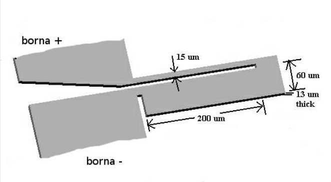
$$-div(k_t \vec{\nabla} T) = q_J$$
$$\text{con } q_J = k_e ||\vec{\nabla} V||^2$$
$$T = T_b \qquad \text{bornas}$$
$$-k_t \frac{\partial T}{\partial n} = h(T - T_{aire}) \qquad \text{resto}$$

Modelo de elementos finitos

$$K_t T_h = b_t(V_h)$$

Actuador microelectromecánico (V)

Problema mecánico



$$
\begin{aligned}
&-div\,\sigma = \vec{f} \\
&\text{con } \epsilon(\vec{u}) = C^{-1}\sigma - \alpha(T - T_{ref})I \\
&\vec{u} = \vec{0} \qquad \text{bornas} \\
&\sigma\vec{n} = \vec{0} \qquad \text{resto}
\end{aligned}
$$

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]