

# Modelling and Numerical Methods in Scientific Computing.

Stéphane Louis Clain

Centro de Matemática, Escola de Ciências, Universidade do Minho, Braga,  
Portugal

Minho, 12 de Novembro de 2013

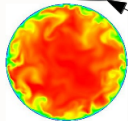


# From modelling to simulation



Real world

Simulations  
Experiences



$$\begin{aligned}\operatorname{div} D &= \mathbf{p}; \\ \operatorname{rot} E &= -\frac{\partial B}{\partial t}; \\ \operatorname{div} B &= 0; \\ \operatorname{rot} H &= \mathbf{J} + \frac{\partial D}{\partial t};\end{aligned}$$

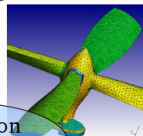
**Modelling**  
Conservation  
Principle,  
Constitutive law

```
while((ptr_c==#.nextCell()))  
{  
  for(size_t i=0;i<=NbPoint;i++)  
  {  
    P=debut+(i*ds)*(fin-debut);  
    no=Norm(P-ptr_c->centroid);
```

**Implementation**  
Scientific computation

Let  $u \in W^{1,1}(\mathbb{R}_+^N)$

**EDP**  
analysis



**Discretization**  
Numerical scheme

**Numerical**  
analysis

$$G_i = \sum_{j \in \nu(i)} \frac{|e_{ij}|}{|c_i|} \sum_{r=1}^R \zeta_r \mathcal{F}_{ij,r} - f_i,$$

# Numerical simulation, why?

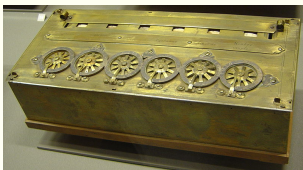
- Baixo preço relativamente à experiência: construção de aviões, de edifícios, de pontes, de barragens...
- Exploração de muitas soluções (mesmo as mais críticas): simulação de processos nucleares.
- Previsão: meteorologia, construção, Tsunami, eventos catastróficos.
- Estudo do passado: arqueologia, mega-vulcão pré-histórico, formação dos planetas, do universo.
- Otimização, problema inverso: determinar as melhores configurações.
- Ter informações difíceis de medir experimentalmente.

☞ A experiência é fundamental para validar os modelos.

☞ Todos os modelos tem os seus limites de representatividade.

# A small history in scientific computation

- A Pascalina (século XVII).
- O início da análise numérica: algoritmo de Euler, Lagrange, Newton (século XVIII).
- Nuclear: A computação científica moderna com 'computador': projeto Manhattan/ENIAC (1942-46).
- CFD: particle in cell com Harlow (1957), finite volume com Godunov (1959).
- Estruturas, elasticidade; elementos finitos, Turner Clough (1956), Zienkiewicz (1965).
- Atualmente: High Performance Computing com mais de 1 Petaflops ( $10^{15}$  floating points operations / s).



From real world to mathematical model

Finite volume methods

Some applications

# From the real world to the mathematical modelling

# Convection-Difusion



convecção condução térmica

$$\partial_t \alpha + \nabla \cdot (V\alpha) - \nabla \cdot (A\nabla \alpha) = s$$

- $\alpha$  fração mássica ou temperatura
- $s$  é a fonte de poluição ou de energia
- $V(x, t)$  é a velocidade do fluido
- $A$  é o coeficiente de difusão.



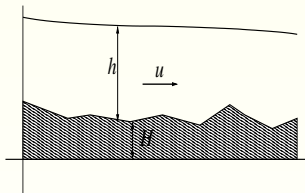
convecção difusão de um poluente

## Shallow-water

Problema com rios, ondas, inundações, Tsunami.

$$\partial_t h + \nabla \cdot (hu) = 0,$$

$$\partial_t (hu) + \nabla \cdot (hu \otimes u + g \frac{h^2}{2}) = -gh \nabla H$$

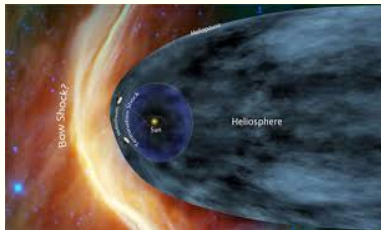


- $h(x, t)$  altura da água
- $u(x, t)$  velocidade da água
- $g$  gravidade
- $H(x, t)$  topografia do fundo



## Sistema de Euler

Equação dos gases compressíveis sem viscosidade

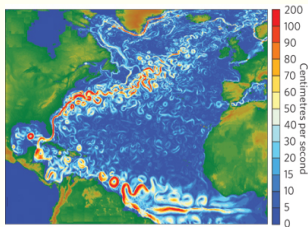


$$\begin{aligned}\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho u) &= 0, \\ \partial_t (\rho u) + \nabla \cdot (\rho u \otimes u + P \text{Id}) &= g, \\ \partial_t (E) + \nabla \cdot (u(E + P)) &= 0.\end{aligned}$$

- $\rho$  densidade
- $u$  velocidade
- $P$  pressão
- $E$  energia total



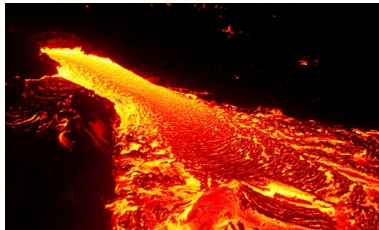
## Equação dos fluidos incompressíveis com viscosidade



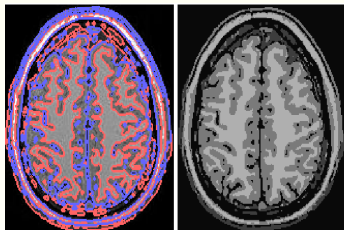
Oceano, atmosfera, lava, polímeros,...

$$\begin{aligned}\rho \partial_t(u) + \rho u \nabla u + \nabla P &= \mu \Delta u + g, \\ \nabla \cdot u &= 0.\end{aligned}$$

- $\rho$  densidade
- $u$  velocidade
- $P$  pressão
- $\mu$  viscosidade



## Equação da fronteira livre



Fogo de floresta, bolha, segmentação de imagem,

$$\begin{aligned}\partial_t \phi + F|\nabla \phi| + \varepsilon \Delta \phi &= 0, \\ \Gamma_t &= \{x \text{ tal que } \phi(x, t) = 0\}.\end{aligned}$$

- $\phi$  função superfície de nível
- $u$  velocidade da frente
- $\varepsilon$  coeficiente de curvatura
- $\Gamma_t$  posição da frente no tempo  $t$ .

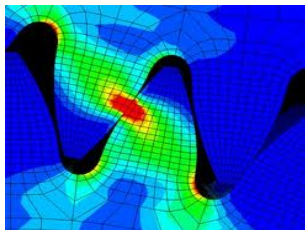


## Equação da mecânica dos sólidos

Estruturas, edifícios, barragens, ossos,...

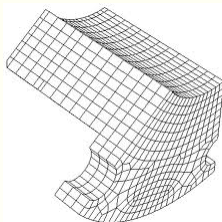
$$-\nabla \cdot \sigma = f, \quad \sigma_{ij} = \frac{E}{1+\nu} \left( \epsilon_{ij} + \frac{\nu}{1-2\nu} \epsilon_{kk} \delta_{ij} \right),$$
$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right).$$

- $u = (u_1, u_2, u_3)$  deslocação
- $E$  módulo de Young e  $\nu$  coeficiente de Poisson
- $\sigma$  tensão
- $\epsilon$  deformação

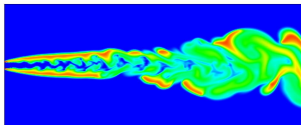


# Finite volume method

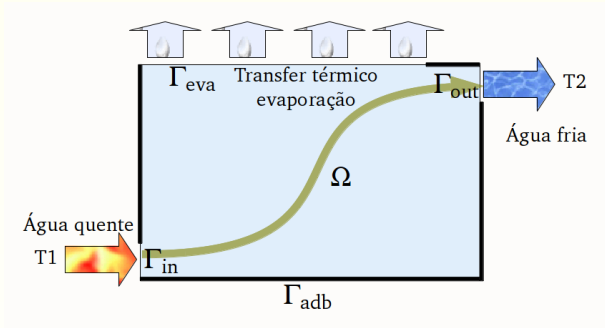
- Transformar as equações (modelo) em novas equações que podemos implementar num computador.
- Discretizar: aproximar a solução com um número finito (discreto) de valores.
- Estabelecer as relações entre os valores discretos. Construir esquemas numéricos e algoritmos computacionais.
- Programar, implementar, otimizar.
- Execução e simulação (pre- & post-processing).



$$G_i = \sum_{j \in \nu(i)} \frac{|e_{ij}|}{|c_i|} \sum_{r=1}^R \zeta_r \mathcal{F}_{ij,r} - f_i,$$



# An example: the convection-diffusion equation

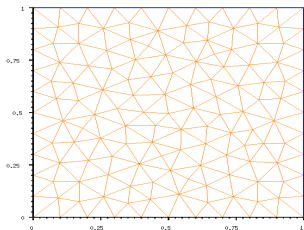


$$\nabla \cdot (VT - k\nabla T) = 0 \text{ in } \Omega,$$

$$T = T_{in} \text{ on } \Gamma_{in}, \quad k\partial_n T = 0 \text{ on } \Gamma_{out} \cup \Gamma_{adb}, \quad k\partial_n T = -\alpha T \text{ on } \Gamma_{eva}.$$

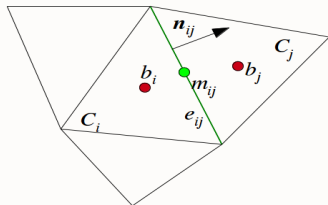
- ☞ Qual é a temperatura  $T_{out}$  na saída?
- ☞ Qual foi a quantidade de energia transferida?

# Mesh, cells and interfaces



- Malha do domínio  $\Omega$  em triângulos .
- $C_i$  o elemento de volume.
- $e_{ij} = C_i \cap C_j$  o lado comum.

- $n_{ij}$  vetor normal de  $C_i$  para  $C_j$ .
- $b_i$  baricentro de  $C_i$ .
- $m_{ij}$  centro de  $e_{ij}$ .
- $\nu_i$  índices das células em contacto com  $C_i$ .





⇒ *Integração sobre o volume  $C_i$*

$$\int_{C_i} \nabla \cdot (VT - k\nabla T) dx = 0.$$

⇒ *Fórmula de Green-Gauss*

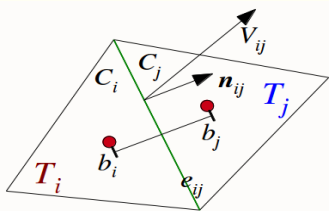
$$\int_{\partial C_i} (T(x)V \cdot \mathbf{n} - k\nabla T \cdot \mathbf{n}) ds = 0.$$

⇒ *Fluxo numérico*

$$\sum_{j \in \nu_i} \int_{e_{ij}} (F_{ij}^{conv} + F_{ij}^{diff}) ds = 0.$$

## Aproximação da função

$$T_i \approx \frac{1}{|C_i|} \int_{C_i} T(x) dx.$$



## Aproximação dos fluxos

$$\mathcal{F}_{ij}^{conv} = [V_{ij} \cdot n_{ij}]^+ T_i + [V_{ij} \cdot n_{ij}]^- T_j \approx \frac{1}{|e_{ij}|} \int_{e_{ij}} T(x) V \cdot \mathbf{n} ds,$$

$$\mathcal{F}_{ij}^{diff} = -k_{ij} \frac{T_j - T_i}{|b_i b_j|} \approx \frac{1}{|e_{ij}|} \int_{e_{ij}} k \nabla T \cdot \mathbf{n} ds,$$

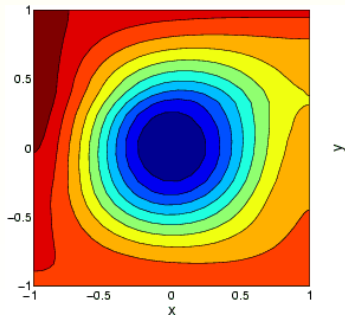
**O sistema linear** Encontrar  $T = (T_i)_{i=1,\dots,I}$  tal que para cada célula  $C_i$ ,  $i = 1, \dots, I$ , temos

$$\sum_{j \in \mathcal{V}_i} \int_{e_{ij}} \left( [V_{ij} \cdot n_{ij}]^+ T_i + [V_{ij} \cdot n_{ij}]^- T_j - k_{ij} \frac{T_j - T_i}{|b_i b_j|} \right) = 0$$

Obtemos um problema matricial

$$[A] \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ \vdots \\ T_I \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{in} \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{bmatrix}$$

cuja resolução dá a solução.



- *Explicit matrix*

- Compute matrix  $A$  (assembly stage) and store using a sparse algorithm.
- Compute the right-hand side  $b$  term and store in vector.
- Use an iterative algorithm to solve problem  $AT = b$ .

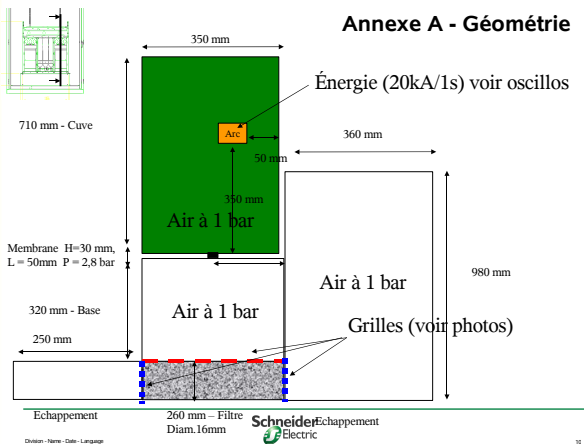
- *Matrix free method (iterative)*

- $T^k$  is an approximation at step  $k$ .
- Compute the fluxes  $F_{ij}^k$  for each interfaces  $e_{ij}$  using  $T^k$ .
- Compute the residual  $G_i^k = \sum_{j \in \nu(i)} F_{ij}^k - f_i$  on each cell  $c_i$ .
- Compute the next step  $T^{k+1}$  with  $G^k$ .

# Applications

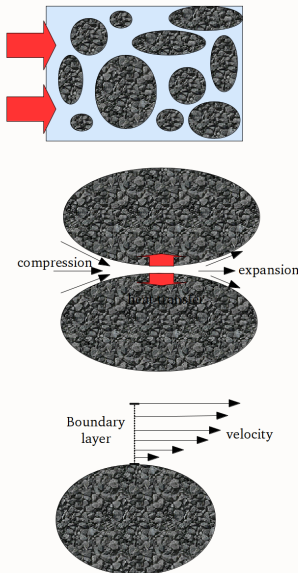
## Disjuntor meia tensão

Colaboradores: D. Rochette (LAEPT), R. Touzani (DMA)



# Gas in porous media

- Porosidade  $\phi$ .
- Força de Darcy  $F_D = \phi^2 \frac{\mu}{k} u$  associada à viscosidade do gás.
- Força de Forchheimer  $F_F = -\beta \phi^3 \rho u |u|$  associada à variação de espaço.
- Transferência térmica  
$$h_v = \frac{6(1-\phi)}{d_p} \frac{k}{d_p} (2 + 1.1 Re^{0.6} Pr^{1/3}) (T - T_s)$$
entre o gás e o meio poroso.



## *Equação de Euler não-conservativa*

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} + \frac{\partial G(U)}{\partial y} = NCT(U) + S(U), \quad (1)$$

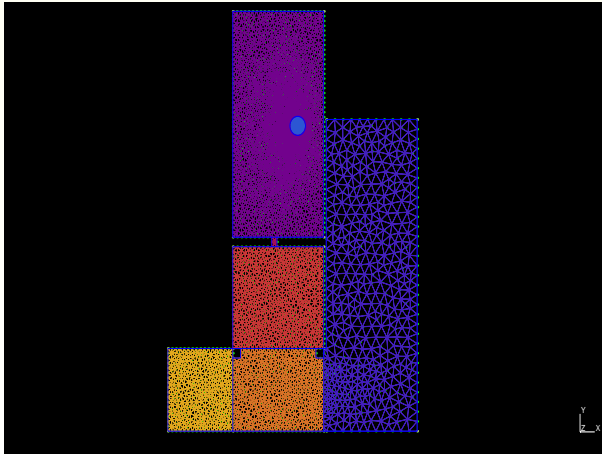
com as notações

$$U = \begin{pmatrix} \phi \\ \rho\phi \\ \rho\phi u \\ \rho\phi v \\ \phi E \end{pmatrix}, \quad F(U) = \begin{pmatrix} 0 \\ \rho\phi u \\ \rho\phi u^2 + \phi P \\ \rho\phi uv \\ \phi u(E + P) \end{pmatrix}, \quad G(U) = \begin{pmatrix} 0 \\ \rho\phi v \\ \rho\phi uv \\ \rho\phi v^2 + \phi P \\ \phi v(E + P) \end{pmatrix}.$$

$$NCT(U) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ P \frac{\partial \phi}{\partial x} \\ P \frac{\partial \phi}{\partial y} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad S(U) = \begin{pmatrix} 0 \\ r_{abl} \\ -\phi^2 \frac{\mu}{k} u - \phi^3 \beta \rho u |V| \\ -\phi^2 \frac{\mu}{k} v - \phi^3 \beta \rho v |V| \\ P_{inj} - 2\pi \epsilon_n - h_v (T - T_s) \end{pmatrix},$$

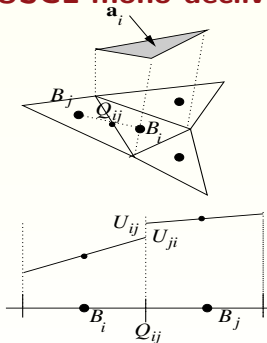


## Malha 2D do disjuntor.

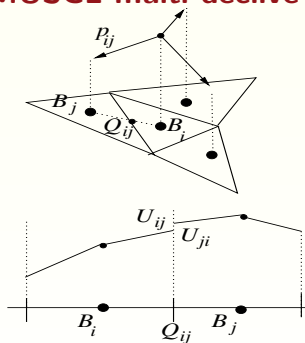


*Esquema well-balanced com método MUSCL*

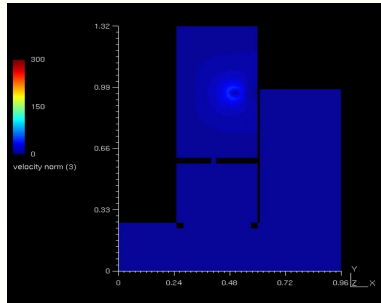
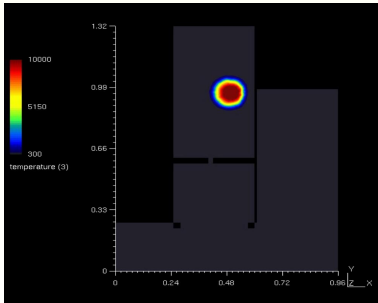
**MUSCL mono-declive**



**MUSCL multi-declive**



## Simulação numérica do disjuntor MV (temperatura e velocidade)

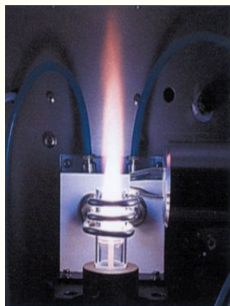


# The Inductively Coupled Plasma Torch (ICP)

Colaboradore: D. Rochette, D. Vacher (LAEPT), M. Lino da Silva (IST)

**Objetivo:** Simulação numérica da tocha.

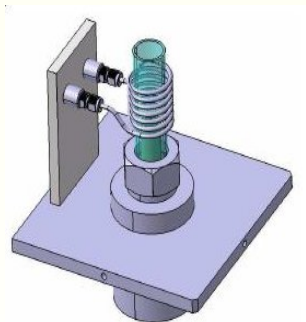
- Frequência 64 MHz.
- Potência 4kW.
- Tensão de 4.5kV sob 600 mA.
- Geometria axisimétrica.
- Injeção do gás com "swirl".
- Dimensões  $5\text{ cm} \times 10\text{ cm}$



*Aplicação* Estudo da radiação na atmosfera de Marte ou Titan.

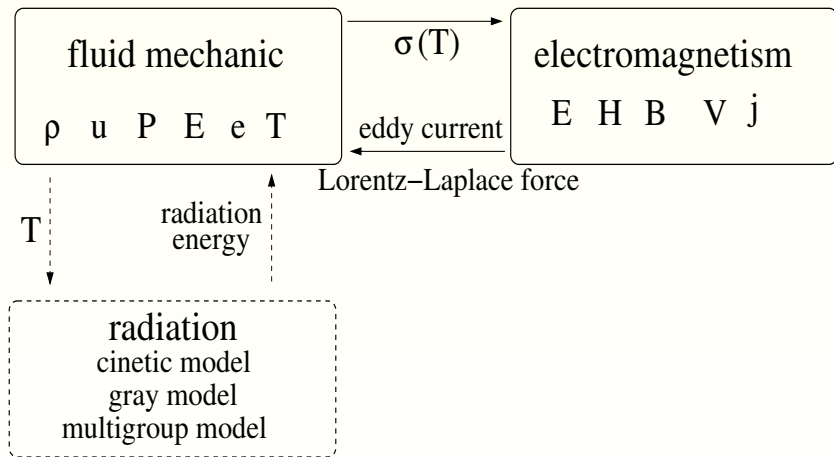
## Temperatura da chama com pressão atmosférica

- Argon,  $Ar$  100%: temperatura  $\approx 7000 - 8000K$ .
- Terra,  $N_2$  80%,  $O_2$  20% : temperatura  $\approx 4000 - 5000K$ .
- Marte,  $N_2$  3%,  $CO_2$  97% : temperatura  $\approx 6000K$ .
- Titan,  $N_2$  98%,  $CH_4$  2% : temperatura  $\approx 3500 - 4000K$ .

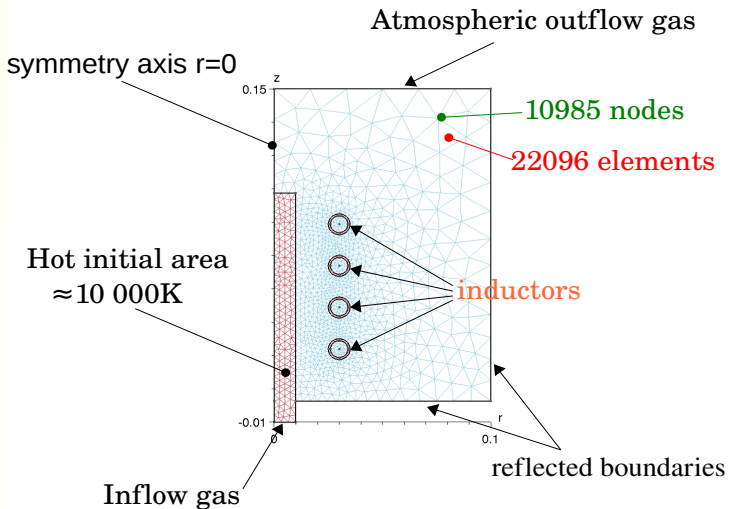




# The mathematical modelling

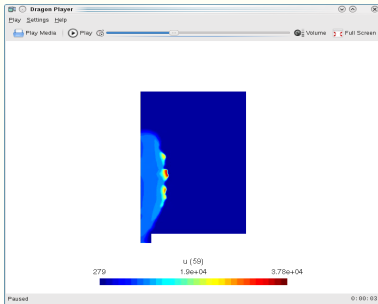


# Configuration

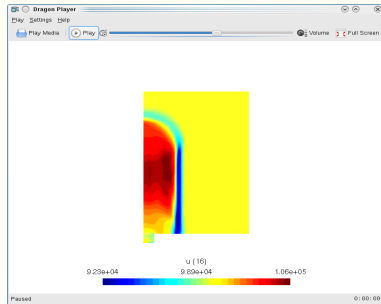




## Temperatura



Temperatura



Pressão

# ageing of an high voltage cable

Colaboradores: A. Boularas, F. Baudoin (DSF)

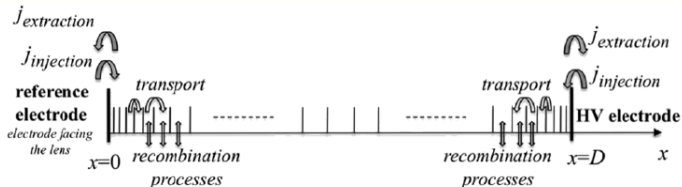
- Restrição ambiental: enterrar os cabos.
- Alta tensão, 225 kV, profundidade 140 cm.
- A parte crítica é o isolante (dieléctrico)
- Envelhecimento/degradação



- ☞ Aumentar a vida do cabo, dimensionar o dieléctrico (formulação química do dieléctrico)
- ☞ Determinar quando é necessário mudar o cabo (20/30 anos)
- ☞ Preço muito elevado (2.M\$ por quilómetro: 10 vezes mais do que as linhas aéreas)

# Degradation process

As reações de recombinação alteram a composição do dielétrico



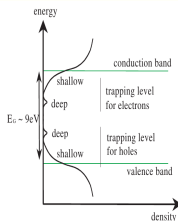
Mobile  $\mu$  or Trapped  $t$   
 Electron  $e$  or hole  $h$   
 current density  $j_{e,h}^\mu$   
 Electric field  $E$   
 Combination terms  $s$

$$\nabla \cdot (\epsilon E) = \rho_h - \rho_e$$

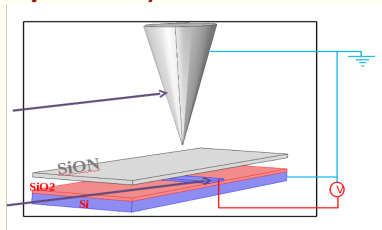
$$\partial_t(\rho_{e,j}^\mu) + \nabla \cdot (j_{e,h}^\mu) = s_{e,h}$$

$$\partial_t(\rho_{e,j}^t) = -s_{e,h}$$

$$j_{e,h}^\mu = m_{e,h} E \rho_{e,h}^\mu$$



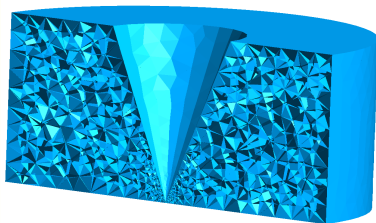
## Aproximação de ordem muito elevada



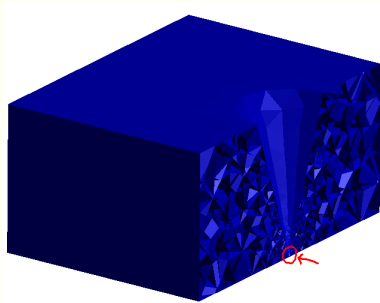
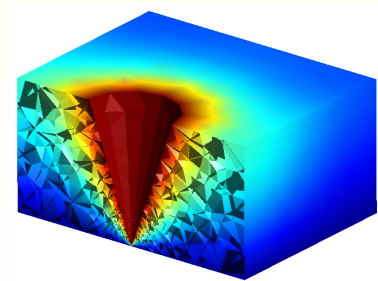
- Setup para determinar as características da degradação.
- Medir a evolução das cargas eléctricas.
- Microtip (cone) com ponta de 10~40 nm.

### Os desafios:

- Descontinuidade dos dieléctricos, geometria "exigente"
- Avaliação muito precisa do campo eléctrico na ponta.
- Calcular a força eléctrica da microtip.

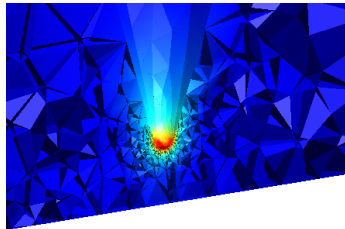


### Novo esquema volumes finitos de alta precisão

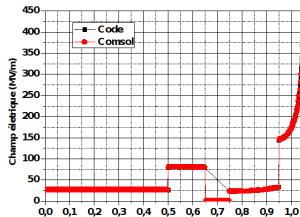
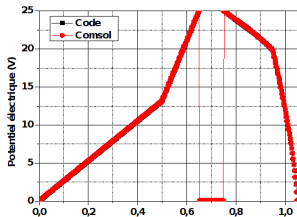
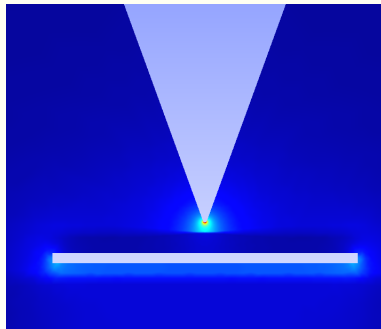
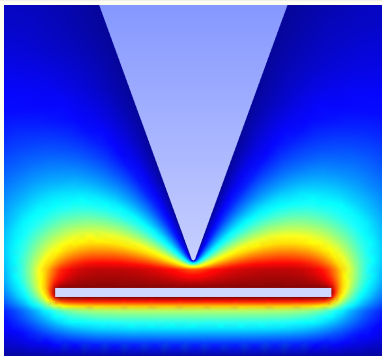


## ☞ *Principais características*

- Aproximação da curvatura da microtip de ordem 6.
- Determinação exata das discontinuidades do campo eléctrico entre 2 dieléctricos



# Simulação numérica do campo eléctrico descontínuo

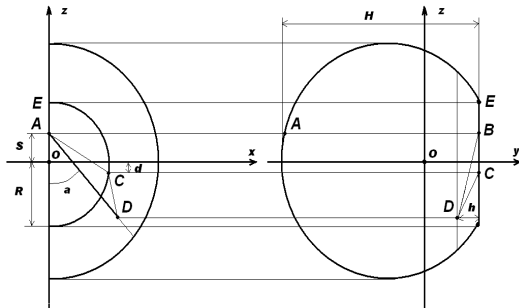


# Numerical surgery

Colaboradores: G. Smirnov (ECUM), H. Costa (CH)

## *Redução parcial da mama*

- 👉 Otimizar a operação (ângulos de cortes)
- 👉 Experimentar várias técnicas
- 👉 Visualizar o resultado final antes da operação

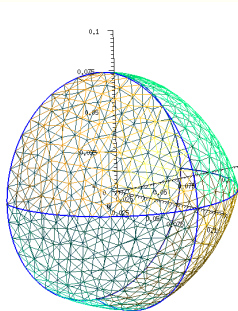


**Elasticidade não linear** com modelação da pele e do espaço de Chassignac.

☞ Minimizar a funcional  $I(f) = \int_{\Omega} W(\nabla f(p)) dp$  onde

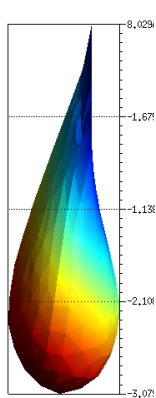
$$W(F) = \frac{\mu}{2}(\text{tr}(FF^T) - 3) - 2 \ln(\det(F)) + \frac{\lambda}{2}(\det(F) - 1)^2$$

- Malha 3D da mama inicial.
- Efetuar o corte.
- Realizar a sutura.
- Visualizar no campo gravitacional.

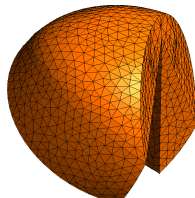
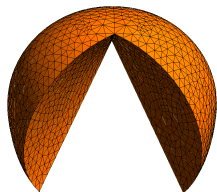




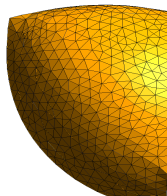
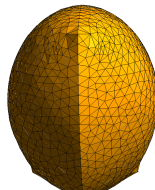
# Numerical results



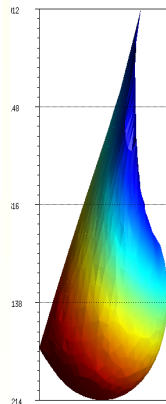
mama inicial



cutting



suturing



mama final

- Powerful tools used in industrial, environmental and institutional frameworks.
- Numerical simulations: transversal and multi-disciplinary ( $\phi$ ,  $\chi$ , bio., eng., compt.).
- Face a large spectrum of problems and require different expertises: *scientific management* .
- 2005-2015: move from "artisanal numerics" (the nineteen's) to large and international consortia to develop softwares using up-to-date technology.
  - Develop new numerical methods;
  - New mathematical models (reduce, asymptotic);
  - Fully improve the computar capacity (High Performance Computing);
  - Still exists unreachable numerical problems (DNS, plasma tokamak, galáxia,...)