

Introdução ao COMSOL

Multiphysics

Susana Catarino

scatarino@dei.uminho.pt

Contacto (laboratório Gualtar): extensão 604707

Aula 1

Modelar e simular

O que é?

Representar através de modelos teóricos matemáticos os fenómenos físicos complexos.

Descrever modelos por equações e resolvê-los de modo a obter aproximações aos fenómenos reais.

Porquê?

Necessidade de compreensão e previsão, de modo a lidar com os fenómenos de forma mais efetiva.

Métodos de Previsão:

- Previsão Experimental
- Previsão Teórica

Sempre que possível, é recomendável seguir ambas e comparar os resultados

Previsão Experimental (testes em laboratório com protótipos, modelos à escala, etc.)

- Informação mais precisa
- Frequentemente é proibitiva em termos de custos
- Por vezes apenas possível em modelos à escala (requer extrapolação dos resultados...)
- Medições nem sempre possíveis
- Todos os dados experimentais têm um erro associado

Vantagens da Previsão Teórica (simulação)

- Baixo custo de implementação do modelo
- Permite o estudo de sistemas reais sem os ter de modificar
- Rapidez na obtenção de resultados
- Dados relevantes em todo o domínio (numa situação experimental há locais inacessíveis e interferência do equipamento de medida com o meio)
- Permite simular condições realistas com segurança (não é necessário usar a modelos à escala, nem perigo em simular substâncias tóxicas ou corrosivas)
- Permite simular situações ideais (simetria, paredes adiabáticas, etc...)
- Possibilita compreender quais as variáveis mais importantes para o problema e como estas interagem entre si.

- Desvantagens da Previsão Teórica (simulação)
- A utilidade dos resultados de uma simulação depende da validade do modelo matemático
- A construção do modelo requer experiência
- É necessário equilíbrio no modelo, uma vez que geralmente têm simplificações associadas para diminuir a complexidade dos modelos.
 Mas é necessário um equilíbrio para que com estas simplificações não se perca informação importante.
- Os problemas com a simulação podem ser de vários tipos:
- (1) a simulação pode tornar-se complexa e cara.
- (2) Quando o modelo matemático admite várias soluções, pode ser complexo determinar qual delas é a correta e interpretar o seu significado físico.
- (3) Problemas para os quais não existem modelos matemáticos bem definidos.

Tipos de previsão teórica:

- Modelos analíticos: descrevem o fenómeno físico através de uma solução fechada e a solução é obtida pela resolução direta do sistema de equações associado ao problema. Em sistemas complexos, muitas vezes é complicado, ou mesmo impossível, obter uma solução analítica.
- Modelos numéricos: Descrevem o fenómeno físico através da resolução de equações para encontrar soluções aproximadas (mas precisas) de problemas complexos. Útil quando é complexo, moroso ou caro testar ou medir as diversas soluções possíveis para um fenómeno a partir de modelos experimentais ou analiticamente. A solução é obtida através de algoritmos que se dividem em diretos ou iterativos, com o objetivo de encontrar sucessões que levem à convergência da solução, ou seja, aproximem os valores exatos com um número mínimo de operações elementares.
 - Finite Elements Method FEM,
 - Finite Volumes Method FVM,
 - Finite Differences Method FDM

diferem no tipo de discretização das equações

Descrição matemática dos problemas

- A solução numérica de um fenómeno implica que o processo/fenómeno seja expressado matematicamente,
 normalmente recorrendo a equações diferenciais.
- Equações diferenciais governativas / diretoras descrevem os processos físicos
- Equação diferencial:
 - Cada equação diferencial apresenta um princípio de conservação: momento, massa ou energia.
 - Cada equação apresenta uma grandeza física como variável dependente (por exemplo temperatura, velocidade, campo elétrico, etc.) e implica um balanço entre os vários fatores que afetam a variável.
 - Os termos de uma equação diferencial são aplicados numa base volúmica.
 - Uma equação diferencial não é mais que um conjunto de termos, cada um expressando uma influência numa base volúmica, gerando em conjunto um balanço de conservação sobre o referido volume.

Descrição matemática dos problemas

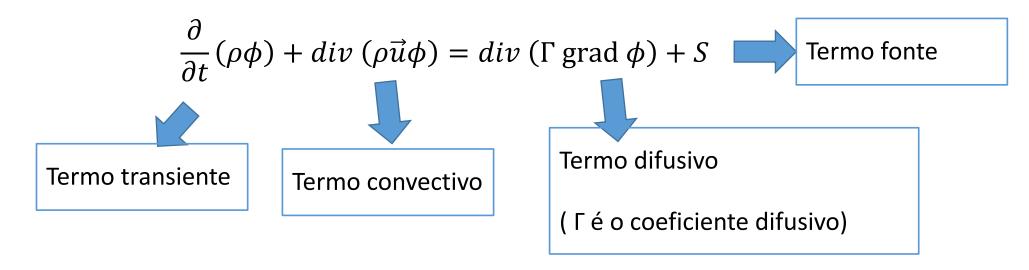
- Conservação da massa
- Conservação do momento
- Conservação da energia

Em cada problema é importante ter em conta que equações têm de ser resolvidas

Equação Governativa Geral

Conservação diferencial governativa geral:

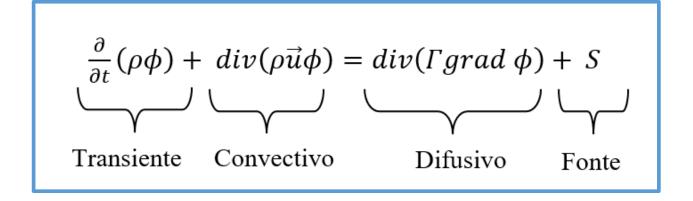
Tendo em conta os exemplos apresentados, observam-se pontos em comum que mostram que o princípio de conservação pode ser generalizado. Para a variável dependente φ, a equação diferencial será:



A variável dependente φ pode assumir várias grandezas: fração de massa, temperatura, entalpia, componente da velocidade, potencial elétrico, deslocamento, etc...

Exemplo – Transporte de calor

Equação genérica para um problema numérico de transporte de calor. Em estado não estacionário, os 4 termos são relevantes!

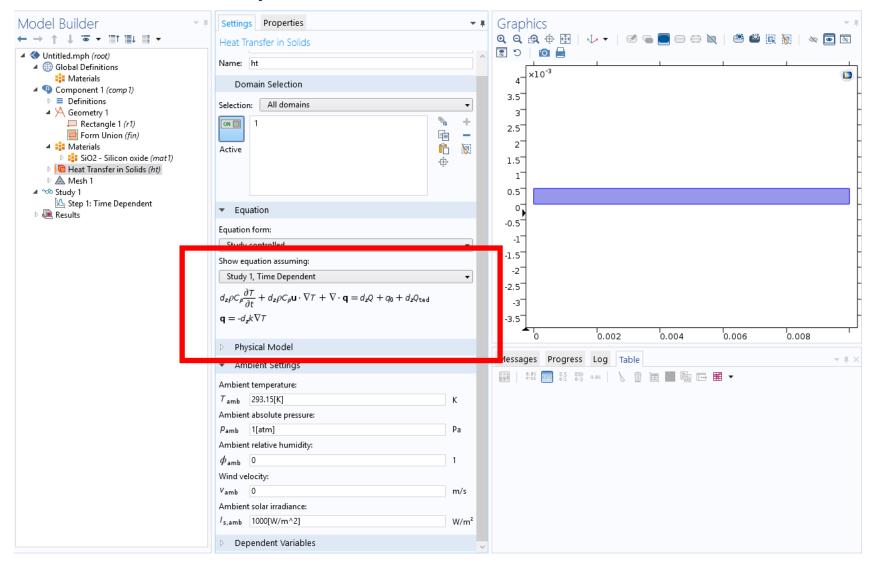


Termo transiente – taxa de variação com o tempo

Termo convectivo - fluxo transportado pelo escoamento (daí a presença da variável u - velocidade)

- ϕ variável dependente
- Γ coeficiente difusivo
- S termo fonte (geração de calor por unidade de volume)

COMSOL – Transporte de calor



Exemplo – piezoelétrico

$$S = s^E M + d^M E$$

$$D = \varepsilon^M E + d^E M$$

$$\mathbf{S} = (\nabla \mathbf{m} + (\nabla \mathbf{m})^T)/2$$

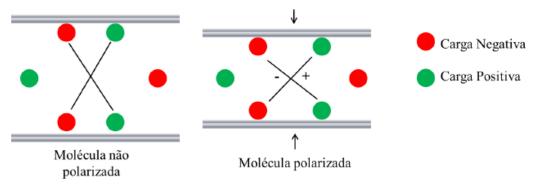
$$\rho(\partial^2 \mathbf{m}/\partial t^2) - \nabla \cdot \mathbf{M} = \mathbf{b}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0$$

Momentum Balance

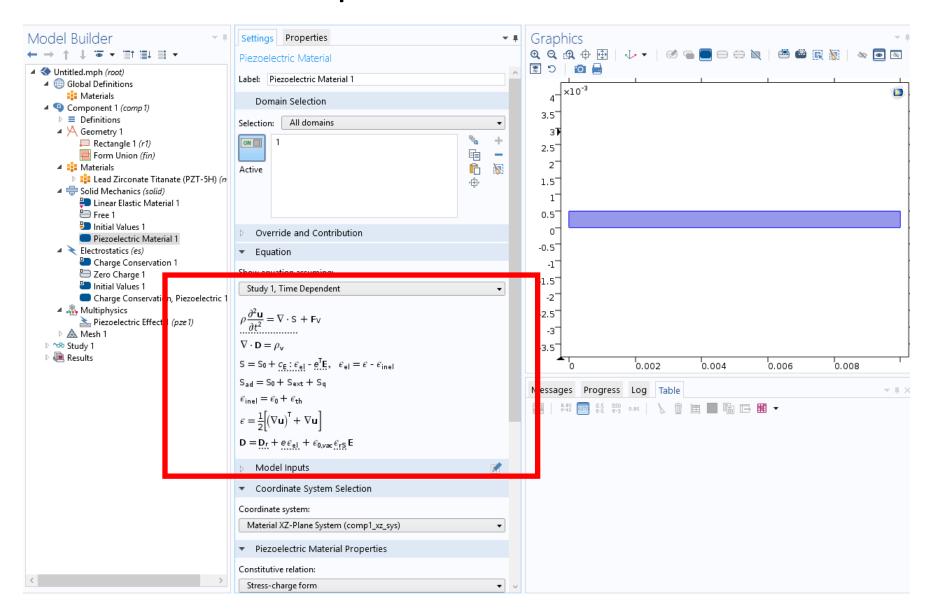
Electric Field Balance

Formação de um dipolo elétrico por aplicação de uma tensão mecânica.



- balanço de momento (m deslocamento mecânico, ρ densidade, M tensão mecânica, b força externa).
- balanço de energia elétrica equação de Maxwell (D vetor deslocamento elétrico).
- sistema de relações lineares (equações constitutivas). d^M
 e d^E coeficientes piezoelétricos, s^E coeficiente elástico,
 ε^M permitividade dielétrica, E campo elétrico, S deformação mecânica.

COMSOL – Efeito piezoelétrico

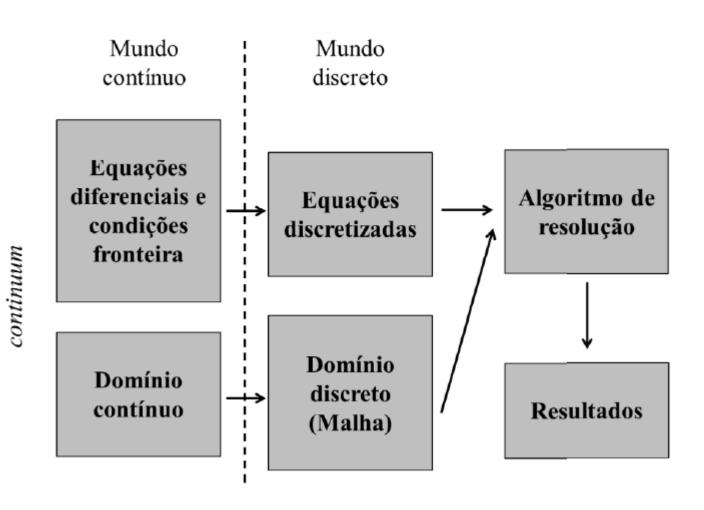


Discretização dos problemas

Hipótese do

Depois de termos as equações governativas que descrevem o fenómeno físico e conhecermos o domínio, podemos então discretizá-las!

Este passo é essencial para poder resolver o problema.



Discretização dos problemas

Os métodos numéricos partem de equações que descrevem como a matéria se comporta no mundo contínuo e transformam essas equações e o respetivo domínio em algo que possa ser descrito por um computador digital.

Os modelos numéricos são discretizados em pequenos elementos e as equações de conservação são resolvidas para cada um deles.

Este processo implica uma perda de informação, com a consequente introdução de um erro de discretização.

Ao discretizar, transforma-se a distribuição da variável dependente, φ (antes numa equação diferencial), num polinómio do tipo:

$$\phi = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_n x^n$$

Os coeficientes a_0 , a_1 , ..., a_n são determinados através de métodos numéricos, que tratam como incógnitas os valores da variável dependente num número finito de nós ou pontos de cálculo no domínio.

Para que serve a discretização?

Substituição da informação contínua da solução exata (muitas vezes complexa ou impossível) por valores discretos (os nós ou pontos de cálculo). É necessário assumir a forma como a variável dependente varia entre os pontos de cálculo.

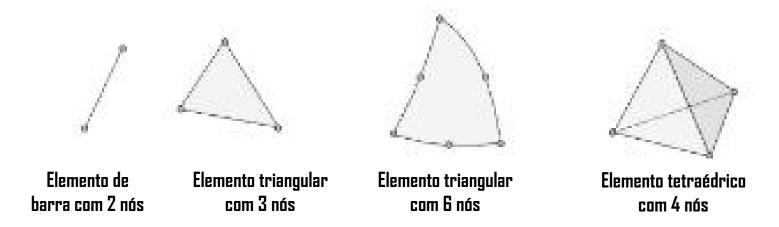
Assim, várias abordagens existem para o processo de discretização: diferenças finitas, elementos finitos e volumes finitos.

Estrutura da equação discretizada:

- É uma equação algébrica que relaciona os valores da variável dependente entre um grupo de pontos de cálculo próximos.
- O valor da variável dependente em cada ponto apenas influencia a variação da variável dependente nos pontos vizinhos.
- À medida que o nº de pontos do domínio aumenta, a solução irá convergir para a solução exata.
- A partir da mesma equação diferencial podemos obter diferentes equações discretizadas (dependendo do método são usados diferentes métodos de derivação e interpolação), mas a sua solução deve convergir com o aumento do número de pontos de cálculo.

COMSOL: Elementos Finitos - FEM

O método é iniciado pela subdivisão do domínio num conjunto de elementos discretos, geralmente triangulares ou quadrangulares, que formam a malha. Estes elementos são delimitados por um número finito de nós onde as variáveis dependentes são determinadas através de aproximações.



Recorre a funções lineares ou quadráticas nos elementos da malha para descrever as variações locais das variáveis dependentes, de um modo que garanta a continuidade da solução através das fronteiras do elemento.

- As funções representam a variação da solução dentro do elemento.
- A solução em cada elemento é aproximada por uma combinação algébrica dos valores nodais locais.

Elementos Finitos - FEM

- O método dos elementos finitos é adequado para encontrar soluções aproximadas de equações diferenciais parciais, tanto lineares como não lineares, bem como de equações integrais.
- Este método permite o uso de malhas não estruturadas

- Permite o estudo de estruturas e fluidos complexos, o que garante uma elevada flexibilidade em problemas de multifísica.

Discretização Temporal

Métodos explícitos:

• calcula valores da variável dependente num instante de tempo $(t+\Delta t)$ usando os valores das etapas anteriores (t)

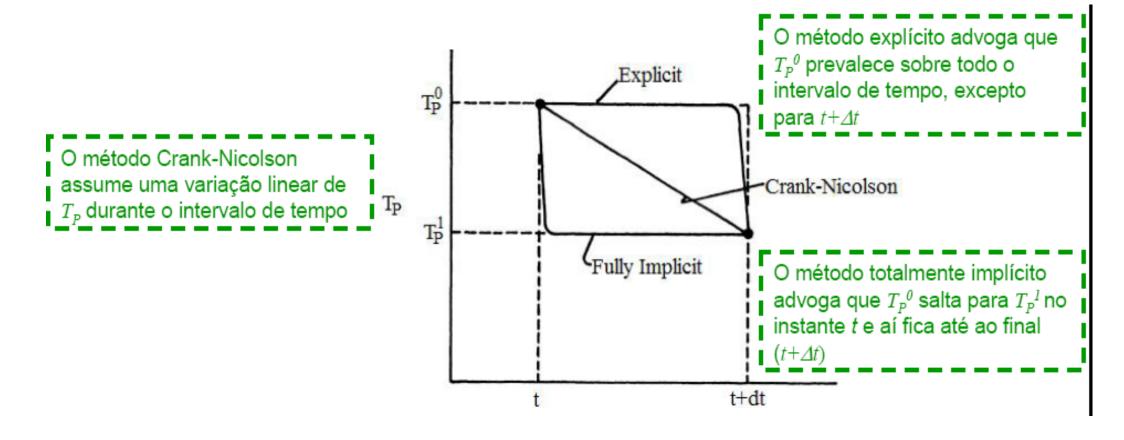
Métodos implícitos:

- encontra a solução através de uma equação que envolve o valor anterior e o próprio valor.
- num método implícito, a solução é calculada iterativamente em cada nível de tempo usando o próprio valor, antes de se avançar para o nível seguinte.

Crank-Nicholson:

• Tem em conta, de forma igual, o instante atual e o anterior. Para intervalos de tempo muito pequenos, apresenta resultados mais precisos.

Discretização Temporal



Variação da temperatura com o tempo para os diferentes esquemas de discretização temporal.

Discretização Temporal

Os esquemas implícitos exigem maior custo computacional, mas garantem maior estabilidade relativamente ao valor de Δt , ou seja, permitem maiores incrementos temporais sem porem em causa a estabilidade da solução transiente. **Assim, sempre que possível, adotar métodos implícitos.**

Critério de estabilidade: À medida que Δx diminui para aumentar a precisão espacial, Δt tem de diminuir também. O respeito desta regra pode implicar Δt muito pequenos. Não respeitar esta regra leva a resultados irrealistas.

Cumprir o critério de estabilidade leva a um aumento da memória e tempo computacional

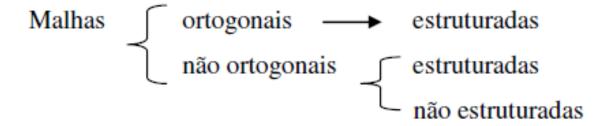
Domínio & Geometria

- Desenhada no software desejado (COMSOL ou outro software de desenho e modelação 2D ou 3D).
- Garantir que o desenho é correto:
 - Domínios fechados: garantir que não são deixadas fronteiras por fechar. Senão ocorrerão problemas na geração da malha.
 - Em domínios adjacentes, exemplo uma interface entre dois domínios, garantir que não fica o mínimo espaço entre eles, senão o software não conseguirá interpretar como domínios adjacentes. Confirmar sempre as coordenadas da geometria.

Uma vez definido a **geometria** e o **problema numérico** [**Física**], é preciso definir os materiais do domínio, **malha**, **condições fronteira**, **condições iniciais** e **solvers**.

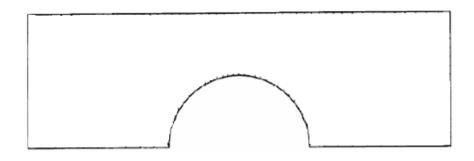
Malha

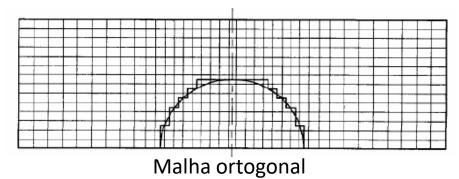
- Os pontos em que as variáveis são calculadas, são definidos pelas malhas numéricas.
- A malha divide o domínio da solução num número finito de sub-domínios (elementos, volumes de controlo, etc.). Os tipos de malhas podem ser agrupados do seguinte modo:

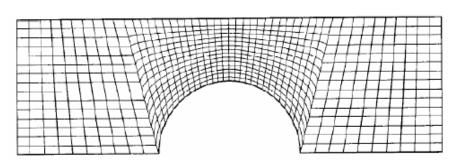


O número de pontos da malha vai determinar o número de variáveis independentes onde o problema é resolvido.

Mais elementos de malha → mais variáveis independentes → maior tempo de cálculo (maior precisão de resultados)



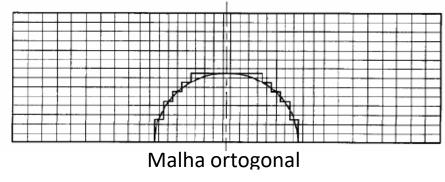


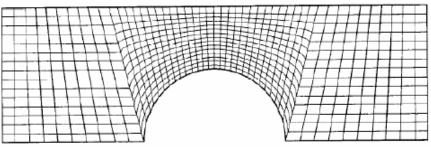


Malha não ortogonal (estruturada)

Malhas ortogonais:

- são sempre estruturadas e baseiam-se em sistemas de coordenadas ortogonais (ou Cartesianos) ou cilíndricos Todos os elementos da malha têm formato semelhante.
- apresentam limitações em geometrias irregulares e complexas.
- em esquemas de geometrias irregulares como o exemplo acima, para mapear uma malha ortogonal é necessário incluir regiões que não fazem parte da geometria a analisar.





Malha não ortogonal (estruturada)

Malhas ortogonais:

- Para resolver um problema associado à geometria, é necessário representar a fronteira com uma aproximação e não considerar células no interior do meio cilindro.
- Problemas:
 - Difícil descrever a aproximação de fronteira; Erros inerentes à aproximação;
 Desperdício de recursos: ao colocar uma malha refinada numa região de interesse, implica que outras regiões de pouco interesse também sejam refinadas.

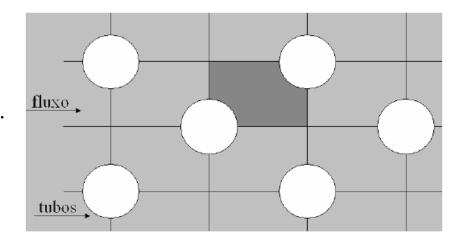
Malhas não ortogonais:

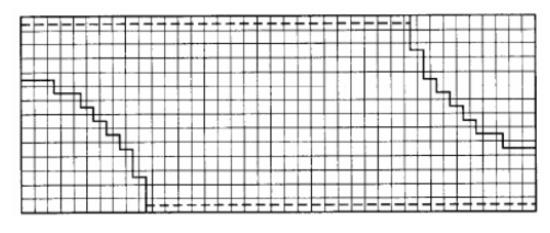
- Superam as limitações das malhas ortogonais e são cada vez mais utilizadas em simulação computacional
- Flexibilidade geométrica: Todos os detalhes podem ser incorporados de forma precisa, podem variar de acordo com as regiões de interesse.
- As equações governativas com malhas não ortogonais são mais complexas do que as das malhas ortogonais equivalentes.

Exemplo: permutador de calor

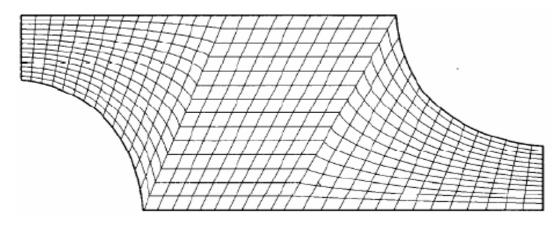
Considere-se que apenas é necessário analisar a região sombreada a escuro.

Considerem-se duas malhas de **40x15 elementos** para mapear a geometria:



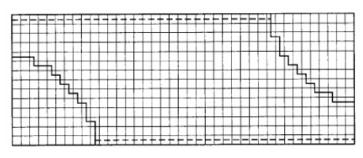




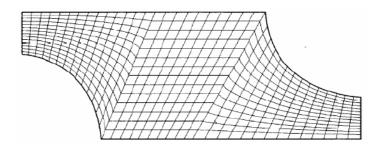


Malha não ortogonal (estruturada)

Malha ortogonal

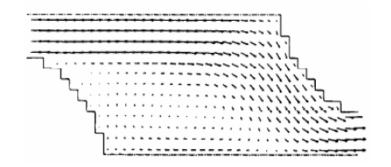


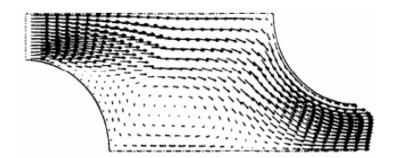
Malha não ortogonal (estruturada)



Para o mesmo número de células nas malhas (40x15):

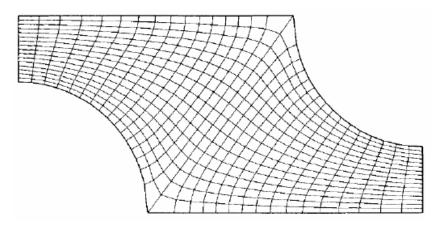
- Na malha ortogonal cerca de 25% do espaço não é útil (corresponde a zonas onde não passa fluido do permutador).
- Na malha não ortogonal toda a malha ocupa a zona do fluido e as superfícies dos cantos são representadas com precisão. Os recursos computacionais são bem utilizados. Gera resultados com muito mais detalhe, quando usando a mesma malha. Exemplo: campo de velocidades abaixo apresentado:





Malhas estruturadas

- As malhas não ortogonais podem ser estruturadas ou não estruturadas, de acordo com a disposição dos diferentes elementos.
- Numa malha estruturada ou regular os elementos são dispostos em famílias de linhas, em que membros de uma determinada família não se cruzam uns com os outros e atravessam cada membro de outras famílias apenas uma vez. Assim, o número de "linhas" e "colunas" numa malha estruturada mantém-se constante no domínio.
- Esta estrutura de malha é simples e equivalente a uma malha ortogonal: cada ponto tem 4 vizinhos em 2D e 6 em 3D.
- A estrutura regular das malhas estruturadas simplifica a programação e matriz do sistema de equações algébricas.
- malhas só aplicáveis a domínios com geometrias de complexidade média.



Malhas estruturadas por blocos

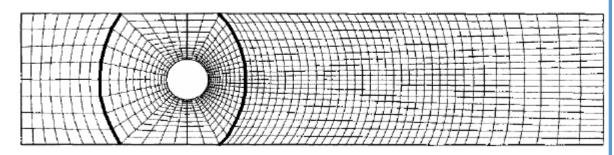
Ultrapassam limitações associadas à utilização de malhas estruturadas convencionais.

Neste tipo de malhas existem dois ou mais níveis de subdivisão do domínio de solução.

Nível mais grosseiro – blocos lógicos com regiões relativamente largas do domínio. A sua estrutura pode ser irregular.

Nível mais refinado – dentro de cada bloco é criada uma malha estruturada. Neste tipo de malhas é necessário um

tratamento especial nas interfaces dos blocos.



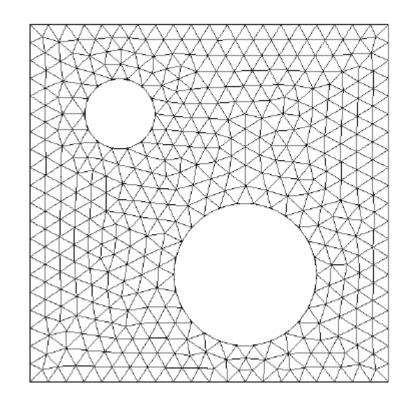
Malha estruturada com 3 blocos com continuidade nas fronteiras entre os blocos.

Flexibilidade das malhas por blocos.

Permitem usar malhas mais finas em regiões onde é necessária maior precisão de cálculo – é possível refinar as malhas localmente. A programação de malhas estruturadas por blocos é mais complexa do que a programação de malhas estruturadas comuns.

Malhas não estruturadas

- Tipo mais flexível de malhas para geometrias muito complexas (sem limitações)
- Os elementos ou volumes podem ter qualquer forma e não há restrição ao número de elementos vizinhos ou vértices (mais frequentes são triângulos e quadriláteros em 2D e tetraedros ou hexaedros em 3D).
- Maior complexidade na formulação dos dados, uma vez que a matriz do sistema de equações algébricas não tem estrutura diagonal regular.
- Códigos computacionais mais flexíveis e ajustam-se mais facilmente a alterações da malha, mas algoritmos de resolução mais lentos.



Malhas – conclusões gerais

- Por regra, é necessário usar uma malha suficientemente refinada para obter uma solução precisa.
- No entanto, poderá ser necessário apenas refinar uma região onde seja necessária maior precisão de resultados.
- Não existe nenhuma regra para definir o espaçamento ótimo e a dimensão dos elementos da malha.
- Normalmente recomenda-se uma malha grosseira preliminar para obter uma primeira estimativa da variável dependente e, a partir daí, o refinamento da malha para obter resultados mais precisos, até chegar à malha ideal.

Métodos de resolução - solvers

Na fase de aplicação do solver, é obtida uma solução numérica apropriada para o modelo matemático (já discretizado e na forma de equações algébricas linearizadas).

O solver é o programa numérico que consiste na aplicação de uma sequência de tarefas de modo a obter a solução das equações, e difere nas aproximações efetuadas às variáveis e nos processos de discretização.

Habitualmente, as equações de discretização devem apresentar-se na forma (para um exemplo 1D):

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + b$$

onde:

$$a_E = \frac{k_e}{\delta x_e} \qquad a_W = \frac{k_w}{\delta x_w}$$

$$a_P = \frac{k_e}{\delta x_e} + \frac{k_w}{\delta x_w} = a_E + a_W \qquad b = \bar{S}\Delta x$$

Solvers – solução das equações algébricas lineares

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + b$$

Com a equação neste formato, T_P , T_E e T_W são incógnitas. a_P , a_F , a_W são coeficientes e b é constante.

Esta equação pode ser apresentada igualmente com coeficientes a_{ii}, incógnitas x_i e constantes b_i, como no exemplo abaixo:

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1$$

Um sistema linear com m equações e n incógnitas apresenta-se como:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n = b_m \end{cases} \quad \text{onde} \quad 1 \le i \le m,$$

```
onde
a_{ii}: coeficientes 1 \le i \le m, 1 \le j \le n
x_i: variáveis j = 1,..., n
```

Solvers – solução das equações algébricas lineares

- A resolução de um sistema linear consiste em calcular os valores de x_j, com j=1, ..., n, caso eles existam, que satisfaçam as m equações simultaneamente.
- Usando notação matricial, o sistema linear pode ser representado por:

$$Ax = b$$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix} \qquad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \qquad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}$$

onde \mathbf{A} é a matriz (m,n) dos coeficientes, \mathbf{x} é o vetor (n linhas) das variáveis e \mathbf{b} (m linhas) é o vetor das constantes.

Solvers – solução das equações algébricas lineares

Os métodos numéricos para a resolução de um sistema linear podem ser divididos em:

MÉTODOS DIRETOS – A menos que ocorram erros no arredondamento, fornecem a solução exata do sistema linear, caso ela exista, após um número finito de operações. Baseados em métodos de resolução direta de sistemas de equações na forma matricial Ax=b por algoritmos de substituição. Podem ser usados métodos de pivoteamento (ex: eliminação de Gauss)

MÉTODOS ITERATIVOS – Geram uma sequência de vetores $\{x^{(k)}\}$, a partir de uma aproximação inicial $x^{(0)}$. Sob certas condições, esta sequência converge para a solução x^* , caso ela exista. Os vetores vão-se aproximando da solução do problema a cada iteração. O valor inicial da aproximação $x^{(0)}$ é arbitrário, uma vez que a convergência do método iterativo é independente da aproximação inicial escolhida.

Solvers – considerações

- Os métodos diretos são processos finitos (uma única iteração) e, teoricamente, obtêm a solução de qualquer sistema não singular de equações.
- Os métodos diretos apresentam problemas com erros de arredondamento (que podem passar de umas etapas para as seguintes, aumentando significativamente). Usar técnicas de pivoteamento pode atenuar esses problemas.
- Os métodos iterativos têm convergência assegurada apenas sob determinadas condições (ver, por exemplo, critério de estabilidade!!!).
- Os métodos iterativos têm menos erros de arredondamento, uma vez que a convergência é independente da aproximação inicial depende só do erro da última iteração efetuada (os erros cometidos nas iterações anteriores não levam à divergência do processo).

Solvers – métodos iterativos

Convergência dos solvers e critérios de paragem

O processo iterativo é repetido até que o vetor $x^{(k)}$ esteja suficientemente próximo do vetor $x^{(k-1)}$.

Mede-se a distância entre $x^{(k)}$ e $x^{(k-1)}$, através da expressão:

$$d^{(k)} = \max_{1 \le i \le n} \left| x_i^{(k)} - x_i^{(k-1)} \right|$$



Valor máximo entre todos os pontos

Se a diferença estiver a diminuir a cada iteração o método está em processo de convergência. O método converge quando chega ao critério de paragem, ou seja, ao erro de tolerância especificado (exemplo 0.001%).

Assim, dada uma precisão ε , o vetor $x^{(k)}$ será escolhido como \bar{x} (ou seja, solução aproximada da solução exata), se $d^{(k)} < \varepsilon$.

O erro relativo do método será dado por:

$$d_r^{(k)} = \frac{d^{(k)}}{\max\limits_{1 \le i \le n} \left| x_i^{(k)} \right|} < \varepsilon$$

Propriedades dos solvers

- **Consistência** método consistente se o erro de truncatura tende para zero quando o espaçamento da malha tende também para zero;
- **Estabilidade** método numérico estável se não amplifica o erro durante o processo de resolução numérica. Em problemas transientes, a estabilidade garante que o método produz uma solução delimitada sempre que a solução da equação exata for delimitada e, em métodos iterativos, garante que não ocorre divergência;
- **Convergência** método convergente se a solução da equação discretizada tende para a solução exata da equação diferencial quando o espaçamento da malha tende para zero. A consistência e a estabilidade do método são condições necessárias e suficientes para que ocorra convergência;

- **Contorno limitado** as soluções numéricas devem situar-se entre fronteiras adequadas, ou seja, quantidades fisicamente não negativas devem sempre ser positivas e, do mesmo modo, na ausência de fontes, os valores máximos e mínimos da variável devem encontrar-se nas fronteiras do domínio;
- Soluções com significado físico os modelos devem garantir soluções realistas. Se os modelos não forem devidamente projetados podem levar a soluções sem significado físico ou a métodos não convergentes;
- **Precisão** a precisão de um método relaciona-se com os erros sistemáticos (de modelação, de discretização e de iteração ou convergência) que levam a que as soluções numéricas sejam aproximadas às soluções exatas;
- **Conservação** uma vez que as equações a resolver são leis de conservação, o modelo numérico deve respeitar também estas leis, isto é, em estado estacionário e na ausência de fontes, uma quantidade que sai de um volume fechado é igual à quantidade que entra nesse volume.

Métodos diretos	Métodos iterativos		
UMFPACK	GMRES		
SPOOLES	FGMRES		
PARDISO	Conjugate Gradients		
TAUCS	Geometric Multigrid		

No caso de modelos com um número muito elevado de graus de liberdade (> 100 000), os *solvers* diretos consomem demasiada memória. Nesses casos, os *solvers* iterativos são mais eficientes e apresentam melhor desempenho, apesar de serem menos estáveis e a convergência ser, por isso, mais difícil.

Lista de solvers disponibilizados pelo COMSOL Multiphysics.

Os solvers diretos mais utilizados são o Unsymmetric Multifrontal sparse LU Factorization Package — UMFPACK (mais estável, mas consome mais memória) e o SParse Object Oriented Linear Equations Solver — SPOOLES, que consome menos memória, mas perde em estabilidade. Ambos consistem num conjunto de rotinas para a resolução de sistemas de equações lineares na forma Ax = b, usando o método multifrontal e factorização direta LU da matriz esparsa (matriz com muitos elementos zero) A, e com pré-ordenação da matriz baseada no algoritmo de minimum degree.

Os *solvers* iterativos no COMSOL apresentam várias abordagens, mas são todos baseados num método de gradientes conjugados, com algumas variações entre eles. Ao contrário dos *solvers* diretos, os *solvers* iterativos aproximam-se da solução de forma gradual, em vez de num único passo computacional. Assim, com o aumento do número de iterações, observa-se uma diminuição da estimativa do erro.

Pós-processamento

Na fase de pós-processamento, ocorre a extração dos dados e a sua análise, de modo a validar o modelo numérico. Se a física envolvida no problema não for compreendida, podem resultar interpretações erradas, comprometendo a correção do modelo.

Como ver se os resultados têm significado físico? Validação!

Melhor método de validação de resultados de simulação numérica é a comparação com cálculo analítico ou testes experimentais. Quando não é possível, o modelo pode ser validado recorrendo a:

- Testes estatísticos (dados reais vs resultados da simulação);
- Comparação com modelos anteriores (se houver);
- Análise de sensibilidade (alterar parâmetros de entrada).

Resumo: 3 etapas principais: pré-processamento, solver e pós-processamento

• Pré-processamento:

- geometria
- malha (precisão da solução depende do nº de elementos, que deve resultar de um balanço entre a precisão necessária e o custo em tempo computacional e memória exigida)
- fenómenos a modelar modelados (física do problema)
- propriedades dos materiais
- condições fronteira e condições iniciais

Solver:

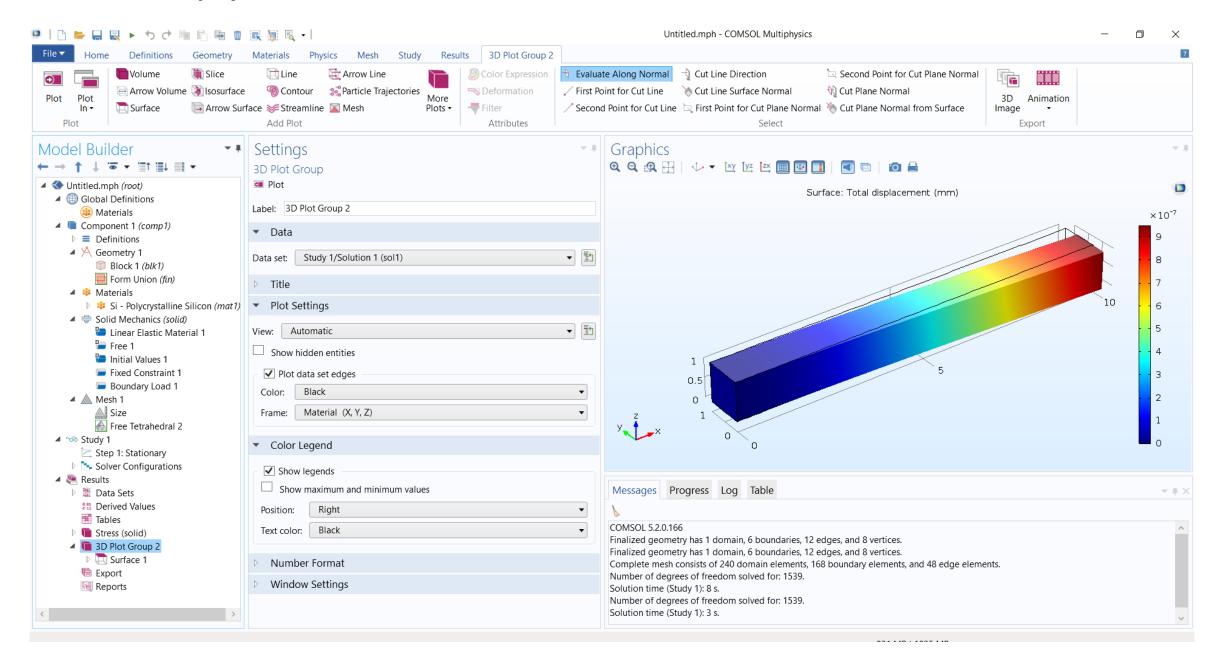
• obtem-se a solução numérica apropriada para o modelo. O solver é o programa numérico que aplica um algoritmo, i.e, uma sequência de tarefas de modo a obter a solução das equações (de modo direto ou iterativo).

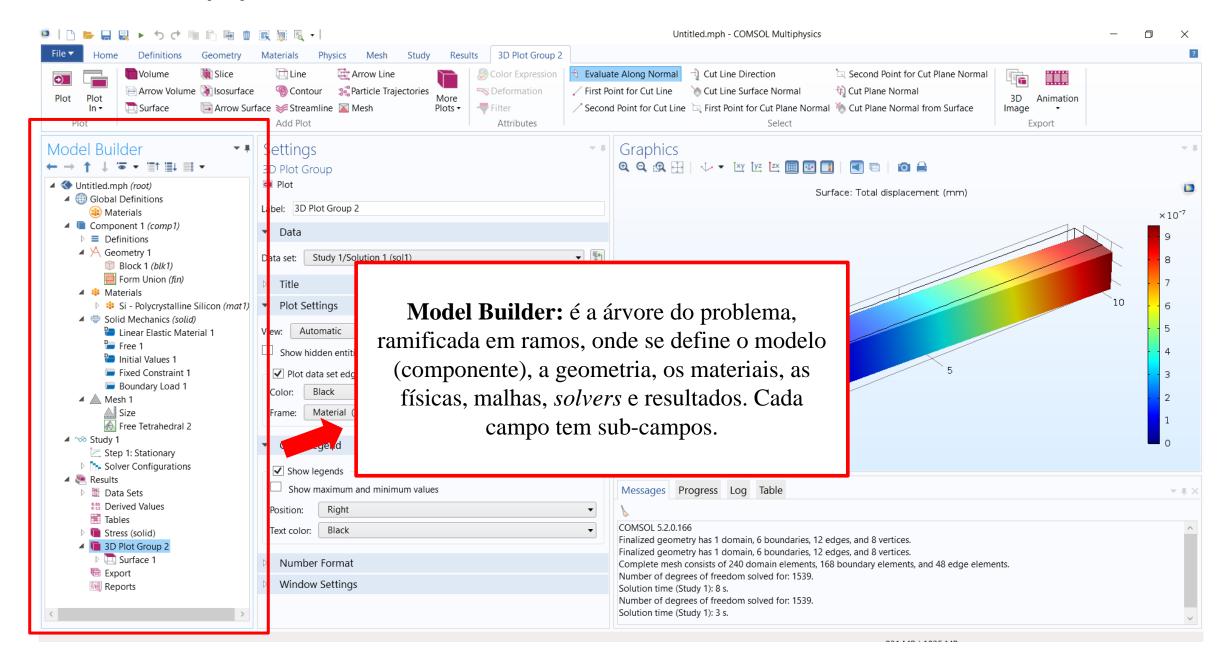
Pós-processamento:

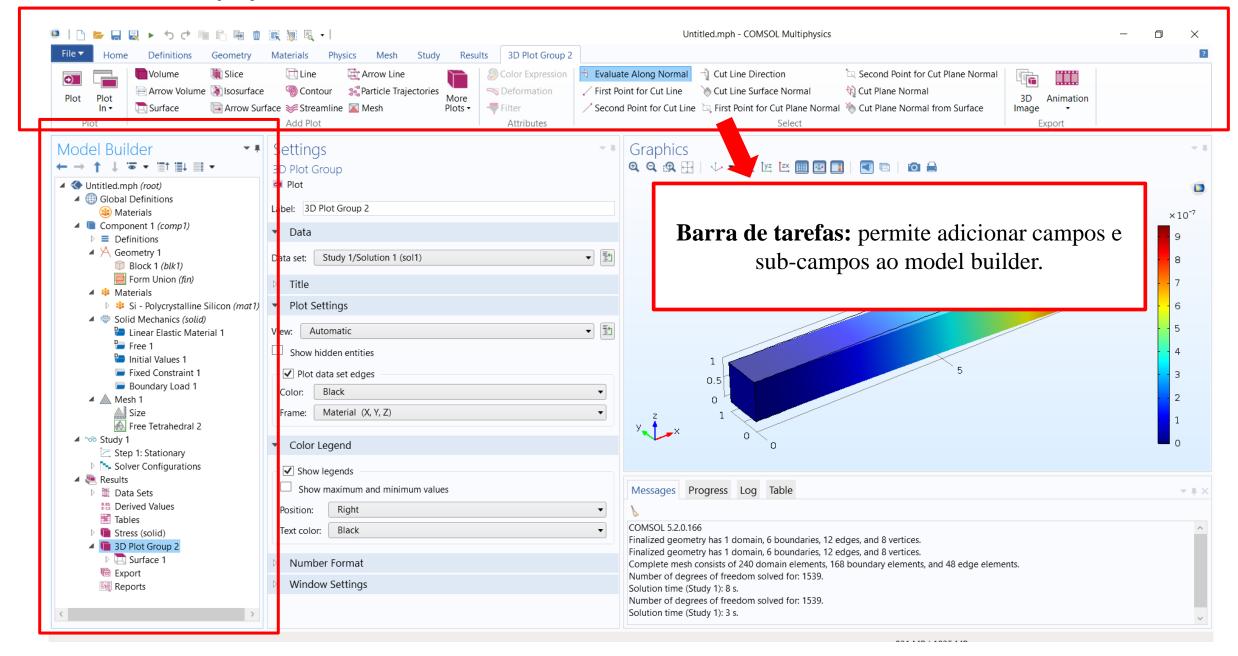
• extração dos dados e a sua análise, de modo a validar o modelo.

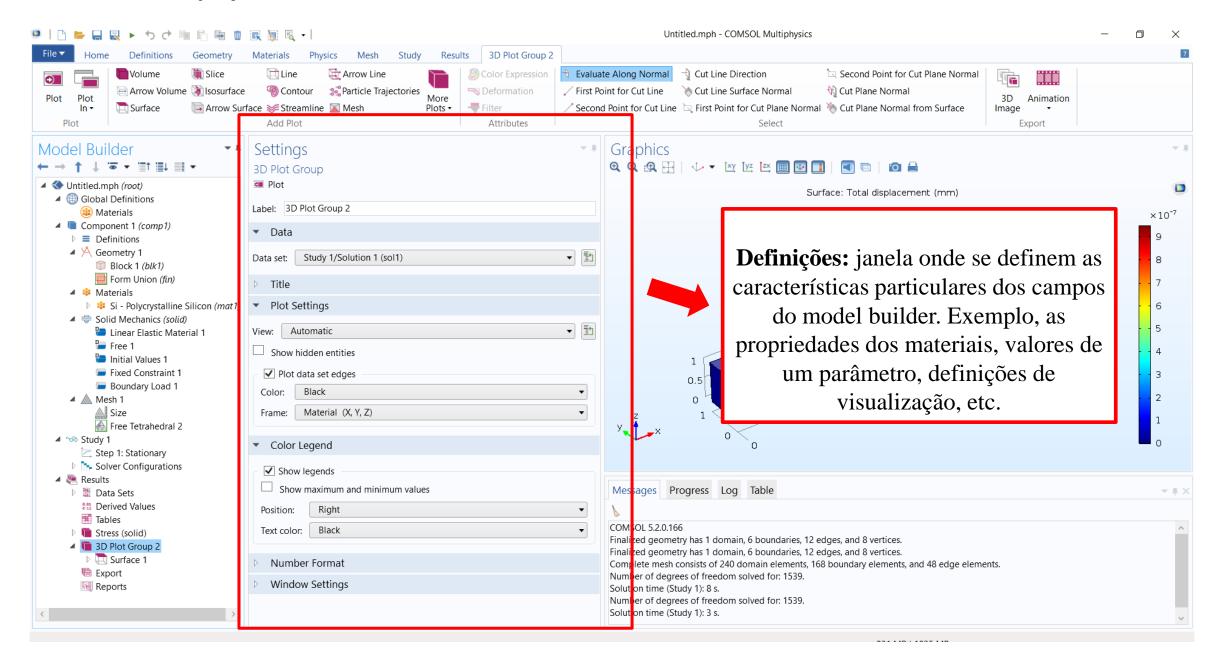
INTRODUÇÃO AO COMSOL MULTIPHYSICS

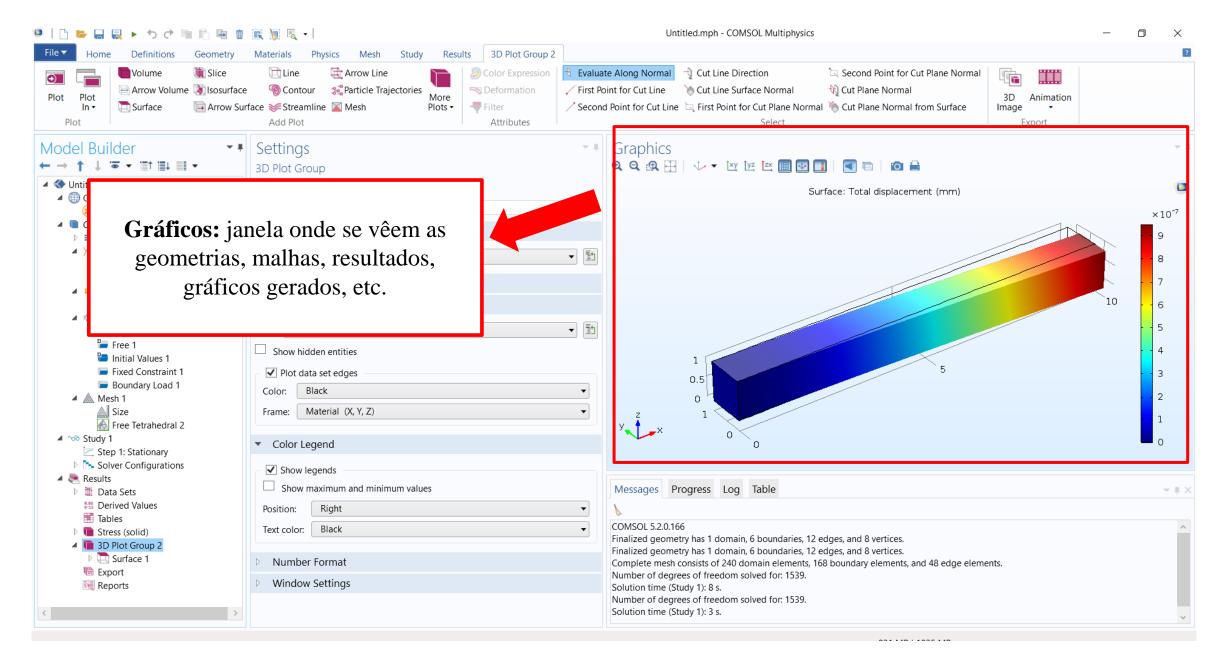
- ferramenta integrada, baseada em métodos de elementos finitos
- interface gráfica simples
- modelação e simulação de fenómenos de multifísica, em problemas estacionários ou transientes, em 1D, 2D e 3D.
- inclui vários módulos com aplicação à física pré-definidos, bem como uma ferramenta genérica para implementação de equações diferenciais parciais (PDEs) que não estejam previamente definidas >>> facilidade de implementação de vários fenómenos através da interface disponibilizada.
- **implementação de um modelo**: geometria >> física do problema (equações de conservação em cada domínio) >> condições fronteira >> condições iniciais >> criação da malha de acordo com as características pretendidas >> seleção do *solver* >> compute >> pós-processamento e visualização de resultados.

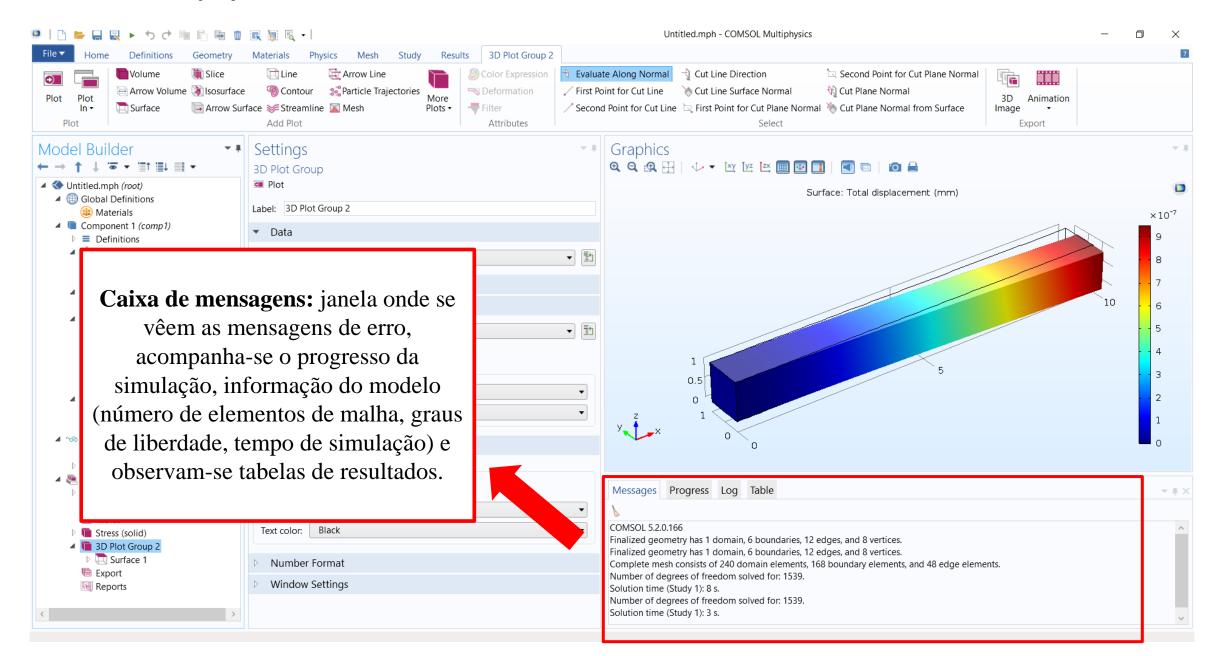












Como modelar e simular - Resumo

- Criar componente (2D, 3D, etc.)
- Importar ou desenhar geometria
- Adicionar materiais aos vários domínios da geometria
- Adicionar as físicas do problema e associar a cada domínio da geometria
- Adicionar as condições iniciais e de fronteira
- Adicionar a malha
- Adicionar estudo/solver (estacionário ou transiente)
- Compute
- Analisar os resultados

Errors and Warnings

COMSOL Multiphysics reports problems of two types:

- Errors, which prevent the program from completing a task. For errors, a
 COMSOL Error window appears with a brief error description and, in some cases, an
 Open Log File button for additional information. Under the node where the error
 occurred there is, in most cases, also an Error subnode () that contains an error
 message that generally provides additional information. Also, for many error types,
 the icon for the node where the error occurred appears with a red cross in the
 lower-right corner.
- Warnings, which are problems that do not prevent the completion of a task but that
 might affect the accuracy or other aspects of the model. Warnings typically appear
 in the Log window (III). The warning message also appears as a Warning
 subnode (I) under the node from which the warning was sent.

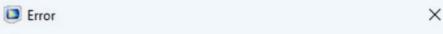
Interface gráfica

- Erro:
 - As janelas de geometria, escalas, etc, perdem definição ou bloqueiam, deixando de responder.
- O que significa:
 - problemas nas opções gráficas do software.
- Como resolver:
 - File >> Preferences >> Graphics and Plot Windows >> Visualization: rendering >> Software Reiniciar o software.

Boa prática: fazer essa alteração assim que o software é instalado.

Malha - erros

- 1) O software não reconhece a fronteira da geometria especificada.
- 2) Tipo de malha a criar incompatível com a geometria. Exemplo: malha ortogonal (mapped) numa geometria complexa.
- Como resolver:
 - Corrigir a geometria (se esta tiver descontinuidades). Este tipo de erros pode surgir na importação de geometrias de outros softwares. Confirmar formatos (.step é dos melhores).
 - 2) Alterar o tipo de malha a criar (usar elementos livres).





A problem occurred when building mesh feature 'Boundary Layers 1' in 'Mesh 1'.

Failed to generate mesh for face.

- Face: 46

Intersecting edge elements.

- Edge: 122,124



Multiple problems occurred when building 'Mesh 1'.

- Features: Mapped 1, Boundary Layers 1 Failed to create mapped mesh for face.
- Face: 7

Entity must be bounded by at least four edges.

Malha – warning

- Em zonas de geometria mais detalhada, alguns elementos da malha são superiores à dimensão de linhas da geometria. Acontece geralmente em problemas em que há domínios de dimensões grandes e outros muito pequenos.
- Como resolver: Refinar localmente a malha para que os elementos nessas regiões sejam mais pequenos que as dimensões da geometria

▼ Warning

Edge is much shorter than the specified minimum element size.

Material

- Warning: Uma propriedade necessária aos módulos de física não está definida nas bibliotecas.
- Como resolver:
 - Adicionar manualmente a propriedade

Property	Name	Value	Unit	Property group	
Bulk modulus	K	140e9	N/m²	Bulk modulus and shear mod	
Shear modulus	G	46e9	N/m²	Bulk modulus and shear mod	
Electrical conductivity	sigma	5.998e7[S/	S/m	Basic	
Heat capacity at constant pressure	Ср	385[J/(kg*	J/(kg·K)	Basic	
Relative permittivity	epsilonr	1	1	Basic	
Density	rho	8700[kg/m	kg/m³	Basic	
Thermal conductivity	k	400[W/(m	W/(m⋅K)	Basic	
Relative permeability	mur	1	1	Basic	
Coefficient of thermal expansion	alpha	17e-6[1/K]	1/K	Basic	
	Bulk modulus Shear modulus Electrical conductivity Heat capacity at constant pressure Relative permittivity Density Thermal conductivity Relative permeability	Bulk modulus K Shear modulus G Electrical conductivity sigma Heat capacity at constant pressure Cp Relative permittivity epsilonr Density rho Thermal conductivity k Relative permeability mur	Bulk modulus Shear modulus G 46e9 Electrical conductivity Heat capacity at constant pressure Relative permittivity Density Thermal conductivity Relative permeability K 140e9 46e9 5.998e7[S/ Cp 385[J/(kg* epsilonr 1 8700[kg/m 400[W/(m Relative permeability mur 1	Bulk modulus K 140e9 N/m² Shear modulus G 46e9 N/m² Electrical conductivity sigma 5.998e7[S/ S/m Heat capacity at constant pressure Cp 385[J/(kg* J/(kg·K)) Relative permittivity epsilonr 1 1 Density rho 8700[kg/m kg/m³ Thermal conductivity k 400[W/(m W/(m·K)) Relative permeability mur 1	Bulk modulus K 140e9 N/m² Bulk modulus and shear mod Shear modulus G 46e9 N/m² Bulk modulus and shear mod Electrical conductivity sigma 5.998e7[S/ S/m Basic Heat capacity at constant pressure Cp 385[J/(kg* J/(kg·K) Basic Relative permittivity epsilonr 1 Basic Density rho 8700[kg/m kg/m³ Basic Thermal conductivity k 400[W/(m W/(m·K) Basic Relative permeability mur 1 Basic

- Error: Uma propriedade necessária aos módulos de física não está definida nas bibliotecas ou **falta associar material a um domínio da geometria**.
- Como resolver: Adicionar manualmente a propriedade e associar todos os domínios a um material.



The following feature has encountered a problem:

Undefined value found.

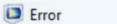
- Detail: Undefined value found in the stiffness matrix.

There are 270 equations giving NaN/Inf in the matrix rows for the variable comp1.En. at coordinates: (0.0227893,0.00100723), (0.0227893,0.00102458), (0.0227893,0.00104887), (0.0227893,0.00108287), (0.0227893,0.00113048), ... and similarly for the degrees of freedom, NaN/Inf in the matrix columns.

Feature: Time-Dependent Solver 1 (sol1/t1)

Solver

- Erro: O solver não consegue convergir uma vez que não atingiu o valor de convergência dentro do número máximo de iterações permitido.
- Como resolver: Aumentar o número máximo de iterações permitido ao solver para tentar a convergência. Se mesmo assim não funcionar (analisar o gráfico de convergência da simulação para ver como esta se comporta), usar malha mais refinada (confirmar a qualidade dos elementos da malha).





The following feature has encountered a problem:

Failed to find a solution.

Maximum number of Newton iterations reached.

Returned solution is not converged.

- Feature: Stationary Solver 1 (sol1/s1)

OK

X

- Erro: O solver não consegue convergir uma vez que o erro residual é muito elevado.
- Como resolver: Usar uma malha mais refinada (confirmar a qualidade dos elementos da malha). Se necessário, refinar apenas localmente a malha. Experimentar diferentes solvers ou diferentes parâmetros do solver. Neste caso não adianta aumentar o número de iterações.





The following feature has encountered a problem:

Failed to find a solution.

In Segregated Step 2:

Divergence of the linear iterations.

There was an error message from the linear solver.

Very ill-conditioned preconditioner.

The relative residual is more than 1000 times larger than the relative tolerance.

Returned solution is not converged.

- Feature: Stationary Solver 1 (sol1/s1)

X

 Confirmar sempre que todos os domínios estão identificados e corretamente associados a um material e a um ou mais módulos de física.

• Confirmar sempre que todas as condições de fronteiras estão identificadas.

Explorar solvers diretos e iterativos.

https://www.comsol.com/blogs/improving-convergence-multiphysics-problems/

Documentação COMSOL (depois de instalar o software):

C:\Program Files\COMSOL\ (...) \doc\pdf

(Manuais, explicação dos módulos, exemplos, tutoriais, tabelas de símbolos e atalhos, guias para todos os módulos)

Exercícios a implementar:

- Mecânica estrutural
 - Aplicação de uma força num cantilever
 - Análise modal
- Efeito Piezoelétrico
- Efeito Eletrostático
- Efeito Termoelétrico
- Outros modelos:
 - Fluídica
 - Transporte de calor
 - RF
 - Correntes elétricas
 - MEMS

• Introdução ao módulo de mecânica estrutural

Structural Mechanics Module é dedicado à análise de estruturas mecânicas sujeitas a cargas estáticas ou dinâmicas. Pode-se usá-lo para uma ampla gama de tipos de análise: estacionária, transiente, modal, paramétrica, de resposta em frequência, etc.

• Tarefa 1 – aplicar uma carga mecânica numa barra:

Aplicar uma força de 0.5 μN num microcantilever 3D de PDMS de dimensão 300 μm x 30 μm x 30 μm

Simulação 3D estacionária



Geometria:

Criar componente 3D no COMSOL e desenhar uma barra (Block) que represente uma micro barra com uma das extremidades fixa.

(nota: a figura abaixo não está à escala, mas serve como indicação).

Dimensões da barra: 300 μm x 30 μm x 30 μm

(posicionar o canto em 0,0,0)

Acrescentar uma linha na zona superior da barra, que serve como referência do local onde se irão aplicar as forças para deformar a barra, a uma distância de 50 um da extremidade (coordenadas dos 2 pontos: 250 um x 30 um x 30

um e 250 um x 0 um x 30 um).

Build!

Materiais:

Atribuir materiais aos domínios: toda a barra é flexível no material polimérico PDMS.

μα 30₂₀ 0 3000 200 100 μm Para encontrar o material pode fazer-se pesquisa ou, em materiais, ir à secção MEMS >> polymers >> PDMS.

Física:

Adicionar ao modelo, em *Add Physics*, os módulos de interesse. No caso, mecânica estrutural >> mecânica de sólidos.

Dentro do módulo selecionado, adicionar agora as condições fronteira. Em relação às condições fronteira, indicar para a fronteira fixa (fronteira do lado esquerdo) a boundary *Fixed constraint*. Todas as outras fronteiras ficam mecanicamente livres (por defeito no COMSOL).

Aplicar carga:

Aplicar uma **força vertical de 0.5 uN na região de fronteira criada na extremidade da barra** – *Boundary Load*. Por ser vertical, terá apenas valor na componente z. Analisando o sistema de eixos, para aplicar a força para baixo, terá de ter sinal negativo (-0.5 [uN]). Atenção dentro da boundary load ao tipo de força a aplicar >>> TOTAL FORCE.

Criar uma malha *normal* (criada por defeito pelo software)

Adicionar "stationary study" para simular em estado estacionário e analisar o deslocamento da estrutura (região onde deforma mais e valor de deslocamento).

Clica em Compute!

Para analisar o deslocamento, na árvore do modelo, ir a *Results* (botão direito)>> *3D plot group*. Criado este campo, clicar no botão direito e seleciona *surface*. Aí, clicar na seta de cor verde e vermelha. Clicando nesse campo, selecionar a variável de interesse (no caso, *total displacement*). Clicar em *Plot* e observar o deslocamento – valores máximos e onde se localizam.

Carga na fronteira: aplicar a mesma força anterior mas na fronteira superior completa (em vez da extremidade).

QUESTÃO 1: Compara os resultados do deslocamento e tensão mecânica obtidos para a força aplicada na extremidade e na fronteira superior completa.

61

• Tarefa 2 - Análise modal:

Parte 1 – Analisar, em frequência, os modos de vibração natural de uma estrutura!

Objetivo: Simular o deslocamento mecânico da barra, com a força de -0.5 uN aplicada na fronteira (igual ao exercício da tarefa 1), mas, em vez de estado estacionário, para vários modos de vibração em frequência.

Adicionar ao modelo um tipo de estudo novo (em vez do Stationary): Eigenfrequency.

(Este modo resolve as equações de deslocamento mecânico quando a barra é atuada por uma força de -0.5 uN. Contudo, em vez de aplicar uma força constante, o software vai procurar frequências adequadas e simular a força a vibrar a cada uma dessas frequências, antes de avançar para a frequência seguinte. Assim irá encontrar os diferentes modos de vibração/ressonância natural da estrutura)

<u>step 1</u>: <u>desired number of eigenfrequencies</u>: 10 (n° de modos de vibração a encontrar. Pode ser > ou <)

search for eigenfrequencies around: 1000 Hz (nº de referência, pois o software vai procurar os modos de vibração nas frequências adequadas ao problema. Se for conhecido em que frequências estarão os modos de vibração, deve ser selecionada uma mais próxima)

step 2: deixar os dados por defeito.

Compute! (efetua a simulação)

Analisar o deslocamento: Results (botão direito)>> 3D plot group. Clicar no botão direito e selecionar surface.

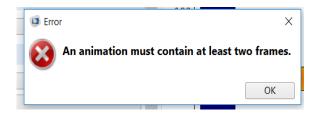
Selecionar o data set de resultados (conjunto de soluções onde estão os dados de interesse — deverá ser a última solução armazenada, *solution store*, da lista). Nesta seleção deve aparecer por baixo um campo *eigenfrequency*, onde aparecem as frequências para as quais o software calculou o modo de vibração.

Confirmar que no campo *expression* está selecionada a variável de interesse (no caso, *total displacement*). Caso contrário, clicar na seta verde e vermelha acima deste campo e procurar a variável de interesse.

Plot – Mostrar o deslocamento para a 1ª frequência.

Selecionar à vez as outras frequências e comparar o deslocamento em cada um dos modos de vibração!

- Agora, ver para uma frequência específica como se comporta a barra ao longo de um ciclo de vibração completo.
- Para o caso de uma das frequências determinadas (escolher uma delas livremente), clicar em *animation* e *player*. Poderá surgir na janela o seguinte erro:



- Este erro surge porque, por defeito, por vezes o *software* assume o *player* em função do tempo, o que neste caso é impossível porque a simulação não é transiente, mas sim modal.
- Assim, para corrigir esse problema, no tipo de sequência selecionar *Dynamic data extension* e no tipo de ciclo *Full Harmonic*. Clicar em play, ou variar o valor na barra de phase shift para ver como se comporta a barra em termos de deslocamento ao longo de um ciclo total de vibração (para a frequência selecionada).
- Mudar a frequência (na seleção do dataset) e ver os diferentes modos de vibração.

Tarefa 3 - Adição de massas à estrutura – simulação modal para determinar os modos de ressonância da barra quando ligada a uma massa

Passo 1 – acrescentar a massa: São várias as opções para adicionar uma massa. Pode ser acrescentada uma geometria adicional ou criar de modo fictício a massa. É o que vai ser feito neste caso. Vamos criar uma **massa fictícia na**

extremidade da estrutura (edge >> added mass).



Settings Properties

= Compute C Update Solution

mass (massa a ▼ 246810

Specified combinations

Parameter unit

ug

Parameter name Parameter value list

Label: Parametric Sweep

Study Settings

Sweep type:

- Em vez de colocar um valor, colocámos um parâmetro que criamos e definimos nas definições globais do problema (Global definitions >> parameters) [como está na fig acima, à direita]
- Dentro do solver (clicar com o botão direito), clicar em *parametric sweep*. Em vez de se simular para apenas um valor de massa, o simulador vai variar este valor e obter uma solução para cada caso.

Nas propriedades, acrescentar um parâmetro ao qual se vai fazer o varrimento: mass. No solver, variar os valores Parametric Sweep

entre 2 e 10 ug e correr novamente a simulação.

• QUESTÃO 2: Analisar a 1^a frequência de ressonância (frequência natural de vibração) obtida para cada massa. O que se conclui? O que acontece à frequência de ressonância à medida que a massa aumenta?