



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL

Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas

Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química

**ELEMENTOS FINITOS ESTABILIZADOS
PARA FLUJOS CON SUPERFICIE LIBRE:
SEGUIMIENTO Y CAPTURA DE INTERFASE.**

Laura Battaglia

Tesis remitida al Comité Académico del Doctorado

como parte de los requisitos para la obtención

del grado de

DOCTOR EN INGENIERIA

Mención Mecánica Computacional

de la

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL

2009

Comisión de Posgrado, Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas, Ciudad Universitaria, Paraje

“El Pozo”, S3000, Santa Fe, Argentina.





UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL
Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas


Santa Fe, 23 de abril de 2009.

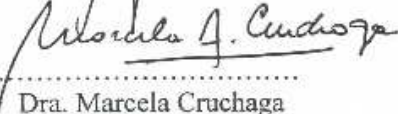
Como miembros del Jurado Evaluador de la Tesis de Doctorado titulada "*Elementos finitos estabilizados para flujos con superficie libre: seguimiento y captura de interfase*", desarrollada por la Ing. Laura Battaglia, certificamos que hemos evaluado la Tesis y recomendamos que sea aceptada como parte de los requisitos para la obtención del título de Doctor en Ingeniería – Mención Mecánica Computacional.

La aprobación final de esta disertación estará condicionada a la presentación de dos copias encuadernadas de la versión final de la Tesis ante el Comité Académico del Doctorado en Ingeniería.


.....
Ing. Juan Carlos Ferreri



.....
Dr. Fernando Saita



.....
Dr. Axel Larretegui


.....
Dra. Marcela Cruchaga

Santa Fe, 23 de Abril de 2009

Certifico haber leído esta Tesis preparada bajo mi dirección y recomiendo que sea aceptada como parte de los requisitos para la obtención del título de Doctor en Ingeniería – Mención Mecánica Computacional.


.....
Dr. Jorge D'Elia
Director de Tesis


.....
Dr. Mario Storti
Codirector de Tesis

Universidad Nacional del Litoral
Facultad de Ingeniería y
Ciencias Hídricas

Secretaría de Posgrado

Ciudad Universitaria
C.C. 217
Ruta Nacional N° 168 - Km. 472,4
(3000) Santa Fe
Tel: (54) (0342) 4575 229
Fax: (54) (0342) 4575 224
E-mail: posgrado@fich.unl.edu.ar

DECLARACION LEGAL DE LA AUTORA

Esta disertación ha sido remitida como parte de los requisitos para la obtención del grado académico de Doctor en Ingeniería ante la Universidad Nacional del Litoral y ha sido depositada en la Biblioteca de la Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas para que esté disponible a sus lectores bajo las condiciones estipuladas por el Reglamento de la mencionada Biblioteca.

Citaciones breves de esta disertación son permitidas sin la necesidad de un permiso especial, en la suposición de que la fuente sea correctamente citada. Solicitudes de permiso para una citación extendida o para la reproducción parcial o total de este manuscrito serán concedidos por el portador legal del derecho de propiedad intelectual de la obra.

Laura Battaglia

Agradecimientos

En primer término, quiero agradecer a las instituciones que me permitieron realizar mis estudios de doctorado, comenzando por el Centro Internacional de Métodos Computacionales en Ingeniería (CIMEC), en el ámbito del Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química (INTEC), donde desarrollé las labores correspondientes, así como al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), la Universidad Nacional del Litoral (UNL) y la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (ANPCyT), quienes proveyeron el financiamiento a través de la beca doctoral y sus proyectos. Además, a la Facultad Regional Santa Fe de la Universidad Tecnológica Nacional (UTN) y sus profesores, donde realicé mis estudios en Ingeniería, tomé contacto con la Mecánica Computacional y hoy participo como docente.

A su vez, agradezco al grupo de trabajo del CIMEC, fundamentalmente en el aspecto humano: a mis directores, Jorge D'Elía y Mario Storti, por su guía, paciencia y confianza; a los restantes integrantes del grupo, compañeros siempre dispuestos a tender una mano; a los profesores con quienes tomé los cursos; a Oscar Maggi, por su respaldo permanente en UTN, y a tanta otra gente que, de una forma u otra, me ha acompañado.

Por último, y especialmente, quiero darle gracias quienes están a mi lado independientemente de lo que emprenda: mi familia, mis amigos y Federico.

Resumen

En esta Tesis se considera la resolución de problemas transientes de flujo con superficie libre de fluidos incompresibles y viscosos, con comportamiento newtoniano, en régimen de flujo laminar e isotérmico y sin influencia de la tensión superficial, tanto para dos como para tres dimensiones. Para ello, se proponen dos estrategias complementarias resueltas mediante elementos finitos estabilizados en el espacio y por diferencias finitas en el tiempo. La primera metodología es una técnica de seguimiento de interfase enmarcada en una formulación lagrangiana-euleriana arbitraria en la cual se resuelven en cada paso de tiempo las ecuaciones de Navier–Stokes en una única fase líquida, para luego determinar el desplazamiento de la superficie libre y, finalmente, readaptar la malla de elementos finitos a la nueva conformación geométrica del dominio espacial. En este paradigma, la atención está puesta en evitar inestabilidades numéricas espurias durante el movimiento de la superficie libre, ya sea mediante un operador de suavizado, o bien a través de una ecuación de transporte de la elevación nodal de la superficie libre estabilizada numéricamente. Este método es aplicable a problemas con pequeños desplazamientos de la superficie libre, o eventualmente deformaciones de mayor amplitud que no produzcan pérdida de unicidad en la interfase. La segunda estrategia consiste en un método de captura de interfase basado en una función de nivel para la cual se simula el flujo de dos fluidos, cada uno de ellos indicado con un valor positivo o negativo de dicha función, tal que el valor cero constituye naturalmente la interfase. En este caso, se consideran tres etapas acopladas: la primera provee la resolución de las ecuaciones de Navier–Stokes para el caso de fluido no homogéneo, esto es, considerando que las propiedades físicas de cada fase dependen del valor de la función de nivel en el elemento a evaluar; la segunda etapa resuelve el transporte de la función de nivel mediante un paso de advección convencional; la tercera etapa consiste en una reinicialización de la función de nivel tal que se verifiquen ciertas propiedades en la transición entre los fluidos, a través de un operador diferencial con dos variantes: continua y discontinua. En la primera de estas variantes, la reinicialización se realiza por medio de un operador continuo en la transición líquido/gas y exhibe un comportamiento superior con respecto a la restante, discontinua en la frontera. Esta segunda metodología es aplicable a desplazamientos medianos y grandes de la superficie libre, pues admite su rotura o que se pliegue sobre sí misma, sin que la pérdida de unicidad de la interfase invalide su aplicación. Las dos propuestas presentadas son abordadas numéricamente a través de la alternancia de etapas, cada una de las cuales es resuelta mediante programación distribuida, lo cual inscribe ambos métodos en un paradigma multiparalelo. Los resultados obtenidos para diversos problemas de solución conocida permiten validar ambas estrategias, incluyendo la convergencia en malla.

Abstract

In this Thesis the resolution of transient free surface flow problems is considered for incompressible, viscous and Newtonian fluids, in a laminar and isothermal flow regime without surface tension effects, for both two and three spatial dimensions. For that, two complementary strategies are proposed, which are solved by stabilized finite elements in space and finite differences in time. The first methodology is an interface-tracking technique, framed inside an Arbitrary Lagrangian-Eulerian formulation where the Navier–Stokes equations are solved each time step over one fluid phase, for determining later the free surface displacement and, finally, readapting the finite element mesh to the new geometric shape of the spatial domain. In this paradigm, the attention is placed on avoiding spurious numerical instabilities during the free surface movement, either through a smoothing operator or by solving a numerically stabilized transport equation for the nodal elevation of the free surface. This method is appropriate for solving problems with small free surface displacements, or higher displacements but keeping the uniqueness of the interface. The second strategy consist in an interface-capturing method based on a level set function for which a two-fluid flow is simulated, each of them indicated with a positive or negative value for the function, in such a way that the zero level set naturally constitutes the interface. For doing so, three coupled stages are considered: the first one provides the resolution of the Navier–Stokes equations for the non-homogeneous fluid case, i.e., considering that the physical properties in each of the phases depend on the level set function value for the analyzed element; the second one solves the level set function transport through a conventional advection step; and the third stage consist in a level set function reinitialization such that certain properties are verified over the transition strip between fluids, through a differential operator, in two alternatives: continuous or discontinuos. In the first of these alternatives, the reinitialization is made by an operator which is continuous across the the transition liquid/gas and exhibits a higher behavior with respect to the other one, that is discontinuous at the frontier. This second approximation is applicable to medium or high free surface displacements because it admits break-up or folding over itself of the interface, in such a way that the loss of the interface uniqueness does not invalidates the application. The two proposals presented are numerically addressed by alternate stages, each of them solved by parallel programming, inscribing both methods in a multiparallel paradigm. The results obtained for several problems with known solutions allow the validation of the two strategies, including mesh convergence.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Motivación	1
1.2. Objetivos	2
1.3. Resolución de flujos con superficie libre	2
1.3.1. Métodos de seguimiento de interfase	3
1.3.2. Métodos de captura o reconstrucción de interfase	4
1.3.3. Ecuaciones de Saint–Venant	5
1.4. Procesamiento distribuido	5
1.5. Metodología	6
2. Estado del arte	7
2.1. Métodos de seguimiento de interfase	7
2.1.1. Formulaciones más difundidas	8
2.1.2. Actualización de la discretización del dominio	8
2.2. Captura de interfase con Volume-of-Fluid	9
2.3. Captura de interfase mediante una función de nivel	11
2.3.1. Estado en el fluido	13
2.3.2. Advección de la función de nivel	13
2.3.3. Reinicialización	14
2.3.3.1. Resolución mediante una ecuación diferencial	15
2.3.3.2. Método de marcha rápida	16
2.3.3.3. Método de LS conservativo	16

2.3.3.4.	Reinicialización con proyección local de la interfase	17
2.4.	Métodos híbridos	18
2.5.	Otros métodos de captura de interfase	18
3.	Ecuaciones de gobierno y su discretización	21
3.1.	Descripción del campo de flujo	21
3.1.1.	Descripciones básicas y configuraciones asociadas	21
3.1.2.	Descripción del movimiento mediante un paradigma ALE	23
3.2.	Ecuaciones de Navier–Stokes	24
3.2.1.	Fluido homogéneo	24
3.2.2.	Fluido no homogéneo	25
3.2.3.	Condiciones de contorno	25
3.2.4.	Condiciones iniciales	26
3.3.	Resolución numérica mediante el MEF	26
3.3.1.	Discretización del problema	27
3.3.2.	Sistema de ecuaciones	29
3.3.3.	Condiciones de contorno e iniciales	30
3.3.4.	Integración temporal	31
4.	Seguimiento de interfase	33
4.1.	Formulación lagrangiana-euleriana arbitraria	33
4.1.1.	Estado en el líquido	34
4.1.2.	Desplazamiento de la superficie libre	34
4.1.3.	Actualización de la malla	36
4.1.3.1.	Resolución de un problema pseudoelástico	37
4.1.3.2.	Minimización de la distorsión de los elementos	38
4.2.	Línea de contacto móvil	39
4.3.	Estabilización numérica de la superficie libre	40
4.3.1.	Suavizado mediante un operador laplaciano	40
4.3.2.	Advección de la superficie libre con SUPG	41

4.3.2.1.	Formulación variacional	41
4.3.2.2.	Problema discreto	42
4.3.2.3.	Implementación	43
4.4.	Algoritmo de resolución multiparalela	44
4.5.	Ejemplos numéricos	45
4.5.1.	Validación: agitación en 2D	45
4.5.2.	Tanque rectangular sometido a aceleración horizontal periódica	47
4.5.3.	Flujo supercrítico sobre un obstáculo	51
4.5.3.1.	Adopción de las condiciones de contorno	51
4.5.3.2.	Resultados	53
4.5.3.3.	Balance de energía	57
4.5.3.4.	Tiempos de ejecución en paralelo	59
4.5.4.	Validación: agitación cuasi-inviscida en 3D	59
4.5.5.	Ejemplo 3D: drenaje central en una pileta	64
4.5.5.1.	Descripción del control	65
4.5.5.2.	Aproximación inviscida	66
4.5.5.3.	Simulación	67
4.5.5.4.	Resultados	70
5.	Metodologías preliminares en captura	73
5.1.	Advección auto-renormalizada	73
5.1.1.	Estado en el fluido	73
5.1.2.	Advección de la función de nivel	74
5.1.3.	Esquema de acoplamiento débil	75
5.1.4.	Ejemplos de evaluación	75
5.1.4.1.	Disco ranurado	75
5.1.4.2.	Agitación de pequeña amplitud	78
5.1.4.3.	Colapso de una columna de agua	81
5.1.5.	Evaluación del método	85

5.2. Renormalización con penalización discontinua	86
5.2.1. Descripción	86
5.2.2. Ejemplo de evaluación: vórtice bidimensional	87
5.2.3. Evaluación del método	88
6. Captura de interfase	91
6.1. Etapas de resolución	91
6.1.1. Estado en el fluido	91
6.1.2. Advección de la función de nivel	93
6.1.3. Renormalización de la función de nivel	94
6.2. Esquema de acoplamiento débil	97
6.3. Ejemplos de advección y renormalización	98
6.3.1. Disco ranurado	98
6.3.2. Vórtice bidimensional	101
6.3.3. Campo de deformación tridimensional	106
6.4. Ejemplos de flujo con superficie libre	109
6.4.1. Pequeños desplazamientos	109
6.4.2. Colapso de una columna de agua en 2D	114
6.4.3. Colapso de una columna de agua en 3D	122
7. Conclusiones	127
7.1. Metodología de seguimiento de interfase lagrangiana-euleriana arbitraria	127
7.2. Metodología de captura de interfase <i>level set</i>	128
7.3. Conclusión general	129
7.4. Problemas abiertos	130
A. Deducción de Ecuaciones en forma ALE	131
A.1. Derivadas	131
A.2. Derivadas temporales sobre volúmenes móviles	133

A.3. Ecuaciones de Navier–Stokes en forma ALE	133
B. Cinemática de la Superficie Libre	135
B.1. Discretización de la ecuación de transporte	135
C. Nomenclatura	141
C.1. Acrónimos	141
C.2. Notación	142
C.2.1. Elementos generales	142
C.2.2. Parámetros de las ecuaciones	142
Bibliografía	147

Índice de Tablas

3.1. Valores de α para los distintos esquemas de integración temporal. . .	31
4.1. Tiempos de ejecución t_p , aceleramiento S_p y eficiencia $E_{\%}$ para distinto número de procesadores p en el problema de flujo sobre un obstáculo para $100 \Delta t$	59
4.2. Tiempos de ejecución t_p , aceleramiento S_p y eficiencia $E_{\%}$ según el número de procesadores p en el problema agitación cuasi-inviscida 3D.	64
5.1. Casos evaluados para el problema del disco ranurado.	76
6.1. Tiempos de ejecución t_p , en segundos y en minutos, aceleramiento S_p y eficiencia $E_{\%}$ para distinta cantidad de procesadores p en el problema del vórtice bidimensional a lo largo de $100 \Delta t$	106
6.2. Tiempos de ejecución t_p para un período, que comprende $900\Delta t$, aceleramiento S_p y eficiencia $E_{\%}$ según el número de procesadores p en el problema del campo de deformaciones tridimensional para 75^3 elementos.	109
6.3. Tiempos de ejecución t_p , aceleramiento S_p y eficiencia $E_{\%}$ según el número de procesadores p en el colapso de la columna de agua 2D para 100 pasos de tiempo.	122
6.4. Tiempos de ejecución de 10 pasos de tiempo $t_p(10)$, tiempos estimados $t_p(1000)$ para $1000\Delta t$, aceleramiento S_p y eficiencia $E_{\%}$ según la cantidad de procesadores p en el ejemplo de desmoronamiento de la columna de agua en 3D.	124

Índice de figuras

2.1. Fracción de volumen y reconstrucción de la SL en VOF.	10
2.2. Esquema de valores de la función de nivel (<i>level set</i>) en un dominio genérico.	12
3.1. Esquema de dominios y configuraciones para las distintas descripciones del campo de flujo.	22
4.1. Desplazamiento de los nodos de la superficie libre.	35
4.2. Denominación de dominios y contornos para el problema de advección de la superficie libre.	36
4.3. Influencia de distintos valores de γ sobre el suavizado de la SL; escala en metros.	41
4.4. Secuencia de ejecución de las diferentes instancias involucradas en problemas de flujo con superficie libre mediante ALE.	44
4.5. Secuencia de ejecución de las diferentes instancias involucradas en problemas de flujo con superficie libre mediante ALE con pasos de predicción.	45
4.6. Dimensiones en metros y posición inicial de la superficie libre para el problema de agitación con solución analítica.	45
4.7. Curva de solución analítica y resultados numéricos (círculos) para el problema de agitación.	46
4.8. Datos geométricos y condiciones de contorno para el tanque sometido a aceleraciones horizontales periódicas.	47

4.9. Evolución temporal de la relación entre los desplazamientos verticales para el nodo superior izquierdo y la profundidad del contenedor, con $\Delta t = 0.018$ s para el caso A y $\Delta t = 0.009$ s para B.	48
4.10. Evolución del volumen de fluido dentro del tanque, adoptando $\Delta t = 0.018$ s para el caso A y $\Delta t = 0.009$ s para el B.	49
4.11. Desplazamiento vertical del nodo izquierdo sobre la SL, relativo a la profundidad del tanque con integración temporal tipo Crank-Nicolson.	50
4.12. Magnitud de las velocidades y deformación del dominio en el problema del tanque agitado horizontalmente en $t = 16.11$ s.	51
4.13. Geometría y referencias para flujo supercrítico en el canal con una obstrucción en el fondo.	52
4.14. Perfil de la interfase y valores absolutos de la velocidad, en m/s, para el problema auxiliar con viscosidad $\nu' = 0.05$ m ² /s en diferentes instantes.	53
4.15. Perfil de la interfase y valores absolutos de la velocidad, en m/s, para el problema con viscosidad $\nu = 0.005$ m ² /s en diferentes instantes.	54
4.16. Geometría y secciones seleccionadas para evaluar el flujo en el canal.	55
4.17. Curvas de variación de la velocidad horizontal en distintas secciones para el problema de flujo supercrítico en un canal.	55
4.18. Curvas de variación de la velocidad vertical en diferentes secciones para el flujo supercrítico en un canal.	56
4.19. Variación de la presión en las secciones de referencia para el problema de flujo supercrítico.	56
4.20. Discretización de elementos finitos para el problema de flujo supercrítico sobre un obstáculo.	57
4.21. Variación de la potencia $W(x)$ en el problema de flujo supercrítico sobre un obstáculo, discriminando el aporte de los distintos términos.	58

4.22. Secciones vertical y horizontal de un cilindro vertical recto de base anular para el problema de <i>sloshing</i> invíscido en 3D. Se indican las condiciones iniciales y los ejes de referencia, con dimensiones en m.	60
4.23. Evolución temporal de los desplazamientos de algunos nodos representativos de la malla para el tanque de base anular.	62
4.24. Movimientos filtrados de los nodos de la superficie libre para el tanque cilíndrico.	63
4.25. Período de movimiento T versus el paso medio de la malla h para el test del cilindro 3D.	64
4.26. Geometría del dominio de flujo: sector del cilindro de sección anular, limitado por la superficie libre, el fondo y una pared rígida en el problema del drenaje central.	65
4.27. Esquema de un vértice potencial de eje vertical con superficie libre.	66
4.28. Sector de cilindro anular modelado para el vértice axisimétrico.	67
4.29. Malla 2D para la generación del modelo 3D del fluido mediante extrusión; dimensiones en m.	67
4.30. Referencias para la descripción de las condiciones de contorno en el ejemplo del vórtice 3D.	68
4.31. Malla deformada para $t = 40$ s. Nótese la gran magnitud de los desplazamientos de la superficie libre en adyacencias del la pared del cilindro interior, y la consiguiente adaptación de la malla.	69
4.32. Curvas de volumen y variación de caudal para el ejemplo resuelto, en los primeros 10000 pasos de tiempo del análisis.	69
4.33. Perfiles de superficie libre calculados en distintos instantes.	70
4.34. Perfil final de la superficie libre obtenida en el análisis con elementos finitos, superpuesta con la solución para el vórtice potencial.	71
4.35. Módulo de la velocidad $\ \mathbf{v}\ $ en el dominio de análisis para un paso de tiempo intermedio, en m/s, para el problema del vórtice 3D.	72

5.1. Acoplamiento débil entre los procesos de NS y ADVDF para resolver el problema de la función de nivel con flujo de fluido.	75
5.2. Dominio y forma de la curva de $\phi = 0$ para el problema del disco de Zalesak.	76
5.3. Estados iniciales (trazo claro) y finales (trazo negro) en los casos A, B y C para el disco de Zalesak.	77
5.4. Perfiles inicial y final de ϕ para el problema del disco de Zalesak: sección en $y = 0.70$ m.	77
5.5. Datos geométricos y condiciones de contorno para la validación con pequeños desplazamientos.	78
5.6. Desplazamiento vertical de la interfase sobre el límite izquierdo para la validación de pequeños desplazamientos.	79
5.7. Pequeños desplazamientos. Variación de ϕ a través de la interfase para distintos valores de C_r y perfil de referencia en una sección sobre el límite izquierdo del dominio.	80
5.8. Geometría para el problema de colapso de una columna de agua.	81
5.9. Etapas tempranas en el colapso de la columna líquida resuelto con elementos <i>smoke</i>	82
5.10. Pasos intermedios en el problema de colapso de la columna líquida resuelto con <i>smoke</i>	83
5.11. Etapas finales en el problema de colapso de la columna de agua con advección auto-renormalizada. Evolución de burbujas y gotas.	84
5.12. Campo de la función de nivel ϕ en el problema de colapso de la columna de agua en distintos instantes.	85
5.13. Curva de $\phi = 0$ en $t = 1$ s y $t = 2$ s para el vórtice 2D resuelto mediante advección renormalizada con operador discontinuo.	88
5.14. Curva de $\phi = 0$ en distintos instantes para el vórtice 2D resuelto mediante advección con renormalización discontinua.	89

6.1. Esquema de transición entre propiedades del fluido: $\tilde{H}(\phi)$ disminuye el ancho de la faja de variación de ϕ	93
6.2. Una solución de ϕ constante de a trozos para el problema de reacción-difusión artificial para $\kappa = 0$, con longitud $L = 1$ y $\phi_{\text{ref}} = 1$	94
6.3. Solución al problema de reacción-difusión artificial para distintos valores de κ , con longitud $L = 1$ y $\phi_{\text{ref}} = 1$	96
6.4. Acoplamiento débil entre los procesos NS, ADVDF y RENOR para el problema de la función de nivel con flujo de fluido y reinicialización.	97
6.5. Estado inicial y finales de los casos A, B, C y D para el disco de Zalesak.	98
6.6. Curvas de nivel de los casos A, B, C y D para el problema del disco ranurado.	99
6.7. Sección en $y \approx 0.70$ m para las alternativas A, B y C en el ejemplo de Zalesak.	99
6.8. Variación del área de $\phi < 0$ a lo largo del análisis en el problema del disco ranurado.	100
6.9. Curva de $\phi = 0$ en $t = 1$ s y $t = 2$ s para el vórtice 2D resuelto mediante advección sin estabilización.	101
6.10. Curva de $\phi = 0$ en $t = 1$ s y $t = 2$ s para el vórtice 2D resuelto mediante advección sin estabilización renormalizada.	101
6.11. Curva de $\phi = 0$ en distintos instantes para el vórtice 2D resuelto mediante advección sin estabilización (A).	102
6.12. Curva de $\phi = 0$ en distintos instantes para el vórtice 2D resuelto mediante advección renormalizada (B).	103
6.13. Variación del área de $\phi > 0$ según las alternativas propuestas para el vórtice 2D.	104
6.14. Sección en $y = 0.5$ m del vórtice bidimensional en $t = 5$ s para las resoluciones A y B.	105

6.15. Vórtice bidimensional resuelto mediante transporte estabilizado con SUPG en $t = 5$ s. A la izquierda, curva de $\phi = 0$. A la derecha, sección en $y = 0.5$ m.	106
6.16. Curva de $\phi = 0$ en $t = 5$ s en el vórtice 2D resuelto con advección renormalizada, variante C.	107
6.17. Superficie de $\phi = 0$ para distintos instantes en el vórtice 3D resuelto con advección renormalizada.	108
6.18. Desplazamiento de la SL sobre el lado izquierdo del dominio para el problema de <i>sloshing</i> con pequeños desplazamientos resuelto sin renormalización.	109
6.19. Transición de ϕ en $t = t_f$ para la sección de la izquierda del dominio del problema de Prosperetti resuelto sin renormalización.	110
6.20. Variación de la masa de fluido inferior en el problema de <i>sloshing</i> resuelto con advección sin renormalizar.	111
6.21. Desplazamiento de la SL sobre el lado izquierdo del dominio para el problema de <i>sloshing</i> con pequeños desplazamientos con renormalización periódica.	112
6.22. Variación de la masa del líquido inferior en el problema de pequeños desplazamientos con renormalización periódica.	112
6.23. Comparación de perfiles de transición sobre la izquierda del dominio en $t = t_f$ para resolución con y sin renormalización.	113
6.24. Curvas de evolución de amplitud para el problema de Prosperetti con y sin renormalización.	113
6.25. Geometría para el problema de colapso de una columna de agua.	114
6.26. Avance del frente de onda en función del tiempo para el problema de colapso de la columna de agua.	115
6.27. Descenso de la columna de agua sobre la izquierda en función del tiempo.	116

6.28. Campo de la función de nivel ϕ para distintos instantes en el problema de rotura de presa. 117

6.29. Evolución de la masa en función del tiempo para el problema 2D de colapso de la columna de agua. 118

6.30. Instantes iniciales del colapso de la columna de agua. 119

6.31. Pasos intermedios en el problema de rotura de la presa. 120

6.32. Etapas finales en el problema de colapso de la columna de agua. . . . 121

6.33. Geometría del problema de colapso de una columna cilíndrica de agua. 122

6.34. Avance relativo a r_0 del frente de agua en función del tiempo adimensionalizado para el problema 3D de colapso de la columna de agua cilíndrica. 123

6.35. Descenso de la parte superior de la columna de agua 3D en función del tiempo adimensionalizado. 124

6.36. Etapas iniciales en el problema de colapso de la columna de agua 3D. 125

B.1. Elemento genérico y funciones de forma para la resolución de la ecuación de transporte de la superficie libre en dominios 2D para el flujo. 137

Capítulo 1

Introducción

Los flujos con Superficie Libre (SL) constituyen un caso particular de flujos con interfases móviles. Entre los problemas típicos en los cuales se requiere resolver un flujo con SL se encuentran, por ejemplo, el escurrimiento en canales abiertos, la agitación o *sloshing* que se produce en un tanque de transporte de líquidos o el patrón de olas generado por el casco de una embarcación. Son problemas como estos los que motivan la Tesis Doctoral a desarrollar, esto es, la resolución de flujos con SL mediante métodos numéricos, en particular con el Método de Elementos Finitos (MEF) para problemas que se presentan en ingenierías tales como Hidráulica, Naval o Mecánica, en las cuales las dimensiones físicas involucradas hacen que la tensión superficial no influya sensiblemente en los resultados del modelo.

1.1. Motivación

La simulación numérica de flujos con SL abarca numerosos casos que se presentan tanto en lo cotidiano como en situaciones excepcionales, en la mayoría de las veces para flujos no estacionarios. La información que puede obtenerse de las simulaciones, en aquellos casos en que los métodos demuestran su aplicabilidad a través de validaciones previas, permiten complementar el diseño de estructuras civiles y mecánicas, tanto en lo que refiere a su forma como a su resistencia, o bien mostrar la respuesta de estructuras o sistemas dados ante sollicitaciones ordinarias o extraordinarias. Algunos ejemplos de esto son:

- *sloshing* o agitación en tanques de transporte de fluidos, que puede afectar la dinámica del vehículo;
- agitación en tanques de almacenamiento de fluidos debido a aceleraciones de distinto origen, como en el caso de sismos;
- escurrimiento en canales abiertos cortos;
- colapso de columnas de fluido;
- vertederos o aforos, cuyo régimen de flujo depende del caudal de ingreso y afecta sensiblemente el comportamiento de la corriente aguas abajo;
- flujo detallado en torno a tomas de agua, en las cuales el bombeo produce excitaciones cuasi-periódicas;

- llenado de recipientes, especialmente en aplicaciones industriales;
- hidrodinámica naval, que incluye patrones de olas generados por embarcaciones y diseño de propulsión para naves de diferentes tipos;

entre otros.

1.2. Objetivos

El objetivo general de esta Tesis es el desarrollo de métodos de simulación numérica para flujos estacionarios o transientes con SL de fluidos incompresibles y viscosos, en dominios fijos o deformables, usando procesamiento multiparalelo y aplicando el MEF para resolver las ecuaciones de Navier–Stokes (NS) para una o dos fases, según la aproximación. Se asumirá fluido de tipo newtoniano con propiedades físicas constantes, mientras que los regímenes de flujo, laminares e isotérmicos, serán tales que los efectos de la tensión superficial podrán ser omitidos en todos los casos y sin desprendimiento en las paredes sólidas.

En esta Tesis, se propone una alternativa de tipo MEF con elementos de igual orden para velocidad y presión en la cual el fluido, representado mediante el sistema de ecuaciones de Navier–Stokes, se resuelve a través de un método estabilizado con *streamline upwind/Petrov-Galerkin* (SUPG) [BH82] y *pressure stabilizing/Petrov-Galerkin* (PSPG) [TMRS92] con mallas no-estructuradas y procesamiento distribuido, mediante dos esquemas distintos: uno de seguimiento de interfase, con malla móvil [SUR96], para casos en los cuales las deformaciones de la SL son pequeñas, y otro de captura de interfase, con malla fija [SZ99], capaz de reproducir, por ejemplo, la rotura de la SL.

El esquema de seguimiento de interfase propuesto se compone de tres etapas sucesivas en cada paso de tiempo: la primera de ellas consiste en la determinación del estado en el líquido, seguida por la etapa de cálculo del desplazamiento de la superficie libre. Por último, se realiza el movimiento de la malla de elementos finitos de manera tal que ésta se adapte a la nueva forma del dominio sin que sea necesario recurrir a la regeneración de los elementos.

La estrategia de captura de interfase para simular flujos con SL se propone también en tres etapas por paso de tiempo. En primera instancia, se determina el estado del fluido en el dominio de análisis, que en este caso se compone de dos fases: una líquida y otra gaseosa, que se distinguen una de otra por una función marcadora. Luego, conociendo la velocidad del fluido en todo el dominio, se transporta la función marcadora, para finalmente realizar un proceso de reinicialización sobre dicha función a fin de que ésta mantenga ciertas propiedades de regularidad.

1.3. Estrategias de resolución de flujos con superficie libre mediante métodos numéricos

Debido a las dificultades que presentan los flujos con interfaces móviles, siendo su posición desconocida *a priori* al ser parte de la solución [SUR96], se han desarrollado numerosos métodos para resolver este tipo de problemas. Las estrategias

que pueden emplearse para ello están estrechamente vinculadas a las descripciones cinemáticas del campo de flujo.

Clásicamente, la Mecánica del Continuo ha recurrido a descripciones lagrangianas, eulerianas o, más recientemente, a alguna combinación de éstas para representar los problemas en cuestión. En una representación *lagrangiana*, las cantidades son asociadas a las partículas materiales del continuo, de manera tal que cualquier desplazamiento de una de ellas implica una deformación del dominio que se está analizando en la misma magnitud del desplazamiento de las partículas. Por otro lado, en una representación *euleriana* los parámetros están referidos a posiciones espaciales con respecto a las cuales las partículas materiales se desplazan: el dominio no sufre cambios de forma, pero las partículas se desplazan libremente en su interior, o bien pueden ingresar o salir del mismo. Cada una de las representaciones indicadas cuenta con limitaciones claras: una formulación lagrangiana para resolver problemas de la Mecánica de Fluidos resulta inadecuada en casos en los cuales se producen grandes deformaciones, por ejemplo, en vórtices, mientras que una formulación euleriana es insuficiente en sí misma para considerar fronteras móviles o deformables del dominio, como en el caso de flujos con SL. Como respuesta a estos inconvenientes, han surgido descripciones del movimiento que combinan ambas metodologías y se califican con el término de lagrangiana-euleriana arbitraria, ALE por sus siglas del inglés *Arbitrary Lagrangian-Eulerian*.

Asociadas a las representaciones antes mencionadas, los métodos de resolución numérica de flujos con interfases móviles pueden agruparse de acuerdo con el tipo de referencial asociado. En un primer grupo se encuentran aquellos métodos de seguimiento de interfase, de corte lagrangiano o bien tipo ALE, en los cuales el dominio es capaz de registrar deformaciones, mientras que en un segundo grupo se cuentan métodos de discretización fija, eulerianos, que requieren la consideración de parámetros adicionales para “capturar” la posición de la SL. En las secciones siguientes se comentan algunos de los métodos más conocidos, ya sea aquellos englobados en la clasificación anterior o independientes de ella, para luego profundizar la revisión en el Cap. 2. Algunas referencias acerca de las distintas metodologías fueron los trabajos de Shyy *et al.* [SURS96] y de Scardovelli y Zaleski [SZ99].

1.3.1. Métodos de seguimiento de interfase

En los métodos lagrangianos la SL o algún otro tipo de interfase está específicamente definida sobre la discretización, conformando una entidad de $n-1$ dimensiones en relación a un dominio euclídeo n -dimensional, lo cual permite un seguimiento más preciso de lo que ocurre en la interfase, por ejemplo sobre los nodos y caras de elementos en el caso del MEF, y por ello se habla de esquemas de tipo “seguimiento de interfase” (*interface-tracking*) [SURS96]. Estos esquemas cuentan con diversas limitaciones, fundamentalmente ligadas al problema que se produce cuando hay una gran magnitud acumulada en las deformaciones relativas, que en métodos de mallas de topología constante puede llevar a la invalidez de la grilla deformada, a menos que se proceda a remallados periódicos o esporádicos del dominio en el transcurso de la simulación, haciendo tedioso el manejo computacional.

Entre los métodos pioneros se cuenta el muy difundido *Marker-And-Cell* (MAC), introducido por Harlow y Welch [HW65], en el cual el seguimiento de la interfase se realiza con marcadores o partículas sin masa que se desplazan con el flujo, indepen-

dientes de la grilla de cálculo, y cuyo estado es determinado sobre una discretización fija, euleriana. A pesar de ser de larga data, publicaciones recientes muestran su vigencia tanto para flujo de Stokes en dominios 2D [IQ08] como para fluidos viscosos en 3D, véanse [OTCM08, TFC⁺01] y las referencias allí incluidas.

Para mitigar los inconvenientes de las representaciones clásicas surgieron propuestas mixtas que combinan los esquemas euleriano y lagrangiano con el fin de aprovechar las ventajas de cada uno, en las cuales entra en juego una configuración de referencia sobre la cual se resuelve el problema, además de una configuración material y otra espacial que representan los paradigmas antes citados. Un ejemplo de esto es la metodología ALE [DH03, HL88, HLZ81], con aplicaciones en problemas con fronteras móviles en general, sean éstas sólidas o interfases. A nivel discreto, se trata de un procedimiento en el cual la deformación de la frontera es seguida de manera lagrangiana mientras que los nodos interiores son relocalizados con algún criterio que evite una excesiva deformación de los elementos de la malla y, en algunas aproximaciones, la necesidad de un remallado. Esta relocalización implica que la velocidad de los nodos de la malla deba ser tomada en cuenta al resolver las ecuaciones de balance en el movimiento del fluido, pero permite obtener mayor precisión sobre la interfase. Aún así, hay limitaciones en cuanto a desplazamientos en los nodos de la superficie libre, ya que mediante ALE no es posible simular, por ejemplo, la rotura de una ola o la captura de burbujas de gas en la masa del fluido. Esta técnica es frecuentemente empleada en problemas con superficie libre, por ejemplo en el caso de agitación [SZ01] o en las primeras etapas del problema de rotura de una presa [DGN04, HL88], donde la SL aún no ha sufrido rotura.

Por otro lado, hoy día se encuentran muy desarrollados los métodos de partículas o *mesh-less* [IODP04], netamente lagrangianos, empleados en tanto en flujos multifase como en interacción fluido-estructura [Mar08].

1.3.2. Métodos de captura o reconstrucción de interfase

Otra alternativa frente a los modelos clásicos es el desarrollo de métodos denominados de “captura de interfase” (*interface-capturing*), tales como *Volume of Fluid* (VOF) [HN81, SZ99] y *Level Set* (LS) [OS88, Set95], o método de función de nivel, en los cuales se emplean mallas fijas que abarcan no sólo el dominio del fluido cuyo comportamiento interesa simular sino también el de la otra fase, de manera tal que la interfase atraviesa una franja de elementos en los cuales se registra la fracción de uno u otro de los fluidos. Entre sus inconvenientes se cuentan la reconstrucción de la interfase, que es “capturada” en función de datos en sus adyacencias, y dificultades para cumplir con la conservación de masa, especialmente en el caso de LS.

Los esquemas VOF/LS son hoy en día muy empleados, ya sea por separado [LYO06] o mediante combinaciones de ambos [SP00], lo cual alimenta continuamente la aparición de propuestas alternativas.

Si bien los métodos de captura exigen muchos recursos computacionales al simular las dos fases para un problema de superficie libre, como contrapartida pueden ser empleados para resolver flujo bifásico.

1.3.3. Ecuaciones de Saint–Venant

Además de los procedimientos citados anteriormente, son muy conocidos los que se basan en la resolución de las ecuaciones de Saint-Venant [Her07], o de *shallow water*, las más empleadas para flujo en canales abiertos y problemas de hidrología superficial en general, tal como en el trabajo de Audusse *et al* [ABD08]. Si bien existen numerosas propuestas para la resolución de estas ecuaciones, las hipótesis aplicadas en la mayoría de aquellas reducen en una las dimensiones del problema, como ser la de velocidad vertical nula, dado que la profundidad del fluido es mucho menor que sus dimensiones horizontales.

1.4. Procesamiento distribuido

El aumento de las exigencias computacionales debido a la resolución de problemas que se representan de manera discreta mediante grandes sistemas de ecuaciones excede las capacidades de cálculo de computadoras personales, lo cual ha llevado al uso de “supercomputadoras”, entre ellas, los *clusters*, que consisten en dos o más computadoras intercomunicadas a través de una red. En particular, debido a sus costos relativamente bajos de construcción y mantenimiento, los cúmulos o *clusters* de computadoras tipo *Beowulf* [Beo08] son de los más difundidos, tal es el caso de los construidos en los últimos años en el Centro Internacional de Métodos Computacionales en Ingeniería (CIMEC) [CIM08], bautizados Geronimo [Aqu07] y Aquiles [Aqu08], el segundo de los cuales se encuentra en funcionamiento con 82 nodos de cálculo *Pentium IV*. Estos equipos están compuestos por procesadores tipo PC, todos sin disco rígido excepto el servidor, conectados entre sí por una red de tipo *Fast Ethernet* y los correspondientes *switch* de alta velocidad (1 GBps), con lo cual se abaratan mucho los costos, económicamente hablando. El sistema operativo, *open source*, es alguna distribución de Linux [Lin08] y se complementa con aplicaciones de libre acceso (GNU) [Fre08], como ser compiladores y otras herramientas específicas.

El programa de cálculo mediante el MEF empleado para realizar parte de la resolución numérica de los flujos con SL es PETSc-FEM [PET08, SYNS02], un programa escrito en lenguaje C/C++ con programación orientada a objetos que se desarrolla en el CIMEC, con el aporte colaborativo de investigadores y estudiantes de posgrado, orientado a multifísica y procesamiento distribuido. Dicho programa se encuentra basado en las librerías *Portable Extensible Toolkit for Scientific Computations* (PETSc) [BBE+05], consistentes en un conjunto de estructuras y rutinas para la solución en paralelo de aplicaciones científicas modeladas mediante ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. La comunicación requerida por el programa, mediante paso de mensajes, se realiza con *Message Passing Interface* (MPI) [MPI08]. El tratamiento de problemas en los cuales intervienen dos o más instancias de PETSc-FEM, cada una de ellas resuelta mediante procesamiento paralelo, constituye un paradigma de cálculo multiparalelo, del cual se hará uso extensivo en esta Tesis.

La necesidad concreta de apelar a procesamiento distribuido para la resolución de los grandes sistemas de ecuaciones que se producen al modelar mediante métodos numéricos los fenómenos de flujo de fluidos es referenciada en numerosas publicaciones, entre las cuales pueden citarse Güller *et al.* [GBT99] o Tezduyar *et al.* [TAB+93].

1.5. Metodología

La metodología de trabajo abarca dos descripciones principales para el caso de flujo con superficie libre. Para ello se desarrollan (i) una técnica tipo lagrangiana-euleriana arbitraria (ALE) de seguimiento de la superficie libre, con movimiento de la malla en cada paso de tiempo, y (ii) una técnica de captura de interfase. La primera es descrita en detalle en el Cap. 4, para la cual se trabajó en el algoritmo de interacción entre etapas, en la selección de estrategias de movimiento de malla y en la estabilización de la resolución numérica del transporte de la superficie libre. El segundo esquema, abordado en el Cap. 6, propone una línea de trabajo en LS que involucra la actualización de la posición de la superficie libre resolviendo la ecuación de advección de la interfase mediante un método de elementos finitos con estabilización. Para este último esquema se modeló un elemento capaz de simular fluido no homogéneo al resolver la instancia de NS, así como también se propuso la estrategia de reinicialización de la función de nivel y el algoritmo de resolución de las múltiples etapas. Igualmente, en el Cap. 5 se detallan dos desarrollos intermedios en captura de interfase, uno de ellos para la etapa de advección de la función de nivel, y el restante para un algoritmo alternativo de reinicialización.

En ambos casos, el flujo del fluido es resuelto a través de las ecuaciones de NS mediante un MEF estabilizado sobre la misma discretización empleada para las técnicas de análisis de la SL, extendido al caso tridimensional con mallas no-estructuradas y procesamiento distribuido, en un paradigma multiparalelo.

Capítulo 2

Estado del arte

La mayor generalidad de los métodos de captura de interfase para simular flujos con SL hace que sean los más difundidos en los últimos años. Por ejemplo, el aumento de la potencia de cómputo de las computadoras digitales permite el empleo de estrategias de adaptatividad de mallas para esquemas tipo LS [CMR08, Her08], la combinación entre VOF y LS [YJL⁺06], e inclusive la integración de métodos de captura con métodos de seguimiento de interfase [ATU07, CCT07b].

Lo antes mencionado no implica en absoluto que los métodos tipo ALE tiendan a ser dejados de lado, sino que se los emplea principalmente en formulaciones multifísicas, tal como en casos de interacción fluido-estructura [SH07] en los cuales también suelen intervenir interfases o superficies libres [DPIOA07].

Últimamente, los distintos métodos de partículas han sido los de mayor crecimiento en la línea de interacción fluido-estructura [IMLO08, Mar08] y simulación de interfases [ASF08], también en combinación con otras aproximaciones, como LS [LJS08].

Los métodos basados en la resolución de las ecuaciones de *lattice Boltzmann* en lugar de emplear las ecuaciones de NS son también capaces de simular flujos multifase y, por ende, flujos con SL. En los últimos tiempos se han desarrollado metodologías que combinan estas ecuaciones con los esquemas de captura de interfase antes mencionados, como VOF [GS03] y LS [TBJ⁺08].

Independientemente de los métodos antes indicados, el propósito de este capítulo es el de resumir la información disponible en relación a las metodologías a desarrollar en esta Tesis, en particular en cuanto a ALE y a captura de interfase mediante VOF y LS, de los cuales el segundo es tomado como referencia para el método propuesto en el Cap. 6.

2.1. Métodos de seguimiento de interfase

En primer lugar, debe tenerse presente que las formulaciones de seguimiento de fronteras tienen un campo de aplicación en el cual se cuentan la simulación de interfases entre fluidos, problemas de interacción fluido-estructura con sólidos rígidos o deformables, desgaste e inclusive de cambios de fase, amplitud que ha estimulado la aparición de muchas variantes en las técnicas de movimiento de malla o, eventualmente, de remallado.

2.1.1. Formulaciones más difundidas

La resolución mediante MEF de problemas de flujo con una técnica ALE surge a fines de la década de 1970, motivado especialmente por la resolución de problemas de interacción fluido-estructura, según se indica en Hughes *et al.* [HLZ81], en el cual, a su vez, introduce la metodología en un caso de flujo con superficie libre para fluido incompresible. La parte euleriana del método hace necesario considerar la estabilización de los términos convectivos, y más aún al aumentar la magnitud de los desplazamientos de la SL, como en Huerta y Liu [HL88] y, más recientemente, Soulaïmani *et al.* [SFDO91].

Como método generalizado para la resolución de muchos de los problemas indicados en el primer párrafo se encuentra el denominado *Deformable-Spatial-Domain/Stabilized Space-Time* (DSD/SST) introducido por Tezduyar *et al.* [TBL92] y de numerosas aplicaciones posteriores [TBML92, GBT99, JT94, TAB⁺93]. Esta formulación tiene en cuenta automáticamente las deformaciones del dominio, de manera que no es necesario tener en cuenta las modificaciones típicas en métodos ALE para la resolución de las ecuaciones de NS [BA02]. El empleo de esta técnica de seguimiento junto con una de captura de interfase, sea con la denominada *Enhanced-Discretization Interface-Capturing Technique* (EDICT) [TAB98] o *Edge-Tracked Interface Locator Technique* (ETILT) [Tez06], da lugar a la *Mixed Interface-Tracking/Interface-Capturing Technique* (MITICT) [ATU07, CCT07b, Tez01]. Para mayor detalle de estas técnicas es conveniente consultar la revisión realizada por Tezduyar [Tez06].

Una propuesta ALE aplicada frecuentemente en flujos a pequeña escala es la de *spines*, en la cual los nodos que conforman el dominio se desplazan sobre una dirección o “espina” (*spine*) que se mantiene fija a lo largo de todo el análisis. Se lo emplea principalmente, por ejemplo, para la simulación del recubrimiento o pintado en capas de escaso espesor (*slot coating*) [Mad05, SS81], simulación de burbujas [JS05, MA95b], u otros fenómenos a escala milimétrica [GS99] típicos en Ingeniería Química, en los cuales los efectos de capilaridad son dominantes. Igualmente, aplicaciones para interacción fluido-estructura de geometría sencilla a mayor escala también recurren a esta metodología [Hei04].

También hay estrategias que combinan esquemas de seguimiento y de captura, generalmente para aplicaciones específicas, como ser desplazamientos y coalescencia de burbujas [dMN⁺04], en el que coexisten una malla fija para la simulación de los fluidos y otra móvil para representar las interfases. Uno de los trabajos de referencia se debe a Unverdi y Tryggvason [UT92], orientado a flujos a pequeña escala, donde las tensiones superficiales u otros fenómenos de la frontera entre gas y líquido cobran mayor relevancia [ET98, ET99].

2.1.2. Actualización de la discretización del dominio

Entre los puntos centrales al diseñar una metodología de seguimiento de interfase, incluyendo las denominadas ALE, se encuentra el proceso mediante el cual se actualiza o regenera la discretización espacial para considerar las deformaciones que se producen en el dominio a lo largo del tiempo.

Las principales alternativas para resolver esta instancia son las siguientes [BA02]:

- **Actualización algebraica:** la discretización es modificada mediante expre-

siones algebraicas explícitas para el desplazamiento de los nodos interiores como función de los desplazamientos de la SL, conservando la definición topológica de los elementos, como en los métodos de *spines* [SS81], sobre mallas estructuradas.

- **Relocalización de nodos interiores:** consiste en la reubicación de los nodos interiores del dominio manteniendo la topología, pero a través de procedimientos auxiliares tales como la resolución de un problema pseudo-elástico [BA02, GBT99, JT94, RM03] o la minimización de un indicador de la distorsión de los elementos [LNS08, LNST07], ambos considerados en esta Tesis, entre otros.
- **Remallado:** la malla es generada nuevamente cada vez que el dominio es deformado, lo cual exige la interpolación/extrapolación de los valores de las variables en los nodos.

2.2. Captura de interfase con Volume-of-Fluid

La familia de métodos englobada en VOF se caracteriza por indicar con la fracción de fluido F con que cuenta cada celda, representada con un ejemplo en la Fig. 2.1, de la siguiente forma:

$$F = \begin{cases} 1 & \text{celda totalmente llena de fluido;} \\ 0 < F < 1 & \text{celda parcialmente llena de fluido;} \\ 0 & \text{celda ocupada por el gas.} \end{cases} \quad (2.1)$$

El hecho de dar la fracción F por elemento está vinculada al origen del método, asociado desde sus principios con el Método de Volúmenes Finitos (MVF) y el Método de Diferencias Finitas (MDF), véase la publicación de Hirt y Nichols [HN81], en tanto que Mashayek y Ashgriz son considerados pioneros en la vinculación de VOF con FEM (*hybrid FEM-VOF*) [MA95a].

Las etapas a seguir en cada paso de tiempo en un método tipo VOF son las siguientes:

1. determinación del estado en el fluido, en ambas fases;
2. advección de la fracción de volumen F ;
3. reconstrucción de la superficie libre o interfase;
4. imposición de nuevas condiciones de contorno para el siguiente paso del fluido.

Tanto la primer etapa como la última no exigen mayor descripción, aunque sí cabe aclarar que las celdas que son atravesadas por la interfase deben recibir un tratamiento especial, pues en ellas coexisten los dos fluidos involucrados, de manera que será preciso interpolar las propiedades físicas de uno y otro de acuerdo a la magnitud de F en la celda y la inclinación de la interfase. Este salto en las propiedades puede llegar a constituir un inconveniente al resolver las ecuaciones de NS.

La fracción F se encuentra regida por una ecuación de advección, aunque en la práctica usual en mallas estructuradas se determina el flujo entre celdas, lo que confiere al método características de *volume-tracking* [RK98, SZ99], esto es, conserva volumen de manera natural. Sin embargo, para aplicaciones con grillas no

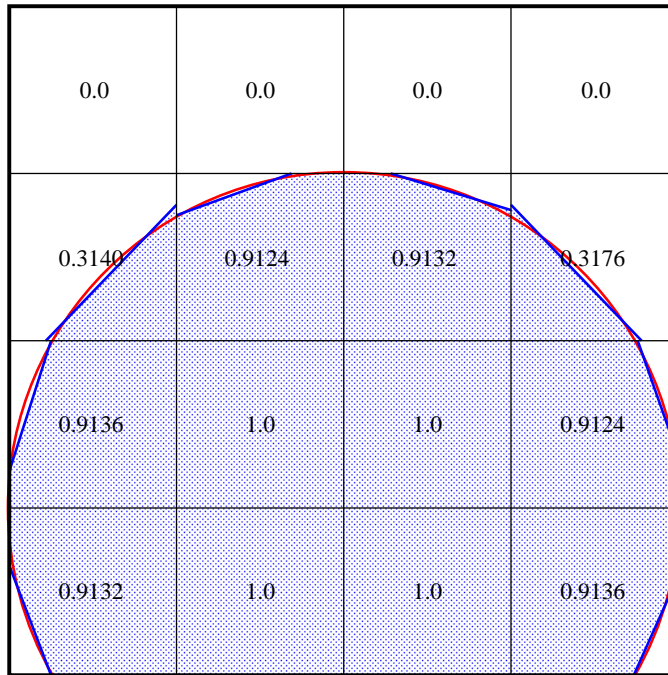


Figura 2.1: Fracción de volumen y reconstrucción de la SL en VOF.

estructuradas, asociadas a VOF mediante MEF [KPL03, LYO06], y dependiendo de la metodología de transporte de F , se producen pérdidas o ganancias de volumen en una u otra fase, inconveniente que suele subsanarse con algún operador adicional para mantener constante la cantidad de masa. Entre las variantes del método, hay quienes usan dos grillas, una de elementos finitos para el fluido y otra para F [MPR99, SL00]. Otro ejemplo es el *Enhanced-Discretization Interface-Capturing Technique* (EDICT) de Tezduyar *et al.* [TAB98], según los autores evolucionado a partir de VOF, que recurre a mallas refinadas dentro de la grilla original. Detalles de la advección de la fracción de fluido para esquemas tipo MVF pueden encontrarse en publicaciones de Scardovelli, Zaleski y otros [AMS04, AMSZ03, AMSZ07, SZ03], tanto en dos como en tres dimensiones.

En lo que hace a la reconstrucción de la interfase, o bien de la SL, existen varios algoritmos, la mayoría de los cuales requiere conocer o calcular la normal a la interfase. Entre los más conocidos para mallas estructuradas se cuentan: el *simple-line interface calculation* (SLIC) [NW76], que consiste en dividir a la celda fraccionada mediante líneas rectas verticales u horizontales; el *piecewise linear interface calculation* (PLIC) [GLN⁺99, Li95, SZ00], que realiza la división con líneas rectas con determinada inclinación y se limita a elementos regulares, sean cuadrangulares en 2D o hexahédricos en 3D; el *piecewise-parabolic interface calculation* (PPIC) [Kul98] para reconstrucción parabólica, entre otros. Una comparación entre los más conocidos puede consultarse en Pilliod *et al.* [PP04] o en la tesis de Klefsman [Kle05]. Por otro lado, para casos de grillas no estructuradas de triángulos y tetrahedros, el trabajo de Yang y James [YJ06] presenta formas analíticas con algoritmos rápidos para realizar la reconstrucción de la interfase, incluso con extensiones a adaptatividad de mallas [YJL⁺06]. Otro método para el cálculo de las normales y curvaturas, se presenta en el trabajo de Raessi *et al.* [RMB07].

En resumen, considerando en parte las apreciaciones de Scardovelli y Zales-

ki [SZ99], algunas de las ventajas de VOF como método de captura de interfase son:

1. preservación de la masa de los fluidos involucrados, aunque esta propiedad se encuentra estrechamente vinculada al algoritmo de transporte de F ;
2. no requiere previsiones especiales para simular la rotura o reconexión de la SL;
3. es de extensión relativamente simple de 2D a 3D;
4. se trata de un esquema local, ya que F en una celda depende de F en las celdas vecinas, lo que facilita la paralelización.

2.3. Captura de interfase mediante una función de nivel

De acuerdo con Sethian [Set95], los métodos tipo *level set* son técnicas numéricas para calcular la posición de frentes que se propagan. Por ejemplo, tiene usos muy variados: generación de imágenes, control, diseño asistido por computadoras, micro-electromecanismos, interfases tales como flujo multifase, superficie libre o propagación de frentes de llama y más.

Esta metodología se basa en la advección de una función definida en todo el dominio, abarcando ambas fases y que vale cero en la interfase, con buena capacidad de captura de desprendimiento de fluido y mezcla. Algunos lo mencionan como un método de seguimiento de interfase, pues en cada paso se determina la posición de ésta, pero esa calificación no se condice con la representación de la SL con nodos o con fronteras de elementos.

La función escalar de LS, o función de nivel, denotada aquí con ϕ , es suave y está definida en todo el dominio espacial Ω , incluyendo tanto la fase líquida como la gaseosa y en un tiempo $t \in [0, T]$ es [SS97]:

$$\phi(\mathbf{x}, t) \begin{cases} > 0 & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_l; \\ = 0 & \text{si } \mathbf{x} \in \Gamma_I; \\ < 0 & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_g; \end{cases} \quad (2.2)$$

donde \mathbf{x} indica la posición espacial en la cual la función es evaluada, ya sea sobre el subdominio que corresponde a la fase líquida Ω_l , o sobre la región gaseosa Ω_g , siendo $\Omega = \Omega_l \cup \Omega_g$ y $\Omega_g = \Omega \setminus \Omega_l$, como puede verse en la Fig. 2.2. Nótese que el subíndice l se asocia a la zona ocupada por el líquido y el subíndice g a la ocupada por el gas, nomenclatura que se conservará en el desarrollo de este método. Por su parte, la interfase se define como:

$$\Gamma_I = \{\mathbf{x} | \phi(\mathbf{x}, t) = 0\}. \quad (2.3)$$

En particular, para flujos con SL se tiene $\Gamma_I = \Gamma_{SL}$.

Conocida $\phi(\mathbf{x}, t) : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, con d el número de dimensiones espaciales, se pueden determinar propiedades geométricas de la curva, tales como:

- el versor normal a la interfase, apuntando del gas al fluido,

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \Big|_{\phi=0}; \quad (2.4)$$

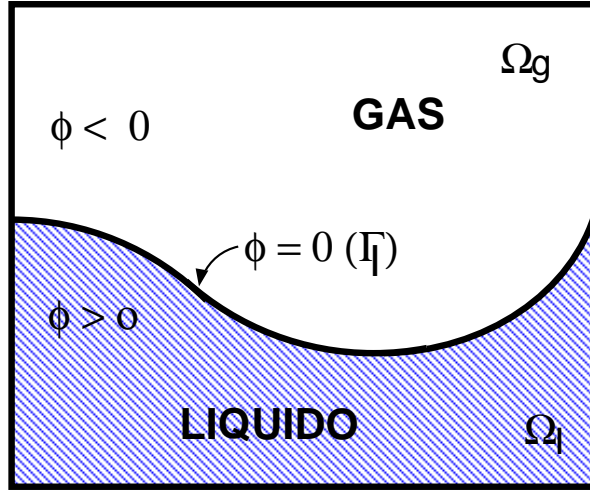


Figura 2.2: Esquema de valores de la función de nivel (*level set*) en un dominio genérico.

- la curvatura de la interfase,

$$\kappa = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right)_{\phi=0}. \quad (2.5)$$

El signo asignado a estas expresiones puede coincidir o no con esta definición, de acuerdo con la metodología que se proponga; por ejemplo, Osher y Fedkiw [OF01] consideran la orientación contraria, esto es, la normal desde el líquido hacia el gas.

El campo de velocidades \mathbf{v} , continuo en la interfase, genera la advección de Γ , que en sí es la de $\phi(\mathbf{x}, t)$:

$$\partial_t \phi + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi = 0. \quad (2.6)$$

En cada paso de tiempo, inicializados la función de nivel ϕ^n y la velocidad del fluido \mathbf{v}^n en el instante $t^n = n\Delta t$, donde Δt es el paso de tiempo, se procede según la siguiente secuencia:

1. determinación del estado del flujo en el fluido, \mathbf{v}^{n+1} ;
2. resolución de la Ec. (2.6), con la cual se obtiene $\phi^{n+1/2}$;
3. reinicialización o renormalización de $\phi^{n+1/2}$, que determina ϕ^{n+1} .

Al igual que con VOF, son muy distintas las metodologías de resolución de cada instancia, lo que genera la gran variedad de alternativas dentro de la familia de LS. En cuanto a métodos numéricos de resolución, son muy comunes el MDF y el MVF, e incluso el MEF, pero en el último caso es preferentemente asociado a mallas estructuradas.

Es práctica usual que la definición inicial de ϕ se determine como una función distancia a la curva o superficie Γ_1 , es decir, a $\phi = 0$, ya que se trata de una función suave, que se encuentra definida en todo el dominio y puede ser determinada de manera sencilla.

Otra variante al método es el “*single-phase level set*”, que consiste en resolver sólo la parte del líquido inferior, el más denso, como en Carrica *et al.* [CWS04], aunque se trata de un procedimiento que cuenta con la limitación de no representar

de manera correcta la física en los casos en los cuales queda gas encapsulado en el líquido.

Como desventaja, algunos autores indican dificultades para mantener una interfase nítida, lo cual puede asociarse fuertemente a la metodología de advección de ϕ que se emplee. Sin embargo, su extensión de dos a tres dimensiones resulta inmediata, pues el tratamiento geométrico es sencillo y más independiente de la discretización que VOF, por lo tanto resulta de mayor afinidad con el MEF que este último.

2.3.1. Estado en el fluido

El cálculo del estado en el fluido, en general planteado para todo Ω , suele resolverse para los casos de flujo incompresible mediante las ecuaciones de NS, dadas como en la Sec. 3.2.2, en el cual las propiedades del fluido van a depender de la posición \mathbf{x} de la partícula en relación a los subdominios Ω_l u Ω_g . En la propuesta de Unverdi y Tryggvason [UT92], retomada por Sussman y Smereka [SS97] y adoptada por diversos autores, los valores de densidad ρ y viscosidad dinámica μ vienen dados por el valor de la función de nivel ϕ en cada punto en la siguiente forma,

$$\rho(\phi) = \rho_g + (\rho_l - \rho_g) H(\phi); \quad \mu(\phi) = \mu_g + (\mu_l - \mu_g) H(\phi); \quad (2.7)$$

con la función de Heaviside $H(\phi)$ definida como:

$$H(\phi) = \begin{cases} 0 & \text{si } \phi < 0; \\ \frac{1}{2} & \text{si } \phi = 0; \\ 1 & \text{si } \phi > 0. \end{cases} \quad (2.8)$$

El inconveniente de usar esta función $H(\phi)$ para la resolución numérica de las ecuaciones de Navier–Stokes es la aparición de dificultades originadas en la interfase debido al salto que se produce en la densidad y la viscosidad, razón por la cual en un entorno de Γ_1 de espesor aproximado $2\varepsilon/|\nabla\phi|$ [SS97], proporcional al tamaño de los elementos de la malla, se emplea una variación suave de la densidad y la viscosidad, que consiste en remplazar la función de Heaviside por:

$$H_\varepsilon(\phi) = \begin{cases} 0 & \text{si } \phi < -\varepsilon; \\ \frac{1}{2} \left[1 + \phi/\varepsilon + (1/\pi) \sin\left(\frac{\pi\phi}{\varepsilon}\right) \right] & \text{si } |\phi| \leq \varepsilon; \\ 1 & \text{si } \phi > \varepsilon. \end{cases} \quad (2.9)$$

De esta forma, donde $|\phi| \leq \varepsilon$ se tiene $|\nabla\phi| = 1$, y la interfase tendría un espesor de valor 2ε , de manera que adoptando el semiespesor de la transición ε se sabe cuánto abarca la transición en función del número de elementos en las adyacencias de la SL. Como alternativa, hay quienes usan el denominado *Ghost Fluid Method* [CFA01, CWS04, HCS07] para salvar el inconveniente de cambio de propiedades, que permite introducir de manera implícita las condiciones de salto.

2.3.2. Advección de la función de nivel

La resolución de la Ec. (2.6) puede realizarse de distintas maneras, teniendo en cuenta que se trata de una ecuación hiperbólica. Entre las formas más usuales se

encuentran las empleadas por Osher, Sethian, Fedkiw y otros [OS88, OF01], como los esquemas *Essentially Non Oscilatory* (ENO) y *Weighted-ENO* (WENO) y esquemas de integración temporal de alto orden, mediante MDF, Galerkin discontinuo [MR06, Gro05], o un Galerkin-MEF estabilizado con *streamline upwind/Petrov-Galerkin* [CC05, CC07].

En la Ec. (2.6), como sólo la velocidad normal a la interfase $v_n = \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}$ es la que genera el desplazamiento que interesa a los fines prácticos, la advección de ϕ puede escribirse como en Osher y Fedkiw [OF01]:

$$\partial_t \phi + v_n |\nabla \phi| = 0. \quad (2.10)$$

Cuando v_n es una función de la dirección de \mathbf{n} , la Ec. (2.10) pasa a ser una ecuación de primer orden de Hamilton-Jacobi,

$$\partial_t \phi + |\nabla \phi| \gamma(\mathbf{n}) = 0, \quad (2.11)$$

con $\gamma(\mathbf{n})$ una función de la normal. Esta expresión se asocia principalmente a fenómenos tales como el crecimiento de cristales o el avance de frentes de llama.

2.3.3. Reinicialización

En la etapa de reinicialización, o de redistanciamiento (*redistancing*), ϕ se redefine mediante el cálculo de la distancia con signo (*signed distance*), cuyo objetivo es mantener la regularidad de ϕ , especialmente en la zona cercana a Γ_1 , y conservar la suavidad de $\phi = 0$. Además, es usual incluir en esta instancia un rebalanceo de masa para compensar las pérdidas de uno u otro de los fluidos considerados en las zonas cercanas a la interfase, como se indica en los estudios de Sussman y Smereka [SS97] o de Mut *et al.* [MBD06].

Las desventajas de una evaluación analítica de la función distancia han llevado a desarrollar diversos procedimientos numéricos para aproximarla: algoritmos exhaustivos o de “fuerza bruta” resultan prohibitivos en cuanto a costos a la hora del cálculo [EMC07], lo que ha estimulado el desarrollo de otros métodos, basados en acotar el sector del dominio afectado por el procedimiento, o con la resolución numérica de un problema auxiliar planteado mediante ecuaciones diferenciales. Entre las publicaciones recientes sobre reinicialización basada en la distancia se encuentran las de Cheng y Tsai [CT08], y algunas orientadas a mallas no estructuradas, como la de Elias *et al.* [EMC07], donde se la resuelve mediante elementos finitos, y la de Mut *et al.* [MBD06].

La regularización puede realizarse en todos los pasos de tiempo o cada determinada cantidad de ellos, con el objetivo de disminuir costos y posibles distorsiones de los resultados. La tesis de Hysing [Hys07] presenta un buen análisis de las metodologías de reinicialización.

Debido a los costos y consecuencias no físicas que suelen producirse en las reinicializaciones, existen mecanismos que evitan este paso intermedio, entre ellos el de velocidades de extensión, de Adalsteinsson y Sethian [AS99], entre otros. Por ejemplo, hay quienes aplican un Galerkin-MEF discontinuo con elementos de mayor orden para resolver el transporte de ϕ , tal como en Marchandise y Remacle [MR06] y Grooss [Gro05], o bien recurrir a adaptatividad (Di Pietro *et al.* [DLFP06]), o a ambas estrategias de manera simultánea, como Compère *et al.* [CMR08]. Como

alternativa, Herrmann [Her08] propone una *Refined Level Set Grid* (RLSG) que consiste en resolver la advección de la función de nivel ϕ en una malla estructurada separada de la del fluido, de mayor refinamiento.

2.3.3.1. Resolución mediante una ecuación diferencial hiperbólica

La reinicialización más referenciada, que se presenta a modo de ejemplo, es la descrita por Sussman *et al.* [SAB⁺99], en la cual se parte de una condición inicial tal que $\phi(\mathbf{x}, 0)$ es una función distancia a la curva que corresponde a $\phi = 0$, pero que al evolucionar el problema no necesariamente se mantiene como tal. Por ello se pretende que, dada una función de nivel, sea posible reinicializarla como función distancia $d(\mathbf{x}, t)$ sin modificar la curva de la interfase. Una forma de resolver este problema es mediante la ecuación diferencial en derivadas parciales dada por

$$\partial_\tau d = \text{sign}(\phi) (1 - \nabla d); \quad (2.12)$$

con una condición inicial de $d(\mathbf{x}, 0) = \phi(\mathbf{x})$ para un tiempo artificial τ y con

$$\text{sign}(\phi) = \begin{cases} -1 & \text{si } \phi < 0; \\ 0 & \text{si } \phi = 0; \\ 1 & \text{si } \phi > 0. \end{cases} \quad (2.13)$$

La solución estacionaria de la Ec. (2.12) es una función distancia, y dado que $\text{sign}(0) = 0$ la curva $\phi(\mathbf{x}) = 0$ no se ve alterada. En lo que hace a conservación de volumen, que en cada elemento Ω_{ij} , en un contexto de diferencias finitas y para el tiempo $\tau = \tau_n$, es:

$$V_{ij}^n = \int_{\Omega_{ij}} H(\phi^n) d\Omega_{ij}; \quad (2.14)$$

de manera tal que, para que no haya pérdida de volumen, debe cumplirse $V_{ij}^n = V_{ij}^0$, lo cual no se verifica si durante el proceso de reinicialización hay algún pequeño cambio, que podría expresarse como sigue,

$$V_{ij}^n - V_{ij}^0 \approx (\tau_n - \tau_0) \int_{\Omega_{ij}} \frac{dH_\varepsilon(\phi^0)}{d\tau} d\Omega_{ij} = \int_{\Omega_{ij}} \frac{dH_\varepsilon(\phi_0)}{d\phi} (\phi^n - \phi^0) d\Omega_{ij}; \quad (2.15)$$

en la que $\phi^0 = \phi(\mathbf{x}, 0)$ y $dH_\varepsilon(\phi)/d\phi$ se calcula analíticamente, pues la expresión es conocida. Para minimizar la variación de volumen, se proyectan los valores actuales de la función de nivel $\tilde{\phi}_{ij}^n$ sobre los nuevos valores ϕ_{ij}^n tal que estos satisfagan

$$\int_{\Omega_{ij}} \frac{dH_\varepsilon(\phi_0)}{d\phi} (\phi^n - \phi^0) d\Omega_{ij} = 0. \quad (2.16)$$

La proyección está propuesta de la forma siguiente,

$$\phi_{ij}^n = \tilde{\phi}_{ij}^n + \lambda_{ij} (\tau_n - \tau_0) \frac{dH_\varepsilon(\phi^0)}{d\phi}; \quad (2.17)$$

en la cual λ_{ij} se asume constante en el elemento Ω_{ij} . Sustituyendo la Ec. (2.17) en la (2.16) y operando,

$$\lambda_{ij} = \frac{-I_1}{I_2}; \quad (2.18)$$

para la cual son,

$$I_1 = \int_{\Omega_{ij}} \frac{dH_\varepsilon(\phi^0)}{d\phi} \left(\frac{\tilde{\phi}^n - \phi^0}{\tau_n - \tau_0} \right) d\Omega_{ij}; \quad (2.19)$$

$$I_2 = \int_{\Omega_{ij}} \left(\frac{dH_\varepsilon(\phi^0)}{d\phi} \right)^2 d\Omega_{ij}. \quad (2.20)$$

El procedimiento consiste en integrar con una estrella (*stencil*) de nueve puntos en cada celda. Como se asume que λ_{ij} es constante en cada elemento, la Ec. (2.18) se resuelve de manera explícita y rápida. Como ventaja adicional, se cita que esta restricción colabora con que ϕ converja a una función distancia manteniendo la curva de la interfase en su posición.

2.3.3.2. Método de marcha rápida

El método de marcha rápida (FMM, del inglés *Fast Marching Method*) de Sethian [Set95] consiste en el cálculo del tiempo de arribo de un frente en dirección normal a un conjunto de puntos a través de la resolución de la ecuación de Eikonal,

$$\|\nabla T\| F_E = 1; \quad (2.21)$$

con las correspondientes condiciones de contorno, siendo $F_E \geq 0$ la velocidad del frente propagado y T el tiempo de arribo del frente, esto es, $T(\mathbf{p})$ es el tiempo en el cual el frente llega al punto \mathbf{p} , y para $F_E = 1$, $T(\mathbf{p})$ resulta ser la distancia de \mathbf{p} al punto más cercano del frente en tiempo 0. Aunque el FMM fue propuesto para mallas estructuradas, se lo ha extendido a las no estructuradas.

El FMM, o una extensión de éste, es usado por algunos autores como Huang *et al.* [HCS07] junto con una técnica de Carrica *et al.* [CWS04] denominada *close point reinitialization* que da los valores iniciales para el proceso de marcha rápida al tiempo que evita el desplazamiento de la interfase durante la reinicialización.

2.3.3.3. Método de LS conservativo

Las publicaciones de Olsson *et al.* [OK05, OKZ07] detallan una metodología denominada *Conservative Level Set Method* para resolver la advección de la función de nivel, acotada al intervalo $[0, 1]$ con la interfase definida en $\phi = 0.5$, en dos etapas: la primera, de advección propiamente dicha, y la segunda, de reinicialización mediante la evolución de un problema auxiliar. El método está propuesto para depender de un campo de velocidades que verifique la condición de incompresibilidad $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$, para un dominio Ω dividido en los subdominios Ω_1 y Ω_2 tales que $\Omega_2 = \Omega \setminus \Omega_1$ y Γ_1 es la interfase entre dichos subdominios.

Para la etapa de transporte se resuelve la ecuación de advección escrita en forma conservativa de ϕ ,

$$\partial_t \phi + \nabla \cdot (\phi \mathbf{v}) = 0; \quad (2.22)$$

pero dado que $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$, entonces:

$$\partial_t \phi + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi = 0. \quad (2.23)$$

Lo que se pretende, según [OKZ07], es la estabilización del perfil normal a la interfase Γ_1 . La advección estabilizada se escribe como:

$$\partial_t \phi + \nabla \cdot (\phi \mathbf{v}) = \frac{1}{\hat{\mu}} \nabla \cdot [-\phi(1 - \phi)\mathbf{n} + \hat{\varepsilon}(\nabla \phi \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}]; \quad (2.24)$$

con $\mathbf{n} = \nabla \phi / \|\nabla \phi\|$ la dirección normal a la curva, en la cual el parámetro artificial $\hat{\mu}$ es disminuido para mantener la variación del perfil de ϕ cerca de Γ_1 . Para poder manejar numéricamente la Ec. (2.24), se la divide en dos ecuaciones, esto es, el sistema queda conformado por:

$$\partial_t \phi + \nabla \cdot (\phi \mathbf{v}) = 0; \quad (2.25)$$

$$\partial_\tau \phi + \nabla \cdot [\phi(1 - \phi)\mathbf{n}] = \hat{\varepsilon} \nabla \cdot [(\nabla \phi \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}]; \quad (2.26)$$

en la cual τ es un tiempo artificial y $\hat{\varepsilon}$ es un parámetro dado por el usuario, tal que $\hat{\varepsilon} = O(h)$. Como ventaja de la separación de la Ec. (2.24), el parámetro $\hat{\mu}$ desaparece. Dado que las Ecs. (2.25) y (2.26) están dadas en forma conservativa, se espera que la integral $\int_\Omega \phi \, d\Omega$ sea constante en el tiempo, al menos en el continuo.

La resolución numérica de la Ec. (2.25), se reporta que, dado su carácter de ecuación de transporte, resulta inestable sin reinicialización; eventualmente, puede resolverse mediante algún método estabilizado, como ser alguno de difusión a lo largo de las líneas de corriente.

De acuerdo con el término de la derecha en Ec. (2.26), la difusión únicamente se produce en la dirección normal \mathbf{n} , pero se ve compensada con el flujo compresivo $\phi(1 - \phi)\mathbf{n}$, de manera que el movimiento de $\phi = 0.5$ durante la reinicialización debería ser pequeño.

En cuanto al flujo compresivo (Harten, 1997), se habla de una “compresión artificial” para mantener la nitidez de una discontinuidad de contacto. En este caso, se la aplica en dirección transversal a la interfase.

2.3.3.4. Reinicialización con proyección local de la interfase

La metodología de reinicialización con proyección local de la interfase en problemas resueltos mediante LS propuesta por Parolini [Par04] es básicamente un redistanciamiento que no involucra control de masa, ya que la conservación de esta propiedad es tenida en cuenta al definir el algoritmo de advección de la función de nivel ϕ , con $\phi = 0$ en la interfase. Tanto en la citada tesis como en publicaciones del mismo autor se presenta la advección de ϕ resuelta mediante un MEF estabilizado con viscosidad en subgrilla, particionando los elementos, en este caso triangulares de segundo orden, en la mitad de los lados. Según el autor, la extensión a tres dimensiones es inmediata. Sobre esta instancia del cálculo, se compara la resolución mediante el método para resolver la advección ya mencionado y otros estabilizados con SUPG o al menos con estabilización en dirección de las líneas de corriente, tras lo cual llega a la conclusión de que los estabilizados con esta última pierden masa. En este caso, la reinicialización apunta a mantener la regularidad de ϕ , mediante la denominada *interface local projection reinitialization*. Para ello, se divide el dominio Ω en una región de interfase Ω_{in} , que agrupa los elementos atravesados por la interfase Γ , y otra región “lejana”. La metodología consta de tres pasos:

1. reinicialización discontinua exacta: para $\tilde{\phi}_h$ calculada en el paso de advección y $|\nabla\tilde{\phi}_h|$ constante por elemento, siendo \mathcal{K}_h cada uno de los elementos en Ω_{in} se calcula la distancia:

$$d_h = \frac{\tilde{\phi}_h(\mathbf{x})}{|\nabla\tilde{\phi}_h(\mathbf{x})|} \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{K}_h; \quad (2.27)$$

con lo cual $\phi_h = 0$ y $\tilde{\phi}_h = 0$ coinciden y $\|\nabla d_h\| = 1$ en cada \mathcal{K}_h , pero es discontinua por elementos.

2. proyección en el espacio de funciones de elementos finitos continuas por tramos: el problema se plantea como: *hallar $\phi_{\text{hint}} \in \mathcal{W}_h(\Omega_{\text{int}})$ tal que*

$$\int_{\Omega_{\text{int}}} \phi_{\text{hint}} \psi_h \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega_{\text{int}}} d_h \psi_h \, d\mathbf{x} \quad \forall \psi_h \in \mathcal{W}_h(\Omega_{\text{int}}); \quad (2.28)$$

siendo $\mathcal{W}_h(\Omega_{\text{int}}) = \{\psi_h \in C^0(\bar{\Omega}_{\text{int}}) \mid \psi_h|_{\mathcal{K}_h} \in P_1(\mathcal{K}_h) \quad \forall \mathcal{K}_h \in \mathcal{T}_\Gamma\}$, con \mathcal{T}_Γ el conjunto de elementos por los cuales pasa la interfase Γ ;

3. reinicialización en la región lejana, que resulta menos crítica, para la cual se emplean métodos caracterizados más por su eficiencia que por su precisión. Por ejemplo, puede aplicarse la reinicialización mediante la resolución de la ecuación hiperbólica de la Sec. 2.3.3.1.

2.4. Métodos híbridos

Los métodos híbridos o combinados han sido propuestos para mejorar la precisión de VOF y LS combinándolos entre sí, o bien con métodos de partículas o marcadores.

Según algunas referencias consultadas, el trabajo pionero en integrar VOF y LS es el de Bourlioux [Bou95], aparentemente sin mayores consecuencias en el ámbito académico. Por su parte, Sussman y Puckett [SP00] proponen un método que combina elementos de VOF y de LS, al introducir el “Coupled Level-Set/Volume-Of-Fluid” (CLSVOF), orientado a 3D. En dicho trabajo se refieren al problema de pérdida de masa como una de las motivaciones al momento de proponer la metodología.

Siguiendo en la línea del CLSVOF, Sussman [Sus05] indica que el acoplamiento entre métodos está dado por el uso de la función de LS para calcular las normales que requiere VOF en cada celda, y al reinicializarse LS se calculan las distancias desde la interfase reconstruida en VOF. En dicho trabajo se incorporan aspectos acerca de adaptatividad y paralelización de la técnica. Como mejora frente al anterior, Sussman *et al.* [SSH+07] trabaja con relaciones de densidad del orden de 1000 : 1.

Entre las propuestas que combinan métodos de partículas con VOF se encuentra la alternativa de Aulisa *et al.* [AMS03], mientras que para LS los métodos más conocidos son los de Enright *et al.* [EFFM02] y Li *et al.* [LJS08].

2.5. Otros métodos de captura de interfase

El denominado *Edge-Tracked Interface Locator Technique* (ETILT), introducido por Tezduyar [Tez01], consiste en advectar una función ϕ continua en el dominio

que indica la posición de la SL en $\phi = 0.5$ sobre los bordes de los elementos de la malla, siendo $\phi > 0.5$ correspondiente al líquido y $\phi < 0.5$ a la fase gaseosa. Bajo ese criterio, la concepción del método parece cercana a la de LS, aunque la forma en que se realiza la reconstrucción de la interfase y el proceso iterativo complementario propuesto para conservar la masa de las fases hacen que se distinga de la implementación tradicional. Los trabajos de Cruchaga *et al.* [CCT05, CCT07a] se abocan a la evaluación de su desempeño numérico y a la consideración de la influencia de la fricción contra las paredes y de la turbulencia.

En este método, los valores de la función de nivel ϕ están representados sobre las aristas de los elementos en lugar de los nodos con las cantidades ϕ^{he} , aunque se proyectan sobre éstos como ϕ^h , mediante mínimos cuadrados, en determinada instancia del cálculo, esto es, algo semejante a:

$$\int_{\Omega} \psi^h (\phi_n^h - \phi_n^{he}) d\Omega = 0; \quad (2.29)$$

a la cual se adiciona un término de penalización para la posición de ϕ sobre los bordes de los elementos, siendo ψ^h la función de prueba. Una vez transportada ϕ^h , por advección estabilizada con SUPG, la recuperación de ϕ^{he} se realiza nuevamente mediante mínimos cuadrados, en la forma:

$$\int_{\Omega} \psi_P^{he} [(\phi_{n+1}^{he})_P - \phi_{n+1}^{he}] d\Omega = 0; \quad (2.30)$$

con el subíndice P indicando que se trata de valores intermedios, que pueden llegar a ser modificados por las correcciones de conservación de volumen.

La condición de conservación de volumen está dada por una estrategia que podría calificarse como “global”, ya que actúa sobre todo el dominio, y tiene la forma:

$$\int_{\Omega} (\phi_{n+1}^{he} - \phi_n^{he}) d\Omega = Q; \quad (2.31)$$

en la cual Q es la entrada o salida de masa en el intervalo temporal $[n, n + 1]$. La relación de balance de masa se define, en el caso de $Q \neq 0$, como:

$$R_m = \frac{1}{Q} \int_{\Omega} (\phi_{n+1}^{he} - \phi_n^{he}) d\Omega; \quad (2.32)$$

mientras que cuando $Q = 0$ se adopta:

$$R_m = \frac{\int_{\Omega} \phi_{n+1}^{he} d\Omega}{\int_{\Omega} \phi_n^{he} d\Omega}. \quad (2.33)$$

Para que se verifique la conservación de masa, debe cumplirse $R_m = 1$, lo cual se logra llevando adelante un proceso iterativo en el cual, siendo i el contador, es:

$$\phi_{n+1,i+1}^h = \phi_n^h + (\phi_{n+1,i}^h - \phi_n^h) / R_m^k; \quad (2.34)$$

para $k = \text{sign}(\phi_{n+1,i}^h - \phi_n^h)$, hasta verificar que $|R_m - 1|$ es menor que una tolerancia dada. Una vez cumplida esta última condición, se ha obtenido ϕ_{n+1}^{he} .

Capítulo 3

Ecuaciones de gobierno y su discretización

El flujo de un fluido viscoso, newtoniano, e incompresible se describe de manera clásica mediante las ecuaciones de Navier–Stokes (NS), esto es, la ecuación de balance en la cantidad de movimiento junto con la condición de incompresibilidad del fluido.

Debido a que se proponen distintas metodologías para simular el flujo de un fluido con SL, una tipo ALE y otra de captura de interfase, se requiere expresar las ecuaciones necesarias en distintas configuraciones de referencia.

La resolución de las ecuaciones de estado del fluido se realiza mediante el MEF, empleando mallas estructuradas y no estructuradas con elementos finitos lineales, en tanto que la integración en el tiempo se lleva adelante con métodos en diferencias, generalmente implícitos.

3.1. Descripción del campo de flujo

3.1.1. Descripciones básicas y configuraciones asociadas

Las configuraciones o descripciones a las cuales se hará referencia a lo largo de esta Tesis se encuentran representadas en la Fig. 3.1, así como también la designación de las aplicaciones que permiten realizar las transformaciones de coordenadas entre ellas. En dicha figura, la configuración material o lagrangiana $\Omega_{\mathbf{X}}$ está constituida por el conjunto o sistema de partículas materiales asociadas a las coordenadas \mathbf{X} , la descripción espacial o euleriana $\Omega_{\mathbf{x}}$ se compone de puntos de coordenadas espaciales \mathbf{x} y, por último, la configuración de referencia $\Omega_{\boldsymbol{\chi}}$, arbitraria, en la cual las coordenadas referenciales $\boldsymbol{\chi}$ son las empleadas en la resolución numérica, esto es, esta última descripción se corresponde con los datos de la discretización espacial del método numérico, como ser la malla de elementos finitos.

Las transformaciones lineales mediante las cuales se relacionan las distintas configuraciones, también indicadas en la Fig. 3.1, son las siguientes:

- el desplazamiento de las partículas, en este caso de fluido, involucra a las coordenadas materiales \mathbf{X} y a las espaciales \mathbf{x} mediante la aplicación lineal $\varphi : \Omega_{\mathbf{X}} \times [t_0, T) \rightarrow \Omega_{\mathbf{x}} \times [t_0, T)$, es decir,

$$(\mathbf{X}, t) \rightarrow \varphi(\mathbf{X}, t) = (\mathbf{x}, t); \quad (3.1)$$

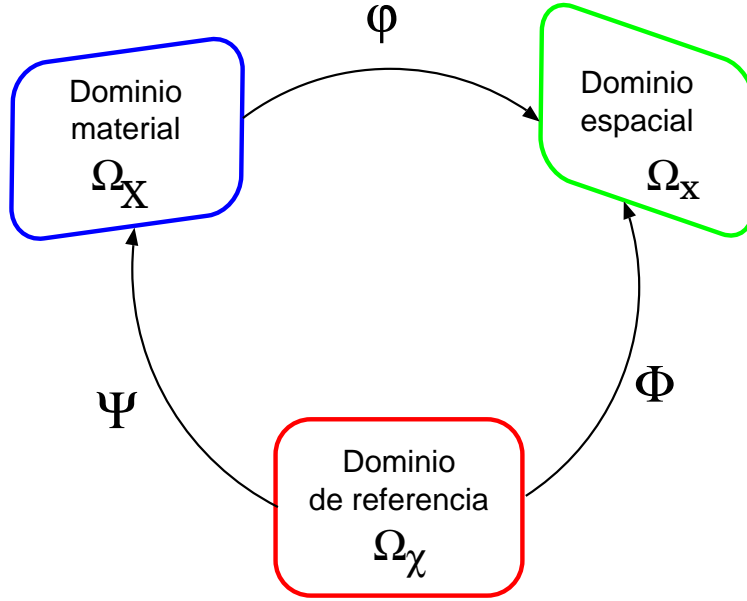


Figura 3.1: Esquema de dominios y configuraciones para las distintas descripciones del campo de flujo.

donde se asume además que la transformación inversa $(\mathbf{X}, t) = \varphi^{-1}(\mathbf{x}, t)$ existe, lo cual requiere que el determinante del gradiente de deformación material J sea mayor que cero, $J = \det\left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}}\right) > 0$, ya que para $J \neq 0$ la transformación es uno a uno y $J < 0$ implicaría un cambio de orientación de los ejes de referencia, que dejarían de conformar una terna dextrógira, mientras que para $J = 0$ la transformación es singular, y por lo tanto inadmisibles;

- el paso del dominio de referencia arbitrario $\Omega_{\boldsymbol{\chi}}$ al dominio espacial $\Omega_{\mathbf{x}}$ es a través de la aplicación lineal $\Phi : \Omega_{\boldsymbol{\chi}} \times [t_0, T) \rightarrow \Omega_{\mathbf{x}} \times [t_0, T)$,

$$(\boldsymbol{\chi}, t) \rightarrow \Phi(\boldsymbol{\chi}, t) = (\mathbf{x}, t); \quad (3.2)$$

que por los mismos motivos expuestos para φ debe cumplir con que el determinante del gradiente de deformación de referencia sea positivo, i.e. $\tilde{J} = \det\left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \boldsymbol{\chi}}\right) > 0$;

- la relación entre las coordenadas dadas en el dominio de referencia arbitrario $\boldsymbol{\chi}$ y las partículas del dominio material \mathbf{X} se establece con la aplicación lineal $\Psi : \Omega_{\boldsymbol{\chi}} \times [t_0, T) \rightarrow \Omega_{\mathbf{X}} \times [t_0, T)$ en la forma

$$(\boldsymbol{\chi}, t) \rightarrow \Psi(\boldsymbol{\chi}, t) = (\mathbf{X}, t); \quad (3.3)$$

con condiciones análogas a las de las transformaciones anteriores para $\bar{J} = \det\left(\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \boldsymbol{\chi}}\right) > 0$.

Las relaciones entre estas tres aplicaciones lineales permiten pasar de una representación a otra conociendo sólo dos de ellas: por ejemplo, si se desconoce Ψ , mediante la composición de las otras dos aplicaciones:

- $\mathbf{X} = \varphi^{-1}(\Phi(\boldsymbol{\chi}, t))$, o sea $\Psi = \varphi^{-1} \circ \Phi$;
- $\boldsymbol{\chi} = \Phi^{-1}(\varphi(\mathbf{X}, t))$, o sea $\Psi^{-1} = \Phi^{-1} \circ \varphi$;

donde \circ denota “composición”. Nótese en la primera de estas expresiones que si $\Phi \equiv \varphi$, entonces se recupera la representación lagrangiana del sistema, con $\mathbf{X} \equiv \boldsymbol{\chi}$. Además, si $\Phi = \mathbf{I}$ la configuración de referencia coincide con la configuración espacial, esto es, se recupera la representación euleriana. pues $\boldsymbol{\chi} \equiv \mathbf{x}$.

3.1.2. Descripción del movimiento mediante un paradigma ALE

Como se comentó en el Cap. 1, hay tres formas de representar el movimiento del fluido: lagrangiana, euleriana y arbitraria o ALE. En la sección anterior se resumieron las condiciones con las cuales la representación puede encuadrarse en alguna de las dos primeras, pero para considerar la tercera es preciso introducir otras magnitudes, en particular, las velocidades relativas entre las distintas configuraciones que coexisten al resolver un problema de mecánica de fluidos. Un procedimiento mediante el cual puede arribarse a las expresiones consideradas se recuerda en el Ap. A.

La velocidad absoluta de una partícula con respecto al marco euleriano, o velocidad material, es definida como:

$$\mathbf{v}(\mathbf{X}, t) = \left. \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}}; \quad (3.4)$$

y coincide con la velocidad de una partícula material \mathbf{X} que en el instante t se encuentra en la posición espacial \mathbf{x} en la cual se evalúa la Ec. (3.4). Esta derivada parcial, calculada “a \mathbf{X} fija” es la que aparece como efecto convectivo al plantear las ecuaciones sobre un marco euleriano e indica la velocidad de desplazamiento entre el fluido y ese referencial euleriano.

Por otro lado, al emplear una formulación ALE para el movimiento en que el dominio de referencia no coincide con el dominio espacial, la velocidad relativa de la malla con respecto al marco euleriano es dada por la expresión:

$$\hat{\mathbf{v}}(\boldsymbol{\chi}, t) = \left. \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} \right|_{\boldsymbol{\chi}}. \quad (3.5)$$

La velocidad relativa de la partícula con respecto al marco de referencia es definida como:

$$\mathbf{w}(\mathbf{X}, t) = \left. \frac{\partial \boldsymbol{\chi}}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}}; \quad (3.6)$$

es la velocidad de la partícula con respecto al marco de referencia.

Por último, la velocidad convectiva \mathbf{c} se define de la siguiente manera:

$$\mathbf{c} := \mathbf{v} - \hat{\mathbf{v}} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \boldsymbol{\chi}} \mathbf{w}; \quad (3.7)$$

y corresponde a la velocidad relativa entre las configuraciones material y de referencia. Recordando que \mathbf{w} es la velocidad relativa de la partícula con respecto a la configuración de referencia, la Ec. (3.7) implica que la velocidad convectiva coincide con \mathbf{w} , es decir $\mathbf{c} = \mathbf{w}$, cuando el movimiento del fluido es exclusivamente de traslación, esto es, si $\partial\mathbf{x}/\partial\boldsymbol{\chi} = \mathbf{I}$.

El uso de un paradigma ALE requiere la expresión de las ecuaciones de gobierno en la configuración de referencia, para lo cual se necesita establecer las relaciones entre ésta y las cantidades intervinientes. La forma a emplear con este fin es la denominada “Ecuación Fundamental ALE” [DH03], cuya deducción es incorporada en el Ap. A, Ec. (A.12), que para una cantidad física escalar f es:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\boldsymbol{\chi}} + \mathbf{c} \cdot \nabla f. \quad (3.8)$$

En lo referido a los alcances de esta Tesis, en el Cap. 4 se precisan las ecuaciones afectadas por la utilización de una formulación ALE.

3.2. Ecuaciones de Navier–Stokes

Las expresiones cuya resolución numérica permiten obtener el estado del flujo van a ser consideradas de dos formas distintas, de acuerdo con la metodología de resolución seleccionada para el tema central de esta Tesis, es decir, problemas de flujo con SL. Dichas alternativas de resolución son abordadas en los Caps. 4 para el caso de fluido homogéneo y 6 para el no homogéneo, siempre considerando fluidos viscosos, newtonianos, no reactivos, con propiedades constantes e incompresibles, en flujos laminares e isotérmicos.

3.2.1. Fluido homogéneo

Las ecuaciones en derivadas parciales que representan el flujo de un fluido homogéneo e incompresible son las de NS, esto es, la expresión diferencial de conservación de la cantidad de movimiento y simultáneamente la condición de incompresibilidad del fluido. En un referencial euleriano son:

$$\rho(\partial_t \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} - \mathbf{f}) - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0 ; \quad (3.9)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 ; \quad (3.10)$$

y que están dadas sobre el dominio del flujo Ω para el tiempo $t \in [0, T]$, en la cual \mathbf{v} es la velocidad del fluido, \mathbf{f} es la fuerza de cuerpo, o fuerza por unidad de masa, ρ la densidad del fluido, T un tiempo final, ∂_t indica derivación parcial con respecto al tiempo y $\nabla = \nabla_{\mathbf{x}}$ es el operador de derivación con respecto a las coordenadas espaciales \mathbf{x} del marco euleriano. El tensor $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{v}, p)$ es el de tensiones en el fluido, que puede descomponerse aditivamente en una parte isotrópica $-p\mathbf{I}$ y otra deviatórica \mathbf{T} , en la forma:

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \mathbf{T} ; \quad (3.11)$$

donde p es la presión e \mathbf{I} el tensor identidad. Dado que únicamente se considerarán fluidos newtonianos, la parte deviatórica \mathbf{T} se relaciona linealmente con la tasa de deformación $\boldsymbol{\epsilon} = \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{v})$ como sigue,

$$\mathbf{T} = 2\mu\boldsymbol{\epsilon} ; \quad (3.12)$$

donde

$$\boldsymbol{\epsilon} = \frac{1}{2} \left[\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \right] ; \quad (3.13)$$

con μ la viscosidad dinámica del fluido y donde $(\dots)^T$ indica transposición.

Las expresiones dadas hasta ahora, en coordenadas espaciales \mathbf{x} no contemplan por sí mismas la posibilidad de la deformación del dominio Ω . Debido a que el problema del flujo debe plantearse en un dominio cuya forma geométrica varía consecuencia del desplazamiento y la deformación de la SL, es preciso establecer una relación entre las ecuaciones antes consideradas, para el dominio espacial fijo $\Omega_{\mathbf{x}}$, y las que relacionan éstas con un dominio de referencia arbitrario $\Omega_{\boldsymbol{\chi}}$. Para ello, se utilizan las formas ALE de las ecuaciones de conservación de cantidad de movimiento y de continuidad obtenidas en el Ap. A, que son:

$$\rho(\partial_t \mathbf{v} + \mathbf{c} \cdot \nabla \mathbf{v} - \mathbf{f}) - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0 ; \quad (3.14)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 . \quad (3.15)$$

El enfoque ALE desarrollado en el Cap. 4 tiene en cuenta la posibilidad de modificación de la forma del dominio durante la evolución temporal, y por ello hace uso de estas dos últimas ecuaciones. Nótese que sólo la de cantidad de movimiento se ve afectada por la velocidad del dominio de referencia $\hat{\mathbf{v}}$, que interviene a través de la velocidad convectiva \mathbf{c} definida en la Ec. (3.7).

3.2.2. Fluido no homogéneo

El caso del planteo de un paradigma de captura de interfase, con un único dominio en el cual coexisten una fase líquida y otra gaseosa entre las que se materializa la SL, requiere la idealización de un fluido “único”, cuyas propiedades sean iguales a las del líquido en la zona que éste ocupa, y ocurra lo mismo para la región que abarca el gas. Esta circunstancia se presenta en la formulación descrita en el Cap. 6, en la cual el valor de una función de nivel $\phi = \phi(\mathbf{x}, t)$ indica la pertenencia de la porción de fluido estudiada a una u otra fase, siendo $\phi < 0$ en la fase gaseosa y $\phi > 0$ en la líquida.

Una forma de considerar esta variación consiste en plantear las ecuaciones de NS en un marco euleriano, de la siguiente forma:

$$\rho(\phi(\mathbf{x}, t)) (\partial_t \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} - \mathbf{f}) - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0 ; \quad (3.16)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 ; \quad (3.17)$$

en tanto que la Ec. 3.11 se mantiene y la Ec. 3.12, a los efectos de considerar la variación en el valor de la viscosidad, pasa a ser considerada como:

$$\mathbf{T} = 2 \mu(\phi(\mathbf{x}, t)) \boldsymbol{\epsilon}. \quad (3.18)$$

Otros detalles relativos a la resolución del flujo de un fluido no homogéneo son incorporados en la Sec. 3.3 y en el Cap. 6.

3.2.3. Condiciones de contorno

Las condiciones de contorno en las fronteras Γ del dominio son las siguientes:

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= \mathbf{v}_D && \text{en } \Gamma_D; \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} &= \mathbf{t} && \text{en } \Gamma_t; \end{aligned} \quad (3.19)$$

donde las condiciones Dirichlet están dadas sobre Γ_D , que corresponde a los contornos sólidos cuya velocidad \mathbf{v}_D puede ser nula o no de acuerdo con la cinemática del dominio, y Γ_t es una superficie de tracción o interfase entre dos fluidos, donde actúan las fuerzas de tracción \mathbf{t} . Además, se verifica que $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_t$ y que $\Gamma_D \cap \Gamma_t = \emptyset$.

En el caso de SL, y para una aproximación lagrangiana con representación homogénea del fluido, en la cual la viscosidad y densidad de la fase gaseosa resultan despreciables, los parámetros que representan a ésta como condición de contorno son planteados sobre el contorno $\Gamma_{SL} \subset \Gamma_t$ como:

$$\begin{aligned} p &= P_{\text{atm}} && \text{en } \Gamma_{SL}; \\ \mathbf{T} \cdot \mathbf{n} &= \mathbf{0} && \text{en } \Gamma_{SL}; \end{aligned} \tag{3.20}$$

siendo Γ_{SL} la superficie libre, P_{atm} la presión que ejerce el gas sobre el líquido, normalmente la atmosférica, y \mathbf{T} las tensiones tangenciales producidas por el gas sobre la interfase. Nótese además en la última expresión de la Ec. 3.20 que el desplazamiento de la superficie libre sólo tiene sentido en la dirección normal a ésta, y que las fuerzas de tracción valen $\mathbf{t} = -P_{\text{atm}} \mathbf{n}$, o bien:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = -P_{\text{atm}} \mathbf{n} \quad \text{sobre } \Gamma_{SL}. \tag{3.21}$$

En este punto, vale la pena mencionar que en el caso de ser $P_{\text{atm}} = 0$, como suele proponerse, el término de contorno sobre Γ_{SL} desaparece, siendo innecesario imponer un valor de presión sobre dicho contorno.

De esta forma, el conjunto de datos para una formulación débil está completo para las ecuaciones de NS en la forma de divergencia, véase Limache *et al.* [LIRO07].

3.2.4. Condiciones iniciales

Las condiciones iniciales en los problemas a ser resueltos por las ecuaciones de NS, en sus variantes para fluidos homogéneos o no homogéneos dadas por las Ecs. (3.9-3.10) o (3.14-3.15) y las (3.16-3.17), respectivamente, son indicadas en primer término sobre la velocidad:

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{v}_0(\mathbf{x}) ; \tag{3.22}$$

esto es, \mathbf{v}_0 es el campo de velocidades inicial definido sobre todo el dominio $\Omega(t)$.

Debido a que la presión no interviene en los términos de integración temporal, no es necesario indicar un valor inicial pues depende del campo de velocidades iniciales \mathbf{v}_0 ; entonces, la condición de contorno que debe incluirse para esta variable es suficiente para que el problema esté bien planteado. Por otro lado, en relación a las velocidades iniciales \mathbf{v}_0 , y atendiendo a la hipótesis de incompresibilidad de los fluidos considerados en esta tesis, es preciso que se verifique $\nabla \cdot \mathbf{v}_0 = 0$, además del cumplimiento de las condiciones de contorno sobre esa misma variable.

3.3. Resolución numérica mediante el MEF

Se establece la resolución mediante el MEF para ambos paradigmas: fluido homogéneo y no homogéneo. En esta sección, en el segundo caso, las propiedades del fluido son $\rho = \rho(\phi(\mathbf{x}), t)$ y $\mu = \mu(\phi(\mathbf{x}), t)$.

Como se ha mencionado, las ecuaciones de NS son resueltas con MEF estabilizado con *streamline upwind/Petrov-Galerkin* (SUPG), introducido por Hughes y Brooks [BH82, HB79], y *pressure stabilizing/Petrov-Galerkin* (PSPG), de Tezduyar *et al.* [Tez91, TMRS92], como se detallará más adelante. Este paradigma permite emplear elementos con la misma interpolación para las velocidades y las presiones, evitando las oscilaciones numéricas en problemas convectivos y las inestabilidades que se producen cuando no se verifica la condición “inf-sup”, más conocida como condición LBB por Ladyzhenskaya [Lad69], Babuška [Bab71] y Brezzi [Bre74], registrándose los conocidos modos de “tablero de ajedrez”.

Geoméricamente, los elementos a resolver pueden ser triangulares o cuadrangulares en 2D, o bien tetrahédricos o hexahédricos en 3D, para mallas estructuradas o no estructuradas, aunque se pone mayor énfasis en las de este último tipo.

Estas estrategias se encuentran programadas en el código PETSc-FEM [PET08, SYNS02], cuyas características generales fueron descritas en la Sec. 1.4, a las cuales hubo que incorporarles por un lado, las herramientas necesarias para la consideración de la superficie libre en la metodología de seguimiento de interfase, y por otro, las capacidades de resolución de fluido no homogéneo para la aproximación mediante captura de interfase.

3.3.1. Discretización del problema

La discretización explicada a continuación se realiza sobre las ecuaciones (3.9-3.10) [SYNS02], siendo el procedimiento para las Ecs. (3.14-3.15) y (3.16-3.17) análogo.

El dominio Ω es dividido en n_{el} elementos finitos Ω^e , con \mathcal{E} el conjunto de esos elementos y H^{1h} el espacio de dimensión finita definido como:

$$H^{1h} = \{\psi^h | \psi^h \in C^0(\bar{\Omega}), \psi^h|_{\Omega^e} \in P^1, \forall \Omega^e \in \mathcal{E}\}, \quad (3.23)$$

en la cual P^1 representa el espacio de polinomios de primer orden. Los espacios funcionales de peso e interpolación son:

$$\mathcal{S}_v^h = \{\mathbf{v}^h | \mathbf{v}^h \in (H^{1h})^{n_d}, \mathbf{v}^h \doteq \mathbf{v}_D \text{ sobre } \Gamma_D\}; \quad (3.24)$$

$$\mathcal{V}_v^h = \{\mathbf{w}^h | \mathbf{w}^h \in (H^{1h})^{n_d}, \mathbf{w}^h \doteq 0 \text{ sobre } \Gamma_D\}; \quad (3.25)$$

$$\mathcal{S}_p^h = \{q^h | q^h \in H^{1h}\}; \quad (3.26)$$

en las cuales n_d es el número de dimensiones espaciales. El método estabilizado se

escribe de la siguiente forma: hallar $\mathbf{v}^h \in \mathcal{S}_v^h$ y $p^h \in \mathcal{S}_p^h$ tal que:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \mathbf{w}^h \cdot \rho (\partial_t \mathbf{v}^h + \mathbf{v}^h \cdot \nabla \mathbf{v}^h - \mathbf{f}) \, d\Omega \\
& + \int_{\Omega} \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{w}^h) : \boldsymbol{\sigma}^h \, d\Omega \\
& + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \boldsymbol{\delta}^h \cdot [\rho (\partial_t \mathbf{v}^h + \mathbf{v}^h \cdot \nabla \mathbf{v}^h - \mathbf{f}) - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^h] \, d\Omega^e \\
& + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \boldsymbol{\iota}^h \cdot [\rho (\partial_t \mathbf{v}^h + \mathbf{v}^h \cdot \nabla \mathbf{v}^h - \mathbf{f}) - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^h] \, d\Omega^e \quad (3.27) \\
& + \int_{\Omega} q^h \nabla \cdot \mathbf{v} \, d\Omega \\
& + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \boldsymbol{\kappa}^h \nabla \cdot \mathbf{v}^h \, d\Omega^e \\
& = \int_{\Gamma_t} \mathbf{w}^h \mathbf{t}^h \, d\Gamma \quad \forall \mathbf{w}^h \in \mathcal{V}_v^h, \forall q^h \in \mathcal{S}_p^h;
\end{aligned}$$

en la cual el término de SUPG es el que contiene $\boldsymbol{\delta}^h$, el de PSPG el afectado por $\boldsymbol{\iota}^h$ y el de estabilización de mínimos cuadrados sobre la restricción de incompresibilidad (*Least-Squares on Incompressibility Constraint*, LSIC) [TO00] el de $\boldsymbol{\kappa}^h$, con $\boldsymbol{\sigma}^h = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{v}^h, p^h)$. Los parámetros de estabilización se definen como:

$$\boldsymbol{\delta}^h = \tau_{\text{SUPG}} (\mathbf{v}^h \cdot \nabla) \mathbf{w}^h; \quad (3.28)$$

$$\boldsymbol{\iota}^h = \tau_{\text{PSPG}} \frac{1}{\rho} \nabla q^h; \quad (3.29)$$

$$\boldsymbol{\kappa}^h = \nu_{\text{LSIC}} \rho \nabla \cdot \mathbf{w}^h; \quad (3.30)$$

siendo en particular el tiempo característico de SUPG, de acuerdo con [TO00] y trabajos posteriores:

$$\tau_{\text{SUPG}} = \left(\frac{1}{\tau_{\text{S1}}^2} + \frac{1}{\tau_{\text{S2}}^2} + \frac{1}{\tau_{\text{S3}}^2} \right)^{-\frac{1}{2}}; \quad (3.31)$$

$$\tau_{\text{S1}} = \frac{h}{2\|\mathbf{v}\|}; \quad (3.32)$$

$$\tau_{\text{S2}} = \frac{\Delta t}{2}; \quad (3.33)$$

$$\tau_{\text{S3}} = \frac{h^2}{4\nu}; \quad (3.34)$$

en tanto que el correspondiente tiempo característico, en unidades de tiempo, para

PSPG es:

$$\tau_{\text{PSPG}} = \left(\frac{1}{\tau_{\text{P1}}^2} + \frac{1}{\tau_{\text{P2}}^2} + \frac{1}{\tau_{\text{P3}}^2} \right)^{-\frac{1}{2}}; \quad (3.35)$$

$$\tau_{\text{P1}} = \frac{h^\#}{2\|\mathbf{v}\|}; \quad (3.36)$$

$$\tau_{\text{P2}} = \frac{\Delta t}{2}; \quad (3.37)$$

$$\tau_{\text{P3}} = \frac{(h^\#)^2}{4\nu}; \quad (3.38)$$

y, finalmente, lo que puede denominarse viscosidad cinemática característica, en unidades de longitud al cuadrado sobre tiempo, que en este caso se define como:

$$\nu_{\text{LSIC}} = \frac{\|\mathbf{v}\|h}{2} z(\text{Pe}); \quad (3.39)$$

en la cual el número de Péclet es calculado mediante:

$$\text{Pe} = \frac{\|\mathbf{v}\|h}{2\nu}. \quad (3.40)$$

Nótese que si $\|\mathbf{v}\| = 0$, las Ecs. (3.32) y (3.36) son singulares, pero las (3.33) y (3.37) serán no singulares, de manera que los parámetros de estabilización de las Ecs. (3.31) y (3.35) resultan siempre regulares.

Cabe hacer la salvedad de que Tezduyar y Osawa [TO00], entre otros, simbolizan con τ_{LSIC} a ν_{LSIC} , lo cual lleva a reiteradas confusiones debido a que las unidades de este coeficiente son de una viscosidad cinemática y no de un tiempo: de allí la preferencia por la notación adoptada en esta Tesis.

Por otro lado, la velocidad con la cual se determinan los coeficientes de estabilización de las Ecs. (3.31), (3.35) y (3.39) es la velocidad convectiva \mathbf{c} , que para un referencial euleriano verifica $\mathbf{c} = \mathbf{v}$ y en una formulación ALE se determina como la velocidad del fluido menos la velocidad de deriva, o velocidad de la malla, $\mathbf{c} = \mathbf{v} - \hat{\mathbf{v}}$.

Para las expresiones anteriores, el tamaño de elemento h es calculado mediante:

$$h = 2 \left(\sum_{a=1}^{n_{\text{en}}} |\mathbf{s} \cdot \nabla w_a| \right)^{-1}; \quad (3.41)$$

siendo las w_a las funciones asociadas al nodo a , n_{en} el número de nodos en el elemento considerado y \mathbf{s} es un versor orientado según las líneas de corriente. La longitud $h^\#$ viene dada por el diámetro del círculo de igual área que el elemento en 2D, o de la esfera de igual volumen en 3D. Por último, la función $z(\text{Pe})$ se define como:

$$z(\text{Pe}) = \begin{cases} \text{Pe}/3, & 0 \leq \text{Pe} < 3; \\ 1, & 3 \leq \text{Pe}. \end{cases} \quad (3.42)$$

3.3.2. Sistema de ecuaciones

Realizando la discretización espacial sobre la Ec. (3.27), el sistema de ecuaciones algebraico resultante puede expresarse como sigue:

$$(\mathbf{M} + \mathbf{M}_\delta)\mathbf{a} + \mathbf{N}(\mathbf{v}) + \mathbf{N}_\delta(\mathbf{v}) + (\mathbf{K} + \mathbf{K}_\delta + \mathbf{G}\boldsymbol{\kappa})\mathbf{v} - (\mathbf{G} - \mathbf{G}_\delta)\mathbf{p} = \mathbf{F} + \mathbf{F}_\delta; \quad (3.43)$$

$$\mathbf{G}^T \mathbf{v} + \mathbf{M}_\mathbf{l}\mathbf{a} + \mathbf{N}_\mathbf{l}(\mathbf{v}) + \mathbf{K}_\mathbf{l}\mathbf{v} + \mathbf{G}_\mathbf{l}\mathbf{p} = \mathbf{E} + \mathbf{E}_\mathbf{l}; \quad (3.44)$$

en la cual los vectores de velocidad, aceleración y presión son, respectivamente:

$$\mathbf{v} = \text{arreglo}\{\mathbf{v}^h\}; \quad (3.45)$$

$$\mathbf{a} = \text{arreglo}\{\dot{\mathbf{v}}\}; \quad (3.46)$$

$$\mathbf{p} = \text{arreglo}\{\mathbf{p}^h\}; \quad (3.47)$$

en tanto que las matrices corresponden a las expresiones siguientes,

$$\mathbf{M} = \int_{\Omega} \mathbf{w}^h \rho \mathbf{w}^h \, d\Omega; \quad (3.48)$$

$$\mathbf{M}_{\delta} = \int_{\Omega} \delta^h \rho \mathbf{w}^h \, d\Omega; \quad (3.49)$$

$$\mathbf{M}_{\iota} = \int_{\Omega} \iota^h \rho \mathbf{w}^h \, d\Omega; \quad (3.50)$$

$$\mathbf{K} = \int_{\Omega} \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{w}^h + (\nabla \mathbf{w}^h)^T) : \mu (\nabla \mathbf{w}^h + (\nabla \mathbf{w}^h)^T) \, d\Omega; \quad (3.51)$$

$$\mathbf{K}_{\delta} = - \int_{\Omega} \delta^h \cdot \nabla \cdot (2\mu \iota^h) \, d\Omega; \quad (3.52)$$

$$\mathbf{K}_{\iota} = - \int_{\Omega} \iota^h \cdot \nabla \cdot (2\mu \iota^h) \, d\Omega; \quad (3.53)$$

$$\mathbf{G} = \int_{\Omega} q^h \nabla \cdot \mathbf{w}^h \, d\Omega; \quad (3.54)$$

$$\mathbf{G}_{\delta} = \int_{\Omega} \delta^h \cdot \nabla q^h \, d\Omega; \quad (3.55)$$

$$\mathbf{G}_{\iota} = \int_{\Omega} \iota^h \cdot \nabla q^h \, d\Omega; \quad (3.56)$$

$$\mathbf{G}_{\kappa} = \int_{\Omega} \kappa^h \cdot \nabla \cdot \mathbf{w}^h \, d\Omega; \quad (3.57)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \mathbf{N}(\mathbf{v}) = \int_{\Omega} \mathbf{w}^h \cdot \rho \mathbf{v}^h \cdot \nabla \mathbf{w}^h \, d\Omega; \quad (3.58)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \mathbf{N}_{\delta}(\mathbf{v}) = \int_{\Omega} \delta^h \cdot \rho \mathbf{v}^h \cdot \nabla \mathbf{w}^h \, d\Omega; \quad (3.59)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \mathbf{N}_{\iota}(\mathbf{v}) = \int_{\Omega} \iota^h \cdot \rho \mathbf{v}^h \cdot \nabla \mathbf{w}^h \, d\Omega. \quad (3.60)$$

Los vectores \mathbf{F} y \mathbf{E} son resultado de la imposición de las condiciones de contorno, sean mixtas o únicamente Dirichlet, respectivamente.

Las matrices de las Ecs. (3.58-3.60) son las que contienen los términos no lineales en \mathbf{v} , lo cual requiere iteraciones dentro de la resolución de cada paso de tiempo.

3.3.3. Condiciones de contorno e iniciales

Como se indicó en la sección anterior, los vectores \mathbf{F} y \mathbf{E} permiten introducir las condiciones de contorno, en general sobre los nodos de la malla.

En cuanto a las condiciones iniciales, la velocidad $\mathbf{v}_0 = \mathbf{v}(\mathbf{x}, 0)$ debe cumplir con la condición de incompresibilidad, $\nabla \cdot \mathbf{v}_0 = 0$, mientras que para la presión no es necesaria ninguna condición especial.

3.3.4. Integración temporal

La integración temporal es llevada adelante por diferencias finitas, a través de una *familia de métodos* α [DH03], que requiere la reformulación de las ecuaciones de la Sec. 3.3.2.

El valor elegido por el usuario para α , que debe verificar $0 \leq \alpha \leq 1$, permite optar entre distintos esquemas de integración temporal, con los parámetros que se indican en la tabla 3.1, recordando que para $\alpha \geq 1/2$ estos esquemas son incondicionalmente estables [DH03].

Esquema	α
Euler hacia adelante	0
Crank–Nicolson	1/2
Galerkin	2/3
Retro-Euler	1

Tabla 3.1: Valores de α para los distintos esquemas de integración temporal.

En lo relativo a la selección del paso de integración temporal Δt , se ha tomado en cuenta la condición *Courant-Friedrichs-Lewy* (CFL) [Lan98], que establece que el dominio de dependencia numérico debe contener al dominio físico de dependencia, esto es, que cada entidad de la discretización reciba la información que viaja con la velocidad del problema. Por ejemplo, para una velocidad de partícula \mathbf{v} que se desplaza en relación a una discretización de tamaño característico h y es evaluada en intervalos Δt atraviesa un elemento en un tiempo de $(\mathbf{v}/h)^{-1}$; si ese tiempo es mayor que Δt , la información que viaja con la partícula no queda registrada en el elemento. Para controlar la verificación de esta propiedad, se define el *número de Courant* como [DH03]:

$$\text{Co} = \left\| \frac{\mathbf{c}\Delta t}{h} \right\|; \quad (3.61)$$

expresión en la cual, al igual que antes, \mathbf{c} es la velocidad relativa de la partícula con respecto al referencial y $\|\dots\|$ es una norma. En virtud del cumplimiento de la condición CFL debe ser $\text{Co} < 1$, de manera que el paso de tiempo Δt puede acotarse superiormente una vez conocido el paso de la malla h . Tanto en los experimentos como en los ejemplos numéricos incluidos en la presente Tesis, se ha monitoreado la magnitud de Co como indicador de la calidad numérica de los análisis.

Capítulo 4

Seguimiento de interfase: lagrangiana-euleriana arbitraria

La aplicación de una formulación ALE requiere tener en cuenta la deformación del dominio producida en cada paso de tiempo, ya sea mediante (i) un proceso de remallado o (ii) una relocalización de los nodos manteniendo la topología de la malla, siendo esta última la alternativa elegida a los fines de esta Tesis, como se detalla en la Sec. 4.1.3.

La ventaja de una metodología ALE frente a una lagrangiana está dada principalmente por las grandes deformaciones a las cuales puede verse sometida la discretización de esta última debido a altas velocidades en el fluido, que llevan a una excesiva deformación de la malla y, en última instancia, al denominado *tangling* o inversión de los elementos. En comparación con métodos eulerianos, la definición explícita de la interfase en ALE permite una imposición adecuada de las condiciones de contorno sobre la interfase, al tiempo que se reduce el tamaño del dominio a simular en los casos de superficie libre, ya que en general se simula únicamente la fase líquida, descartando la gaseosa.

Uno de los inconvenientes que se detectan al resolver problemas de flujo con SL con esta metodología es el de la inestabilidad numérica de la interfase, debido a que ésta es desplazada mediante una ecuación de transporte con término advectivo de importancia vinculada al problema a resolver, razón por la cual la estabilización numérica de la ecuación de transporte de la superficie libre es un tema central a tener en cuenta.

4.1. Formulación lagrangiana-euleriana arbitraria

La metodología ALE tal como se la propone en esta Tesis consiste en la simulación sobre un dominio que abarca únicamente un líquido y que se deforma como consecuencia de los desplazamientos de los nodos de la SL, en dirección normal a ésta, en tanto que el resto de la grilla se mueve de manera arbitraria. Estos movimientos deben ser tenidos en cuenta al momento de determinar el nuevo estado en el fluido, esto es, van a coexistir una configuración de referencia, en general coincidente con la forma inicial de la malla de elementos finitos, y una configuración espacial en la cual las posiciones de los nodos de la discretización van a variar su posición de un instante de tiempo a otro, incluyendo las entidades que definen la interfase.

El esquema de resolución a través de este paradigma consta de tres pasos: el primero, la resolución de las ecuaciones de NS, seguido del cálculo del desplazamiento de los nodos de la SL y, por último, la actualización de la malla, que en este caso se realiza mediante la relocalización de los nodos interiores de la discretización. Cada una de estas instancias es comentada en las secciones siguientes.

4.1.1. Estado en el líquido

En el Cap. 3 se introdujeron las expresiones de las ecuaciones de NS para fluido homogéneo, Ecs. (3.14) y (3.15):

$$\begin{aligned} \rho(\partial_t \mathbf{v} + \mathbf{c} \cdot \nabla \mathbf{v} - \mathbf{f}) - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} &= 0 ; \\ \nabla \cdot \mathbf{v} &= 0 . \end{aligned}$$

en las cuales la velocidad convectiva \mathbf{c} se determina, en el caso discreto, para cada nodo de la discretización, mientras que resto de los parámetros ya ha sido definido en la Sec. 3.2.1.

Las condiciones de contorno son las detalladas en la Sec. 3.2.3, recordando que en este caso la viscosidad y densidad del fluido del ambiente son despreciables frente a la del fluido simulado, lo cual reduce la condición de la Ec. (3.20) a la Ec. (3.21):

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = -P_{\text{atm}} \mathbf{n} \quad \text{sobre } \Gamma_{\text{SL}} ;$$

que para $P_{\text{atm}} = 0$ no debe ser indicada explícitamente sobre la superficie libre, ya que el término de contorno sobre Γ_{SL} es nulo.

Los resultados de la resolución de las ecuaciones de NS en forma ALE aportan el estado en el fluido, del cual se toman las velocidades en la SL para determinar el desplazamiento de ésta en la etapa intermedia, que luego será dato para el movimiento de la malla.

4.1.2. Desplazamiento de la superficie libre

Los desplazamientos de los nodos de la SL se proponen restringidos a una dirección dada por un versor $\hat{\mathbf{s}}_j$, fija durante todo el estudio, de manera que la nueva posición del nodo j sobre la SL en el tiempo t es [BDESN04]:

$$\mathbf{x}_j(t) = \mathbf{x}_{0,j} + \eta_j(t) \hat{\mathbf{s}}_j ; \quad (4.1)$$

en la cual $\hat{\mathbf{s}}_j$ da la dirección fija o “espina” (*spine*), $\mathbf{x}_{0,j}$ es la posición inicial del nodo j y η_j la coordenada escalar, todos ellos indicados en la Fig. 4.1. Usualmente, $\hat{\mathbf{s}}_j$ es normal a la SL en reposo para el problema a resolver.

Es importante remarcar que las espinas se usan exclusivamente para los desplazamientos de la SL, y que en el interior del dominio las posiciones nodales son determinadas mediante alguno de los métodos presentados en la Sec. 4.1.3. De esta forma, la distorsión de la malla es reducida en comparación con casos en los cuales la totalidad de los nodos se mueven sobre direcciones fijas.

El movimiento de la superficie libre es regido por la denominada condición cinemática. Esta condición contiene el significado físico de interfase material, a través

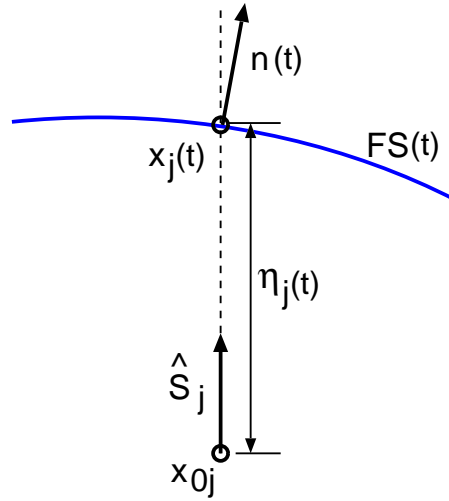


Figura 4.1: Desplazamiento de los nodos de la superficie libre.

de la cual no hay intercambio de fluido [GE99, MBK⁺87, Ped03, Sto57], y puede expresarse como:

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \partial_t \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{n} \quad \text{sobre } \Gamma_{\text{SL}}; \quad (4.2)$$

donde \mathbf{n} es la dirección normal a la superficie libre y $\boldsymbol{\eta}$ es el desplazamiento o elevación de la interfase sobre la dirección de la espina $\hat{\mathbf{s}}$, es decir $\boldsymbol{\eta} = \eta \hat{\mathbf{s}}$, con η representando el desplazamiento escalar, esquematizado en la Fig. 4.1. Remplazando en la Ec. (4.2),

$$\partial_t \eta = \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}}{\hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{n}}. \quad (4.3)$$

Nótese que los desplazamientos considerados son aquellos que se producen en dirección normal a la superficie libre, mientras que los tangenciales son irrelevantes.

Teniendo en cuenta la Ec. (4.1) y que el campo escalar en tres dimensiones es $\eta = \eta(x_1, x_2, t)$, la SL puede expresarse de manera implícita como:

$$F(\mathbf{x}, t) = x_3 - \eta = 0; \quad (4.4)$$

asumiendo que la dirección de las espinas se adopta vertical, i.e. $\hat{\mathbf{s}} \parallel x_3$, con lo cual su normal puede calcularse con el gradiente,

$$\mathbf{n} = \nabla F(\mathbf{x}) = \left[-\frac{\partial \eta}{\partial x_1} \quad -\frac{\partial \eta}{\partial x_2} \quad +1 \right]^T. \quad (4.5)$$

Remplazando en la Ec. (4.3) con (4.5) e introduciendo el parámetro de proyección

$$H = \hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{n}; \quad (4.6)$$

esto es, H es la proyección de la normal en la dirección de la espina, resulta:

$$\partial_t \eta = \frac{1}{H} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \frac{1}{H} \left[-v_1 \frac{\partial \eta}{\partial x_1} - v_2 \frac{\partial \eta}{\partial x_2} + v_3 \right]; \quad (4.7)$$

con lo cual se arriba a una expresión para la elevación η en la forma de una ecuación de advección. La reducción al caso de superficie libre en dominio bidimensional es

inmediata. A partir de la Ec. (4.7), y con el fin de mantener una notación clara y uniforme en las expresiones subsiguientes, el problema a resolver para obtener el desplazamiento de la superficie libre η se escribe como el siguiente sistema advectivo,

$$\partial_t \eta + \mathbf{v}_{\parallel} \cdot \hat{\nabla} \eta = s \quad \text{en } \Omega'_{\text{SL}} ; \quad (4.8)$$

con:

$$\eta = \eta_D \quad \text{sobre } \Gamma'_D ; \quad (4.9)$$

en la que la velocidad tangencial a la SL es:

$$\mathbf{v}_{\parallel} = \frac{1}{H} [v_1 \quad v_2]^T ; \quad (4.10)$$

mientras que el gradiente bidimensional de la elevación η es:

$$\hat{\nabla} \eta = \left[\frac{\partial \eta}{\partial x_1} \quad \frac{\partial \eta}{\partial x_2} \right]^T ; \quad (4.11)$$

y $s = v_3/H$ es el término fuente dado por la velocidad del fluido en la dirección vertical para cada punto de la SL. Además, $\Omega'_{\text{SL}} = \Gamma_{\text{SL}}$ en la ecuación Ec. (3.21) es el dominio de interfase de dimensión $n_{\text{dim}} - 1$, correspondiente a un dominio n_{dim} para el problema del fluido con SL, véase la Fig. 4.2. Por último, siendo $\Gamma'_{\text{SL}} = \partial \Omega'_{\text{SL}}$, sobre Γ'_D se impone la condición de contorno Dirichlet para la ecuación de advección dada. Debe tenerse presente que la Ec. (4.8) representa un problema hiperbólico, y por lo tanto Γ'_D es el contorno de ingreso en el que se verifica $\mathbf{v}_{\parallel} \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0$, con $\hat{\mathbf{n}} = [n_1; n_2]^T$, es decir, $\Gamma'_D = \{\Gamma'_{\text{SL}} | \mathbf{v}_{\parallel} \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0\}$.

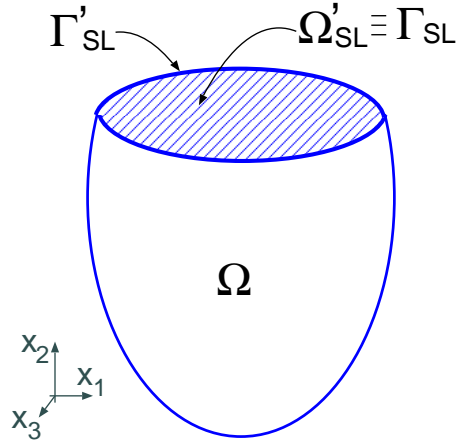


Figura 4.2: Denominación de dominios y contornos para el problema de advección de la superficie libre.

El carácter advectivo de la Ec. (4.8) hace que su resolución numérica requiera de algún método estabilizado, cuestión que será tratada en detalle en Sec. 4.3.

4.1.3. Actualización de la malla

En un paradigma ALE, en el que el dominio sufre deformaciones al evolucionar el problema en el tiempo, es preciso contar con una metodología para actualizar el

teselado, generalmente en todos los pasos de tiempo, siendo posible optar por alguna de las alternativas resumidas en la Sec. 2.1.2.

La alternativa de reacomodamiento de los elementos de la discretización es la adoptada en este caso, en las dos variantes indicadas: de resolución del problema pseudoelástico y de minimización de la distorsión de los elementos. Ambas son incorporadas en el módulo denominado MMV, por *mesh movement*. Entre los motivos por los cuales se descartó la posibilidad de regenerar la grilla es que esta alternativa no sólo insume muchos recursos computacionales sino que además exige la interpolación o extrapolación de los resultados del paso de tiempo anterior a los nuevos elementos, con la consiguiente pérdida de precisión. Por otro lado, la opción de una actualización algebraica no es apropiada a casos de geometrías de forma compleja o de moderados desplazamientos de la superficie libre, ya que los elementos podrían resultar sumamente distorsionados.

Una vez que se ha determinado el campo de velocidades sobre la superficie libre, los desplazamientos nodales sobre ésta son calculados y pasan a ser datos para resolver el problema de actualización de la malla, que puede realizarse mediante alguno de los métodos que se describen en las próximas secciones.

Independientemente del proceso seleccionado para obtener las nuevas coordenadas de los nodos interiores, las condiciones de contorno para esta etapa del algoritmo son comunes para las alternativas evaluadas. Por ejemplo, las condiciones de contorno en un tanque rectangular con una SL simple consisten en (i) nodos con desplazamientos nulos en el fondo del tanque; (ii) nodos fijos en dirección horizontal pero libres de desplazarse verticalmente en las paredes laterales, y (iii) los desplazamientos de los nodos de la SL, determinados según lo indicado en la Sec. 4.1.2. Obviamente, la selección de las condiciones de contorno debe ser acorde al problema considerado.

Los métodos aplicados en conjunción con este paradigma conservan la topología de la malla de elementos finitos, ya que los cambios se introducen a través de las coordenadas de los nodos, sin modificar las conectividades.

En una primera instancia, la selección de una u otra forma de actualizar la grilla se realiza teniendo en cuenta los costos computacionales, pero a medida que la complejidad de la geometría del dominio espacial o las deformaciones experimentadas aumentan, se requieren herramientas más robustas, de manera tal que ambas alternativas son consideradas en esta Tesis, en las Sec. 4.1.3.1 y 4.1.3.2.

4.1.3.1. Resolución de un problema pseudoelástico

En esta alternativa, la actualización de la malla consiste en calcular las nuevas posiciones de los nodos resolviendo un problema elástico artificial sobre el dominio inicial Ω_0 , en el cual las condiciones de contorno son siempre de tipo Dirichlet. Este problema pseudoelástico se formula como uno elástico convencional, esto es,

$$\begin{aligned}\sigma_{ij,j} &= 0 ; \\ \sigma_{ij} &= 2\tilde{\mu}\epsilon_{ij} + \tilde{\lambda}\delta_{ij}\epsilon_{kk} ; \\ \epsilon_{ij} &= \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) ;\end{aligned}\tag{4.12}$$

donde $\tilde{\mu}$ y $\tilde{\lambda}$ son las constantes elásticas de Lamé adoptadas arbitrariamente para el material, δ_{ij} es el tensor de Kronecker y los desplazamientos nodales

$$\mathbf{u}_j = \mathbf{x}_j^{n+1} - \mathbf{x}_j^0 ; \quad (4.13)$$

corresponden a las condiciones de contorno sobre la SL. Para contornos sólidos, las condiciones de contorno se imponen de la forma $\mathbf{u} = \mathbf{o}$ para los sectores no deslizables y $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$ para los deslizables o de *slip*.

Las propiedades artificiales del material pueden expresarse en términos del coeficiente de Poisson $\tilde{\nu}$ y del módulo de elasticidad longitudinal \tilde{E} , que son los parámetros tomados como referencia a la hora de ingresar los datos para el cálculo, aunque debido al tipo de condiciones de contorno, sólo el primero de ellos tiene relevancia, recordando que el objetivo es calcular posiciones de nodos y no tensiones elásticas. Normalmente, se adopta $\tilde{\nu} = 0.3$ teniendo en cuenta que para $\tilde{\nu} \rightarrow 0.5$, es decir, tendiendo a incompresibilidad, el problema está mal condicionado.

El *solver* lineal es capaz de resolver problemas en los cuales las deformaciones son relativamente grandes, aunque puede proporcionar mallas distorsionadas de forma tal que los resultados numéricos se ven deteriorados y, eventualmente, puede llegar a fallar la actualización debido a la generación de elementos con jacobiano negativo. El tiempo empleado para resolver la actualización de esta forma es del orden del 35 % o 40 % del insumido para resolver el estado en el fluido.

El trabajo de Xu *et al.* [XA04] resume distintos métodos de rigidización usados normalmente en métodos de movimiento de malla, expresando la matriz de rigidez elemental \mathbf{K}_e para el problema pseudo-elástico como:

$$\mathbf{K}_e = \int_{\Omega_t^e} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} |\mathbf{J}|^e \tau^e d\Omega_t^e ; \quad (4.14)$$

en la cual \mathbf{B} es la matriz de las derivadas de las funciones de forma del elemento, \mathbf{D} la matriz constitutiva, $|\mathbf{J}|^e$ el jacobiano del elemento y τ^e un factor que controla la rigidez. Siguiendo la formulación propuesta por Tezduyar y Stein [TSKS04, STB04], τ^e se adopta de la siguiente forma,

$$\tau^e = \left(\frac{|\mathbf{J}|^0}{|\mathbf{J}|^e} \right)^r ; \quad (4.15)$$

donde el exponente no negativo r es un parámetro de escala elegido por el usuario, $|\mathbf{J}|^e$ es el jacobiano del elemento e y $|\mathbf{J}|^0$ es otro parámetro arbitrario, incorporado para dar consistencia dimensional a la expresión. De esta forma, los elementos de menor tamaño se comportan de manera más rígida, en una proporción dada por r .

Para resolver los problemas de manera elástica lineal, se define $r = 0$, en tanto que $r > 1$ habilita la opción para resolver de manera “no lineal”.

El empleo de este procedimiento permite una reducción de la distorsión de los elementos, especialmente los más pequeños, pero cuenta con la desventaja de aumentar los costos computacionales, llegando a ser prácticamente el mismo que el del *solver* del fluido.

4.1.3.2. Minimización de la distorsión de los elementos

Este algoritmo ha sido propuesto e implementado por López *et al.* [LNST07] y mejorado posteriormente por los mismos autores [LNS08], motivado por el interés

de resolver problemas con fronteras móviles de desplazamientos impuestos, esto es, en el área de dinámica computacional de mallas (*Computational Mesh Dynamics*, CMD), particularizado aquí para SL.

El método consiste en resolver un problema de optimización, donde el funcional a minimizar es expresado en la siguiente forma general,

$$F = F(\{x_j^\alpha\}); \quad (4.16)$$

siendo x_j^α la coordenada α del nodo x_j y $\{x_j^\alpha\}$ el conjunto de coordenadas de los nodos. Hay varios requerimientos para obtener un funcional apropiado para minimizar, considerando que el problema es resuelto mediante métodos tipo Newton. El criterio aplicado fue implementado de la forma siguiente,

$$F = C_v \left(\frac{V}{V_{\text{ref}}} - 1 \right)^m + C_q q^n ; \quad (4.17)$$

en la cual V es el volumen elemental y V_{ref} el objetivo, es decir, el que corresponde al elemento de referencia, ya sea el equilátero o el inicial del estudio, q es un indicador de calidad para cada elemento, C_v y C_q son coeficientes de ponderación y m, n indican las normas a aplicar a las medidas de tamaño y forma. Para problemas bidimensionales, se evalúa el área en lugar del volumen elemental.

Debe tenerse en cuenta que, para mantener la coherencia entre los términos de la Ec. (4.17), m puede tomar valores pares y, por consiguiente, se propone $n < 0$, de forma que ambos términos son minimizados simultáneamente, ya que en ese caso el índice de distorsión $1/q$ se verá disminuido.

El indicador de calidad adoptado es:

$$q = \frac{CV}{\sum_i l_i^p} ; \quad (4.18)$$

i.e., es el cociente entre el volumen elemental V y la suma de las longitudes de las aristas l_i del elemento elevadas a la potencia p , que es la dimensión espacial considerada, escalada por una constante C elegida de forma tal que $0 \leq q \leq 1$, para $q = 1$ en el caso del elemento equilátero. De esta forma, en el caso de triángulos resulta $C = 4\sqrt{3}$, mientras que $C = 36\sqrt{2}$ para tetraedros.

El algoritmo está formulado con el propósito de obtener la mejor malla en cada paso de tiempo, siempre en relación a los criterios elegidos acerca de la calidad de los elementos. Los valores de C_v y C_q permiten al usuario personalizar el criterio de actualización de la malla.

El método está propuesto para resolver problemas en dos y tres dimensiones, pero por el momento se encuentra implementado para triángulos y tetraedros, respectivamente.

Como regla general, el comienzo del proceso requiere que la malla inicial cuente con una topología válida, y que en cada paso de actualización se verifique $q \neq 0$ para $n < 0$.

4.2. Línea de contacto móvil

En el problema discreto, tal como se lo ha descrito hasta ahora, los nodos que definen la línea de contacto, esto es, en la intersección de la SL con un contorno

sólido, o *waterline*, pueden tener velocidad nula según la imposición de las condiciones de contorno, lo cual podría llevar a grandes gradientes en la elevación de η cerca de las paredes. Por eso, es conveniente que la condición de no deslizamiento sea relajada en la línea de contacto, remplazándola por la denominada “condición de deslizamiento de Navier” [GBT99]:

$$(\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = -\frac{1}{\beta}(\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{v}_{\text{wall}}) ; \quad (4.19)$$

en la cual \mathbf{v} es la velocidad del fluido en la línea de contacto, y \mathbf{v}_{wall} es la velocidad de la pared, usualmente nula, mientras que $\mathbf{I} - \mathbf{nn}$ proyecta la componente de velocidades sobre el plano tangente y β es un coeficiente de deslizamiento de valor arbitrario. Los valores límite de β son $\beta = 0$ para una condición de no deslizamiento, en tanto que $\beta \rightarrow \infty$ lleva a considerar un deslizamiento perfecto.

4.3. Estabilización numérica de la superficie libre

La formulación explícita del desplazamiento de la superficie libre dada por la Ec. (4.8) resulta numéricamente inestable para ondas gravitacionales de alta frecuencia. Este hecho ya ha sido indicado por diversos autores, quienes apelaron a diferentes métodos de estabilización para obtener soluciones satisfactorias. Entre estos métodos se encuentran el de *streamline upwind/Petrov-Galerkin* (SUPG) [BH82] aplicado a la SL por Soulaïmani *et al.* [SFDO91] y Güler *et al.* [GBT99], y el denominado *Galerkin/Least-Squares* (GLS), elegido por Behr y Abraham [BA02].

En el marco de esta Tesis, se aplicaron dos estrategias distintas para obtener soluciones de SL libres de oscilaciones de alta frecuencia. La primera de ellas, denominada *de suavizado*, consistió en imponer un operador laplaciano a la elevación η determinado de manera explícita, como se describe en la Sec. 4.3.1, mientras que en la segunda se propone una ecuación de transporte en η estabilizado con SUPG en la Sec. 4.3.2.

4.3.1. Suavizado mediante un operador laplaciano

La forma más sencilla de determinar la nueva posición de los nodos de la SL es la resolución de manera explícita de la Ec. 4.3, esto es, ya en el problema discreto [BDESN05],

$$\Delta\eta_j^{n+1} = \Delta t \frac{\mathbf{v}_j^{n+1} \cdot \mathbf{n}_j^n}{\hat{\mathbf{s}}_j \cdot \mathbf{n}_j^n} . \quad (4.20)$$

en la cual los superíndices indican el paso de tiempo en que se calcula cada parámetro, mientras que los subíndices refieren al nodo considerado. En esta expresión, se requiere que $\hat{\mathbf{s}}_j$ y \mathbf{n}_j^n no sean perpendiculares entre sí, aunque esta circunstancia se ve usualmente salvada por la adopción de $\hat{\mathbf{s}}_j$ tan perpendicular a la inclinación de la superficie libre como sea posible estimar.

Una estabilización posible para esta expresión numérica de evolución de la SL consiste en la aplicación de un operador de suavizado \mathcal{S} , propuesto de forma tal que, con $\Delta\tilde{\eta}_j^{n+1}$ en lugar de $\Delta\eta_j^{n+1}$ en la Ec. (4.20), el incremento en la coordenada η es:

$$\Delta\eta_j^{n+1} = \mathcal{S}(\Delta\tilde{\eta}_j^{n+1}) . \quad (4.21)$$

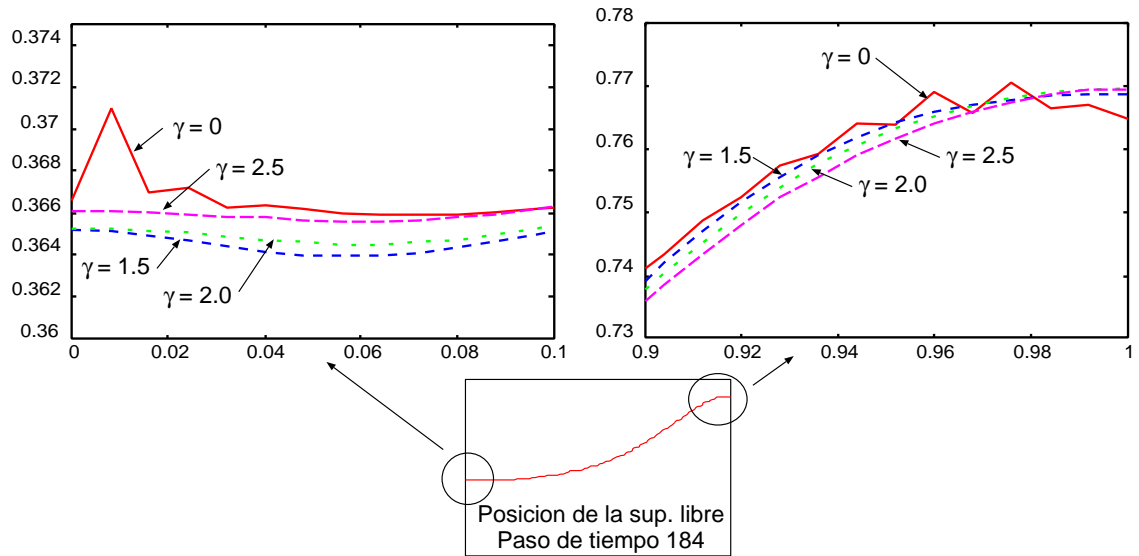


Figura 4.3: Influencia de distintos valores de γ sobre el suavizado de la SL; escala en metros.

Esta aplicación consiste en resolver la ecuación del calor empleando parámetros artificiales para la difusividad, con una longitud característica γh , siendo h un tamaño de malla característico y $\gamma = O(1)$ un factor propuesto por el usuario.

Como ejemplo de los efectos de alta frecuencia sobre la SL cerca de las paredes laterales de un tanque con una deformación sinusoidal de la superficie libre como condición inicial y sometido a un campo gravitatorio vertical, la Fig. 4.3 muestra los resultados obtenidos para distintos valores de γ junto con la solución no suavizada, para el caso de una actualización pseudoelástica no lineal de la malla de la Sec. 4.1.3.1.

Esta metodología fue empleada en los ejemplos resueltos en dos y tres dimensiones presentados en Battaglia *et al.* [BDESN06].

El uso de este procedimiento de suavizado resulta más apropiado para casos en los cuales las velocidades y desplazamientos en la SL son relativamente bajos, ya que a medida que los valores medios de estos campos se incrementan, los resultados muestran diferencias importantes al ser comparados con las soluciones analíticas o semianalíticas.

4.3.2. Advección de la superficie libre con SUPG

4.3.2.1. Formulación variacional

El método de estabilización SUPG, introducido por Brooks y Hughes [BH82], es el adoptado para la resolución del problema de advección de la Ec. (4.8) mediante Galerkin, como paso previo a la actualización de la malla, realizado sobre los resultados del NS.

La formulación variacional adoptada como guía es tomada de Donea y Huerta [DH03], y se basa en los espacios funcionales $\mathcal{S} := \{\eta \in H^1(\Omega'_{SL}) | \eta = \eta_D \text{ sobre } \Gamma'_D\}$ y $\mathcal{W} := \{w \in H^1(\Omega'_{SL}) | w = 0 \text{ sobre } \Gamma'_D\}$. El problema se propone de la siguiente

forma: hallar $\eta \in \mathcal{S}$ tal que

$$\int_{\Omega'_{SL}} w \frac{\partial \eta}{\partial t} d\Omega'_{SL} + \int_{\Omega'_{SL}} w (\mathbf{v}_{\parallel} \cdot \hat{\nabla} \eta) d\Omega'_{SL} = \int_{\Omega'_{SL}} w s d\Omega'_{SL} ; \quad (4.22)$$

o, expresado en forma compacta,

$$a(w, \eta) + c(\mathbf{v}_{\parallel}; w, \eta) = (w, s) \text{ en } \Omega'_{SL} ; \quad (4.23)$$

en la cual los términos se identifican de la forma siguiente,

$$\begin{aligned} a(w, \eta) &= \int_{\Omega'_{SL}} w \frac{\partial \eta}{\partial t} d\Omega'_{SL} ; \\ c(\mathbf{v}_{\parallel}; w, \eta) &= \int_{\Omega'_{SL}} w (\mathbf{v}_{\parallel} \cdot \hat{\nabla} \eta) d\Omega'_{SL} ; \\ (w, s) &= \int_{\Omega'_{SL}} w s d\Omega'_{SL} . \end{aligned} \quad (4.24)$$

Una estabilización *consistente* para la formulación de la Ec. (4.23) puede escribirse como:

$$a(w, \eta) + c(\mathbf{v}_{\parallel}; w, \eta) + \sum_e \int_{\Omega'_e} \mathcal{P}(w) \tau_S \mathcal{R}(\eta) d\Omega'_e = (w, s) \text{ en } \Omega'_{SL} ; \quad (4.25)$$

con el tiempo intrínseco o parámetro de estabilización τ_S , que se describe más adelante en esta sección, e indicando con Ω'_e que la integración del término se realiza sobre cada uno de los elementos. El residuo de la ecuación diferencial es:

$$\mathcal{R}(\eta) = \frac{\partial \eta}{\partial t} + \mathbf{v}_{\parallel} \cdot \hat{\nabla} \eta - s = \mathcal{L}(\eta) - s ; \quad (4.26)$$

y el operador $\mathcal{P}(w)$ es definido para una estabilización con SUPG en la forma:

$$\mathcal{P}(w) = \mathbf{v}_{\parallel} \cdot \hat{\nabla} w . \quad (4.27)$$

4.3.2.2. Problema discreto

El problema discretizado toma finalmente la forma de: hallar $\eta^h \in \mathcal{S}^h$ tal que

$$a(w^h, \eta^h) + c(\mathbf{v}_{\parallel}; w^h, \eta^h) + \sum_e \int_{\Omega'_e} \mathcal{P}(w^h) \tau_S \mathcal{R}(\eta^h) d\Omega'_e = (w^h, s) ; \quad (4.28)$$

para todo $w^h \in \mathcal{W}^h$, con $\eta^h \in \mathcal{S}^h$, siendo \mathcal{W}^h y \mathcal{S}^h subespacios de dimensión finita de \mathcal{W} y \mathcal{S} , respectivamente.

El tiempo intrínseco τ_S es tomado como:

$$\tau_S = \frac{h}{2\|\mathbf{a}\|} ; \quad (4.29)$$

en la cual h es un tamaño típico y \mathbf{a} es una velocidad media, ambos en cada elemento, y considerando que en general las velocidades \mathbf{v}_{\parallel} pueden ser distintas en cada nodo.

4.3.2.3. Implementación

La implementación de un MEF para determinar la nueva posición de la SL en un problema bidimensional implica que el sistema advectivo es unidimensional. En ese caso, mientras el problema de NS o la instancia de movimiento de malla (MMV) son resueltas sobre elementos cuadrangulares o rectangulares, la interfase es discretizada mediante elementos lineales de dos nodos sobre los cuales se resuelve la Ec. (4.28), considerando en este caso que la segunda componente espacial es adoptada como dirección vertical, i.e., para $\mathbf{v} = [v_1; v_2]^T$ las velocidades en el problema de advección son $v_{\parallel} = v_1/H$ y $s = v_2/H$, donde H es la proyección de la normal a la superficie libre sobre la dirección de la espina, calculada según la Ec. (4.6).

Remplazando en las Ecs. (4.26) a (4.28), el problema se transforma en: *hallar* $\eta^h \in \mathcal{S}_{SL}^h$ tal que

$$a(w^h, \eta^h) + c(v_{\parallel}; w^h, \eta^h) + \sum_e \int_{\Omega_e'} \left(v_{\parallel} \frac{\partial w^h}{\partial x_1} \right) \tau_S^e \left(\frac{\partial \eta^h}{\partial t} + v_{\parallel} \frac{\partial \eta^h}{\partial x_1} - s \right) d\Omega_e' = (w^h, s); \quad (4.30)$$

para todo $w^h \in \mathcal{W}_{SL}^h$, con $\eta^h \in \mathcal{S}_{SL}^h$, siendo \mathcal{W}_{SL}^h y \mathcal{S}_{SL}^h subespacios de dimensión finita de \mathcal{W}_{SL} y \mathcal{S}_{SL} , los espacios funcionales que se corresponden con \mathcal{W} y \mathcal{S} de la Sec. 4.3.2.1 para problemas unidimensionales, respectivamente.

El tiempo intrínseco es calculado para cada elemento de la siguiente manera:

$$\tau_S^e = \frac{h}{2a}, \quad (4.31)$$

teniendo en cuenta que h es la longitud del elemento considerado y a la media aritmética de las velocidades nodales en dirección x_1 .

La forma matricial de la Ec. (4.30), tras realizar la integración espacial y el ensamble elemental que se detallan en el Ap. B.1 para el caso 2D es:

$$(\mathbf{M} + \mathbf{C}_S) \boldsymbol{\eta}_t + (\mathbf{C} + \mathbf{K}_S) \boldsymbol{\eta} = (\mathbf{M} + \mathbf{C}_S) \mathbf{s}; \quad (4.32)$$

donde \mathbf{M} y \mathbf{C} son las matrices de masa y de convección, respectivamente, en tanto que \mathbf{C}_S y \mathbf{K}_S son las matrices de pseudo-convección y pseudo-difusión que surgen de la integración de los términos de estabilización. Todas las matrices cuentan con $n_{\text{nod}SL} \times n_{\text{nod}SL}$ elementos, siendo $n_{\text{nod}SL}$ la cantidad de nodos sobre la SL, y que a su vez da la cantidad de incógnitas. El vector \mathbf{s} agrupa los $n_{\text{nod}SL}$ términos fuente dados por las componentes verticales de la velocidad v_2 escaladas con el H correspondiente, $\boldsymbol{\eta}$ es el vector de incógnitas y $\boldsymbol{\eta}_t$ el de derivadas parciales de $\boldsymbol{\eta}$ con respecto al tiempo.

La integración temporal es llevada adelante por diferencias finitas a través de una familia de métodos α , que requiere la discretización de la Ec. (4.30) y la reformulación de la Ec. (4.32). Adoptando para ello

$$\boldsymbol{\eta}_t \approx \frac{\boldsymbol{\eta}^{(n+1)} - \boldsymbol{\eta}^{(n)}}{\Delta t}; \quad (4.33)$$

el sistema de ecuaciones final a resolver luce como sigue:

$$\begin{aligned} & \left[\mathbf{M} + \mathbf{C}_S^{(n+1)} + \alpha \Delta t \left(\mathbf{C}^{(n+1)} + \mathbf{K}_S^{(n+1)} \right) \right] \boldsymbol{\eta}^{(n+1)} = \\ & \left(\mathbf{M} + \mathbf{C}_S^{(n+1)} \right) \left[\alpha \Delta t \mathbf{s}^{(n+1)} + (1 - \alpha) \Delta t \mathbf{s}^{(n)} + \boldsymbol{\eta}^{(n)} \right] - (1 - \alpha) \Delta t \left(\mathbf{C}^{(n+1)} + \mathbf{K}_S^{(n+1)} \right) \boldsymbol{\eta}^{(n)}. \end{aligned} \quad (4.34)$$

en la cual el valor seleccionado de α lleva a los distintos métodos clásicos de integración temporal, resumidos en la Tabla 3.1 de la Sec. 3.3.4.

4.4. Algoritmo de resolución multiparalela

Al momento de definir la estrategia de cálculo de cada una de las instancias, esto es, resolución de las ecuaciones de NS, desplazamiento de la SL y relocalización de los nodos interiores MMV, se optó por un esquema de acoplamiento débil en lugar de uno monolítico, razón por la cual a lo largo de cada estudio coexisten dos procesos principales, el de NS y el de MMV, que se comunican en cada paso de tiempo. Debido a que cada una de estas instancias principales tiene la capacidad de ser ejecutada en paralelo, lo cual se hace frecuentemente, se dice que es un algoritmo de resolución multiparalela.

El sistema de la Ec. (4.34) es resuelto dentro de un *hook*, que no es más que un programa en lenguaje C que, en este caso, comunica la instancia de NS con la de MMV y utiliza rutinas de las librerías PETSc [BBE⁺05] para resolver el sistema lineal de ecuaciones que determina los desplazamientos de la superficie libre. De esta forma, el *hook* está preparado para ser empleado en cálculo paralelo.

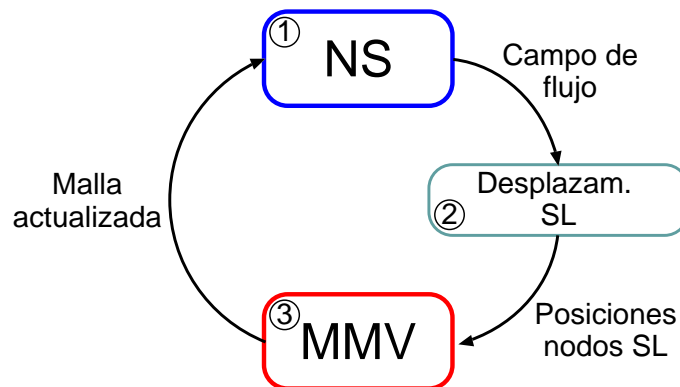


Figura 4.4: Secuencia de ejecución de las diferentes instancias involucradas en problemas de flujo con superficie libre mediante ALE.

Una representación gráfica del esquema implementado puede apreciarse en la Fig. 4.4, en el cual el solver de NS determina el campo de flujo, luego se calculan los desplazamientos nodales en la SL, con o sin estabilización, y al finalizar de cada paso de tiempo se actualizan las posiciones nodales para el interior de la malla mediante el proceso de MMV.

Tras realizar una serie de pruebas en las cuales las velocidades en el fluido eran relativamente importantes, se incorporaron iteraciones previas tanto para la instancia de NS como para la de MMV con la intención de contar con un estado del fluido actualizado al momento de calcular la posición actualizada de los nodos interiores de la malla. La Fig. 4.5 muestra el orden de ejecución de cada parte del sistema cuando se emplea un lazo de predicción en una cantidad “p” definida por el usuario. La diferencia consiste en la determinación del estado del fluido para un paso global sobre una malla de forma predicha, que ha sido calculada mediante la interacción de procesos auxiliares de NS y MMV. Esta parte predictiva de la resolución permite

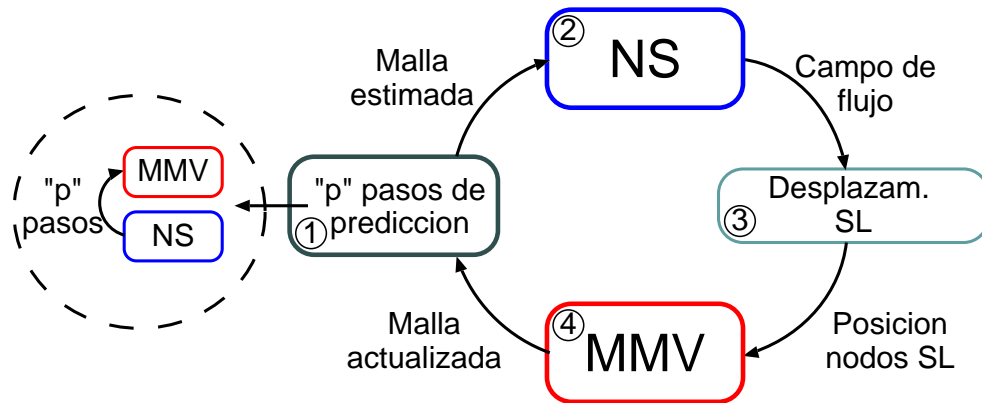


Figura 4.5: Secuencia de ejecución de las diferentes instancias involucradas en problemas de flujo con superficie libre mediante ALE con pasos de predicción.

obtener resultados más precisos a partir de las instancias principales, indicadas con los números 2 y 4 en la gráfica de la Fig. 4.5.

4.5. Ejemplos numéricos

4.5.1. Validación: agitación en 2D

El método propuesto es validado mediante un problema bidimensional de agitación con solución analítica, empleado por Rabier y Medale [RM03] y presentado también en Battaglia *et al.* [BDESN06]. Este test muestra principalmente cómo un esquema numérico predice, además de la frecuencia, la tasa de amortiguamiento dominada por la viscosidad del fluido.

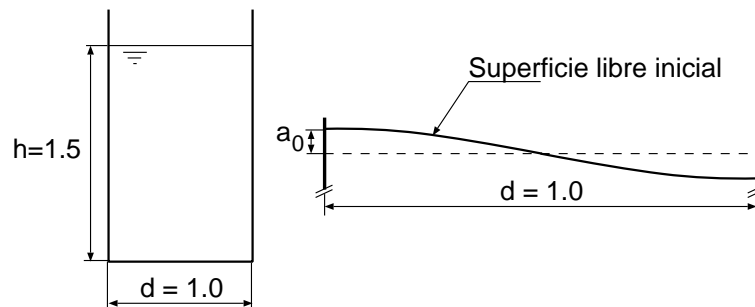


Figura 4.6: Dimensiones en metros y posición inicial de la superficie libre para el problema de agitación con solución analítica.

El ejemplo consiste en resolver el PVI del movimiento de pequeña amplitud de la SL de un fluido viscoso en un tanque rectangular esquematizado en la Fig. 4.6 cuya SL tiene una posición inicial dada por

$$h(x) = 1.5 + a_0 \sin[\pi(1/2 - x)] ; \quad (4.35)$$

donde a_0 es la amplitud de la perturbación sinusoidal inicial del movimiento. El fluido se encuentra sometido a la aceleración de la gravedad, y las fuerzas viscosas son responsables del amortiguamiento del movimiento. Las condiciones de contorno

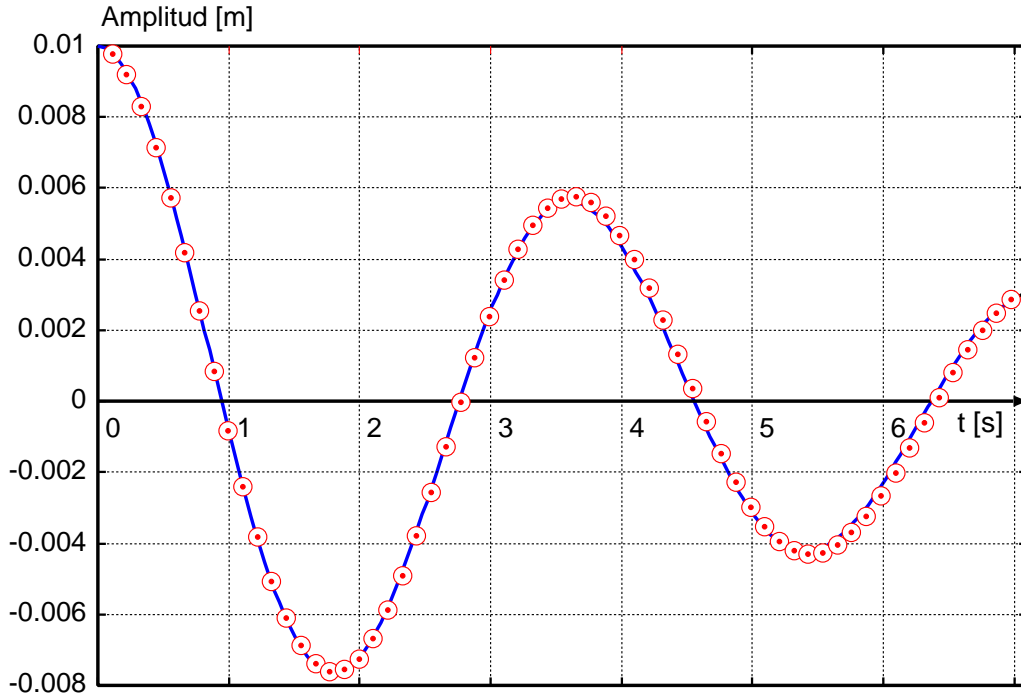


Figura 4.7: Curva de solución analítica y resultados numéricos (círculos) para el problema de agitación.

elegidas son de deslizamiento perfecto sobre los contornos sólidos, lo cual implica velocidad en dirección normal a éstos y tensiones tangenciales nulas, tanto en las paredes laterales como en el fondo del tanque. La condición *slip* sobre las paredes responde a la simetría de la deformación de la SL, y a las hipótesis de dominio lateral e inferior infinitos para la solución analítica. Sobre la superficie libre, $P_{\text{atm}} = 0$ y las tensiones tangenciales son $\mathbf{T} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0}$.

La solución analítica del caso linealizado es dada por Prosperetti [Pro81] en la forma

$$a(t) = \frac{4\nu^2 k^4}{8\nu^2 k^4 + \omega_0^2} a_0 \operatorname{erfc}(\nu k^2 t)^{1/2} + \sum_{i=1}^4 \frac{z_i}{Z_i} \left(\frac{\omega_0^2 a_0}{z_i^2 - \nu k^2} \right) \exp[(z_i^2 - \nu k^2)t] \operatorname{erfc}(z_i t^{1/2}); \quad (4.36)$$

en la cual ν es la viscosidad cinemática del fluido, k es el número de onda, $\omega_0^2 = gk$ es la frecuencia natural invíscida, y cada z_i es una raíz de la siguiente ecuación algebraica:

$$z^4 + k^2 \nu z^2 + 4(k^2 \nu)^{3/2} z + \nu^2 k^4 + \omega_0^2 = 0; \quad (4.37)$$

donde $Z_1 = (z_2 - z_1)(z_3 - z_1)(z_4 - z_1)$, Z_2, Z_3, Z_4 se obtienen por permutación circular de los índices y $\operatorname{erfc}(\dots)$ es la función error para variable compleja. Esta expresión es válida para ondas planas de pequeña amplitud en un dominio de profundidad infinita.

El ejemplo fue resuelto para la geometría antes indicada, con amplitud inicial $a_0 = 0.01$ m, viscosidad cinemática $\nu = 0.01$ m²/s, aceleración gravitatoria unitaria $g = 1.0$ m/s² y una malla de 40×60 elementos cuadrangulares para un tanque de

$h = 1.5$ m de altura y $d = 1.0$ m de ancho, con un paso de tiempo $\Delta t = 2.12 \cdot 10^{-2}$ s. Las propiedades físicas del fluido fueron adoptadas de la resolución de este mismo ejemplo en la literatura [BW00, RM03, Ram90], al igual que las condiciones de contorno ya comentadas. Debido al tamaño reducido del problema, la resolución numérica se realizó en un único procesador, perteneciente a una computadora de escritorio.

La Fig. 4.7 muestra la curva de posición vertical del nodo superior izquierdo versus el tiempo superpuesta a la curva calculada analíticamente. Es oportuno mencionar que al realizar la comparación con los resultados de Rabier y Medale [RM03] se detectó un error de tipeo en la ecuación correspondiente a la Ec. (4.36) mediante una verificación de dimensiones físicas en los términos intervinientes, luego corroborado con el trabajo original de Prosperetti [Pro81].

Estos resultados permiten validar el método, ya que se observa que tanto la frecuencia como el amortiguamiento viscoso del sistema son bien capturados por la solución numérica.

Rabier y Medale [RM03] propusieron distintas discretizaciones espaciales y temporales. Los mencionados autores observan para la resolución de este problema que las diferencias que obtienen entre sus resultados y la solución analítica son debidas a la no inclusión de la tracción sobre la superficie libre, que no es considerada en este modelo.

Cabe aclarar que, debido a las bajas velocidades que se registran sobre la SL, no se producen inestabilidades debidas a efectos convectivos, por lo tanto este ejemplo no requiere estabilización numérica en la interfase.

4.5.2. Tanque rectangular sometido a aceleración horizontal periódica

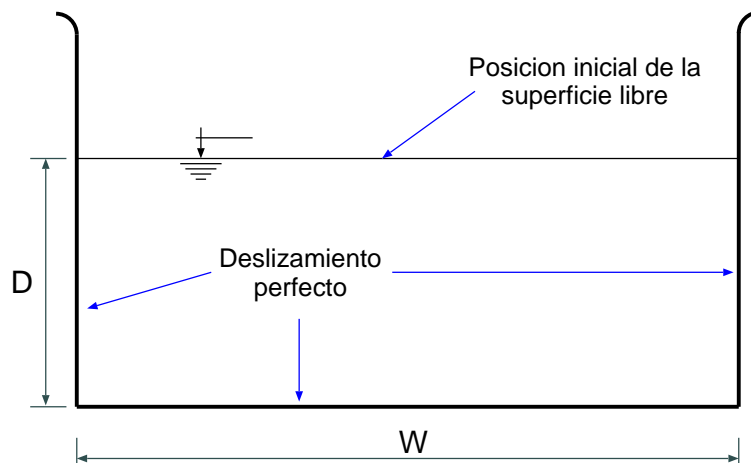


Figura 4.8: Datos geométricos y condiciones de contorno para el tanque sometido a aceleraciones horizontales periódicas.

Este ejemplo consiste en la simulación de una agitación de gran amplitud en un tanque, generado por una aceleración horizontal de magnitud y sentido periódicos en el tiempo. El problema fue propuesto por primera vez por Huerta y Liu [HL88], quienes obtienen buena aproximación a resultados experimentales, luego reproducido

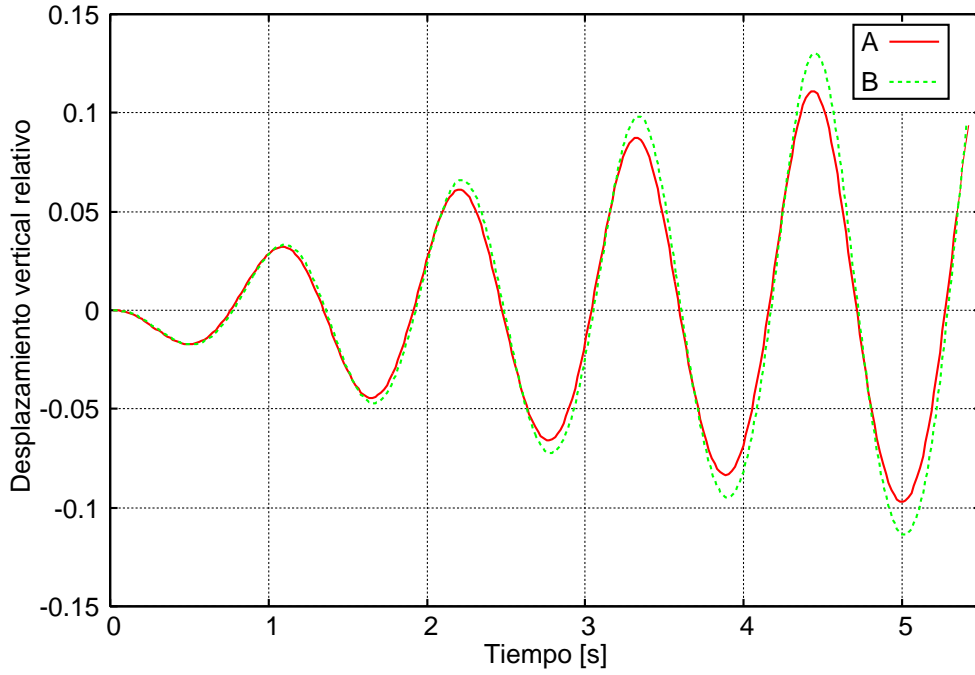


Figura 4.9: Evolución temporal de la relación entre los desplazamientos verticales para el nodo superior izquierdo y la profundidad del contenedor, con $\Delta t = 0.018$ s para el caso A y $\Delta t = 0.009$ s para B.

por Soulaïmani *et al.* [SFDO91] y Battaglia *et al.* [BSDE07]. Aunque la formulación considerada en el presente trabajo está enfocada a desplazamientos pequeños de la superficie libre, este ejemplo muestra la robustez del método al momento de resolver grandes desplazamientos y velocidades horizontales mayores que las que se presentan en el problema de la Sec. 4.5.1.

El tanque es un contenedor rectangular de $W = 0.80$ m de ancho, con una altura de agua de $D = 0.30$ m, como puede verse en la Fig. 4.8, y es modelado como un problema 2D. Debido a la baja viscosidad del fluido, $\nu = 1.0 \times 10^{-6}$ m²/s, las condiciones de contorno sobre las paredes laterales son de deslizamiento perfecto [HL88, SFDO91, SZ01]. La aceleración que actúa sobre el dominio es $G = [g_1; g_2]^T$, de componente vertical de magnitud $g_2 = -g = -9.81$ m/s² y la horizontal dependiente del tiempo, $g_1 = A g \sin \omega t$, en la cual el coeficiente de amplitud es $A = 0.01$, t es el tiempo y ω la frecuencia circular. Esta frecuencia ha sido calculada de manera tal que excita el primer modo de *sloshing*, teniendo en cuenta que la longitud de onda para éste es $\lambda = 2W$, por lo tanto,

$$f = \sqrt{\frac{g}{4\pi W} \tanh \frac{\pi D}{W}} \approx 0.89825 \text{ 1/s} . \quad (4.38)$$

La frecuencia angular a imponer es entonces $\omega = 2\pi f \approx 5.64$ rad/s.

Este ejemplo fue abordado con distintos tamaños de malla y pasos de tiempo, siempre empleando un único procesador para realizar los cálculos numéricos, integrando temporalmente tanto con Crank-Nicolson como con Retro-Euler, y realizando uno o más pasos de predicción antes de cada paso de tiempo. Los resultados se encuentran representados en las Figs. 4.9 a 4.11.

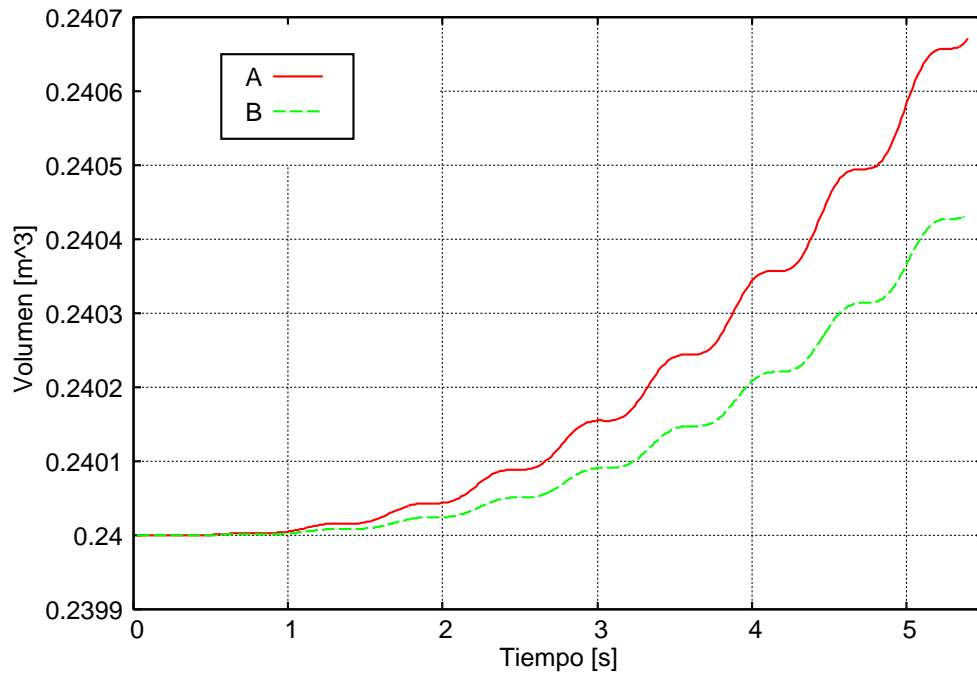


Figura 4.10: Evolución del volumen de fluido dentro del tanque, adoptando $\Delta t = 0.018$ s para el caso A y $\Delta t = 0.009$ s para el B.

En primer lugar, el problema fue resuelto para dos mallas con distinto refinamiento, una de 39×104 y otra de 78×208 elementos, con $\Delta t = 0.009$ s y $\Delta t = 0.0045$ s, respectivamente, presentando pequeñas diferencias entre los resultados obtenidos con una y otra en un análisis con $t_f = 4.1$ s, siendo la diferencia entre ambas del orden del 4% en relación a la amplitud del movimiento y del 1.5% con respecto a la amplitud relativa, esto es, en relación a D . La diferencia porcentual entre los resultados para una y otra discretización es constante a lo largo del análisis.

Luego, se modificó el paso de tiempo, mostrando que los desplazamientos de la superficie libre son muy sensibles a este parámetro, como puede verse en las Figs. 4.9 y 4.10, donde tanto el caso A como el B fueron modelados con una malla 2D de 54×144 elementos cuadrangulares, y con $\Delta t = 0.018$ s para el primero y $\Delta t = 0.009$ s para el segundo. La amplitud de los desplazamientos en B se aproxima mejor a los de Huerta y Liu [HL88], así como también son menores las pérdidas de masa.

La Fig. 4.11 muestra el desplazamiento del nodo superior izquierdo comparado con las envolventes de los resultados de la bibliografía [HL88, SFDO91], para el problema resuelto sobre una malla de 39×104 elementos con $\Delta t = 0.009$ s, haciendo uso de un esquema de integración temporal Crank-Nicolson, i.e. $\alpha = 0.5$, a lo largo de 2000 pasos de tiempo. La resolución de este mismo problema para un esquema con Retro-Euler evidencia amplitudes menores en los desplazamientos, a pesar de lo cual la variación en la masa es despreciable frente al 4% que se produce con $\alpha = 0.5$.

Teniendo en cuenta que el tanque es excitado con la frecuencia asociada al primer modo de *sloshing*, se espera un incremento permanente en la amplitud del movimiento hasta que se equilibren la potencia aplicada y la disipación viscosa, o bien hasta que se produzca la rotura de la SL, invalidando el presente método. Corresponde aclarar que en la simulación presentada en la Fig. 4.11 no se produjo ninguna de estas dos circunstancias, en un total de 16 períodos simulados. En este sentido, la

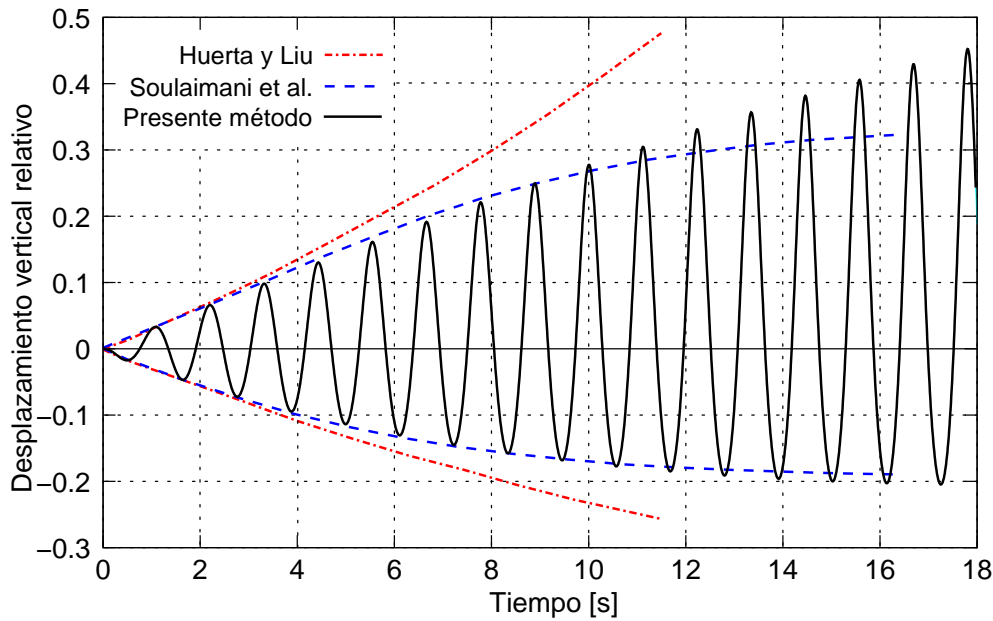


Figura 4.11: Desplazamiento vertical del nodo izquierdo sobre la SL, relativo a la profundidad del tanque con integración temporal tipo Crank-Nicolson.

referencia [HL88] obtiene casi un 50 % en el desplazamiento vertical relativo del nodo superior izquierdo del dominio, para retirar la excitación después del décimo período, sin reportar la rotura de la interfase. Por su parte, Soulaïmani *et al.* [SFDO91] resuelven 15 períodos manteniendo la excitación sin hacer mención alguna a la rotura de la interfase, aunque la amplitud de los desplazamientos relativos que estos autores obtienen es menor del 35 %, con un desplazamiento del 28 % en 10 períodos, muy similar a la amplitud obtenida en la presente Tesis.

Aunque los resultados presentados en la Fig. 4.11 no son plenamente coincidentes en cuanto a amplitud con los de [HL88] o [SFDO91], la tasa de crecimiento de los primeros períodos en los tres casos predice una amplitud del orden del 30 % para el décimo período. La envolvente de amplitudes en períodos intermedios muestra en el caso de Huerta y Liu [HL88] una tendencia superlineal, esto es, más que lineal pero menos que cuadrática, en tanto que es prácticamente lineal para la metodología presentada en la Tesis y es levemente sublineal, o cóncava hacia abajo, en el trabajo de Soulaïmani *et al.* [SFDO91], razón por la cual el resultado obtenido por el presente método se encuentra delineado entre los dos de referencia.

Otro aspecto destacado del ejemplo es la no linealidad de la deformación de la SL que se evidencia en que las amplitudes de los desplazamientos en subida son mayores que las amplitudes en bajada, en coincidencia con resultados de modelos físicos [HL88]. Este fenómeno se aprecia en la Fig. 4.11 para $t > 4$ s, y se debe a que el fluido en la zona de descenso muestra curvas más suaves que en ascenso, donde el líquido adquiere una forma empinada, como puede verse en la Fig. 4.12.

Ensayos numéricos posteriores mostraron que la diferencia entre incorporar pasos de predicción o disminuir el paso de tiempo eran prácticamente equivalentes.

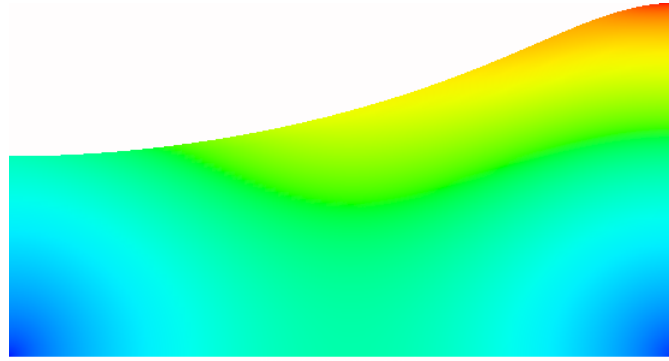


Figura 4.12: Magnitud de las velocidades y deformación del dominio en el problema del tanque agitado horizontalmente en $t = 16.11$ s.

4.5.3. Flujo supercrítico sobre un obstáculo

El propósito de este ejemplo es la evaluación del procedimiento de estabilización de la SL mediante SUPG; por ello, se propuso el flujo supercrítico ($Fr = 1.5$) en un canal abierto con una obstrucción parabólica en el fondo, denominada *bump* [BSDE07]. Las particularidades de este flujo son muy distintas a las de los ejemplos anteriores, en los cuales las velocidades transversales a la superficie libre son de magnitud pequeña o despreciable. Para el caso de flujo viscoso, no se han encontrado soluciones (semi) analíticas o resultados experimentales disponibles para el rango de parámetros de fluido considerado, pero soluciones analíticas para flujo potencial pueden ser tomadas como referencia, tales como las propuestas por Forbes y Schwartz [FS82] para obstáculos semicirculares. Estas soluciones potenciales indican que la posición de la superficie libre para el caso de régimen supercrítico sobre una obstrucción simétrica es una curva simétrica centrada en el eje vertical del *bump* y con la cresta ubicada por sobre el nivel de la interfase en reposo.

La geometría del dominio es presentada en la Fig. 4.13, así como también las referencias para las condiciones de contorno y la posición inicial de la interfase. Las dimensiones adoptadas son $H_c = 1.00$ m para la profundidad inicial, las longitudes aguas arriba y aguas abajo son, respectivamente, $L_u = 3.00$ m y $L_d = 5.00$ m, mientras que la obstrucción es de perfil parabólico de $H_b = 0.50$ m de altura y $L_b = 1.00$ m de ancho.

El fluido se encuentra caracterizado por una viscosidad cinemática $\nu = 0.005$ m²/s y una densidad $\rho = 1$ kg/m³, y es sometido además a un campo gravitacional con aceleración $g = 1$ m/s² en la dirección vertical negativa. Estos datos resultan en un número de Froude $Fr = 1.50$ y un número de Reynolds $Re \approx 300$, con lo cual el régimen de flujo es supercrítico ($Fr > 1$) y no es preciso modelar la turbulencia en el sistema.

4.5.3.1. Adopción de las condiciones de contorno

Las condiciones de contorno impuestas para el problema de NS son las siguientes: para la superficie libre, número (1) en la Fig. 4.13, se aplica la condición de *traction free*; sobre el fondo (3), la condición de deslizamiento perfecto; la sección de salida (4) es libre, es decir, no hay condiciones impuestas, y en la sección de entrada (2), se fija la velocidad horizontal en $v_{in} = 1.50$ m/s. Para la instancia MMV, aplicando

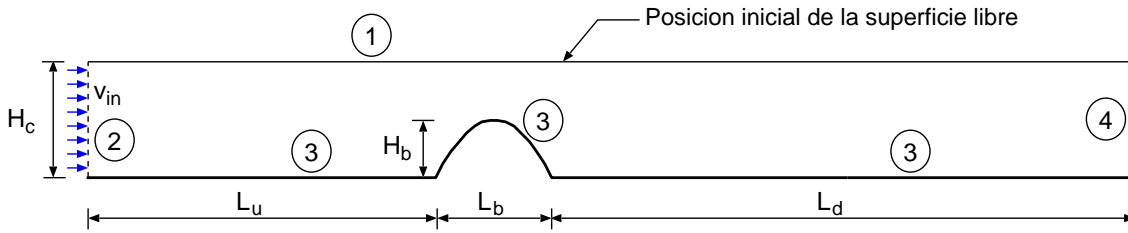


Figura 4.13: Geometría y referencias para flujo supercrítico en el canal con una obstrucción en el fondo.

el método descrito en la Sec. 4.1.3.2, todos los nodos sobre (3) se encuentran fijos, mientras que en los nodos en las secciones de entrada (2) y salida (4) no pueden desplazarse horizontalmente, pero sí verticalmente en (4). Por último, el desplazamiento de los nodos ubicados en la superficie libre (1) es resultado de la rutina de actualización que se ejecuta entre los módulos de NS y MMV. Además, los desplazamientos verticales sobre (2) se encuentran impedidos en razón de la condición supercrítica del flujo, lo cual implica que toda la información para el problema debe ser fijada sobre la sección de ingreso, que en este caso consiste en la velocidad horizontal v_{in} y el tirante de fluido H_c .

La adopción de una condición de deslizamiento perfecto en el fondo del canal para un flujo a $Re = 300$ es motivada por el interés central en la estabilización de la superficie libre, pues de aplicarse la condición $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ sería preciso una resolución en mayor detalle en este sector pero irrelevante para la interfase.

Otro de los motivos por los cuales se propuso un flujo supercrítico se relaciona con las condiciones de contornos en la entrada (2) y la salida del fluido (4). En este tipo de flujo es preciso fijar en la sección de ingreso el tirante H_c y la velocidad de ingreso, pero no es posible indicar una condición sobre la presión o la velocidad vertical a la salida, ya que debido a la libertad de movimiento del pelo de agua en dicha sección no puede definirse la condición de presión hidrostática con precisión ni evitar el movimiento de los nodos debido al movimiento de la interfase. La adopción de las mencionadas condiciones en la sección de salida fue realizada tras una serie de pruebas con imposición de perfiles de presión y velocidad, entre otras estrategias, de las cuales no se obtuvieron mejores resultados que los aquí presentados. La solución a esta limitación en el tipo de flujo consiste en desarrollar una condición de contorno especial, absorbente, que escapa a los alcances de la Tesis.

Por otro lado, la preferencia de un flujo supercrítico por sobre uno subcrítico viene dada por el hecho de que, en el caso de $Fr < 1$, cualquier perturbación que pudiera producirse en el flujo se propagaría aguas arriba y aguas abajo con velocidad $\bar{u} \pm \sqrt{gh}$, siendo \bar{u} la velocidad media del flujo, g la aceleración de la gravedad y h la profundidad del canal [Whi97], lo cual afectaría la curva de la superficie libre en el ingreso y produciría la falla del método de actualización de malla. En cambio, para flujo supercrítico, cualquier perturbación se propaga aguas abajo y no interfiere con la sección de ingreso. Este hecho puede equipararse con las condiciones de contorno a imponer en un flujo compresible en el cual deben ser dato todas las variables aguas arriba al momento de resolver un flujo supersónico. Esta analogía entre tipos de flujo es también destacada por White [Whi97].

4.5.3.2. Resultados

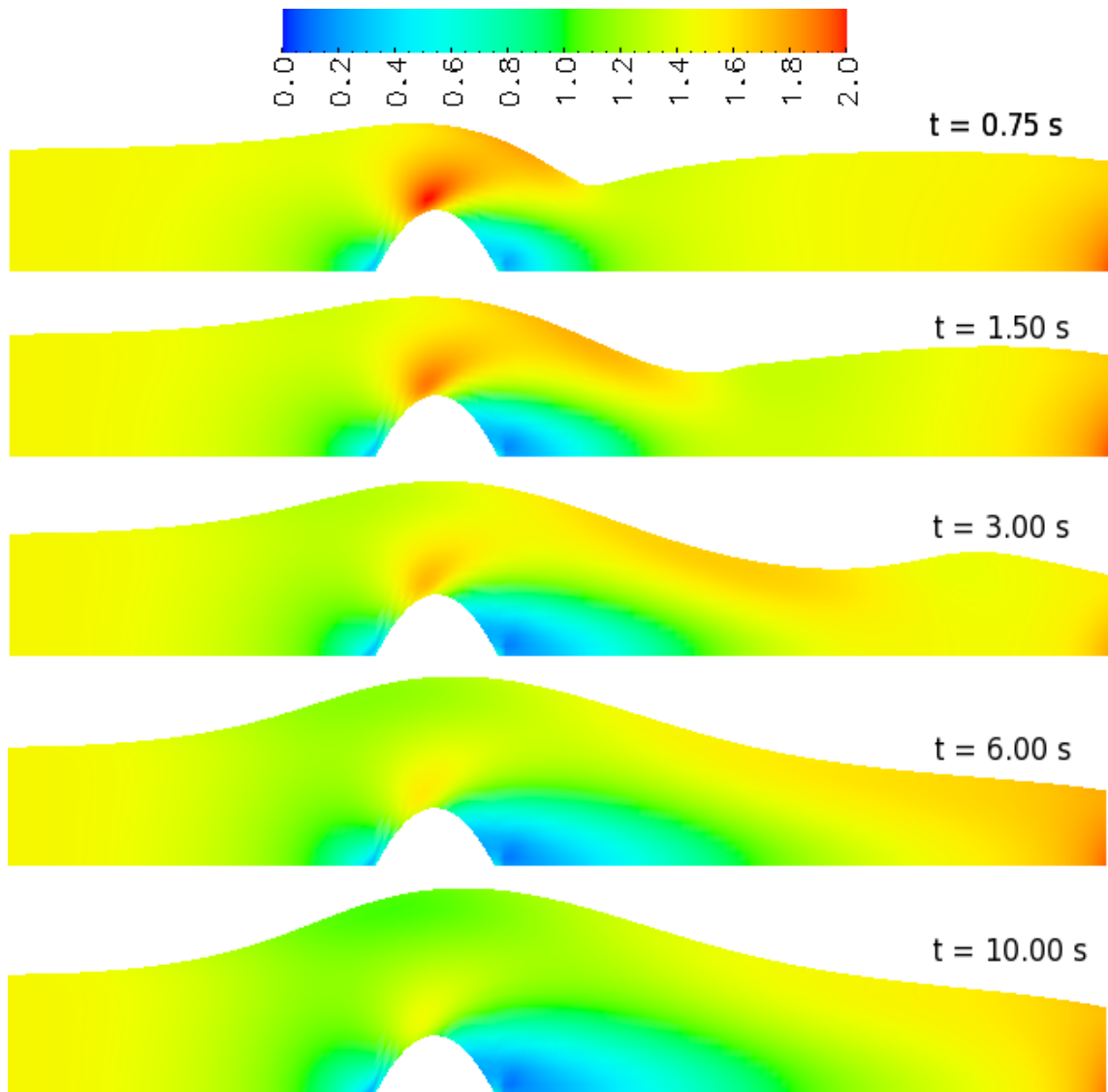


Figura 4.14: Perfil de la interfase y valores absolutos de la velocidad, en m/s, para el problema auxiliar con viscosidad $\nu' = 0.05 \text{ m}^2/\text{s}$ en diferentes instantes.

La simulación fue realizada sobre una malla regular de 15×135 elementos cuadrangulares y 2176 nodos. Dado que al comienzo del estudio se producen desplazamientos violentos de la superficie libre debido a la altura del obstáculo y la magnitud de la velocidad de ingreso, fue necesario realizar un análisis auxiliar con una viscosidad mayor, de $\nu' = 0.05 \text{ m}^2/\text{s}$ y un paso de tiempo $\Delta t' = 0.01 \text{ s}$ a lo largo de 1000 pasos, cuya evolución temporal se muestra en la Fig. 4.14. El objetivo de esta primera aproximación fue obtener una mejor condición inicial para el estudio previsto, que fue resuelto luego con $\Delta t = 0.01 \text{ s}$ y el valor original de la viscosidad. En ambos casos, se adoptó $\alpha = 0.5$ y un paso de predicción, teniendo en cuenta el predominio de las velocidades horizontales por sobre las verticales.

Independientemente del carácter de resultado auxiliar, el desarrollo del perfil de la superficie libre con mayor viscosidad, así como el del campo de velocidades, también ilustrado en la Fig. 4.14, aporta algunas observaciones interesantes en compa-

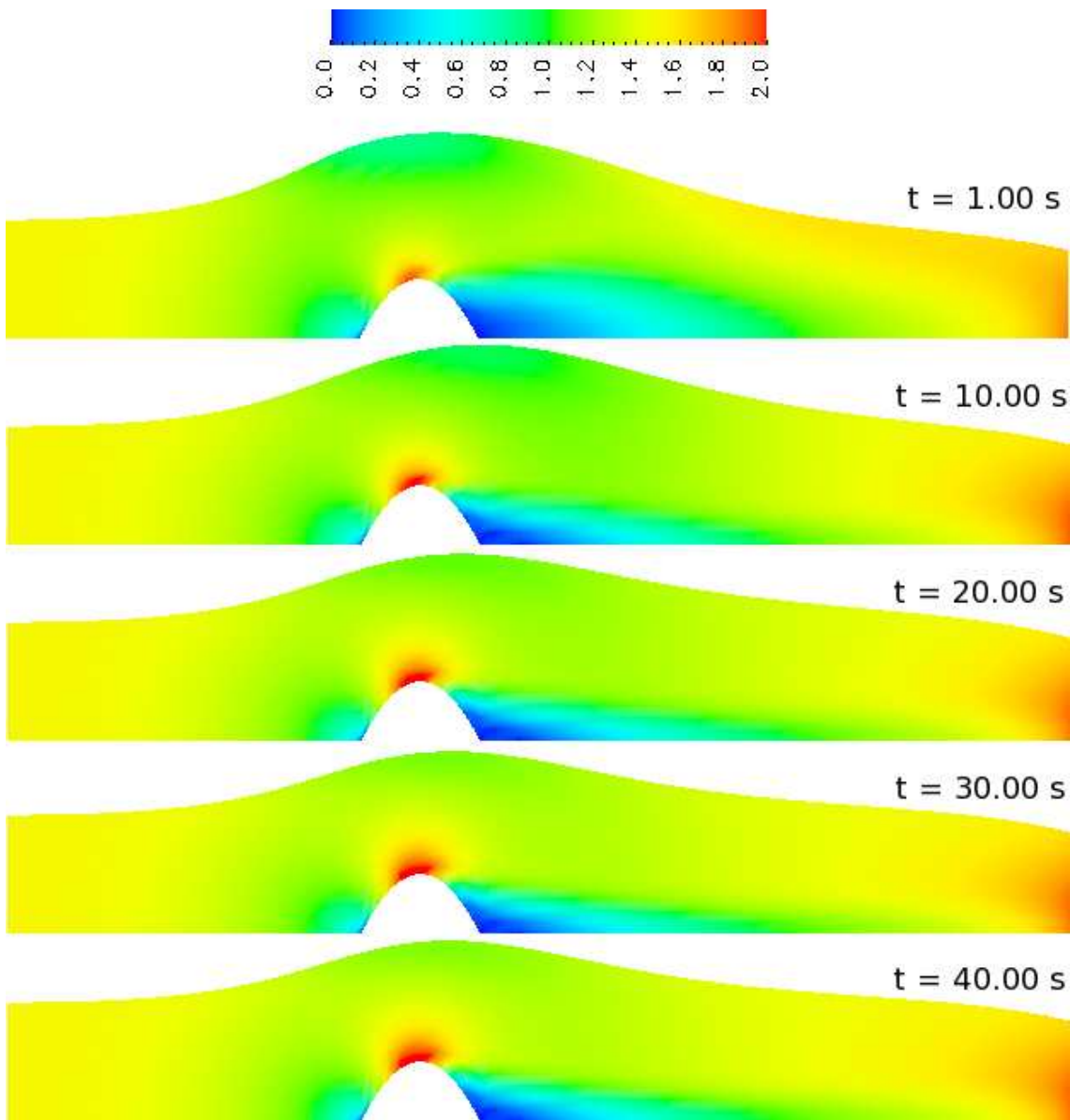


Figura 4.15: Perfil de la interfase y valores absolutos de la velocidad, en m/s, para el problema con viscosidad $\nu = 0.005 \text{ m}^2/\text{s}$ en diferentes instantes.

ración con la solución potencial, tal como el desplazamiento aguas abajo del vértice de la curva de la interfase, probablemente originado por una especie de extensión del *bump* en la misma dirección, generada por el sector de baja velocidad que se aprecia en la figura. La altura del pico es de 1.70 m por sobre el nivel del fondo del canal, que es mayor que el dado por el problema potencial similar resuelto en [FS82].

Los campos de velocidades absolutas y la evolución de la interfase para el valor definitivo de ν , con $\Delta t = 0.01 \text{ s}$ para 4000 pasos de tiempo son incorporados en la Fig. 4.15. A diferencia de lo apreciado en el análisis más viscoso, la altura máxima del perfil es menor, de 1.52 m, y el vértice se ubica más cerca del *bump*, siendo el perfil de la superficie libre prácticamente simétrico, al menos en el sector más cercano al obstáculo. Otra diferencia con el estudio anterior es la ubicación de las velocidades máximas, que en este caso es registrada sobre el obstáculo en lugar de producirse

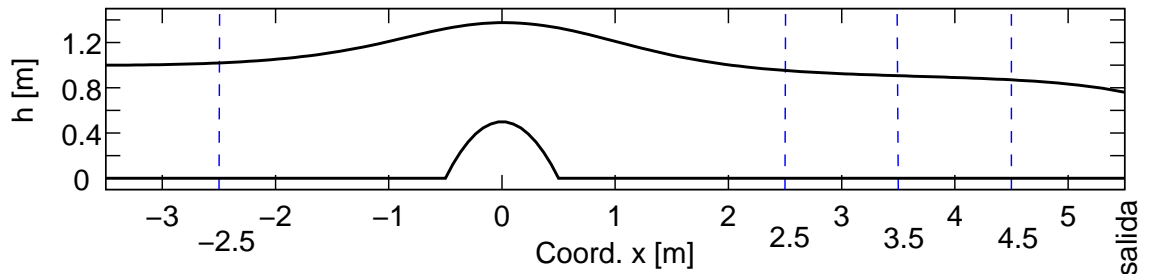


Figura 4.16: Geometría y secciones seleccionadas para evaluar el flujo en el canal.

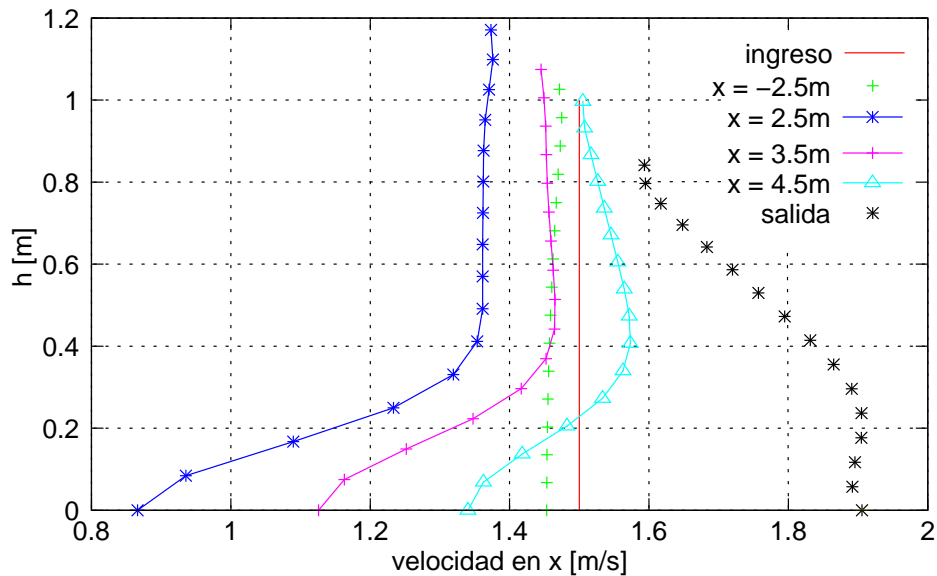


Figura 4.17: Curvas de variación de la velocidad horizontal en distintas secciones para el problema de flujo supercrítico en un canal.

en la sección de salida, en tanto que la zona de bajas velocidades detrás del *bump* es de menor tamaño. El análisis finalizó con un estado de cuasi-estacionario, esto es, variaciones muy bajas entre las posiciones nodales y valores de velocidad entre estados consecutivos, y una diferencia de 0.46% entre los caudales de entrada y salida al dominio.

En la Fig. 4.16 se esquematiza la geometría del dominio y las secciones seleccionadas para resumir los datos del análisis.

La Fig. 4.17 muestra los perfiles de velocidad para las secciones a la entrada ($x = -3.50$ m), a la salida y en las posiciones intermedias indicadas en la Fig. 4.16. En ella puede apreciarse que en los perfiles de coordenadas x positivas la variación de la velocidad horizontal es muy importante en la altura del flujo, especialmente en $x = 2.50$ m y en la sección de salida, en el primer caso debido a la “sombra” en las velocidades que produce el obstáculo y en el segundo como consecuencia de la perturbación introducida por la condición de contorno.

Los valores de la velocidad vertical de la Fig. 4.18 denotan escasas magnitudes, excepto en la sección de salida, en que se produce un incremento en la magnitud de la velocidad vertical, con sentido hacia abajo, lo cual colabora con el descenso del pelo de agua que se aprecia en la Fig. 4.15.

Por último, se presentan en la Fig. 4.19 las curvas de presión para las secciones

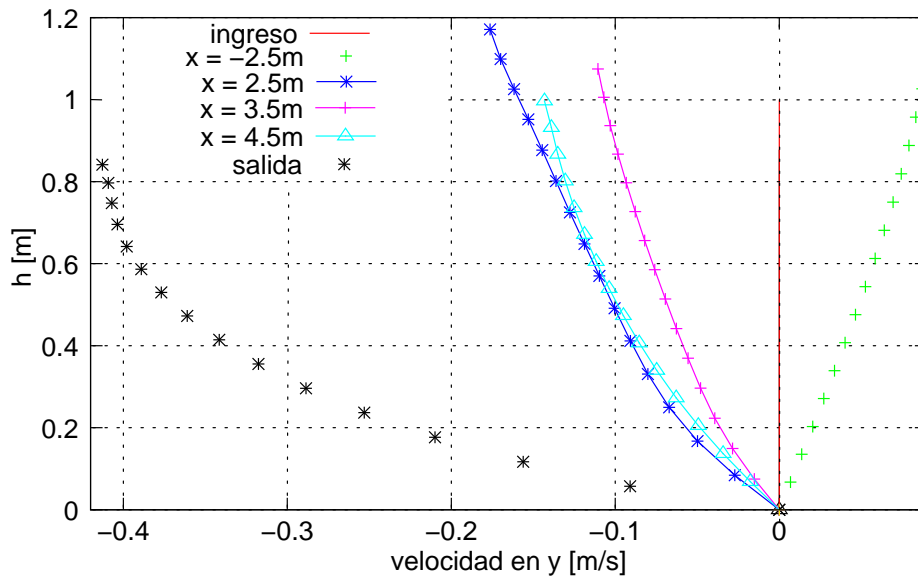


Figura 4.18: Curvas de variación de la velocidad vertical en diferentes secciones para el flujo supercrítico en un canal.

consideradas, siendo en todos los casos coincidentes prácticamente con la hidrostática, a excepción nuevamente de la salida.

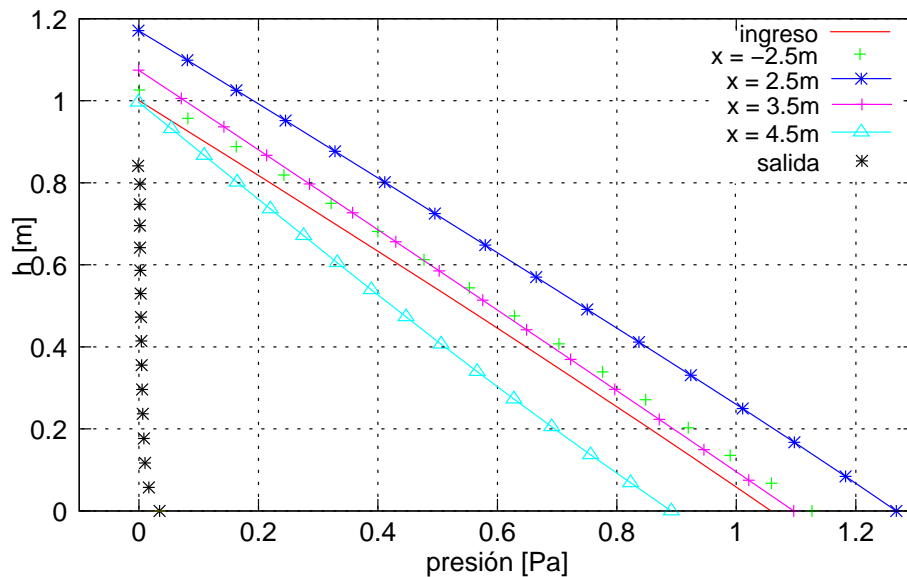


Figura 4.19: Variación de la presión en las secciones de referencia para el problema de flujo supercrítico.

Cabe destacar que en las Figs. 4.17-4.19 se aprecia un comportamiento diferente de las variables en la sección de salida ($x = 5.50$ m), especialmente en lo relativo a velocidades verticales y valor de la presión. Como se comentó al describir las condiciones de contorno, esto se debe a que no ha sido posible imponer condiciones tales que el flujo conserve las propiedades que presenta en un canal, esto es, velocidades verticales bajas y presión hidrostática, de manera que la salida se asemeja más a la de un vertedero.

4.5.3.3. Balance de energía

A manera de verificación del algoritmo completo, se realizó un balance de energía, partiendo de la siguiente expresión [Whi91]:

$$\int_{\Gamma_2} \left(p + e\rho + \frac{1}{2}\rho u^2 + gy \right) (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}) ds - \int_{\Gamma_1} \left(p + e\rho + \frac{1}{2}\rho u^2 + gy \right) (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}) ds = \frac{dQ}{dt} + \frac{dW}{dt} \quad (4.39)$$

donde \mathbf{v} es la velocidad y v su módulo, (x, y) son las coordenadas cartesianas, siendo x la horizontal e y la vertical, e la energía interna del fluido, $\hat{\mathbf{n}}$ la normal a las respectivas secciones Γ , dQ/dt es el calor extraído y dW/dt el trabajo externo aplicado. El balance se realiza entre dos superficies de corte arbitrarias $\Gamma_{1,2}$, coincidentes en este caso con la sección de ingreso y la sección de salida, respectivamente.

Llamando $W(\Gamma)$ a la potencia, o flujo de energía, a través de una dada curva Γ que corta el dominio,

$$W(\Gamma) = \int_{\Gamma} \left(p + e\rho + \frac{1}{2}\rho u^2 + gy \right) (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}) ds, \quad (4.40)$$

entonces el balance se puede escribir como

$$W(\Gamma_2) = W(\Gamma_1) + \frac{dQ}{dt} + \frac{dW}{dt}. \quad (4.41)$$

En el caso de este ejemplo, el trabajo externo es nulo, ya que los contornos están en reposo y por lo tanto no realizan trabajo.

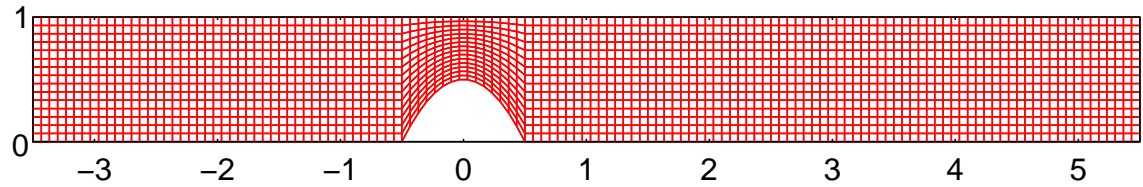


Figura 4.20: Discretización de elementos finitos para el problema de flujo supercrítico sobre un obstáculo.

Asumiendo que la energía interna e es constante, en particular adoptada como $e = 0$, y que la disipación viscosa es balanceada con una fuente de calor $dQ/dt < 0$, debe satisfacerse:

$$W(\Gamma_2) < W(\Gamma_1). \quad (4.42)$$

La malla de elementos finitos es estructurada, representada en la Fig. 4.20, y se compone de 135 elementos en dirección x y 15 en dirección y . El flujo de energía W fue calculado mediante la regla del trapecio en 135 polilíneas Γ_j , definidas por la unión de los segmentos que pasan por los centroides de los elementos de la columna j . Además, se calculó por separado cada una de las contribuciones W , es decir,

$$\begin{aligned} E_k(\Gamma) &= \int_{\Gamma} \frac{1}{2}\rho u^2 (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}) ds, & \text{energía cinética;} \\ E_v(\Gamma) &= \int_{\Gamma} \rho gy (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}) ds, & \text{energía potencial;} \\ E_p(\Gamma) &= \int_{\Gamma} p (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}) ds, & \text{término de presión.} \end{aligned} \quad (4.43)$$

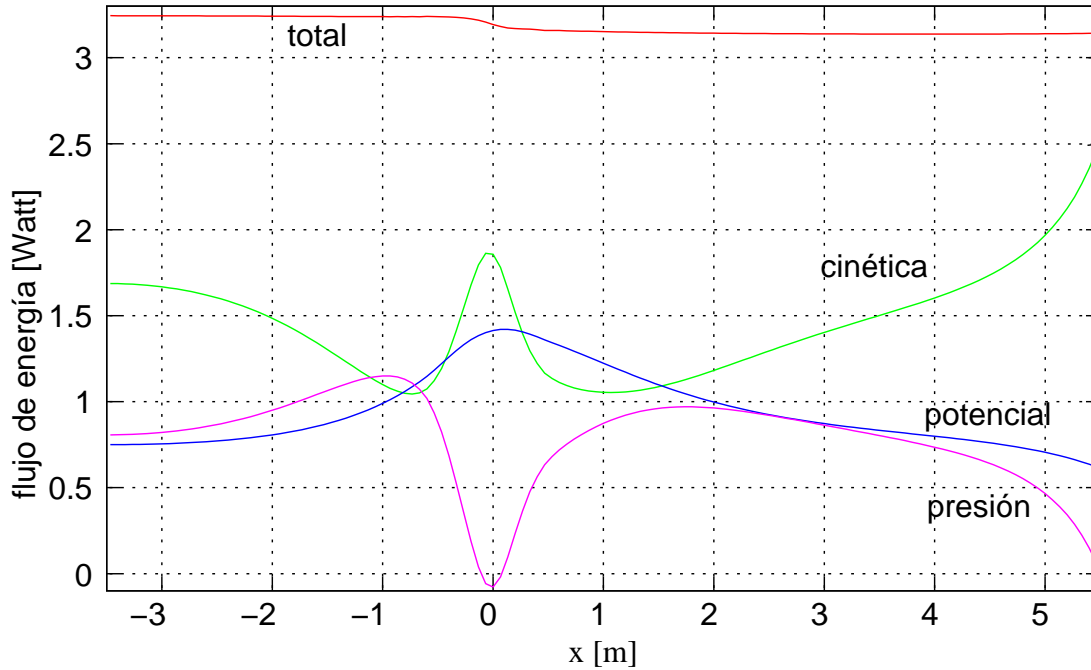


Figura 4.21: Variación de la potencia $W(x)$ en el problema de flujo supercrítico sobre un obstáculo, discriminando el aporte de los distintos términos.

Estos valores se grafican en la Fig. 4.21 según el valor de x correspondiente al punto inferior de la curva Γ . En dicha figura se observa que la energía cinética aumenta en la zona de salida y, de hecho, el valor a la salida es mayor que a la entrada. Sin embargo, esto se compensa con una disminución en el término de presión y de energía potencial, de manera tal que el flujo de energía a la salida es menor que a la entrada, lo cual satisface el criterio de que la disipación tiene que ser positiva.

A fin de verificar que la disipación registrada fuera consistente con los datos del problema, se realizó el cálculo de la disipación viscosa mediante una integración de Gauss sobre todos los elementos del dominio para la siguiente expresión [Whi68]:

$$\dot{E}_\mu = \int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} : \boldsymbol{\tau} \, d\Omega ; \quad (4.44)$$

que para integrar sobre la discretización de \mathcal{E} elementos finitos pasa a ser:

$$\dot{E}_\mu = \sum_{k=1}^{\mathcal{E}} \int_{\Omega_k} \frac{\mu}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2 \, d\Omega_k . \quad (4.45)$$

Como resultado de ello, se obtuvo el valor $\dot{E}_\mu = 0.110$ Watt para la disipación viscosa por unidad de volumen en el último paso de tiempo, en tanto que la pérdida representada en la figura 4.21 para la sección $x = 5.50$ m es $\dot{E}_M = W(\Gamma_1) - W(\Gamma_2) = 0.102$ Watt. Esto es, la magnitud de la disipación calculada mediante la Ec. (4.45) es del mismo orden que la obtenida realizando el balance de energía, que a su vez es de escasa magnitud en relación a la potencia en la sección de ingreso $W(\Gamma_1) = 3.2442$ Watt, es decir un 3%.

4.5.3.4. Tiempos de ejecución en paralelo

El análisis cuyos resultados se exhiben fue realizado mediante el uso de seis procesadores *Pentium IV*, cada uno de ellos de 2 Gb de memoria RAM, pertenecientes al *cluster* Aquiles [Aqu08] que se describe en la Sec. 1.4, insumiendo 97 min la resolución de 7500 pasos de tiempo.

A los fines de evaluar la conveniencia de ejecución en paralelo de este algoritmo, en el caso particular de este problema, se realizaron mediciones de tiempos de ejecución para el ejemplo presentado, esta vez realizando sólo 100 Δt pasos de tiempo. Dichos tiempos de ejecución, resumidos en la Tabla 4.1, son empleados para determinar los siguientes parámetros de resolución en paralelo [DDSV93, SP96], indicados también en la tabla antes citada:

- el *speedup* S_p o aceleramiento, que consiste en el cociente entre el tiempo de ejecución del algoritmo en un único procesador t_1 y el tiempo t_p que insume la ejecución en una cantidad p de procesadores,

$$S_p = \frac{t_1}{t_p}; \quad (4.46)$$

- la eficiencia porcentual $E\%$,

$$E\% = 100 \frac{S_p}{p} = 100 \frac{t_1}{p t_p}. \quad (4.47)$$

Idealmente, algoritmos totalmente paralelizados mostrarían un aceleramiento de valor igual a la cantidad de procesadores ($S_p \rightarrow p$), caso en el cual la eficiencia sería del 100 %, aunque lo usual es que se verifique $S_p \leq p$.

p	t_p [s]	S_p	$E\%$
1	261	-	-
2	158	1.65	83
4	105	2.49	62
6	78	3.36	56

Tabla 4.1: Tiempos de ejecución t_p , aceleramiento S_p y eficiencia $E\%$ para distinto número de procesadores p en el problema de flujo sobre un obstáculo para 100 Δt .

Como puede verse en la Tabla 4.1, tanto el aceleramiento como la eficiencia se deterioran con el aumento de la cantidad de procesadores. En este caso, al tratarse de un problema 2D, esta circunstancia es más notable debido a que la cantidad de incógnitas es significativamente menor que en uno 3D, de manera que los tiempos de comunicación entre procesadores aumentan en mayor medida que los de procesamiento, afectando los parámetros mencionados.

4.5.4. Validación: agitación cuasi-invísida en 3D

El caso propuesto en Battaglia *et al.* [BDESN06] corresponde a un cilindro recto de base anular cuya geometría es dada en la Fig. 4.22. La naturaleza de este ejemplo es claramente tridimensional debido a la condición inicial impuesta, que produce

circulación del fluido de uno a otro lado del tanque. Este test muestra que el esquema numérico tiene la capacidad de reproducir los autovalores y autofunciones de la superficie libre, como en los trabajos de Papaspyrou *et al.* [PKV04, PVK04].

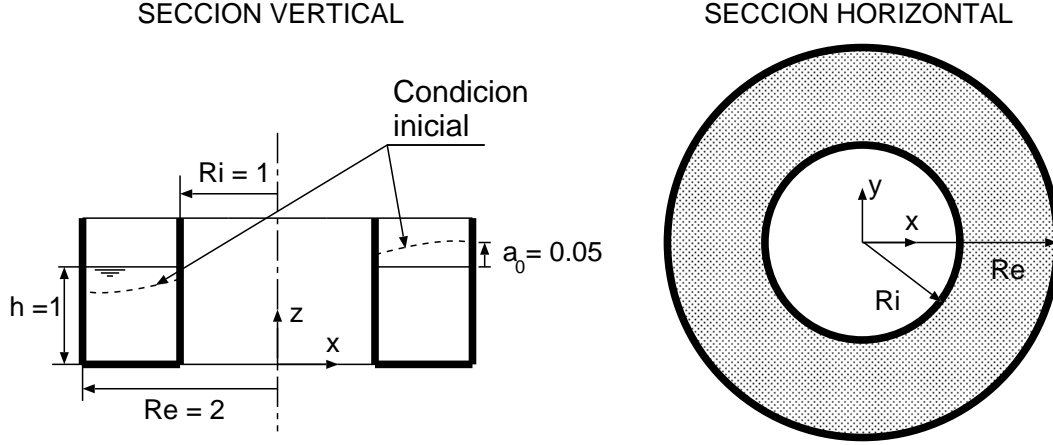


Figura 4.22: Secciones vertical y horizontal de un cilindro vertical recto de base anular para el problema de *sloshing* invíscido en 3D. Se indican las condiciones iniciales y los ejes de referencia, con dimensiones en m.

Los radios interno y externo del cilindro son $R_i = 1$ m y $R_e = 2$ m, respectivamente. La condición inicial propuesta, también representada en la Fig. 4.22, es la superficie libre perturbada por desplazamientos proporcionales a la deformada de la primer frecuencia natural de *sloshing* ($n = 1$) con una amplitud máxima de $a_0 = 0.05$ m sobre la altura del líquido en reposo, que es $h = 1.0$ m. De esta manera, el movimiento no se vería influenciado por otros modos naturales distintos del empleado como condición inicial.

Las condiciones de contorno para el NS son impuestas de la siguiente forma: $P_{\text{atm}} = 0$ y $\mathbf{T} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0}$ sobre la superficie libre, y velocidades tales que se verifica el deslizamiento perfecto sobre los contornos rígidos. Para el MMV, los nodos se encuentran fijos en el fondo del recipiente, sobre las paredes son libres de moverse en dirección vertical, y en la superficie libre son impuestos de acuerdo con el valor de desplazamiento calculado en el *hook*.

Los resultados obtenidos son contrastados con los resultados de ecuaciones desarrolladas por Moiseev y Petrov [MP66], con las cuales se determinan las frecuencias naturales de *sloshing* para líquidos invíscidos en este tipo de dominios. Debido a que estos valores analíticos son calculados con la hipótesis de líquidos invíscidos, no se pretende que el valor numérico viscoso converja a aquellos, aún cuando $\nu \rightarrow 0$ y la malla sea refinada. A pesar de ello, se espera obtener una buena aproximación con un error relativo porcentual bajo.

Para la frecuencia natural ω , el número de onda k y el coeficiente adimensional $c = R_e/R_i > 1$, las ecuaciones consideradas son:

$$k_m^{(n)} = \frac{\left(\omega_m^{(n)}\right)^2}{g}; \quad (4.48)$$

$$k_m^{(n)} = \kappa_m^{(n)} \tanh[\kappa_m^{(n)} h]; \quad (4.49)$$

donde $\kappa_m^{(n)}$ es la m -ésima raíz de la ecuación trascendente

$$J'_n(\kappa) \cdot N'_n(c\kappa) - N'_n(\kappa) \cdot J'_n(c\kappa) = 0; \quad (4.50)$$

en la cual $J_n(\dots)$ y $N_n(\dots)$ son las funciones de Bessel de primer y segundo tipo, respectivamente. Además, se adoptó $n = 1$ en correspondencia con el modo de menor frecuencia.

Los períodos más altos calculados al aplicar este método son $T_1 = 9.94$ s, $T_2 = 3.47$ s, $T_3 = 2.49$ s y $T_4 = 2.04$ s, teniendo en cuenta que $T = 2\pi/\omega$. Debido a que el primero de ellos el que domina el movimiento, se adopta $T_a = 9.94$ s como período de contraste para comparar con los resultados numéricos.

El problema de elementos finitos para este caso fue resuelto con una malla de 32000 elementos hexahédricos de 8 nodos, con un total de 35721 nodos. La aceleración de la gravedad se impuso en 1.0 m/s², la viscosidad cinemática en $\nu = 10^{-3}$ m²/s y el paso de tiempo en $\Delta t = 0.1$ s.

Un valor de viscosidad cinemática menor al adoptado podría afectar la aproximación a la frecuencia del modo de oscilación seleccionado, por dos motivos. El primero de ellos tiene que ver con los errores propios de la discretización, debido a los cuales el autovector del problema discreto difiere ligeramente de la autofunción con la cual se inicializa el problema, y el segundo con la transferencia de energía a otros modos por efectos no lineales. La concurrencia de estos factores produce un batido de frecuencias que no es amortiguado si la viscosidad ν es baja, afectando la medición del período. Al contrario, si se adopta una viscosidad alta, se produce un mayor amortiguamiento de los modos de mayor frecuencia al avanzar en el tiempo, aunque se introduce un error debido al desplazamiento de la frecuencia. Por ello, se ha adoptado un valor de compromiso a los fines de evitar el batido de frecuencias por un lado, y el desplazamiento del período por otro.

Los resultados numéricos son graficados en la Fig. 4.23, en la cual se dibujan los desplazamientos verticales de cuatro nodos representativos del problema allí indicados, de manera tal que es posible distinguir el período T del movimiento sin que se aprecien efectos de modos mayores en las curvas. En dicha figura se puede observar que los valores pico de subida y bajada parecerían no estar en concordancia. Por ejemplo, en la amplitud correspondiente al punto 1, el pico que se produce un poco antes de $t = 5$ s tiene un valor de 0.045 m, mientras que el siguiente de bajada ocurre a $t \approx 10$ s y es de -0.033 m. Es decir, la disminución de amplitud es de un 26%. Sin embargo, en el siguiente pico de subida, a $t \approx 15$ s, se registra un valor cercano a 0.033 m, esto es, sin disminución con respecto al pico en bajada anterior. La explicación para este comportamiento es que, si bien la amplitud inicial de la perturbación en la superficie libre es pequeña, de 5 cm en 1 m de profundidad, se aprecia un efecto no lineal que pierde notoriedad al disminuir la amplitud de la oscilación y que se produce de manera sistemática en los cuatro nodos reportados.

En el trabajo de Hernández-Barrios *et al.* [HHA07], quienes resuelven numéricamente el problema de agitación invíscida en tanques cilíndricos sometidos a aceleraciones de diverso origen y magnitud, se reporta este mismo fenómeno al resolver el *sloshing* para la frecuencia de excitación correspondiente al primer modo. Corroborando lo anterior, las simulaciones de tanques cilíndricos sometidos a aceleración horizontal sinusoidal realizadas por Biswal *et al.* [BBS06] muestran también una mayor amplitud en los desplazamientos en subida que en bajada, y también atribuyen el hecho a la no linealidad en la deformación de la SL.

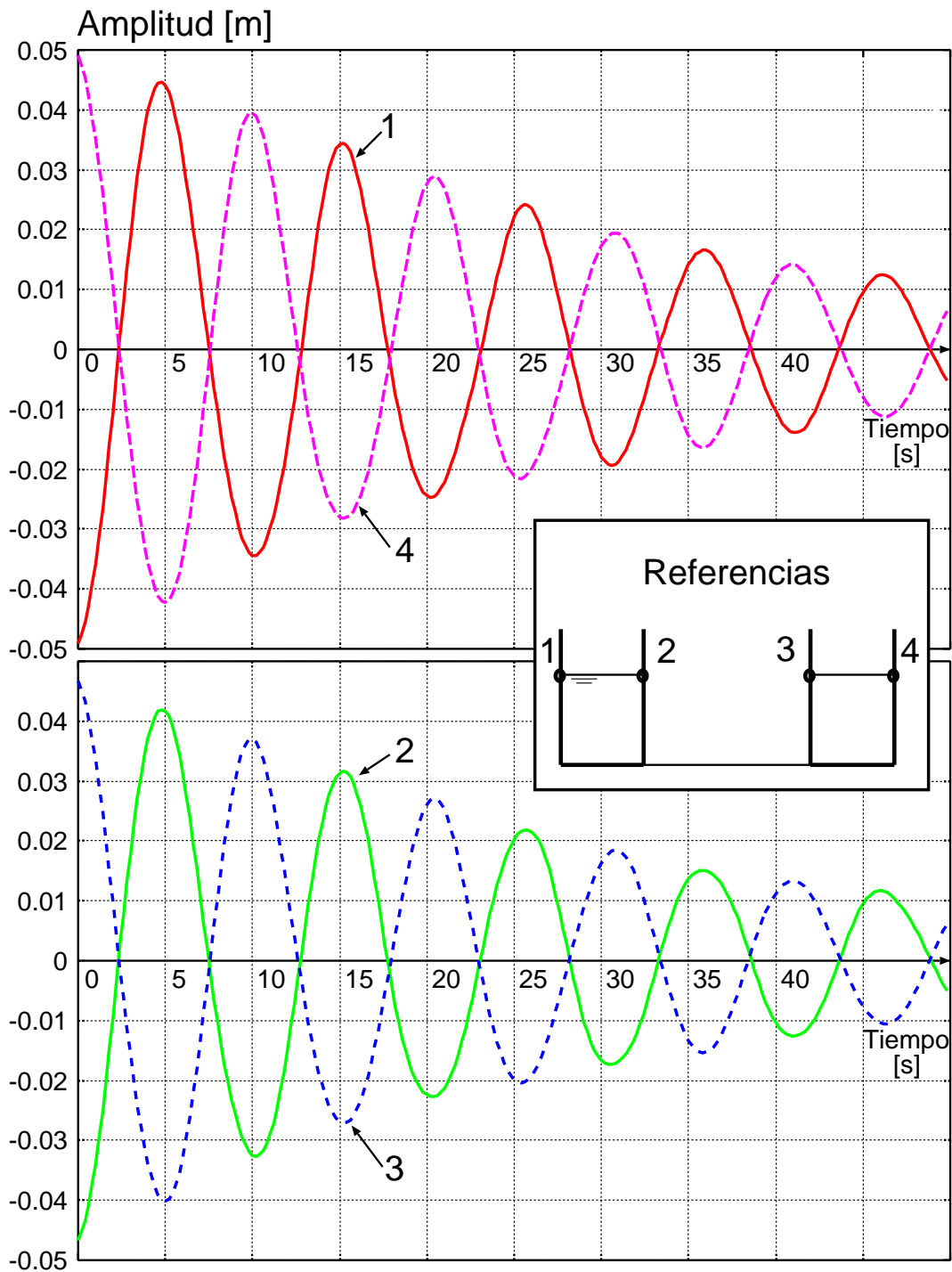


Figura 4.23: Evolución temporal de los desplazamientos de algunos nodos representativos de la malla para el tanque de base anular.

Este fenómeno se observa igualmente en el ejemplo de *sloshing* en el tanque acelerado horizontalmente, Sec. 4.5.2, en el cual el efecto se acentúa con el tiempo, ya que en este caso la amplitud crece. En cambio, no se presenta en el de validación para pequeñas amplitudes de la Sec. 4.5.1, ya que en éste la amplitud es pequeña durante toda la simulación.

Globalmente, se puede mostrar la agitación pesando los desplazamientos de la

superficie libre con una “función de momento”, que calcula la suma de desplazamientos nodales verticales multiplicada por la distancia de los nodos correspondientes al eje del cilindro, permitiendo una estimación del período en el tanque completo como el promedio de las distancias entre ceros de dicha función, que se encuentra representada en la Fig. 4.24. El período de movimiento calculado de esta manera es

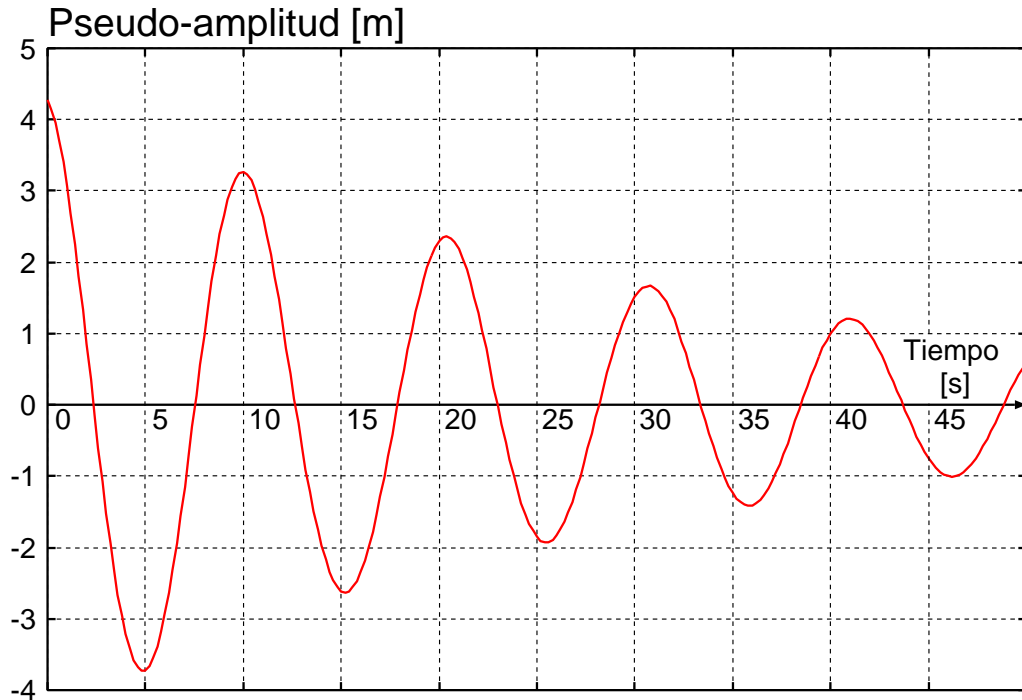


Figura 4.24: Movimientos filtrados de los nodos de la superficie libre para el tanque cilíndrico.

$T_e = 10.33$ s, por lo tanto el error relativo entre la solución numérica viscosa y la inviscida es de menos del 4%.

Distintos experimentos numéricos fueron realizados para estudiar la convergencia del método, tomando el período del movimiento como parámetro principal. Las variables consideradas son el tamaño medio de los elementos h y el paso de tiempo Δt , manteniendo constante el cociente entre ellos. Considerando que la aproximación en elementos finitos aplicada es $O(h^2)$, los resultados fueron usados para realizar una extrapolación de Richardson con la cual se obtuvo el valor asintótico $T_0 = 10.315$ s para $h \rightarrow 0$. La Fig. 4.25 incluye los puntos calculados para realizar esta estimación, así como también el valor de T_0 .

En cuanto a la ejecución del algoritmo, el tiempo determinado para resolver el problema en 13 nodos del *cluster* Geronimo [Aqu07] para la malla refinada de 256000 elementos en 200 pasos temporales fue de 23hs 54min. Luego, se resolvió el problema con 32000 elementos para 100 pasos de tiempo en el *cluster* Aquiles con distinta cantidad de procesadores, siendo los resultados aquellos exhibidos en la Tabla 4.2, incluyendo el aceleramiento y la eficiencia tal como fueron definidos en las Ecs. (4.46) y (4.47).

Como puede verse en la Tabla 4.2, tanto el aceleramiento como la eficiencia determinados en este caso son mayores para la misma cantidad de procesadores que en los respectivos de la Sec. 4.5.3. Nótese además que de ejecutarse el problema en

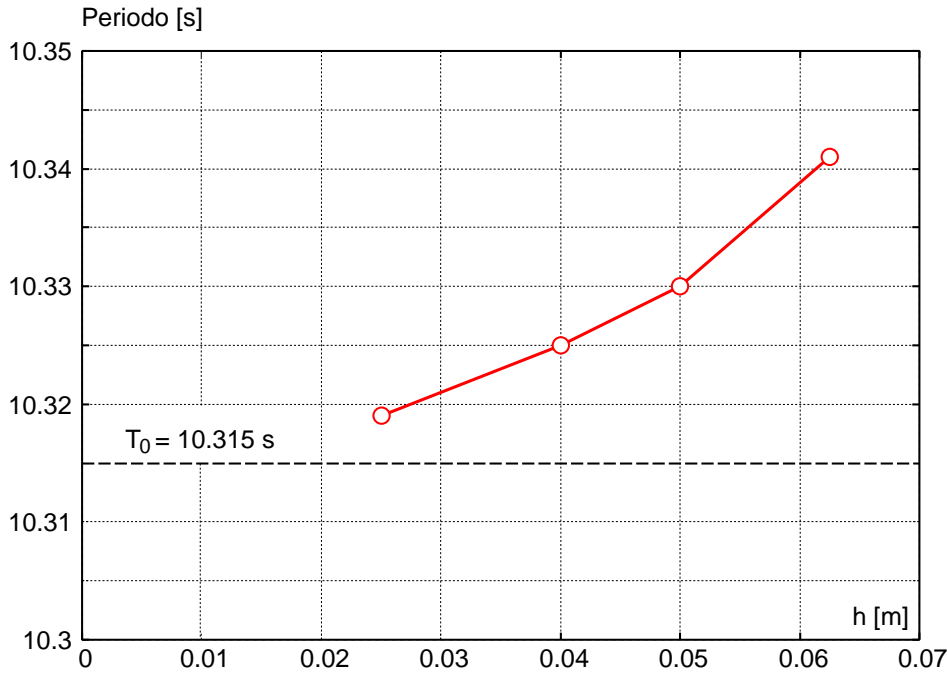


Figura 4.25: Período de movimiento T versus el paso medio de la malla h para el test del cilindro 3D.

p	t_p [s]	t_p [min]	S_p	$E\%$
1	14799	246.65	-	-
2	7844	130.73	1.89	94
4	4750	79.17	3.12	78
8	2911	48.52	5.08	64
16	1883	31.38	7.86	49

Tabla 4.2: Tiempos de ejecución t_p , aceleramiento S_p y eficiencia $E\%$ según el número de procesadores p en el problema agitación cuasi-inviscida 3D.

$p = 8$ procesadores, los resultados se obtienen en un tiempo cinco veces menor que en la ejecución secuencial, es decir, con $p = 1$.

4.5.5. Ejemplo 3D: drenaje central en una pileta

Otro ejemplo 3D para comprobar la capacidad de la metodología para la resolución de flujos con superficie libre consistió en simular un desagüe semejante al de una pileta o bañera, conocido en la literatura como *bath-plug*, cuya dificultad es el control del flujo de ingreso a los fines de mantener un nivel prácticamente constante de líquido en el recinto [BFSDE06], mediante un modelo axisimétrico esquematizado en la Fig. 4.26. Para ello, se programó un nuevo *hook*, adicional al que comunica los procesos de NS y de MMV, cuya función es la de controlar valores relacionados con condiciones de contorno, como el caudal de ingreso de fluido al dominio, con el objetivo de mantener el volumen del dominio constante.

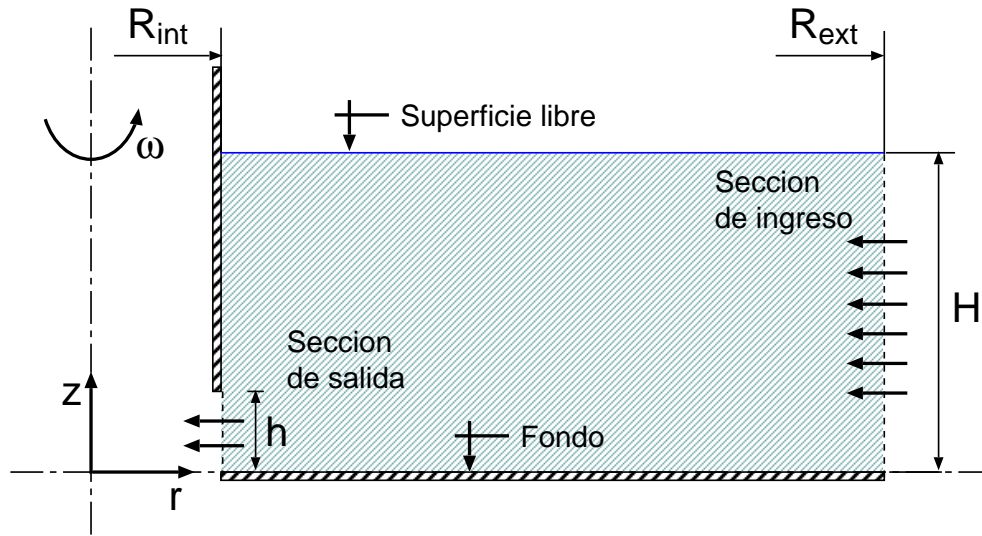


Figura 4.26: Geometría del dominio de flujo: sector del cilindro de sección anular, limitado por la superficie libre, el fondo y una pared rígida en el problema del drenaje central.

4.5.5.1. Descripción del control

El mecanismo implementado determina la tasa de caudal entrante q mediante

$$\dot{q} = -C_{\text{vol}} (V - V_{\text{ref}}); \quad (4.51)$$

donde V es el volumen de fluido actual, V_{ref} el volumen objetivo, C_{vol} es una constante positiva arbitraria que permite la regulación del término variable, siendo $\dot{q} = dq/dt$. De esta forma, el caudal q disminuye cuando $(V - V_{\text{ref}}) > 0$ y se incrementa en caso contrario, en una proporción dada por C_{vol} .

Además de los parámetros antes mencionados, hay restricciones adicionales sobre el caudal de ingreso, tales como valores máximo (q_{max}) y mínimo (q_{min}), el primero de ellos para mantener el crecimiento acotado y el segundo para evitar la inversión en el sentido de la velocidad en la sección de ingreso.

Una vez que q es calculado, debido a que el tamaño de la sección de ingreso puede ser modificado debido al proceso de actualización de la malla, la velocidad radial de ingreso v_r es calculada tras conocer la coordenada en dirección z del nodo que define la altura de la entrada, dentro del mismo *hook*.

Esta propuesta de control muestra algunas desventajas, entre ellas el hecho de contar con información de apenas un paso de tiempo anterior para determinar los parámetros actualizados para el paso siguiente. También es preciso realizar algunas pruebas con el fin de obtener un valor apropiado para el coeficiente C_{vol} , que resulta sensible al valor del paso de tiempo. Otros puntos clave son los valores iniciales para las variables a tener en cuenta, tales como el caudal inicial q_{mit} o el volumen objetivo V_{ref} , aunque éstos pueden adoptarse en función de análisis similares llevados adelante sin control. Sin embargo, la aplicación de la metodología a algunos ejemplos muestra que pueden realizarse mejoras, como la incorporación de términos de mayor orden en la Ec. (4.51), especialmente en cuanto a lograr los objetivos con mayor rapidez, lo cual redundaría en menores costos computacionales.

4.5.5.2. Aproximación invíscida

Varios autores han propuesto soluciones numéricas y analíticas para problemas tales como el clásico *bath plug* o recipientes con un drenaje inferior [FH95], en el cual la superficie libre del flujo se afecta por los efectos de la velocidad circunferencial que se incrementa al acercarse al eje vertical, mostrando la formación del vórtice típico, aunque la singularidad sobre dicho eje hace que la resolución de este problema sea muy difícil desde el punto de vista del MEF. Debido a esto, se adoptó un dominio de estudio que consiste en un sector de reservorio para un ducto de succión que se encuentra sobre el eje del vórtice y evita la singularidad. La velocidad de ingreso se impone con una componente circunferencial predominante, lo que genera un vórtice en el dominio y produce la deformación de la superficie libre.

En el caso no viscoso, sin velocidad radial y considerando un referencial en coordenadas cilíndricas r, φ, z , cualquier velocidad circunferencial $v_\varphi(r)$ es solución al problema del vórtice infinito. Sin embargo, cuando hay una pequeña componente radial de la velocidad $v_r(r)$ las capas de fluido circunferenciales deben mantener su cantidad de movimiento angular y, como resultado de ello, la velocidad circunferencial $v_\varphi(r)$ aumenta a medida que $r \rightarrow 0$. Si se considera un vórtice potencial con

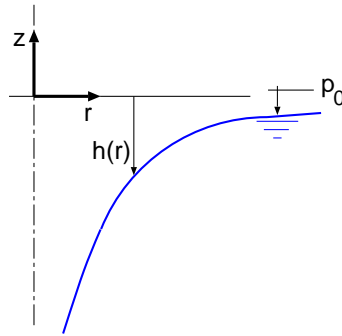


Figura 4.27: Esquema de un vórtice potencial de eje vertical con superficie libre.

superficie libre bajo la acción de un campo gravitacional como el de la Fig. 4.27, la posición vertical $h = h(r)$ de la superficie libre con respecto al plano de equilibrio hidrostático $z = 0$ está dada por [Spu97, BFSDE06]:

$$h(r) = \frac{v_0^2}{2g} \frac{r_0^2}{r^2}; \quad (4.52)$$

donde v_0 es la velocidad circunferencial a una distancia radial r_0 dada, medida a partir del eje vertical z y g es la aceleración de la gravedad.

La solución analítica considerada en la Ec. (4.52) corresponde al caso límite en el cual tanto la viscosidad como v_r tienden a cero. Para el experimento numérico con fluido viscoso es preciso imponer una velocidad radial no nula, ya que de otra forma el fluido tendería al reposo. A los fines de este ejemplo, como aproximación a la velocidad radial nula, se adopta v_r pequeña en relación a v_φ .

En esas condiciones, el ejemplo consiste en la simulación numérica de un vórtice vertical axisimétrico con superficie libre de un fluido viscoso e incompresible bajo la acción de un campo gravitacional, con presión fija en la sección de ingreso y caudal de ingreso incógnita para un volumen constante de fluido en el dominio. El perfil resultante empleando la metodología de control es comparado con el perfil teórico en el límite invíscido.

4.5.5.3. Simulación

El ejemplo resuelto con MEF consiste en la simulación axisimétrica de un vórtice con entrada de fluido continua dada por una velocidad de componentes circunferencial y radial, con movimiento circunferencial dominante y una descarga propuesta sobre una sección de la superficie cilíndrica interna, véase la Fig. 4.26.

La geometría del ejemplo se describe con ayuda de la Fig. 4.28. El dominio del flujo es un cilindro de sección anular cuyos radios interno y externo son $R_{\text{int}} = 1$ m y $R_{\text{ext}} = 6$ m, respectivamente, con altura inicial $H = 1.40$ m, al igual que la altura inicial sobre la derecha de la figura, y una sección de salida de $h = 0.20$ m de alto en la superficie cilíndrica interna. Sobre esta salida, las condiciones de contorno simulan la presencia de una pared rígida, que se asume como parte del sistema de descarga.

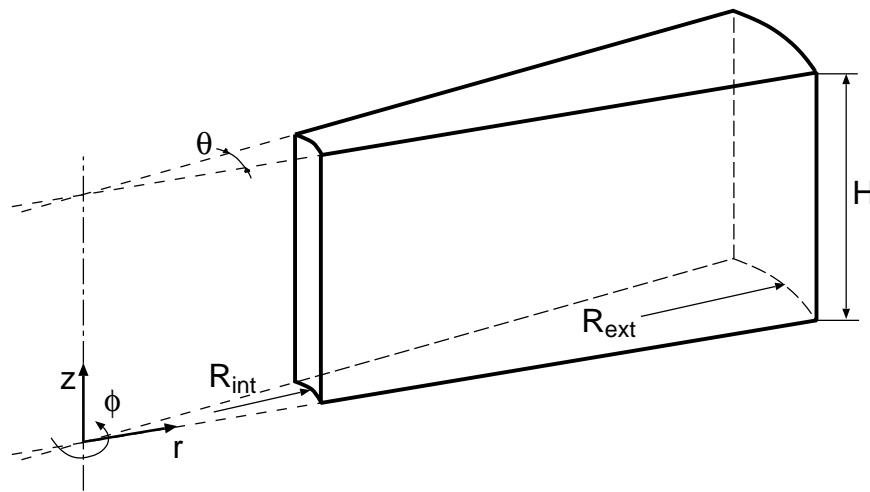


Figura 4.28: Sector de cilindro anular modelado para el vértice axisimétrico.

El fluido, viscoso e incompresible, se modela con viscosidad cinemática $\nu = 0.001$ m²/s y densidad $\rho = 1$ kg/m³, en tanto que $g = 0.16$ m/s² en dirección $-z$.

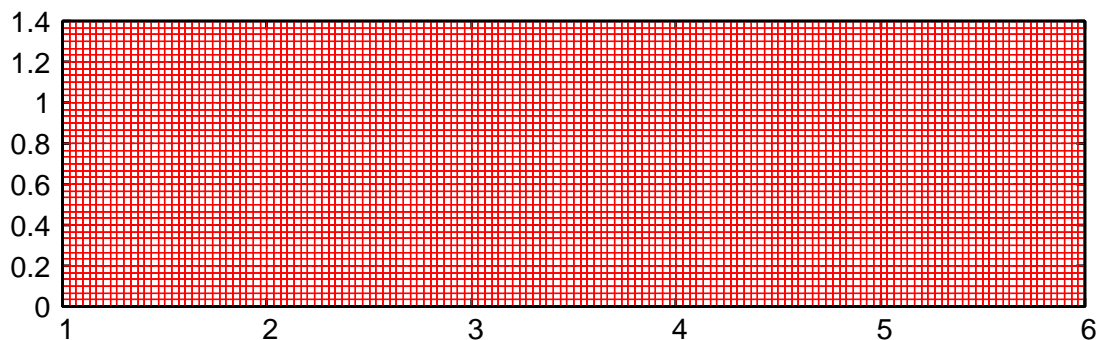


Figura 4.29: Malla 2D para la generación del modelo 3D del fluido mediante extrusión; dimensiones en m.

La simetría axial del ejemplo permite la construcción del modelo de elementos finitos como una capa de elementos extrudados en torno al eje z a partir de una malla bidimensional de cuadrángulos, representada en la Fig. 4.29, dando origen a un sector de cilindro de base anular caracterizado por $\theta = 5^\circ$ de amplitud angular y

elementos hexahédricos de 8 nodos empleados para el análisis de NS, en tanto que para la instancia de movimiento de malla se emplearon tetrahedros, definidos de manera tal que por cada elemento del fluido hay cinco tetrahedros, con el objeto de aplicar la estrategia de la Sec. 4.1.3.2.

Debido a que las velocidades horizontales son importantes en relación a la de la superficie libre, es preciso realizar una estabilización, que en este caso fue realizada mediante el operador dado en la Sec. 4.3.1, con un valor bajo para el coeficiente de influencia: $\gamma = 0.1$.

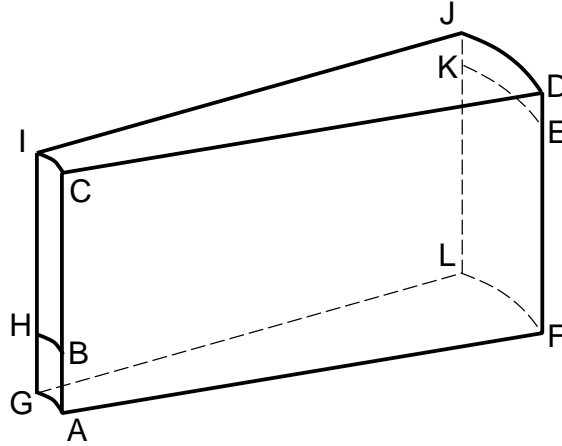


Figura 4.30: Referencias para la descripción de las condiciones de contorno en el ejemplo del vórtice 3D.

La resolución numérica de la instancia de NS requiere las siguientes condiciones de contorno, siguiendo las referencias de la Fig. 4.30:

$$\begin{aligned}
 p &= p_{\text{out}} && \text{en la salida, AGHB;} \\
 v_r = v_t &= 0 && \text{en la pared interior, BHIC;} \\
 \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} &= 0 && \text{sobre el fondo, AFLG;} \\
 \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} &= 0 && \text{para el sector sobre la entrada, KEDJ;} \\
 \mathbf{v} &= \mathbf{v}_i && \text{en la entrada, LFEK;}
 \end{aligned} \tag{4.53}$$

siendo p_{out} la presión propuesta en la sección de salida y \mathbf{v}_i la velocidad de ingreso, definida por su magnitud en dirección radial $|v_r|$ y el cociente entre entre ésta y la magnitud de la velocidad en dirección tangencial $|v_t|$, es decir, el ángulo de incidencia, en este caso de 100° medidos a partir del eje r . La condición sobre la superficie KEDJ debe permitir el ascenso y descenso de la superficie libre sobre la sección de ingreso, pues de otro modo cualquier perturbación que pudiera producirse en el interior del dominio y desplazarse hacia la sección de ingreso, dado el carácter de flujo subcrítico en la entrada, produciría un error en la actualización de la malla debido a una deformación localizada excesiva. En cuanto al fondo, AFLG, el patrón de flujo a esa profundidad es horizontal, ya que la parte inferior de la sección de ingreso coincide con la sección de salida, y en caso de imponerse $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ sería necesario un refinamiento importante para la resolución del flujo en la región. Las condiciones sobre BHIC fueron propuestas en principio como de deslizamiento perfecto ($v_r = 0$), pero dadas las altas velocidades tangenciales en las adyacencias de dicha superficie,

que perturbaban fuertemente la SL, se propuso la condición $v_r = v_t = 0$, en tanto que la componente vertical de la velocidad debe mantenerse libre para permitir el desplazamiento de la interfase.

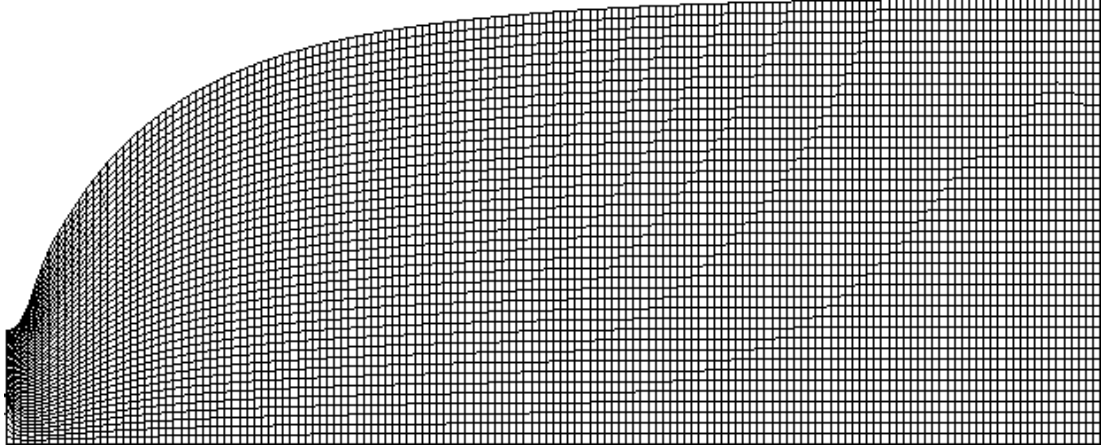


Figura 4.31: Malla deformada para $t = 40$ s. Nótese la gran magnitud de los desplazamientos de la superficie libre en adyacencias de la pared del cilindro interior, y la consiguiente adaptación de la malla.

La axisimetría es impuesta mediante condiciones de contorno periódicas entre los nodos de las caras ACDF y LJIG, teniendo en cuenta el ángulo θ entre los planos de dichas caras. Estas restricciones implican que las componentes radiales, tangenciales y verticales de \mathbf{v} en cada nodo de ACDF son las mismas que en los correspondientes nodos de LJIG, al igual que la presión.

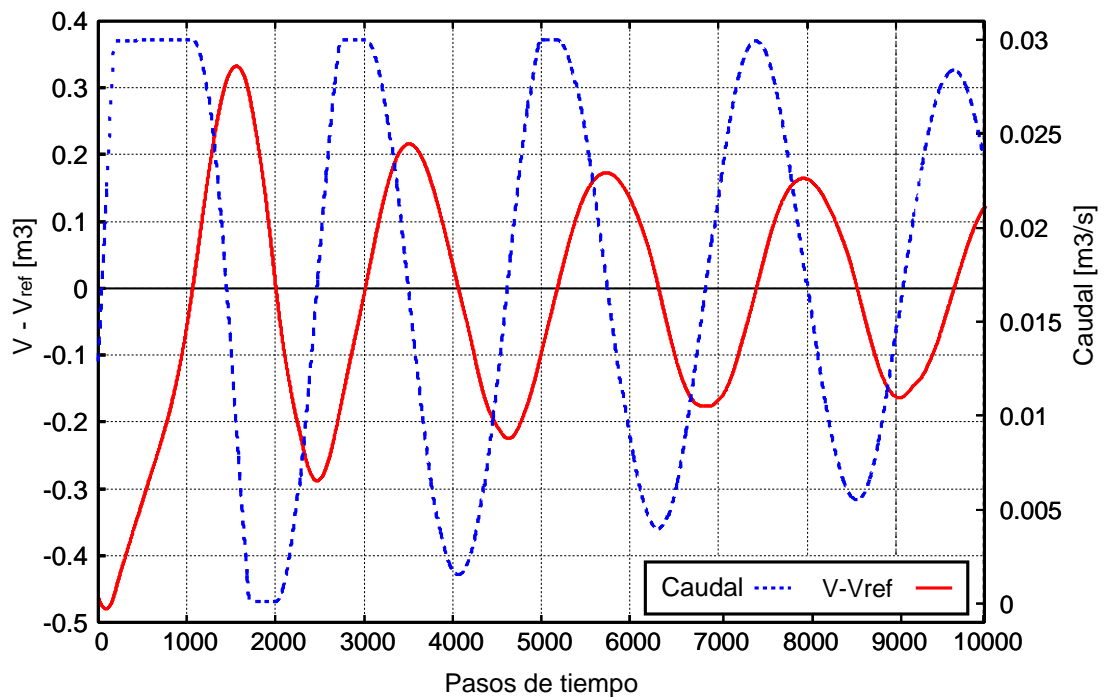


Figura 4.32: Curvas de volumen y variación de caudal para el ejemplo resuelto, en los primeros 10000 pasos de tiempo del análisis.

Las condiciones de contorno para el movimiento de la malla son de desplazamiento nulo en la sección de salida (AGHB), desplazamiento horizontal nulo para BHIC, LFDJ, ACDF y LJIG, pero con libertad de desplazamiento vertical, en tanto que la superficie libre se desplaza en magnitud calculada en el *hook* a partir de los resultados de NS. Tanto los nodos de la SL como los de las caras verticales del dominio (BHIC, LFDJ, ACDF y LJIG) son libres de desplazarse en dirección estrictamente vertical, es decir, sobre una espina $\hat{s}_j \parallel z$.

La condición inicial para el análisis es el estado hidrostático para la superficie libre ubicada en el plano $z = 1.40$ m, dando un volumen inicial $V = 2.14$ m³. El paso de tiempo se adoptó en $\Delta t = 0.2$ s, y en la sección de salida se propuso $p_{\text{out}} = -0.045$ Pa.

Los parámetros para el control son un volumen objetivo $V_{\text{ref}} = 2.60$ m³, con $C_{\text{vol}} = 1 \times 10^{-3}$ 1/s², caudal inicial $q_{\text{init}} = 1 \times 10^{-2}$ m³/s, con $q_{\text{max}} = 3 \times 10^{-2}$ m³/s y $q_{\text{min}} = 1 \times 10^{-4}$ m³/s como cotas superior e inferior para q , respectivamente. Los valores iniciales de q y V_{ref} se obtuvieron de pruebas anteriores realizadas sobre el mismo modelo, sin la aplicación del control.

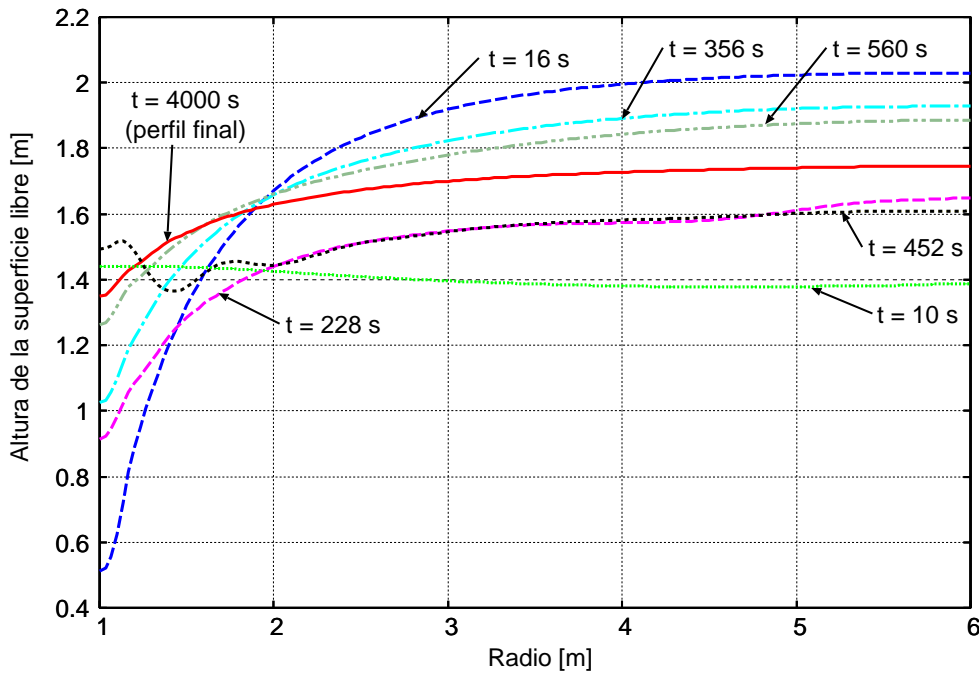


Figura 4.33: Perfiles de superficie libre calculados en distintos instantes.

La resolución numérica, realizada en 10 procesadores del *cluster* Aquiles para una malla de 12986 nodos y 6300 hexahedros para el problema del fluido, con suavizado de la superficie libre cada cinco pasos de tiempo sobre los 150 elementos de SL, insumió prácticamente 28 hs para avanzar 10000 pasos temporales, es decir que cada uno de ellos requirió unos 10 s.

4.5.5.4. Resultados

La actualización de la malla se realizó aplicando la técnica de minimización de distorsión de los elementos, empleando tetrahedros y los parámetros $C_v = 0$, $C_q = 1$ y $n = -1$ en la Ec. (4.17), ya que la alternativa de actualización pseudoelástica

de la Sec. 4.1.3.1 no es capaz de tolerar los desplazamientos que se producen en la superficie libre en la región cercana al cilindro interior, especialmente en los primeros pasos de tiempo. La malla deformada en un instante intermedio se muestra en la Fig. 4.31.

La evolución del volumen y del caudal de ingreso durante los primeros 10000 pasos de tiempo del análisis, representados en la Fig. 4.32, muestra cómo opera el mecanismo de control sobre los parámetros. En este caso, el volumen inicial era menor que V_{ref} , lo cual hizo crecer q hasta igualar la cota superior q_{max} , valor que se mantuvo hasta registrar $V > V_{\text{ref}}$, momento en que q comienza a disminuir. Este comportamiento se repitió el resto del análisis, aunque con menores amplitudes. Nótese que las cotas superior e inferior sobre el caudal fueron efectivas especialmente al principio del estudio, lo cual redundó en un ahorro en los tiempos de análisis.

Los desplazamientos de la superficie libre fueron mayores al principio del estudio, lo cual es coherente con las variaciones de volumen ya comentadas. En la Fig. 4.33 se grafican varios perfiles de la superficie libre para los tiempos indicados, la mayoría de ellos en coincidencia con máximos o mínimos en V , mostrando la relación entre éste y las deformaciones que afectan la superficie libre y, en consecuencia, el proceso de actualización de la malla.

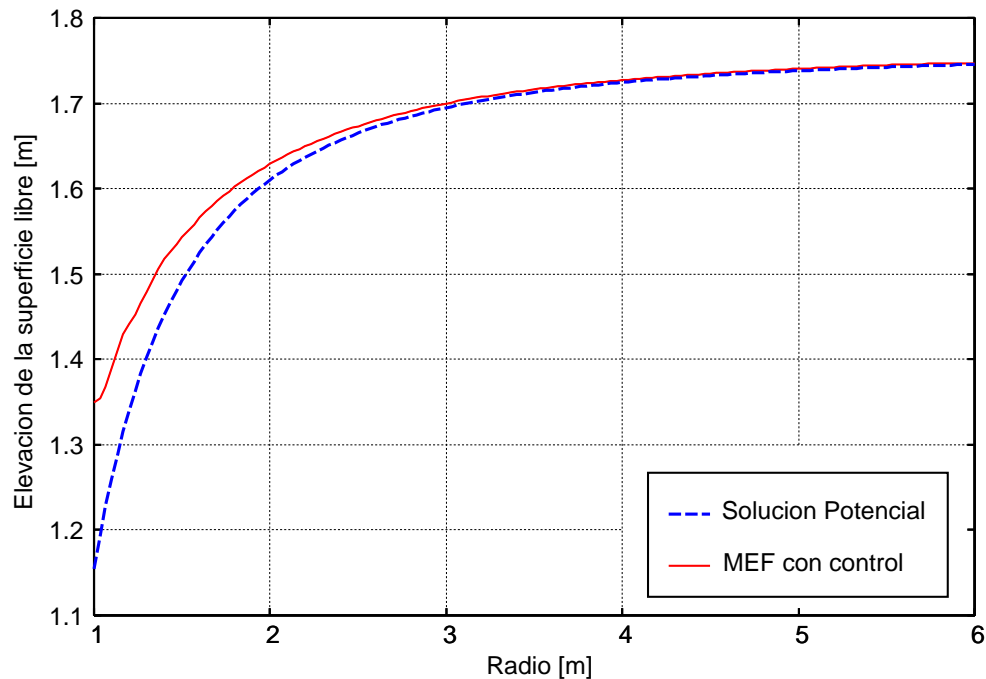


Figura 4.34: Perfil final de la superficie libre obtenida en el análisis con elementos finitos, superpuesta con la solución para el vórtice potencial.

Tras 20000 pasos de tiempo, el volumen logrado tiene una diferencia menor del 1% en relación al volumen objetivo y la superficie libre muestra un perfil estacionario, graficado en la Fig. 4.34 junto con la curva teórica para flujo potencial del vórtice infinito de la Ec. (4.52), con una velocidad de ingreso circunferencial $v_0 = 0.0125$ m/s. El error calculado al comparar las curvas es $e = 13\%$ en $r = 1$ m, pero desciende a menos del 1% para $r > 2$ m. La mayor diferencia en las cercanías de $r = 1$ m se atribuye al hecho de que el perfil de referencia es calculado para un flujo invíscido, sin paredes rígidas en el contorno interior y velocidad radial nula.

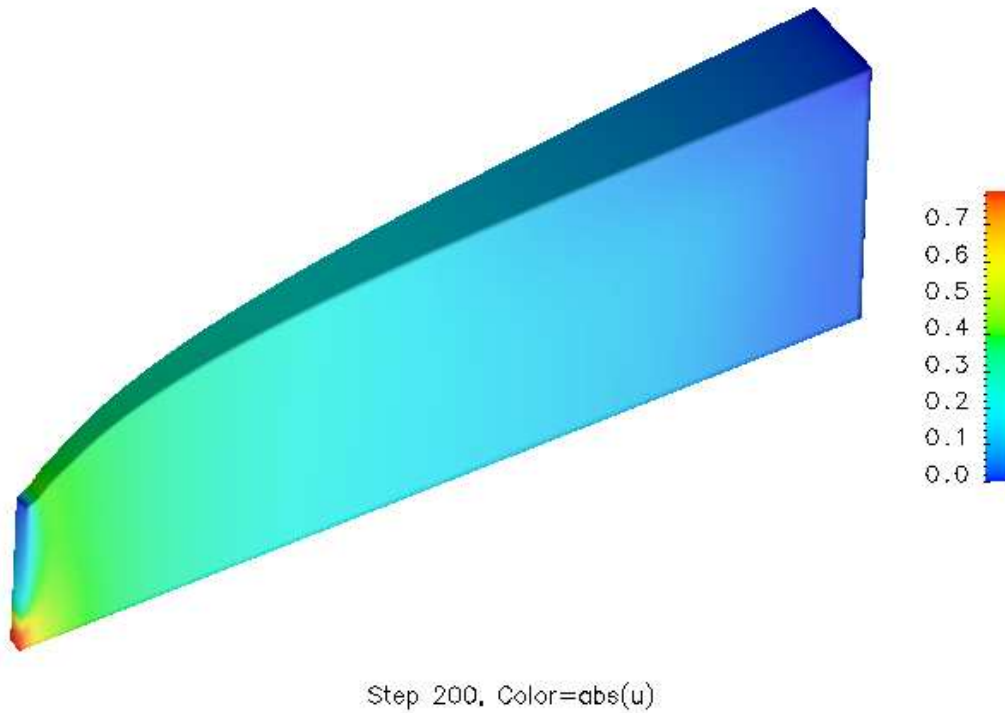


Figura 4.35: Módulo de la velocidad $\|\mathbf{v}\|$ en el dominio de análisis para un paso de tiempo intermedio, en m/s, para el problema del vórtice 3D.

La Fig. 4.35 muestra la magnitud de \mathbf{v} en un paso de tiempo intermedio, permitiendo apreciar el incremento de la velocidad en las zonas cercanas a R_{int} debido al aumento de la componente circunferencial de la velocidad y al escaso tamaño de la sección de salida. La excepción está dada por los bajos valores apreciados sobre la pared ubicada en el radio interior debido a las condiciones de borde allí establecidas.

Como comentario final, es oportuno hacer notar que la selección de los parámetros físicos, especialmente la aceleración gravimétrica g y la densidad ρ no obedecen a limitaciones del método, teniendo en cuenta que, en definitiva, el flujo se caracteriza mediante los parámetros adimensionales Fr y Re .

En el caso de la densidad, para la resolución de flujos incompresibles y viscosos con SL, aparece como factor multiplicativo en la ecuación de cantidad de movimiento y no interviene en la definición de los números adimensionales de referencia. Por ello, si se decide modificar la magnitud de la densidad empleando ρ' en lugar de ρ , únicamente los resultados en presión son afectados por ello, hecho que se soluciona al multiplicar el valor obtenido por la relación de densidades, $p' = (\rho'/\rho)p$.

Para el presente ejemplo, se adoptó $g = 0.16 \text{ m/s}^2$ y $\nu = 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$. Tomando como escala de longitud la altura del pelo de agua en el drenaje $h = 0.2 \text{ m}$, y para la velocidad, la velocidad absoluta media a la salida $U = 0.75 \text{ m/s}$, los números adimensionales son entonces $Fr = 4.19$ y $Re = 150$. Este problema podría reproducirse, por ejemplo, con aceite de oliva ($\nu = 1.08 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$) para $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ y los mismos valores de Fr y Re , con $h = 0.045 \text{ m}$ y velocidad a la salida de $U = 2.80 \text{ m/s}$.

Capítulo 5

Metodologías preliminares en captura de interfase

El desarrollo de un método de captura de interfase surgió a través del interés en la resolución de problemas con grandes deformaciones del dominio del líquido, en los cuales la superficie libre sufre roturas o se dobla sobre sí misma, perdiendo unicidad, y por ello resulta imposible abordarlos con el método de seguimiento de interfase presentado en el Cap. 4.

Si bien el método más efectivo basado en una función de nivel se explica detalladamente en el Cap. 6, en el presente se describen dos propuestas preliminares para esa aproximación. La primera de ellas, Sec. 5.1, consiste en una modificación a la ecuación de transporte de la función de nivel ϕ , cuyo objetivo es la eliminación de un paso de renormalización. La segunda, dada en la Sec. 5.2, fue desarrollada como paso previo a la renormalización descrita en la Sec. 6.1.3, pero empleando un término de penalidad discontinuo para el control de masa en lugar del adoptado, que se tratará en la Sec. 6.1.3.

5.1. Advección auto-renormalizada

5.1.1. Estado en el fluido

La resolución del problema del flujo de fluido en el dominio dado es realizada sobre las ecuaciones de NS incompresibles, que son las Ecs. (3.16),

$$\begin{aligned}\rho(\phi(\mathbf{x}, t)) (\partial_t \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} - \mathbf{f}) - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} &= 0 ; \\ \nabla \cdot \mathbf{v} &= 0 ;\end{aligned}$$

junto con las siguientes a ésta. Debido a que se trata de una metodología de captura de interfase, coexisten dos fluidos para los cuales es necesario interpolar las propiedades correspondientes, como ser la densidad ρ y la viscosidad dinámica μ , en este caso mediante:

$$\begin{aligned}\rho(\phi) &= \frac{1}{2} \left[\left(1 + \tilde{H}(\phi)\right) \rho_l + \left(1 - \tilde{H}(\phi)\right) \rho_g \right] ; \\ \mu(\phi) &= \frac{1}{2} \left[\left(1 + \tilde{H}(\phi)\right) \mu_l + \left(1 - \tilde{H}(\phi)\right) \mu_g \right] ;\end{aligned}\tag{5.1}$$

para las cuales $\tilde{H}(\phi)$ es:

$$\tilde{H}(\phi) = \tanh\left(\frac{\pi\phi}{\tilde{\varepsilon}}\right); \quad (5.2)$$

con $\tilde{\varepsilon} = 0.5$. Mayores detalles acerca de la resolución del problema del fluido con estas expresiones son dados en la Sec. 6.1.1.

5.1.2. Advección de la función de nivel

En lugar del problema de advección pura dado en la Ec. (2.6),

$$\partial_t\phi + \mathbf{v} \cdot \nabla\phi = 0; \quad (5.3)$$

una formulación distinta es introducida con la intención de regularizar el campo de ϕ al mismo tiempo que se realiza el transporte de $\phi = 0$ que, en definitiva, es lo que interesa. Para ello, se incorporan a dicha ecuación dos términos, indicados en el miembro derecho de la siguiente expresión,

$$\partial_t\phi + \mathbf{v} \cdot \nabla\phi = C_r \phi (\phi^2 - \phi_{\text{ref}}^2) - \kappa(\phi)\Delta\phi; \quad (5.4)$$

que resultan nulos sobre la interfase y refuerzan la propiedad de $\phi = \pm\phi_{\text{ref}}$ fuera de la franja de interpolación, en tanto que las condiciones de contorno son

$$\phi = \bar{\phi} \quad \text{sobre } \Gamma_{\text{in}}; \quad (5.5)$$

siendo la sección de ingreso $\Gamma_{\text{in}} = \{\Gamma \mid \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} < 0\}$. El problema resultante es uno de advección con dos términos adicionales: uno reactivo y otro difusivo. La constante arbitraria C_r , denominada parámetro de regularización, está dada en unidades de tiempo⁻¹, Δ es el operador laplaciano y $\kappa(\phi)$ es un parámetro de difusión que se calcula como

$$\kappa(\phi) = \kappa_{\text{ref}} \min(|\phi|/\phi_{\text{ref}}, 1); \quad (5.6)$$

es decir que actúa sobre casi todo el dominio pero tiende a cero cerca de Γ_{I} , con la constante κ_{ref} también adoptada por el usuario.

Los valores de referencia son $\phi_{\text{ref}} = 1$ y

$$\kappa_{\text{ref}} = (\varepsilon/h)^2 h^2 C_r; \quad (5.7)$$

en unidades de longitud²/tiempo, donde h es un tamaño característico de elemento y ε/h es un indicador de cuántos elementos están incluidos en la mitad de la región de interpolación para una longitud ε propuesta, que se mantendrá en ese orden de magnitud a lo largo del análisis.

El problema planteado por la Ec. (5.4) es resuelto numéricamente mediante la implementación de un elemento finito especial denominado *smoke*, programado al efecto como parte del código PETSc-FEM. Este elemento es básicamente un elemento de advección al cual se le incorporan los términos reactivo y difusivo, que es resuelto empleando el *solver* de ecuaciones de advección-difusión mediante el MEF, con estabilización tipo *streamline upwind/Petrov-Galerkin* (SUPG) [BH82]. En el caso de adoptar $C_r = 0$, el programa se limita a resolver el problema de la Ec. (5.3), también estabilizado con SUPG. Cabe destacar que el método está programado de manera tal que tanto problemas 2D como 3D pueden ser fácilmente resueltos. Esta metodología ha sido presentada en Battaglia *et al.* [BSDE08].

Un caso de prueba para estimar el desempeño de esta estrategia se muestra en la Sec. 5.1.4.1, donde el elemento *smoke* es comparado con los resultados obtenidos con una advección sin regularización de ϕ , esto es, con $C_r = 0$.

5.1.3. Esquema de acoplamiento débil

El algoritmo propuesto para la resolución numérica de cada uno de los problemas establecidos en las Secs. 6.1.1 y 6.1.2 consiste en un acoplamiento débil entre los dos programas de elementos finitos cuyo procedimiento iterativo es esquematizado en la Fig. 5.1. Estos dos programas, que se encuentran ejecutándose de manera alternada, pueden a su vez ser ejecutados en paralelo, es decir, cada uno de ellos en varios procesadores, que pueden ser compartidos por ambos *solvers*. Por ello, también en este caso se habla de una resolución multiparalela.

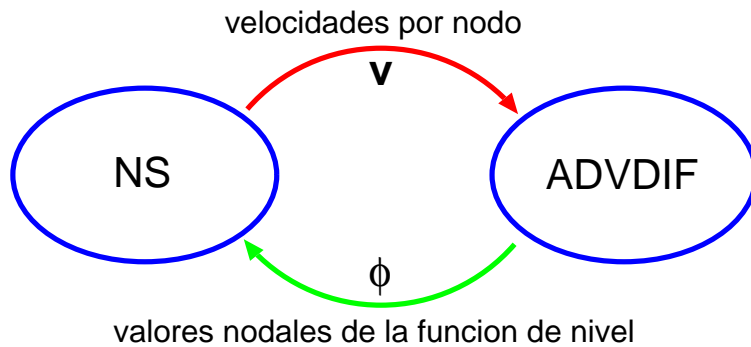


Figura 5.1: Acoplamiento débil entre los procesos de NS y ADVDF para resolver el problema de la función de nivel con flujo de fluido.

Tanto el módulo NS como el ADVDF requieren condiciones iniciales para el comienzo de las iteraciones, pero a partir de la primera de ellas la tarea de cada módulo es la que sigue:

- **NS:** resuelve el problema de flujo del fluido de la Ec. (3.16) para un instante de tiempo t^n después de n pasos de tiempo, considerando $\rho = \rho(\phi(\mathbf{x}, t))$ y $\mu = \mu(\phi(\mathbf{x}, t))$, es decir, el campo de ϕ es dato; una vez que el análisis del paso de tiempo ha finalizado, se transmiten las velocidades del fluido calculadas para todo el dominio Ω , dadas por nodo, a la siguiente etapa;
- **ADVDF:** resuelve la ecuación de advección-difusión-reacción en tiempo t^n , que dependiendo del valor dado a C_r será la Ec. (5.3) o la Ec. (5.4), tomando como dato las velocidades nodales obtenidas del NS y devolviendo los nuevos valores de la función de nivel, también por nodos, para así permitir el cálculo del estado del fluido en t^{n+1} .

En caso de ser necesario incorporar un paso de reinicialización, el algoritmo iterativo incluiría una tercer instancia que procesaría los valores nodales de ϕ obtenidos de la etapa de ADVDF, aunque no necesariamente en todos los pasos de tiempo.

5.1.4. Ejemplos de evaluación

5.1.4.1. Disco ranurado

La efectividad del procedimiento de advección es evaluada sobre el disco de Zalesak [Zal79], que es tomado como referencia por numerosas publicaciones acerca de métodos de captura de interfase [DLFP06, EC07, GNNB08, Her08, MBD06,

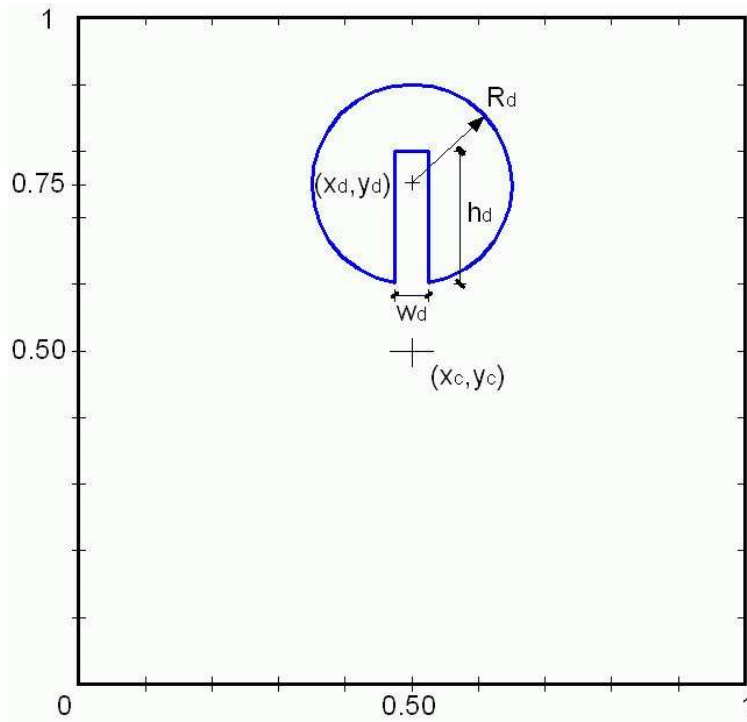


Figura 5.2: Dominio y forma de la curva de $\phi = 0$ para el problema del disco de Zalesak.

[RK98, SP00]. La prueba consiste en someter un disco ranurado definido por una curva cerrada de $\phi = 0$ a un campo de velocidades dentro de un dominio cuadrado, que puede verse en la Fig. 5.2. El círculo es de $R_d = 0.15$ m de radio, centrado en $(x_d, y_d) = (0.5, 0.75)$ m, y la ranura es de $w_d = 0.05$ m de ancho y de $h_d = 0.25$ m de altura. La velocidad con la cual se desplaza ϕ , dada en sus componentes cartesianas, es:

$$\begin{aligned} v_x &= 2\pi (y - y_c); \\ v_y &= -2\pi (x - x_c); \end{aligned} \quad (5.8)$$

i.e., constituye una rotación rígida en torno al punto $(x_c, y_c) = (0.5, 0.5)$ m.

Se analiza entonces el campo de ϕ una vez que la figura ha completado una revolución en torno a (x_c, y_c) , para un tiempo final $t_f = 1$ s y un paso de tiempo de $\Delta t = 1/(200\pi)$ s ≈ 0.0016 s. El estado final, a menos de los errores debidos al transporte de la función de nivel, debe ser igual al de la condición inicial.

Caso	C_r [s ⁻¹]
A	0
B	1
C	10

Tabla 5.1: Casos evaluados para el problema del disco ranurado.

El problema fue resuelto sobre una malla estructurada y uniforme compuesta por 80000 elementos triangulares lineales, considerando los de la Tabla 5.1.

El parámetro de difusión artificial κ_{ref} es adoptado como en la Ec. (5.7). Los cambios de forma de la curva de nivel cero para los tres casos son representados

en la Fig. 5.3, donde es posible identificar las debilidades comunes, tales como el suavizado de las esquinas de la ranura. El caso A resulta ser el más difusivo, como puede apreciarse en la parte superior de la ranura, en tanto que el caso C evidencia una especie de atraso, esto es, como si la velocidad de rotación fuera menor que la impuesta.

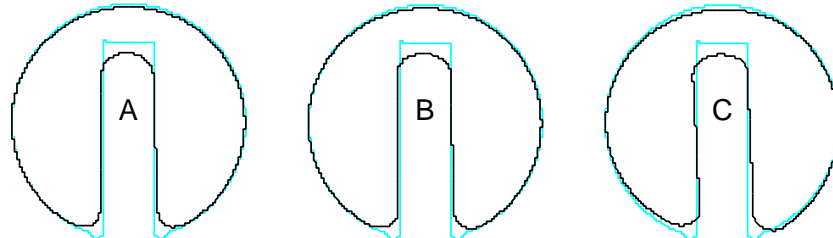


Figura 5.3: Estados iniciales (trazo claro) y finales (trazo negro) en los casos A, B y C para el disco de Zalesak.

En lo relativo a conservación del área de la región $\phi > 0$, esto es, el interior de la forma, hay pocas diferencias entre las alternativas analizadas, que registran las siguientes pérdidas: $\Delta A_A = 1.9\%$, $\Delta A_B = 1.9\%$ y $\Delta A_C = 2.8\%$.

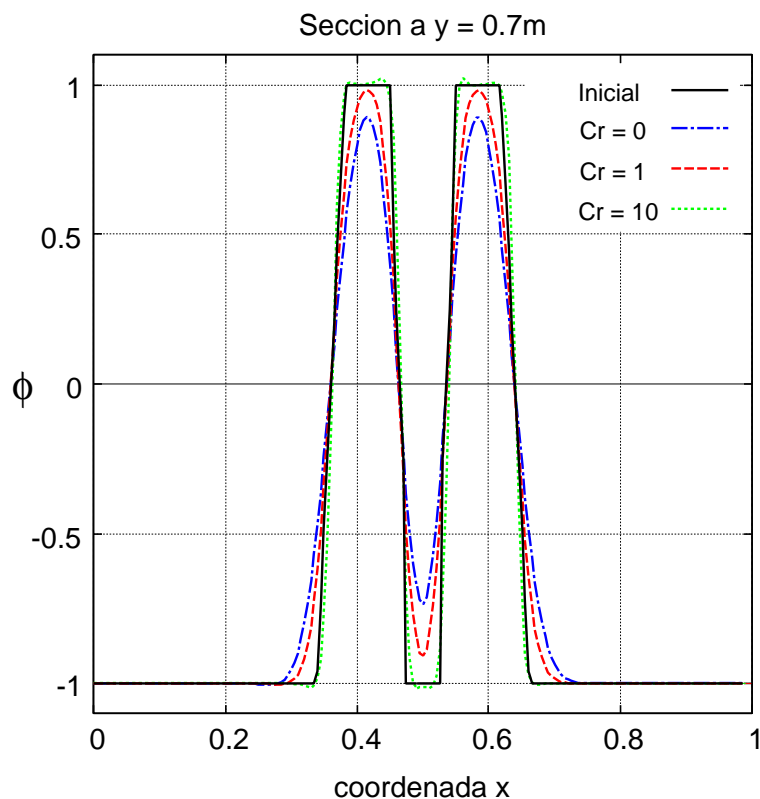


Figura 5.4: Perfiles inicial y final de ϕ para el problema del disco de Zalesak: sección en $y = 0.70$ m.

Además de la forma plana de la curva de $\phi = 0$ y la conservación de masa, se evalúan otros aspectos con el fin de concluir si el elemento *smoke* es conveniente para la advección de la función de LS. Por ejemplo, en la Fig. 5.4 se representan los

perfiles de ϕ obtenidos en una sección a $y = 0.70$ m para los casos A, B y C. Dichas curvas muestran que, aún cuando $\phi = 0$ es bien descripta, la amplitud de la función de LS se ve reducida no sólo en su máximo positivo sino también en la amplitud para $x \approx 0.5$ m. Esta situación también se presenta en el caso B, aunque los picos no se ven tan disminuidos como en el caso anterior. Finalmente, para $C_r = 10 \text{ s}^{-1}$, la curva inicial está bien descripta, pero pueden apreciarse pequeños *undershoots* y *overshoots* en $\phi = \pm 1$. La importancia de este análisis radica en el hecho de que el elemento *smoke* debe emplearse para advectar ϕ , que a su vez es utilizada por el solver de NS para definir las propiedades del fluido en el punto, pesando las del líquido y la del gas según la Ec. (5.1). Es por ello que las imprecisiones en los valores de la función de LS conllevan resultados imprecisos en el problema de flujo del fluido y la falla de la metodología, teniendo en cuenta la precisión.

Dado que ninguna de las alternativas muestra un comportamiento completamente satisfactorio, es clara la necesidad de una instancia de reinicialización sobre el campo de la función de nivel.

5.1.4.2. Agitación de pequeña amplitud

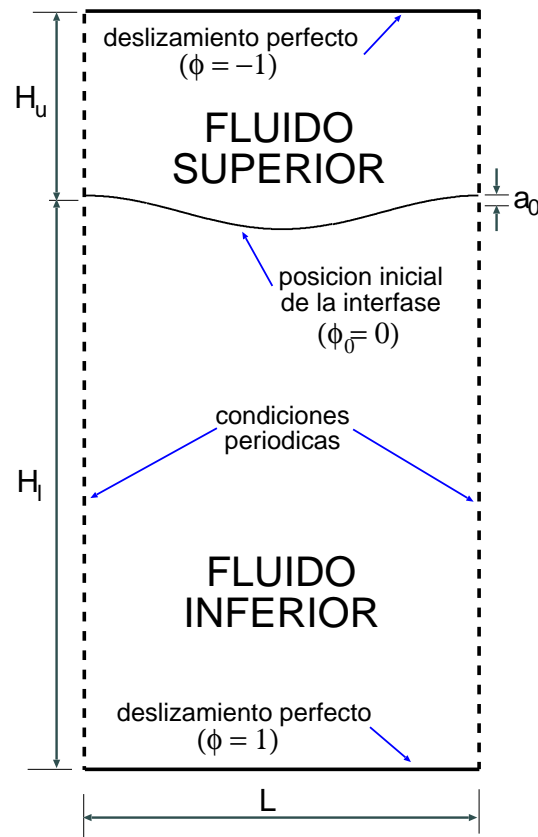


Figura 5.5: Datos geométricos y condiciones de contorno para la validación con pequeños desplazamientos.

Se realiza una validación para el método resolviendo un problema similar al de la Sec. 4.5.1, tomado de Prosperetti [Pro81], que consiste en el movimiento de la interfase entre dos fluidos viscosos con una onda sinusoidal como condición inicial, cuya amplitud es amortiguada por la viscosidad de los fluidos.

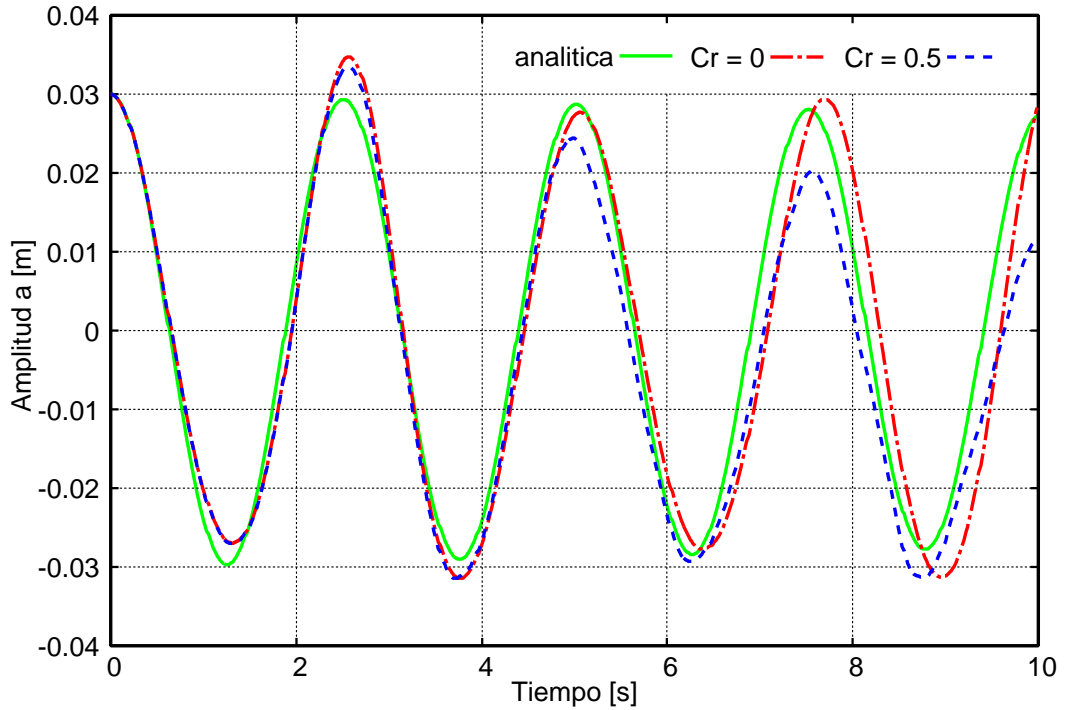


Figura 5.6: Desplazamiento vertical de la interfase sobre el límite izquierdo para la validación de pequeños desplazamientos.

El dominio de análisis Ω propuesto es rectangular, de ancho L y altura $H = H_l + H_u$, siendo H_l la altura del líquido ubicado en la parte inferior y H_u la del que se encuentra en la parte superior, como se muestra en la Fig. 5.5, con una amplitud inicial de la onda a_0 despreciable en comparación con H . Los contornos laterales están vinculados mediante condiciones de contorno periódicas para simular un dominio de extensión infinita en dirección lateral para las dos instancias a resolver mediante MEF. Por último, condiciones de deslizamiento perfecto para el caso del fluido son impuestas tanto en el fondo como en la parte superior de Ω , y en esta última también la presión en $p = 0$, en tanto que para el problema de advección son $\phi = 1$ $\phi = -1$ en la parte inferior y en la superior, respectivamente, véase la Fig. 5.5.

La condición inicial mediante la cual se ubica la SL con $\phi = 0$ viene dada por la expresión

$$h(x) = H_l + a_0 \cos(2\pi x/L) . \quad (5.9)$$

El sistema es sometido a una aceleración gravitatoria vertical g , y cada fluido cuenta con las siguientes propiedades: densidad ρ_l y viscosidad cinemática ν_l para el líquido de la parte inferior, y las correspondientes ρ_u y ν_u para la superior, con $\rho_l > \rho_u$ para considerar el caso de estratificación estable.

La expresión analítica que describe el desplazamiento vertical de la interfase como función del tiempo t para ondas planas de pequeña amplitud en un dominio de profundidad infinita es conocida si las viscosidades cinemáticas de ambos fluidos

valen lo mismo, es decir, $\nu = \nu_l = \nu_u$, y es como sigue [Pro81]:

$$a(t) = \frac{4(1-4\beta)\nu^2 k^4}{8(1-4\beta)\nu^2 k^4 + \omega_0^2} a_0 \operatorname{erfc}(\nu k^2 t)^{1/2} + \sum_{i=1}^4 \frac{z_i}{Z_i} \left(\frac{\omega_0^2 a_0}{z_i^2 - \nu k^2} \right) \exp[(z_i^2 - \nu k^2)t] \operatorname{erfc}(z_i t^{1/2}); \quad (5.10)$$

donde el parámetro de densidad β es calculado como $\beta = \rho_l \rho_u / (\rho_l + \rho_u)^2$, k es el número de onda, $\omega_0^2 = gk$ es la frecuencia angular natural invíscida y cada z_i es una raíz de la siguiente ecuación algebraica,

$$z^4 - 4\beta(k^2\nu)^{1/2} z^3 + 2(1-6\beta)k^2\nu z^2 + 4(1-3\beta)(k^2\nu)^{3/2} z + (1-4\beta)\nu^2 k^4 + \omega_0^2 = 0; \quad (5.11)$$

con $Z_1 = (z_2 - z_1)(z_3 - z_1)(z_4 - z_1)$ y Z_2, Z_3, Z_4 calculados mediante permutación circular de los índices. La expresión $\operatorname{erfc}(\dots)$ es la función de error para variable compleja.

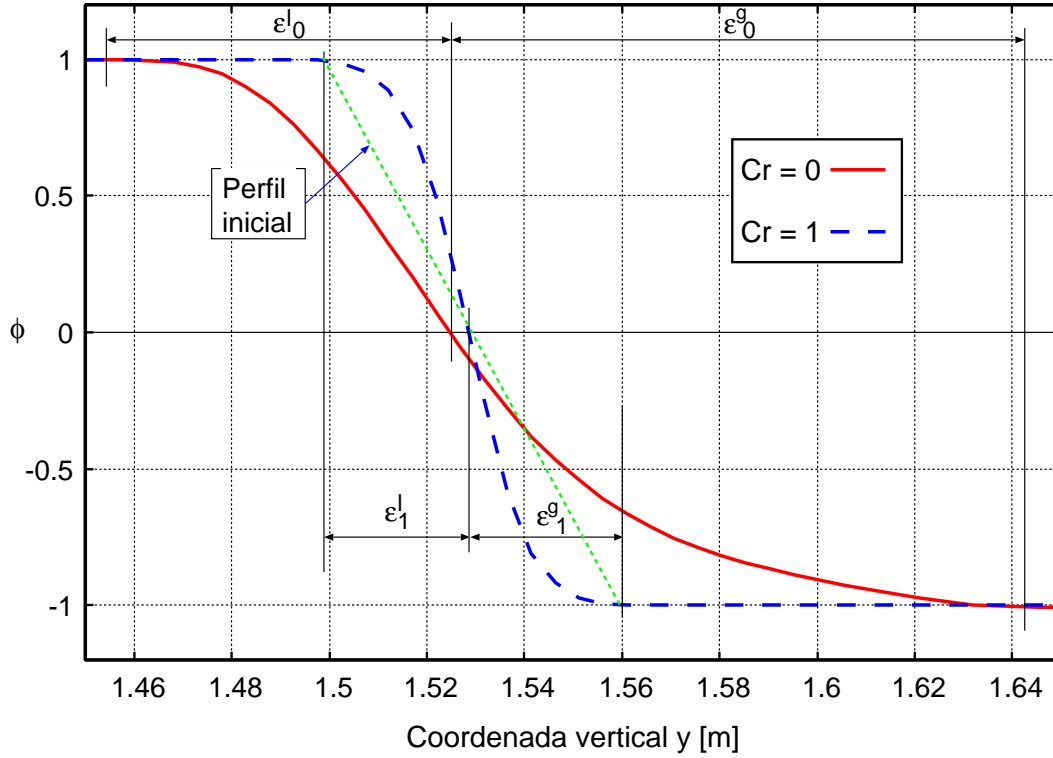


Figura 5.7: Pequeños desplazamientos. Variación de ϕ a través de la interfase para distintos valores de C_r y perfil de referencia en una sección sobre el límite izquierdo del dominio.

La resolución numérica fue obtenida sobre un dominio definido por $H_l = 1.50$ m, $H_u = 0.50$ m y $L = 1.00$ m, una amplitud inicial $a_0 = 0.03$ m, que es introducida a través de un campo inicial de ϕ para el problema de la Ec. (5.4) con $\varepsilon \approx 0.05$ cm y tomando $h \approx 0.005$ cm como un valor representativo del tamaño de la malla para la región más cercana a la interfase. El dominio fue discretizado con una malla de elementos finitos no estructurada consistente en 11240 elementos triangulares lineales con refinamiento en las adyacencias de la superficie libre, generada por un

mallador desarrollado por Calvo [Cal05]. La aceleración de la gravedad adoptada es $g = 1 \text{ m/s}^2$, las densidades valen $\rho_l = 100 \text{ kg/m}^3$ y $\rho_u = 1 \text{ kg/m}^3$, la viscosidad cinemática es $\nu = 0.0001 \text{ m}^2/\text{s}$ y $t_f = 10.0 \text{ s}$ es el tiempo final, con $\Delta t = 0.0125 \text{ s}$.

Este problema fue resuelto para distintos valores del parámetro de regularización, $C_r = 0$ y $C_r = 0.5 \text{ s}^{-1}$, empleando un esquema de integración temporal implícito.

Los resultados obtenidos son los representados en la Fig. 5.6, donde las curvas corresponden a $C_r = 0.5 \text{ s}^{-1}$ para la resolución con *smoke*, a $C_r = 0$ para el problema ordinario de advección y a la solución analítica. Esta figura muestra cómo la fase es en principio respetada por la curva de $C_r = 0.5 \text{ s}^{-1}$, aunque debería examinarse el desarrollo de ambas curvas para $t > 10 \text{ s}$ a los fines de un análisis concluyente. Además, la amplitud no es bien capturada por ninguna de las dos soluciones numéricas para $t > 5 \text{ s}$. La conservación de masa fue controlada para ambos casos numéricos, pero las pérdidas resultan despreciables debido a la pequeña amplitud de los desplazamientos.

Al igual que en el ejemplo anterior, se comparan dos perfiles finales de la función de nivel, obtenidos después de 100 pasos de tiempo para diferentes valores de C_r , véase la Fig. 5.7. Para la solución advectiva estabilizada ($C_r = 0$), la faja de transición muestra diferentes anchos para la fase inferior y la superior, siendo en este caso $\varepsilon_0^l < \varepsilon_0^g$, de acuerdo con la notación de la figura. Por otro lado, al adoptar $C_r = 1 \text{ s}^{-1}$, la resolución se lleva adelante con el elemento *smoke*, mostrando que el perfil de ϕ mantiene su ancho inicial en la transición, con $\varepsilon_1^l \approx \varepsilon_1^g$ y una transición suave entre $\phi = +1$ y $\phi = -1$, que permite una mejor interpolación para las propiedades del fluido en la instancia de resolución del NS. Esta comparación lleva a concluir que $C_r > 0$ y $\kappa = \kappa(\phi)$ resultan útiles para la regularización del perfil de ϕ , teniendo en cuenta la conservación de ε y la suavidad de la transición, respectivamente.

5.1.4.3. Colapso de una columna de agua

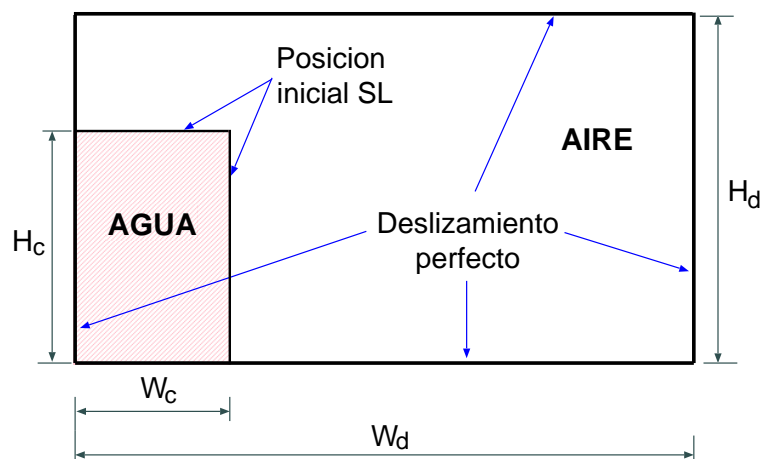


Figura 5.8: Geometría para el problema de colapso de una columna de agua.

El ejemplo, conocido también como problema de rotura de presa (*dam-break problem*), consiste en la simulación del colapso de una columna de agua dentro de una atmósfera de aire, similar a aquellos presentados en numerosos trabajos relativos a simulaciones de SL mediante diversas metodologías [AF06, ASF08, BTA08, CL03,

[CCT07a, EC07, HKC04, HL88, MR06, MPR99, TLW08], en este caso con una relación de aspecto $r_a = 2$, como se muestra en la Fig. 5.8, en la cual los datos geométricos son: el ancho y la altura del dominio, $W_d = 4.00$ m y $H_d = 3.00$ m, respectivamente, con una columna de agua de $W_c = 1.00$ m de ancho y $H_c = 2.00$ m de altura, esto es, con una relación de aspecto de $r_a = 2$.

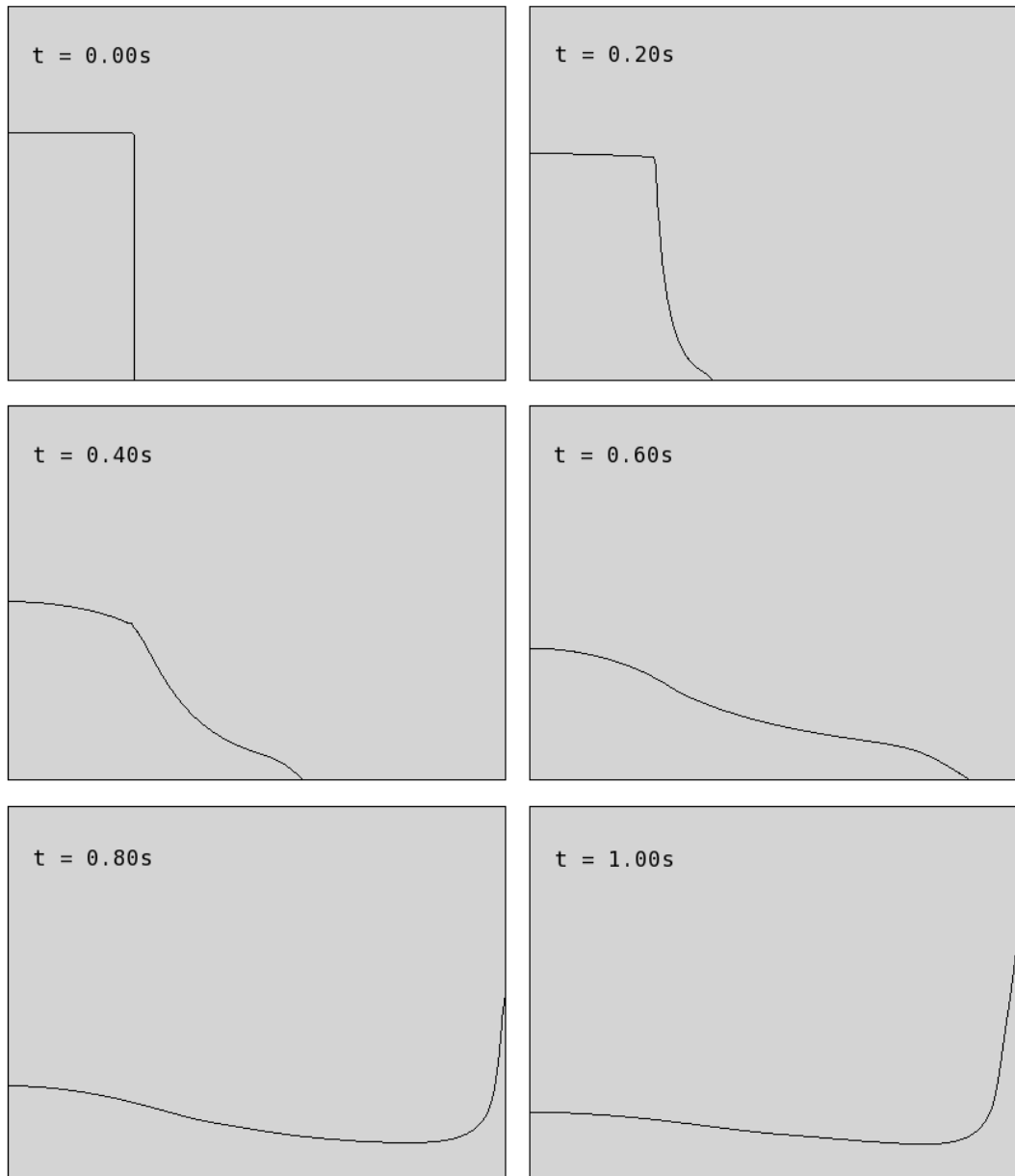


Figura 5.9: Etapas tempranas en el colapso de la columna líquida resuelto con elementos *smoke*.

Como condiciones de contorno en el problema del fluido se adopta deslizamiento perfecto, a través de definir la velocidad normal nula sobre las paredes del dominio. El módulo ADVDFIF no requiere condiciones de contorno debido a que no se presentan secciones de ingreso de fluido.

Los datos de los fluidos son los siguientes: para el agua, densidad $\rho_l = 1000$ kg/m³ y viscosidad dinámica $\mu_l = 1.0 \times 10^{-3}$ kg/(m s), y para el aire son $\rho_g = 1$ kg/m³ y

$\mu_g = 1.0 \times 10^{-5} \text{ kg}/(\text{m s})$.

La simulación computacional fue llevada adelante hasta un tiempo final $t_f = 10 \text{ s}$ en 2000 pasos de tiempo, a razón de un $\Delta t = 0.005 \text{ s}$, con integración implícita en ambas instancias del algoritmo.

La malla de elementos finitos se compone de elementos cuadrangulares con lados de $h = 0.033 \text{ m}$, conformando una grilla estructurada de alrededor de 11000 nodos, y es utilizada tanto para la resolución del NS como la del ADVDF. Los parámetros adoptados para el elemento *smoke* son $C_r = 1 \text{ s}^{-1}$ y $\kappa_{ref} = 0.01 \text{ m}^2/\text{s}$, el último de ellos calculado a partir de un ancho de transición de $\varepsilon = 0.10 \text{ m}$.

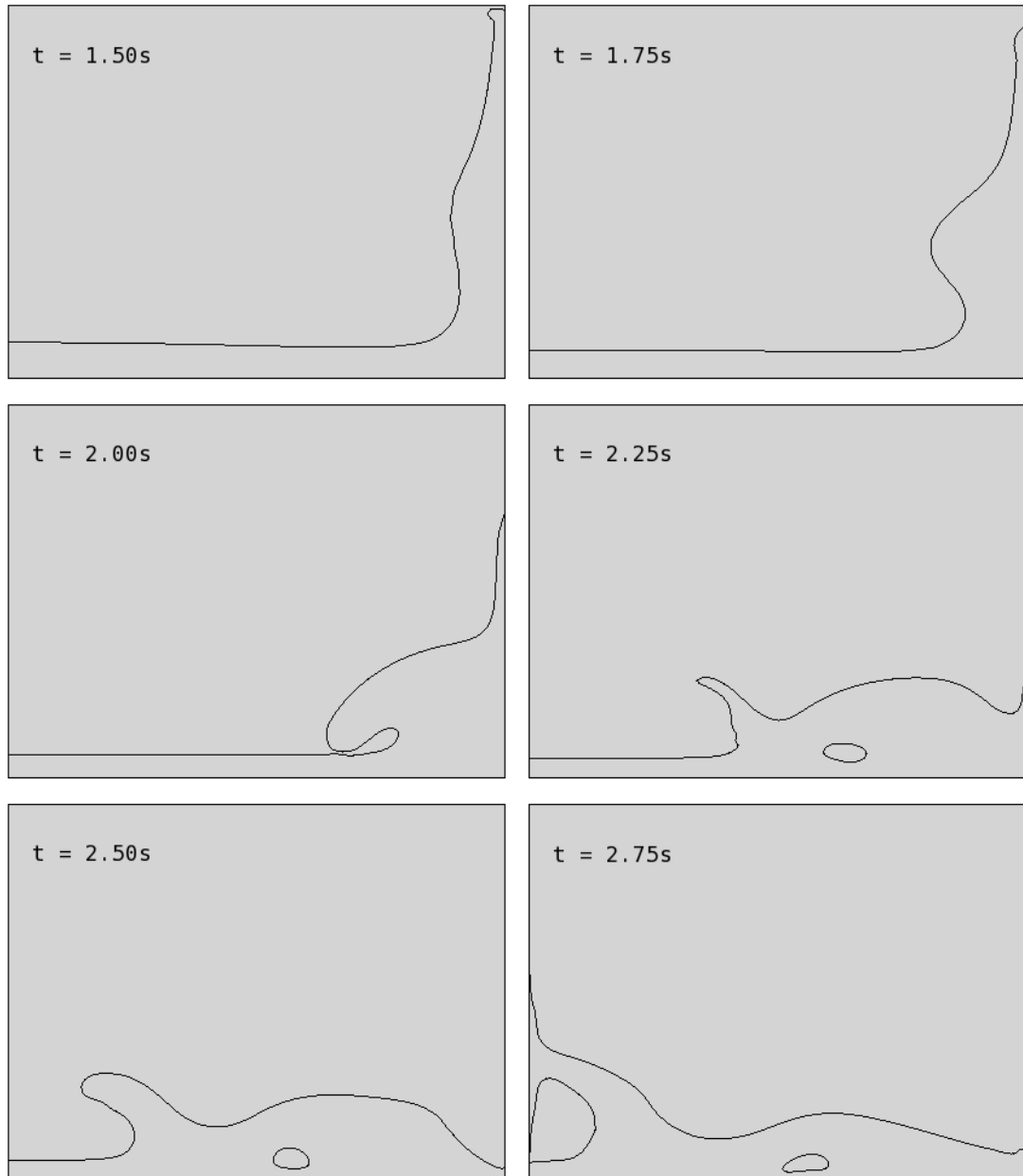


Figura 5.10: Pasos intermedios en el problema de colapso de la columna líquida resuelto con *smoke*.

Los resultados se muestran en las Figs. 5.9 a 5.11, donde la interfase es representada en línea negra. Como puede verse, hay tres etapas en este problema, la primera

de ellas el colapso de la columna, o “etapa inicial”, en la Fig. 5.9; la segunda se desarrolla tras el impacto del líquido contra el lado derecho del dominio hasta $t \approx 2.75$ s, véase la Fig. 5.10; la última se registra desde ese instante hasta la finalización de la simulación, y se la identifica como “etapa final” en la Fig. 5.11.

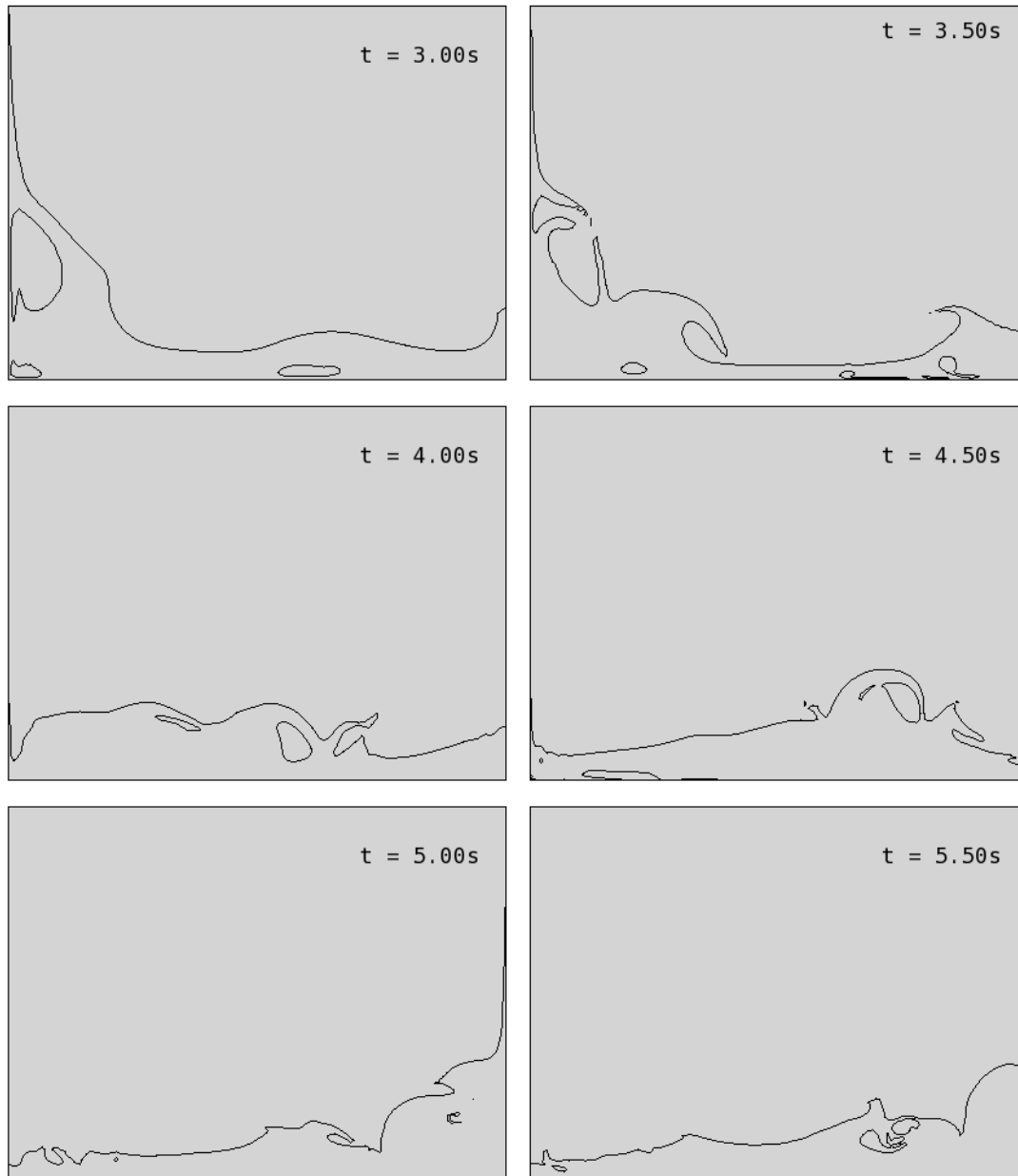


Figura 5.11: Etapas finales en el problema de colapso de la columna de agua con advección auto-renormalizada. Evolución de burbujas y gotas.

La etapa de colapso muestra buena aproximación con resultados similares, tanto numéricos como experimentales, véase por ejemplo el trabajo de Cruchaga *et al.* [CCT07a], pero las restantes etapas son difíciles de verificar debido a los pocos resultados disponibles, el salpicado del líquido y las burbujas generadas y disueltas, especialmente cuando se presentan algunos fenómenos no físicos, como aire originado en el fondo del contenedor o gotas que “desaparecen”, como se ve en la última de

las figuras.

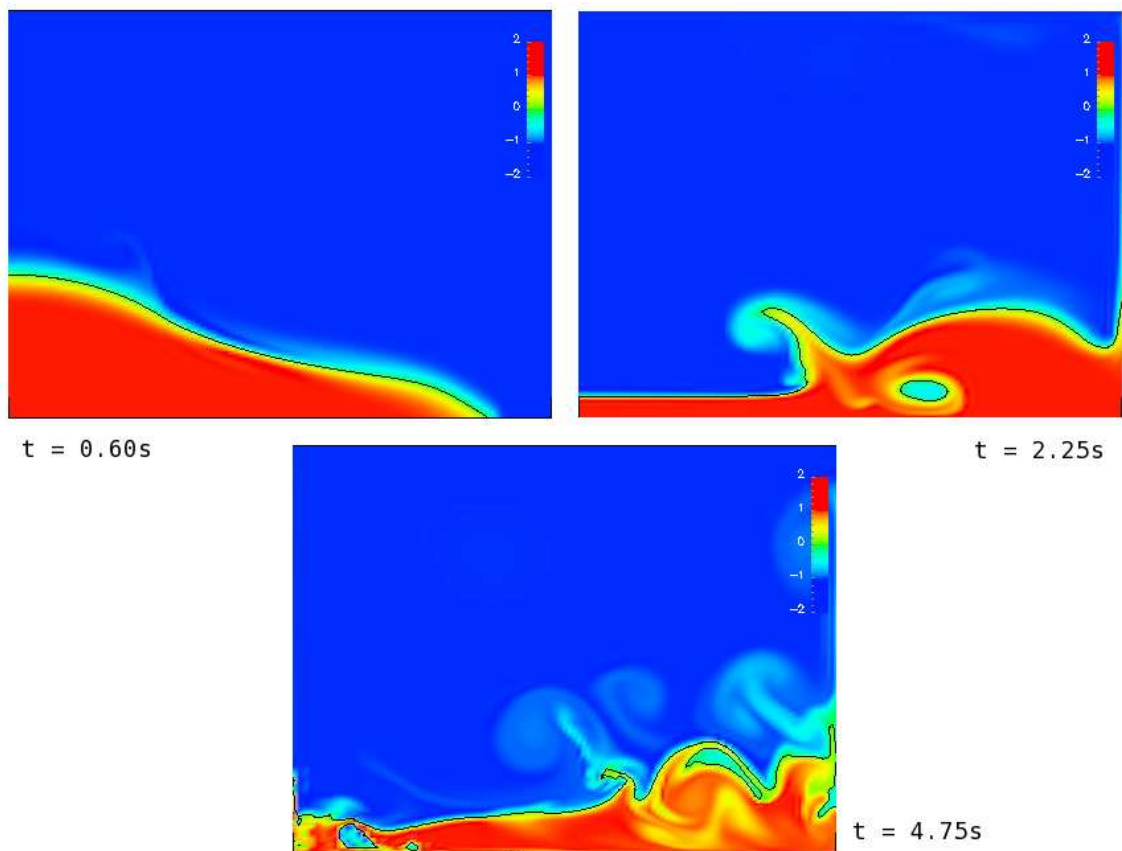


Figura 5.12: Campo de la función de nivel ϕ en el problema de colapso de la columna de agua en distintos instantes.

El campo de la función de nivel se muestra en las imágenes de la Fig. 5.12 para tres instantes de tiempo, cada uno de ellos correspondiente a una de las etapas mencionadas previamente. Las diferencias más importantes entre ellas está relacionada con el “espesor” de la interfase, que es menor en la figura para $t = 0.60$ s. En etapas intermedias, el parámetro ε ya no es representativo de la transición de la interfase, lo cual es más evidente en el pico central y el vórtice que se aprecia en $t = 2.25$ s, en la misma Fig. 5.12. Por último, para $t = 4.75$ s, el campo de ϕ está mucho más diseminado debido al error acumulado a lo largo de la simulación y la ausencia de un procedimiento de reinicialización que pudiera mejorar los resultados.

5.1.5. Evaluación del método

El método de advección auto-renormalizada muestra ser de costos computacionales bajos, en los casos en los cuales no sería preciso emplear una renormalización, esto es, se ahorraría una tercer instancia, adicional a las descritas en la Sec. 5.1.3.

Para ejemplos de baja velocidad en el fluido, como el de agitación de pequeña amplitud, puede mostrar un desempeño aceptable tanto en la captura de la interfase como en la conservación del espesor de la transición, pero esta última propiedad se pierde cuando las velocidades son mayores, especialmente en la interfase, lo cual se

visualiza mediante el ejemplo del colapso de la columna de agua en 2D, en la Fig. 5.12 y los comentarios correspondientes.

Otra ventaja de esta propuesta es la facilidad para determinar los coeficientes dados por el usuario, que son $C_r = O(1)$ y $\kappa_{\text{ref}} = O(h^2 C_r)$. Sin embargo, al estar incorporado a la ecuación de transporte de la función de nivel ϕ , los términos de renormalización actúan en todos los pasos de tiempo sin que sea inmediato una implementación que los intercale cada cierta cantidad de pasos de tiempo; esto puede provocar que los errores de reinicialización conlleven diferencias acumuladas un tanto altas.

Debido a los inconvenientes indicados, se resolvió no profundizar el estudio de esta estrategia de resolución de captura de interfase, a pesar de lo cual ciertas ideas relativas a los términos adicionales son retomadas para proponer una metodología de renormalización de ϕ . Se dejó de lado también la posibilidad de aplicar alguna metodología de renormalización complementaria al algoritmo de la Sec. 5.1.3, por dos motivos: el primero es que la advección pura ($C_r = 0$) provee resultados de buena calidad para el transporte de la función de nivel, y el segundo es la intención de evitar la abundancia de parámetros a ser definidos por el usuario al momento de resolver el problema completo, ya que sería necesario definir los parámetros para el *smoke* más los exigidos por la reinicialización, con funciones superpuestas.

5.2. Renormalización acotada con penalización discontinua

5.2.1. Descripción

Las primeras pruebas para proponer una renormalización de la función de nivel ϕ tras el paso de transporte de dicha cantidad fueron llevadas a cabo con un operador basado en el esquema de auto-renormalización de la Sec. 5.1, que es propuesto de la siguiente forma,

$$C_r \phi (\phi^2 - \phi_{\text{ref}}^2) - \kappa \Delta \phi + M (H(\phi) - H(\phi^0)) = 0; \quad (5.12)$$

en la cual se distinguen los parámetros de regularización C_r , de difusión κ y de penalización M en los respectivos términos, al igual que el valor de referencia ϕ_{ref} , habiéndose adoptado $\phi_{\text{ref}} = 1$, siendo ϕ^0 el campo inicial de la función de nivel, a renormalizar. Obsérvese que, a diferencia de la Ec. (5.4), no hay dependencia temporal de las variables, de manera que C_r es adimensional, al igual que M . Por su parte, κ tiene unidades de longitud² y es independiente de la variable ϕ , pero se mantiene su propiedad de dependencia del tamaño típico del elemento h , como se verá en los ejemplos. En el término de penalización se emplea la función de Heaviside $H(\phi)$ definida como:

$$H(\phi) = \begin{cases} 1 & \text{si } \phi > 0; \\ 0 & \text{si } \phi \leq 0. \end{cases} \quad (5.13)$$

El primer término de la Ec. (5.12) es de tipo reactivo: su efecto sobre ϕ es el de forzarla a mantenerse sobre $\phi = \pm \phi_{\text{ref}}$. El término difusivo, multiplicado por κ en la Ec. (5.12), aporta suavidad a la transición de la función de nivel gracias al operador laplaciano, en un ancho manejado justamente por κ . En la resolución

numérica, este coeficiente está relacionado con el paso espacial de la malla h tal que $(2h)^2 \leq \kappa \leq (8h)^2$, lo cual guarda relación con el problema a resolverse, como se mostrará a través de los ejemplos. Valores menores a los indicados para κ producen no sólo un angostamiento de la faja de transición sino también un predominio del primer término tal que la solución muestra un atraso en la advección de $\phi = 0$. Por último, el término de penalización multiplicado por M minimiza la variación de masa para la fase $\phi > 0$, pues penaliza el cambio signo de la incógnita, tomando como referencia los valores provistos por el módulo ADVDF a la etapa de reinicialización.

La integración del término de penalización mediante elementos finitos exigió el uso de expresiones semi-analíticas de integración en aquellos elementos atravesados por la interfase, lo cual resulta en una programación compleja y acotada en cuanto al tipo de elementos a emplear.

El tercer término del operador de la Ec. (5.12), que debido a la definición de $H(\phi)$ resulta discontinuo, presenta el inconveniente de introducir modificaciones especialmente en la faja de transición, pero sólo en la región en la cual la función de nivel es positiva, es decir $\phi > 0$, de manera que la continuidad de ϕ se ve alterada.

El algoritmo empleado para la resolución de flujos con interfases móviles empleando esta metodología es análogo al descrito en la Sec. 6.2, en el cual la reinicialización es resuelta cada n_{reno} pasos de tiempo.

5.2.2. Ejemplo de evaluación: vórtice bidimensional

Un caso de prueba típico para el conjunto de advección y renormalización de la función de nivel ϕ consiste en un disco de radio $r = 0.15$ m que encierra uno de los fluidos, cuyo centro se encuentra ubicado en coordenadas $(x_c, y_c) = (0.50, 0.75)$ m en un dominio cuadrado de 1 m de lado ubicado entre $x = 0$ y $x = 1$ m, y desde $y = 0$ hasta $y = 1$ m. Este disco, representado por $\phi = 0$, se ve sometido a un campo de velocidades definido por una función de corriente Ξ ,

$$\Xi = -\frac{1}{\pi} \sin^2(\pi x) \sin^2(\pi y); \quad (5.14)$$

a partir de la cual se determina el campo de velocidades en el dominio,

$$v_x = -\frac{\partial \Xi}{\partial y} = -\sin(2\pi y) \sin^2(\pi x); \quad (5.15)$$

$$v_y = +\frac{\partial \Xi}{\partial x} = \sin(2\pi x) \sin^2(\pi y); \quad (5.16)$$

Este ejemplo, en algunos casos con diferencia en el signo de Ξ , ha sido tomado como referencia para diversos métodos de seguimiento del campo de ϕ [DLFP06, EFFM02, GNNB08, Her08, OK05, RMB07, RK98] o extensiones de VOF [EC07] a partir del trabajo de Bell *et al.* [BCG89], con dos variantes incluidas a continuación.

Las soluciones semianalíticas con las cuales se compara la posición de la interfase fueron halladas advectando con el campo de velocidades de las Ecs. (5.15) y (5.16) cierto número de partículas inicialmente ubicadas en el contorno del círculo dato.

El problema se resolvió con los siguientes parámetros: $C_r = 1$, $\kappa = (3h)^2 = 1.37 \times 10^{-4}$ m², $M = 10000$ y $n_{\text{reno}} = 5$. La discretización consta de 131000 elementos triangulares lineales, siendo aproximadamente 256 elementos por lado, y el paso de tiempo $\Delta t = 1.95 \times 10^{-3}$ s, adoptado para $Co = 0.5$. Mediante otros análisis se

verificó que cambios en los valores de κ y M no producían modificaciones sustanciales en los resultados incorporados a continuación.

Variante 1

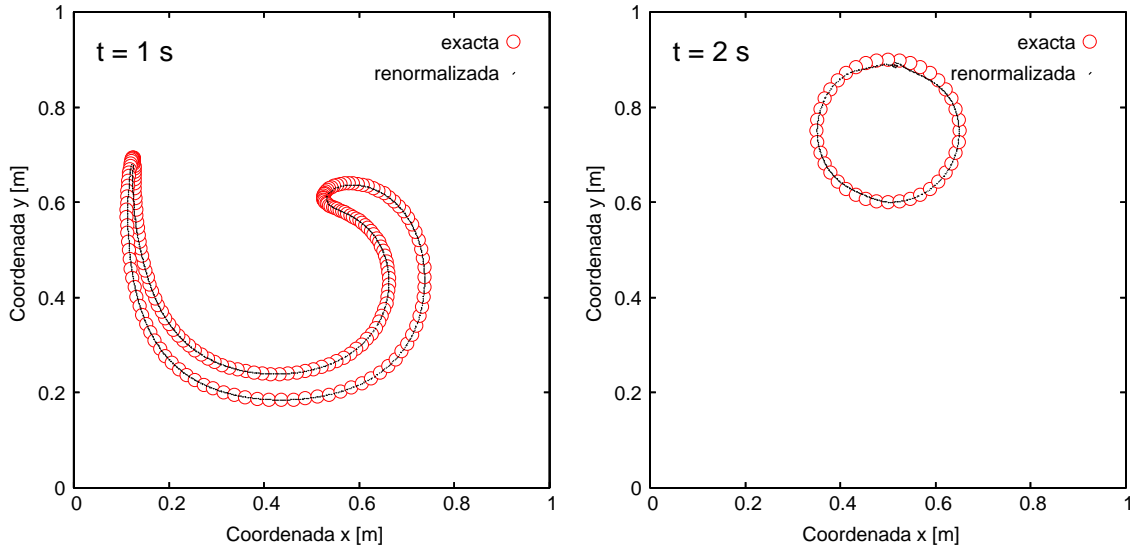


Figura 5.13: Curva de $\phi = 0$ en $t = 1$ s y $t = 2$ s para el vórtice 2D resuelto mediante advección renormalizada con operador discontinuo.

En esta primera fase del test, se obtiene el estado para $t = 1$ s, se invierte el campo de flujo y se detiene el análisis en $t = 2$ s, incorporando las curvas de $\phi = 0$ en ambos casos en la Fig. 5.13 junto con las marcas de la solución exacta. En este caso, es evidente que se produce una pérdida tanto del área encerrada por $\phi = 0$ como de la forma de la curva, esto último más evidente para el tiempo final. Para una comparación cuantitativa, debe tenerse presente que los resultados obtenidos en la Sec. 6.3.2 muestran una variación de menos de 0.2% en el área encerrada por $\phi = 0$, en tanto que en esta oportunidad dicha variación es de 3.9%.

Variante 2

La simulación de la burbuja bidimensional en el vórtice fue realizada con este tipo de renormalización hasta $t = 5$ s manteniendo el campo de velocidades de las Ecs. (5.15) y (5.16). Los resultados se representan en la Fig. 5.14.

Al igual que en la variante anterior, es notoria la pérdida de área que sufre la región de $\phi > 0$, que para $t = 5$ s es ya del 12.3% y en $t = 5$ s es casi total y, a diferencia de la renormalización continua del Cap. 6, se aprecian desprendimientos de la burbuja en tiempos intermedios, véase el ejemplo en la Sec. 6.3.2.

5.2.3. Evaluación del método

La variación de los valores de κ y M no produjeron cambios significativos en la solución numérica que justificaran un mayor estudio de la estrategia con operador discontinuo. Junto a esto, la observación de los resultados obtenidos mediante esta metodología de renormalización muestran que ésta no tiene la capacidad de colaborar

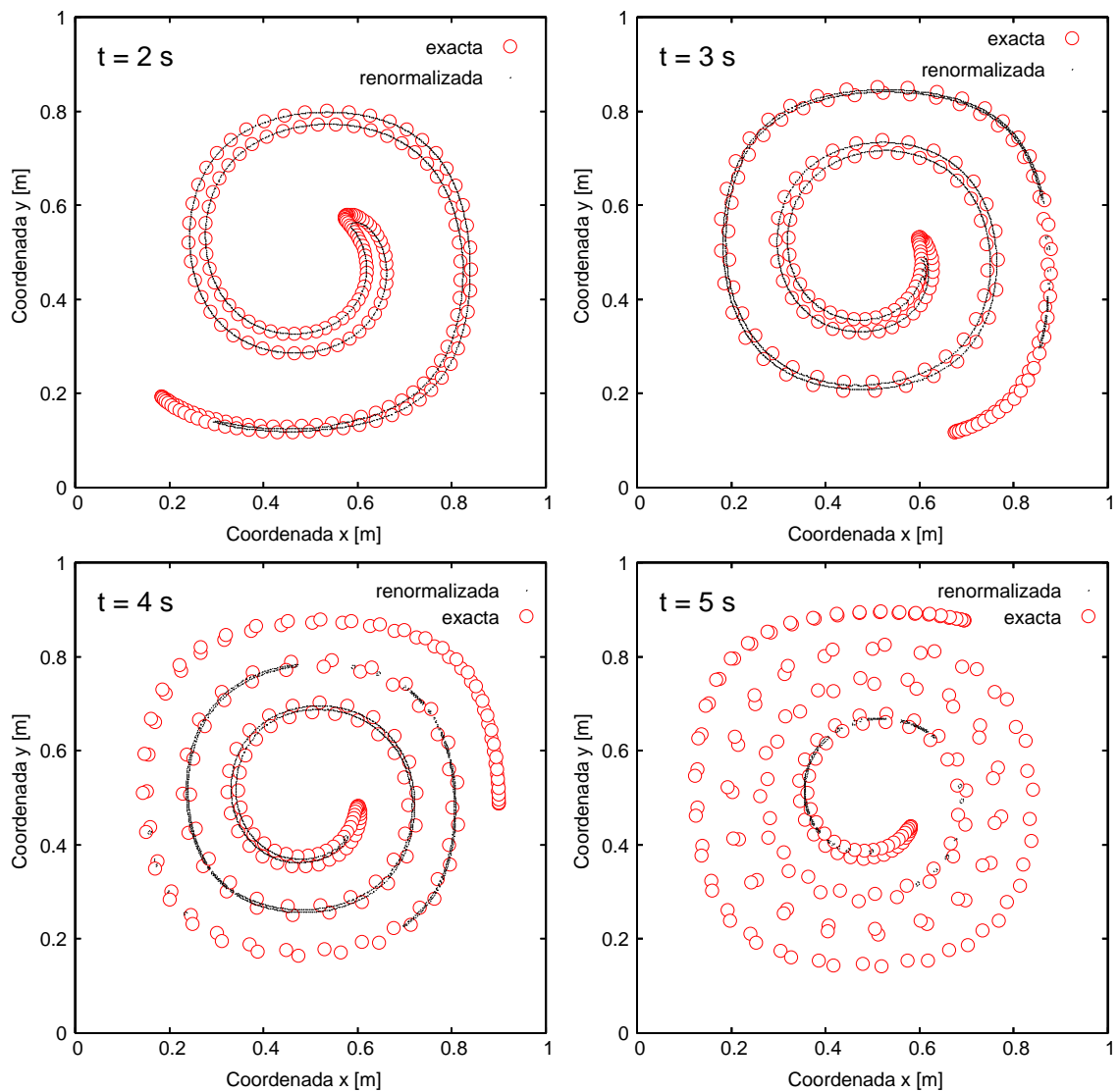


Figura 5.14: Curva de $\phi = 0$ en distintos instantes para el vórtice 2D resuelto mediante advección con renormalización discontinua.

con el paso de advección de $\phi = 0$, ya que no se produce conservación de masa. En comparación con resultados de otros autores [Her08, OK05], e incluso frente a la renormalización continua de la Sec. 6.1.3, el desempeño de esta propuesta es inferior.

Al analizar el término de penalidad de la Ec. (5.12) se planteó la hipótesis de que la discontinuidad introducida en adyacencias de la interfase fuera el origen de los inconvenientes mostrados por esta estrategia, lo que derivó en la propuesta de la renormalización continua de la Sec. 6.1.3 y la preferencia de ésta por sobre la presentada en este capítulo.

Capítulo 6

Captura de interfase con regularización continua acotada de la función de nivel

En el presente capítulo se explica en detalle la metodología más destacada en captura de interfase para esta Tesis, basada en *level set*, evolucionada a partir de las propuestas del Cap. 5.

Para ilustrar su desempeño, se presentan dos grupos de ejemplos numéricos: el primero de ellos consiste la advección de la función de nivel ϕ , con los cuales se evalúan los módulos de advección y de renormalización de ϕ actuando en conjunto, mientras que el segundo muestra resultados obtenidos incorporando la instancia de resolución del flujo mediante las ecuaciones de NS.

6.1. Etapas de resolución

El método de captura propuesto se caracteriza por acotar la función de nivel ϕ al intervalo $[-1, 1]$, correspondiendo $\phi = 0$ a la curva que representa la interfase, lo cual se encuentra estrechamente ligado a la renormalización de dicha función, que está diseñada con el objeto de mantener inalterada la advección de $\phi = 0$ y reforzar $\phi = \pm 1$ fuera de una faja de transición.

La resolución consiste en la sucesión de las siguientes etapas: (i) la determinación del estado en el fluido, seguida de (ii) el transporte de la función de nivel ϕ y (iii) la renormalización de ϕ .

6.1.1. Estado en el fluido

El problema de flujo del fluido es representado por la forma incompresible de las ecuaciones de NS en el caso de fluido no homogéneo, dadas por las Ecs. (3.16) y siguientes,

$$\begin{aligned}\rho(\phi(\mathbf{x}, t)) (\partial_t \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} - \mathbf{f}) - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} &= 0 ; \\ \nabla \cdot \mathbf{v} &= 0 ;\end{aligned}$$

para $\mathbf{x} \in \Omega$, siendo $\Omega = \Omega_l \cup \Omega_g$ con los subíndices l y g indicando la pertenencia al dominio líquido o gaseoso, respectivamente, donde \mathbf{v} es la velocidad del fluido, \mathbf{f} es la fuerza de cuerpo, $\rho(\phi(\mathbf{x}, t))$ la densidad del fluido, que depende tanto de la

posición \mathbf{x} como del instante de evaluación t debido a la propuesta de flujo bifásico, y $\partial_t(\dots) = \partial(\dots)/\partial t$ indica la derivada parcial con respecto al tiempo. El tensor de tensiones viscosas $\boldsymbol{\sigma}$, compuesto por partes isotrópica $-p\mathbf{I}$ y desviadora \mathbf{T} es:

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \mathbf{T} ;$$

como se explicitó en la Sec. 3.2.2, en la cual, para fluidos newtonianos, son:

$$\begin{aligned} \mathbf{T} &= 2 \mu(\phi(\mathbf{x}, t)) \boldsymbol{\epsilon} ; \\ \boldsymbol{\epsilon} &= \frac{1}{2} \left[\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \right] ; \end{aligned}$$

donde interviene la viscosidad dinámica de los fluidos involucrados, determinada como $\mu = \mu(\phi(\mathbf{x}, t))$, en tanto que la viscosidad cinemática se calcula como sigue,

$$\nu(\phi(\mathbf{x}, t)) = \mu(\phi(\mathbf{x}, t)) / \rho(\phi(\mathbf{x}, t)) ; \quad (6.1)$$

es decir que ambas dependen del valor de la función de LS, ϕ , a los fines de tener en cuenta las fases intervinientes de acuerdo con \mathbf{x} en t , al igual que la densidad $\rho = \rho(\phi(\mathbf{x}, t))$.

Las condiciones de flujo sobre los contornos $\Gamma = \partial\Omega$ en los casos considerados hasta ahora son de tipo Dirichlet, $\mathbf{v} = \mathbf{v}_D$ sobre Γ_D , siendo Γ_D una frontera rígida, o condiciones periódicas en otros casos. Cabe acotar que sobre la interfase, Γ_I , no es preciso imponer ninguna condición. La presión está dada sobre algún contorno o punto del dominio, en general como $p = 0$.

Como en la mayoría de los esquemas LS, la densidad y la viscosidad son determinadas como funciones de los valores de ϕ [SS97] a manera de interpolación en lugar de imponer un salto en las propiedades de los fluidos, siendo propuesta aquí de la siguiente forma,

$$\begin{aligned} \rho(\phi) &= \frac{1}{2} \left[\left(1 + \tilde{H}(\phi)\right) \rho_l + \left(1 - \tilde{H}(\phi)\right) \rho_g \right] ; \\ \mu(\phi) &= \frac{1}{2} \left[\left(1 + \tilde{H}(\phi)\right) \mu_l + \left(1 - \tilde{H}(\phi)\right) \mu_g \right]. \end{aligned} \quad (6.2)$$

En particular, en la vecindad de la interfase $\Gamma_{SL} = \Gamma_I$ se encuentra una faja definida por un ancho ε en la cual ϕ varía de manera continua y suave entre -1 y $+1$, constituyendo un campo que en la instancia de advección de la función de nivel es resuelto con menor error que una variación más brusca.

Esta zona intermedia es también necesaria a los fines de contar con una transición suave entre las fases de líquido y de gas, pues de otra forma la discontinuidad en dichas propiedades produciría problemas en la resolución numérica. A pesar de esto, la faja admite ser algo más estrecha, como se reporta en [SS97] y otros trabajos, véase la Sec. 2.3.1. En este caso, en lugar de $H_\varepsilon(\phi)$ calculada en la Ec. (2.9) se propone una distinta, designada $\tilde{H}(\phi)$, que es:

$$\tilde{H}(\phi) = \tanh \left(\frac{\pi\phi}{\tilde{\varepsilon}} \right) ; \quad (6.3)$$

i.e., para $|\phi| \rightarrow \tilde{\varepsilon}$ es $\tilde{H}(\phi) \rightarrow 1$, con un valor adoptado de $\tilde{\varepsilon} = 0.5$, de manera que la interpolación de las propiedades de los fluidos se realiza en una franja de la mitad de

ancho de la transición entre $\phi = -1$ y $\phi = 1$, véase la figura 6.1, i.e., si $\tilde{\varepsilon} = 0.5$, en $\phi = 0.5$ es $\tilde{H}(\phi) \approx 0.99627$. De esta manera, el campo de la función de nivel resulta más fácil de resolver en el paso de advección, ya que es más suave, pero disminuye la difusión que se produce en las adyacencias de Γ_{SL} debido a la interpolación de ρ y μ entre los correspondientes valores de los fluidos.

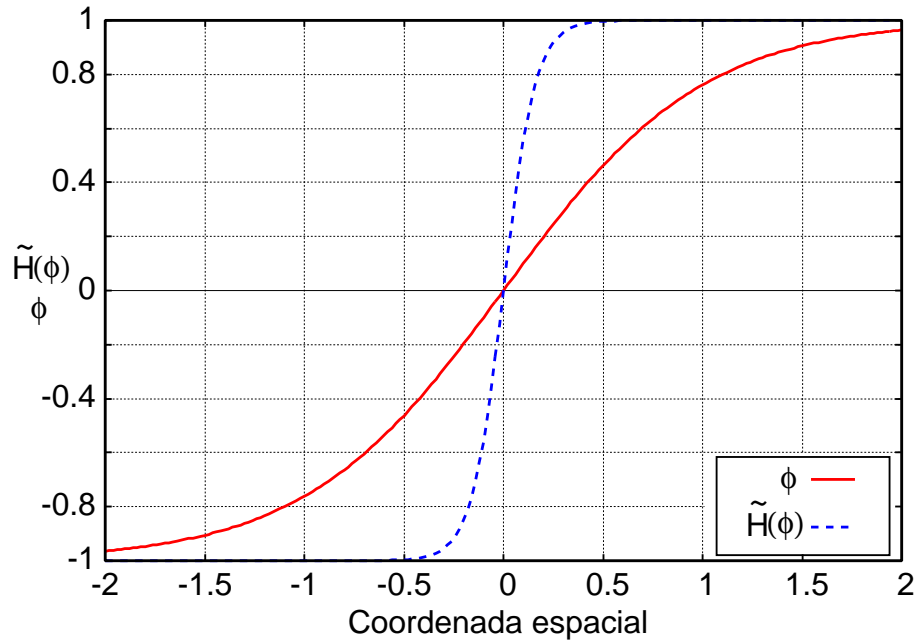


Figura 6.1: Esquema de transición entre propiedades del fluido: $\tilde{H}(\phi)$ disminuye el ancho de la faja de variación de ϕ .

6.1.2. Advección de la función de nivel

El campo de velocidades \mathbf{v} , continuo a través de la interfase, genera la advección de Γ_{SL} , que en sí es la de la función de nivel $\phi(\mathbf{x}, t)$,

$$\partial_t \phi + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi = 0; \quad (6.4)$$

en la cual las condiciones de contorno Dirichlet vienen dadas por:

$$\phi = \bar{\phi} \quad \text{sobre} \quad \Gamma_{\text{in}}; \quad (6.5)$$

siendo la sección de ingreso $\Gamma_{\text{in}} = \{\Gamma \mid \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} < 0\}$. Debido al carácter hiperbólico del problema, no es necesaria otra condición de contorno, aunque sí se emplearon condiciones periódicas en algunos de los ejemplos propuestos.

El problema así establecido es resuelto empleando el *solver* de ecuaciones de advección-difusión mediante el MEF, con estabilización mediante *streamline upwind/Petrov-Galerkin* (SUPG) [BH82] en los casos que lo requieran. Cabe destacar que el método está programado de manera tal que pueden resolverse tanto problemas 2D como 3D.

6.1.3. Renormalización de la función de nivel

Varias experiencias numéricas realizadas sobre problemas de solución conocida en los cuales se proponía la advección del campo de la función de nivel ϕ resolviendo únicamente la Ec. (6.4) evidenciaron la necesidad de incorporar un procedimiento de reinicialización o renormalización debido a que se apreciaban pérdidas de masa y, en algunos casos, excesivo suavizado de la curva de la interfase en los ejemplos resueltos en la etapa preliminar, especialmente en el caso de uso de métodos estabilizados. Estos mismos inconvenientes, aunque en menor medida, se apreciaron al evaluar el desempeño del método de advección de ϕ incorporado en la Sec. 5.1, que posteriormente fue dejado de lado al evolucionar el aquí propuesto.

Con posterioridad al desarrollo de la metodología de la Sec. 5.1, se evaluaron los trabajos de Olsson *et al.* [OK05, OKZ07], en los cuales se propone un LS con reinicialización de la función de nivel mediante un operador continuo, dentro del denominado *Conservative Level Set Method*, véase la Sec. 2.3.3.3, que entre otras similitudes con la citada metodología del Cap. 5.1 propone y mantiene acotada la función de nivel, aunque en su caso en un intervalo $0 \leq \phi \leq 1$.

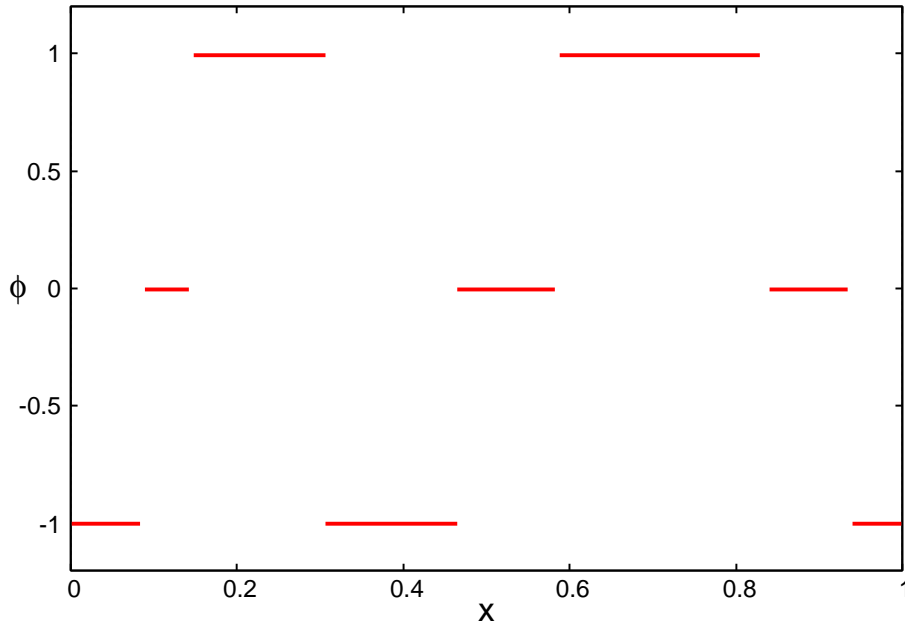


Figura 6.2: Una solución de ϕ constante de a trozos para el problema de reacción-difusión artificial para $\kappa = 0$, con longitud $L = 1$ y $\phi_{\text{ref}} = 1$.

Para el método propuesto en esta Tesis, que se caracteriza por mantener a la función de nivel en el intervalo $-1 \leq \phi \leq 1$, se propuso entonces separar la Ec. (5.4) en dos ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, una de ellas para el transporte de ϕ , de la forma de la Ec. (6.4), y la restante en la forma de un operador de regularización, como sigue:

$$C_r \phi (\phi^2 - \phi_{\text{ref}}^2) - \kappa \Delta \phi + M (\check{H}(\phi) - \check{H}(\phi^0)) = 0; \quad (6.6)$$

siendo C_r el parámetro de regularización, κ el coeficiente de difusión, M el parámetro de penalización, ϕ_{ref} un valor de referencia para la variable, en este caso adoptado $\phi_{\text{ref}} = 1$, y ϕ^0 el campo de la función de nivel inicial, a renormalizar. Las definiciones

de los parámetros se corresponden con las dadas en la Sec. 5.2.1, esto es, C_r y M son adimensionales, en tanto que κ está dado en unidades de longitud², es independiente de la variable ϕ y se adopta en relación al tamaño característico del elemento h . La función de transición $\check{H}(\phi)$ se definió en principio como una función de Heaviside, como puede verse en el Cap. 5.2, pero finalmente se adoptó la siguiente función infinitamente diferenciable:

$$\check{H}(\phi) = \tanh(2\pi\phi). \quad (6.7)$$

Para ilustrar el efecto de la Ec. (6.6) sobre el campo de ϕ , se evaluará en primera instancia una parte de dicha ecuación, en un dominio espacial unidimensional de longitud L , $0 \leq x \leq L$:

$$C_r \phi (\phi^2 - \phi_{\text{ref}}^2) - \kappa \Delta \phi = 0; \quad (6.8)$$

con condiciones de contorno Dirichlet conocidas, donde $\phi = \phi(x)$, representando una ecuación de reacción-difusión estacionaria. Para analizar el comportamiento de cada término se considera el caso de $\kappa = 0$ [SP07]: en este caso, para cada punto del dominio existe una solución, que corresponderá a cualquiera de las raíces del término reactivo, es decir que $\phi = \pm \phi_{\text{ref}}$ o $\phi = 0$. En estas circunstancias, cualquier solución posible es constante por tramos, como se propone en la Fig. 6.2 con $\phi_{\text{ref}} = 1$.

Al realizar un análisis pseudo-temporal del término reactivo, con τ un tiempo artificial,

$$\partial_\tau \phi + C_r \phi (\phi^2 - \phi_{\text{ref}}^2) = 0; \quad (6.9)$$

y aproximando luego el término temporal con un esquema de Euler hacia adelante, entonces:

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta\tau} + C_r \phi^n [(\phi^n)^2 - \phi_{\text{ref}}^2] = 0; \quad (6.10)$$

siendo ϕ^n el valor de la función en el tiempo artificial $\tau = n\Delta\tau$ y $\Delta\tau$ el paso pseudo-temporal. Luego, se arriba a la siguiente expresión:

$$\phi^{n+1} = \phi^n - C_r \Delta\tau \phi^n [(\phi^n)^2 - \phi_{\text{ref}}^2] = K; \quad (6.11)$$

con la cual se determinará cuáles de las raíces de la ecuación de reacción son estables. Esto se realiza aplicando el criterio de convergencia del método de punto fijo [Log94, SP07], que indica que las raíces son estables si:

$$|K'| = |1 - C_r \Delta\tau [3(\phi^n)^2 - \phi_{\text{ref}}^2]| < 1; \quad (6.12)$$

en tanto que cuando $|K'| > 1$ las raíces son inestables y con $|K'| = 1$ las soluciones son indiferentes. En este caso, las soluciones $\phi = \pm \phi_{\text{ref}}$ son estables y $\phi = 0$ es inestable.

Si ahora se reintroduce la difusividad κ , cada par de segmentos de solución contiguos en x (Fig. 6.2) pasan a estar vinculados entre sí de manera continua, con los extremos redondeados, pero aquellos tramos en los cuales la solución era $\phi = 0$ se vuelven inestables y desaparecen, como muestra la Fig. 6.3, en la cual se superponen la solución inicial y las soluciones para distintos valores de κ . Para estudiar la influencia de los parámetros C_r y κ , se los relaciona mediante el parámetro siguiente,

$$\delta = \sqrt{\frac{\kappa}{C_r}} \quad (6.13)$$

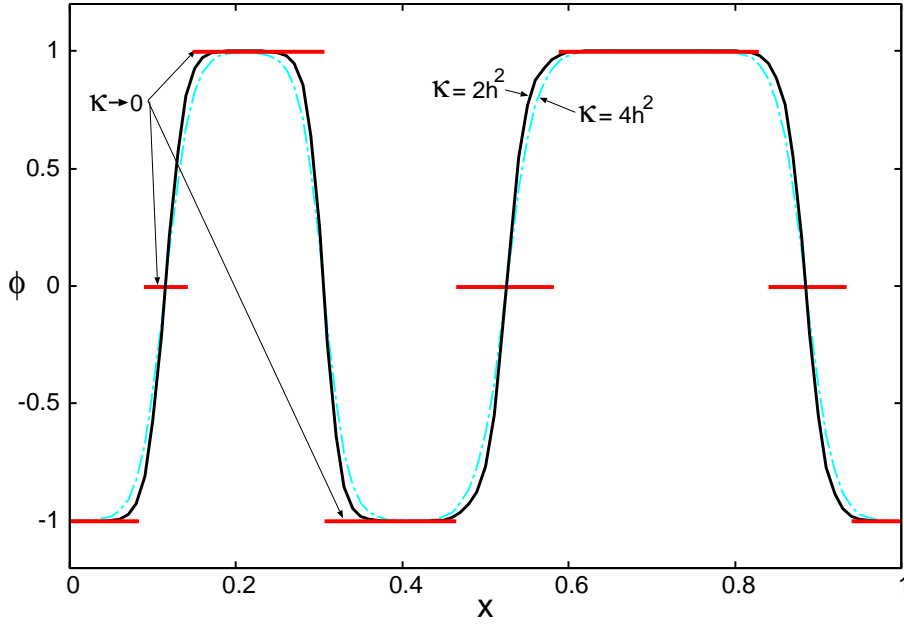


Figura 6.3: Solución al problema de reacción-difusión artificial para distintos valores de κ , con longitud $L = 1$ y $\phi_{\text{ref}} = 1$.

dado en unidades de longitud, que es un indicador del ancho de la transición de ϕ entre $-\phi_{\text{ref}}$ y ϕ_{ref} ; entonces, al adoptar $C_r = 1$ constante en todos los análisis, es κ quien gobierna el ancho de la faja de variación de ϕ , al tiempo que se elimina un parámetro que, de otra forma, debería ser dado por el usuario. Para apreciar este efecto, en la Fig. 6.3 se representaron las soluciones para dos valores de κ , donde el mayor de ellos produce un mayor redondeo de la solución, y además puede verse de qué manera se ajusta la función a $\phi_{\text{ref}} = 1$.

En cuanto al término restante de la Ec. (6.6), o término de penalización, multiplicado por M , es a través del cual se toman como referencia los valores dato ϕ^0 para iniciar la regularización, y a su vez fuerza un desplazamiento mínimo de $\phi = 0$ con respecto al obtenido en el paso de advección, esto es, con respecto a ϕ^0 , mediante la ponderación de $\check{H}(\phi) - \check{H}(\phi^0)$. Valores apropiados para M son $O(100)$ u $O(1000)$.

Habiendo definido $C_r = 1$, la Ec. (6.6) pasa a ser:

$$\phi (\phi^2 - \phi_{\text{ref}}^2) - \kappa \Delta \phi + M (\check{H}(\phi) - \check{H}(\phi^0)) = 0; \quad (6.14)$$

es decir, sólo es preciso adoptar dos parámetros para resolver esta instancia del método.

Las regiones lejanas a la interfase no se ven afectadas en mayor medida por el proceso de renormalización, ya que cuando $\phi \approx \phi_{\text{ref}}$ todos los términos tienden a cero, pues $\phi^2 - \phi_{\text{ref}}^2 \approx 0$, $\Delta \phi \approx 0$ y $\check{H}(\phi) - \check{H}(\phi^0) \approx 0$, independientemente de los valores de κ o M . En cambio, la mayor influencia del operador se registra en la vecindad de la interfase, que es exactamente donde se producen las alteraciones en los valores de ϕ que resultan en pérdida de precisión y, además, pérdida de masa.

En cuanto a la elección de los parámetros libres κ y M , por ejemplo, para un caso en el cual se producirá la rotura de la superficie libre y formación de gotas, es conveniente proponer un valor de κ de h^2 a $(2.5h)^2$, lo cual producirá una transición más estrecha, y emplear un $M \approx O(1000)$, cuyo propósito será el de evitar la

desaparición de las gotas.

El operador de la Ec. (6.14) se resuelve numéricamente mediante un MEF, minimizando el residuo de dicha ecuación y tomando como condición inicial ϕ^0 , que es obtenida del paso de advección previo. Además, es posible aplicarlo en todos los pasos de tiempo o bien cada n_{reno} pasos.

De manera accesoria, y en los casos en que los problemas presentan inestabilidades numéricas al resolverse la instancia de advección de la función de nivel, la renormalización tiene un efecto estabilizador, de manera que permite en general evitar la aplicación de SUPG en la advección de ϕ .

6.2. Esquema de acoplamiento débil

El algoritmo propuesto para la resolución numérica de cada uno de los problemas establecidos en las Secs. 6.1.1, 6.1.2 y 6.1.3 consiste en un acoplamiento débil entre los tres programas de elementos finitos, denominados NS, ADVDF y RENOR, respectivamente, cuyo procedimiento iterativo es esquematizado en la Fig. 6.4. Estos programas, que avanzan de manera alternada, pueden a su vez ser ejecutados en paralelo, cada uno de ellos en varios procesadores, que a su vez pueden ser compartidos por los tres *solvers*. Por ello, también en este caso se habla de una resolución multiparalela.

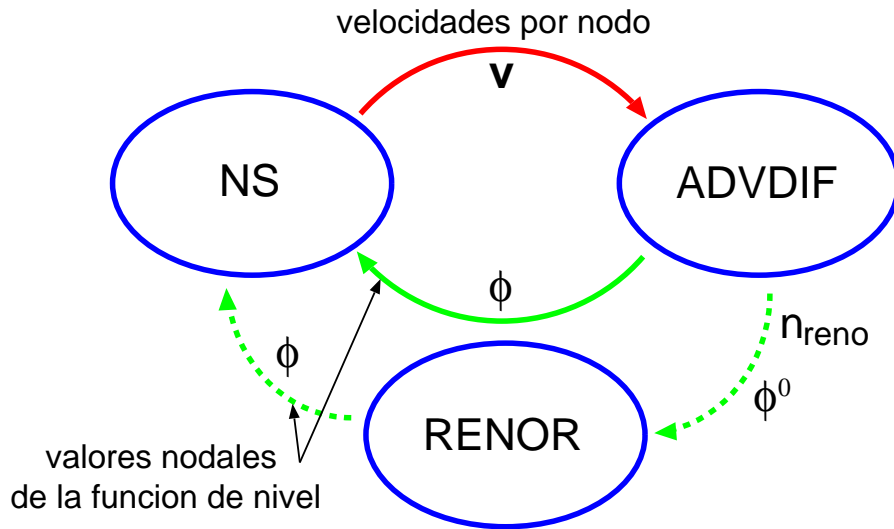


Figura 6.4: Acoplamiento débil entre los procesos NS, ADVDF y RENOR para el problema de la función de nivel con flujo de fluido y reinicialización.

Los módulos involucrados requieren condiciones iniciales para el comienzo de las iteraciones; a partir de la primera de ellas la tarea de cada instancia es la que sigue:

- **NS:** resuelve el problema de flujo del fluido de la Ec. (3.16) para un instante de tiempo t^n después de n pasos de tiempo, considerando $\rho = \rho(\phi(\mathbf{x}, t))$ y $\mu = \mu(\phi(\mathbf{x}, t))$, es decir que el campo de ϕ debe ser conocido; una vez que el análisis del paso de tiempo ha finalizado, se transmiten las velocidades del fluido calculadas para todo el dominio Ω , dadas por nodo, a la siguiente etapa;

- **ADVDIF**: resuelve la ecuación de advección en el instante de tiempo t^n , tomando como dato las velocidades nodales obtenidas del NS y retornando los nuevos valores de la función de nivel ϕ^n , también por nodos, para así permitir el cálculo del estado del fluido en t^{n+1} , de manera directa o a través de RENOR;
- **RENOR**: se ejecuta entre ADVDF y NS, pero en general no en todos los pasos de tiempo, sino cada n_{reno} pasos, tomando como dato el resultado de ADVDF designado ϕ^0 para obtener mediante la resolución de la Ec. (6.14) el campo de ϕ que utilizará el NS para el siguiente paso de tiempo.

6.3. Ejemplos de advección y renormalización de la función de nivel

Los ejemplos presentados en esta sección son ejercicios que permiten la evaluación de las metodologías de advección y de renormalización para la función de nivel ϕ ante circunstancias tales como la presencia de esquinas en la curva de $\phi = 0$, grandes exigencias sobre la deformación de dicha curva y la conservación de la masa de cada uno de los fluidos. También se especifica en qué casos es conveniente incorporar una renormalización, y de qué depende esta decisión. Estas simulaciones permiten a su vez determinar pautas para la elección de los valores de los parámetros asociados a la renormalización.

6.3.1. Disco ranurado

El denominado disco de Zalesak [Zal79], presentado como test en la Sec. 5.1.4.1, es considerado para la evaluación de este método. Se trata de un ejemplo que permite evaluar la conservación de las formas angulosas en una figura transportada [Her08], ya sean entrantes o salientes.

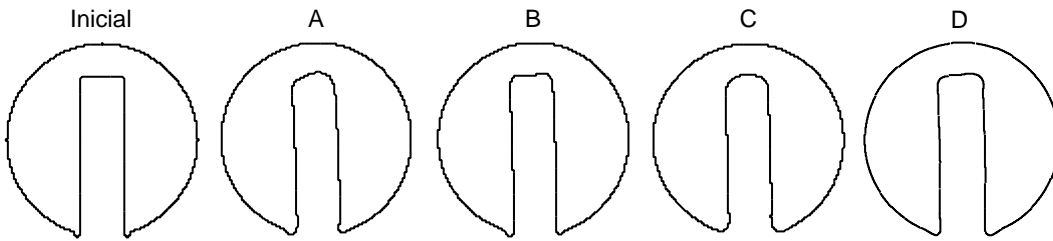


Figura 6.5: Estado inicial y finales de los casos A, B, C y D para el disco de Zalesak.

Una vez completa una revolución de la figura en $t_f = 1$ s se compara la solución final con la condición inicial, para las siguientes alternativas:

- advección con renormalización para una malla estructurada de 131000 triángulos (256 elementos por lado), $\Delta t = 1/(200\pi)$ s ≈ 0.0016 s para un $Co \approx 1$ sobre la parte del disco más alejada del centro de rotación, $n_{\text{reno}} = 10$, $\kappa = (3h)^2 = 1.4 \times 10^{-4}$ m² y $M = 2000$;
- advección con renormalización para una malla estructurada de 524000 triángulos (512 elementos por lado), $n_{\text{reno}} = 20$, $\kappa = (3h)^2 = 3.4 \times 10^{-5}$ m² y $M = 2000$, en este caso con $\Delta t \approx 8 \times 10^{-4}$ s;

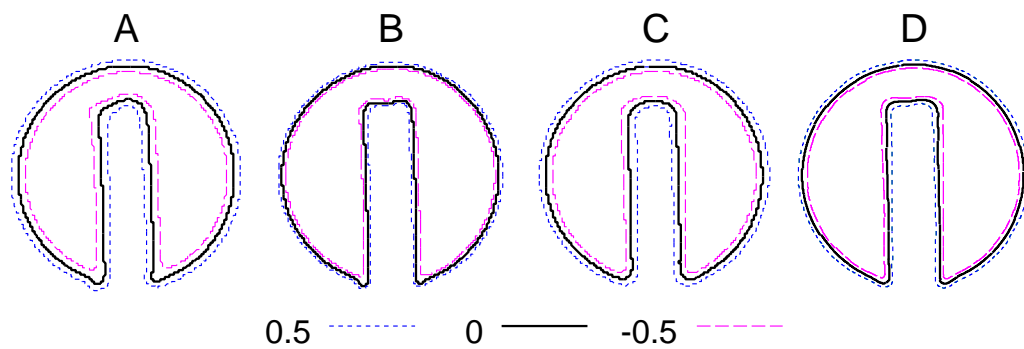


Figura 6.6: Curvas de nivel de los casos A, B, C y D para el problema del disco ranurado.

- C. advección sin renormalización, estabilizada con SUPG estándar sobre 131000 elementos triangulares, $\Delta t = 1/(200\pi)$ s ≈ 0.0016 s;
- D. advección sin renormalización, estabilizada con SUPG estándar sobre 524000 triángulos, $\Delta t \approx 8 \times 10^{-4}$ s;

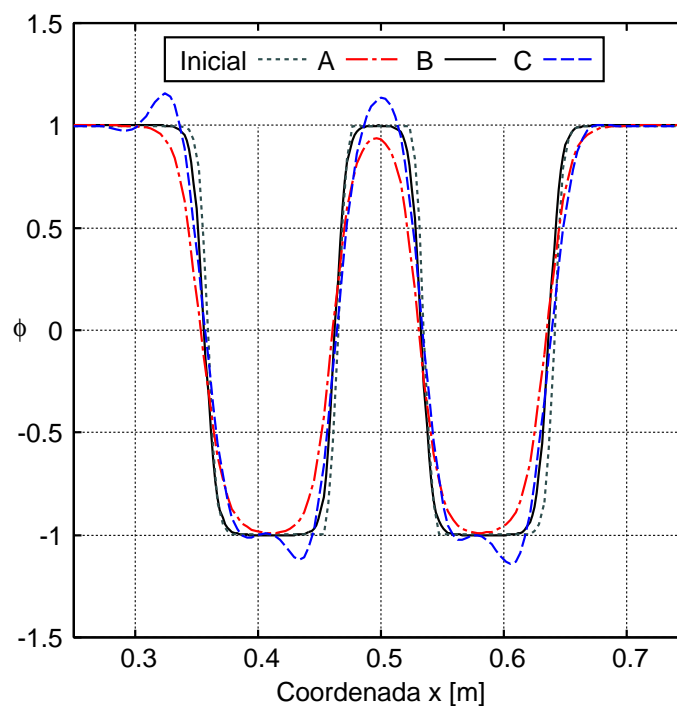


Figura 6.7: Sección en $y \approx 0.70$ m para las alternativas A, B y C en el ejemplo de Zalesak.

La Fig. 6.5 muestra la configuración inicial y las finales para los casos renormalizados (A, B) y sin renormalizar (C, D), resueltos con la misma discretización de alrededor de 131000 elementos en A y C, y para 524000 elementos en B y D, en el instante $t = t_f$. Las diferencias entre las soluciones numéricas en la Fig. 6.5 es escasa, aunque una comparación realizada sobre las mismas curvas pero incluyendo las curvas de nivel para $\phi = \pm 0.5$ (Fig. 6.6) permite contrastar la suavidad de la transición en uno y otro campo solución: las alternativas renormalizadas (A y B),

a diferencia de C y D, muestran uniformidad en el ancho de la faja de transición en todo el contorno de la figura y una captura ligeramente mejor de las esquinas angulosas. Cabe mencionar en este punto que tanto en A como en B la cantidad de elementos comprendidos en el semiancho de transición ε es de aproximadamente 10. Si además se practica una sección en $y \approx 0.70$ m y se comparan el estado inicial con los cálculos en A, B y C, es posible verificar la regularidad que muestran A y B en $-1 < \phi < 1$, véase la Fig. 6.7.

Se realizó otro análisis con advección, en este caso sin estabilización, para los mismos parámetros que en C, cuyos resultados muestran inestabilidad numérica en la figura final, razón por la cual se los descartó a los fines del análisis. En cuanto a la variante C, la adopción de una estabilización mediante SUPG aporta una solución de mayor calidad, aunque igualmente se aprecian algunos rastros de inestabilidad numérica en máximos y mínimos para la solución obtenida con esta variante, que pueden verse en la Fig. 6.7 y se registran de manera similar para el caso D.

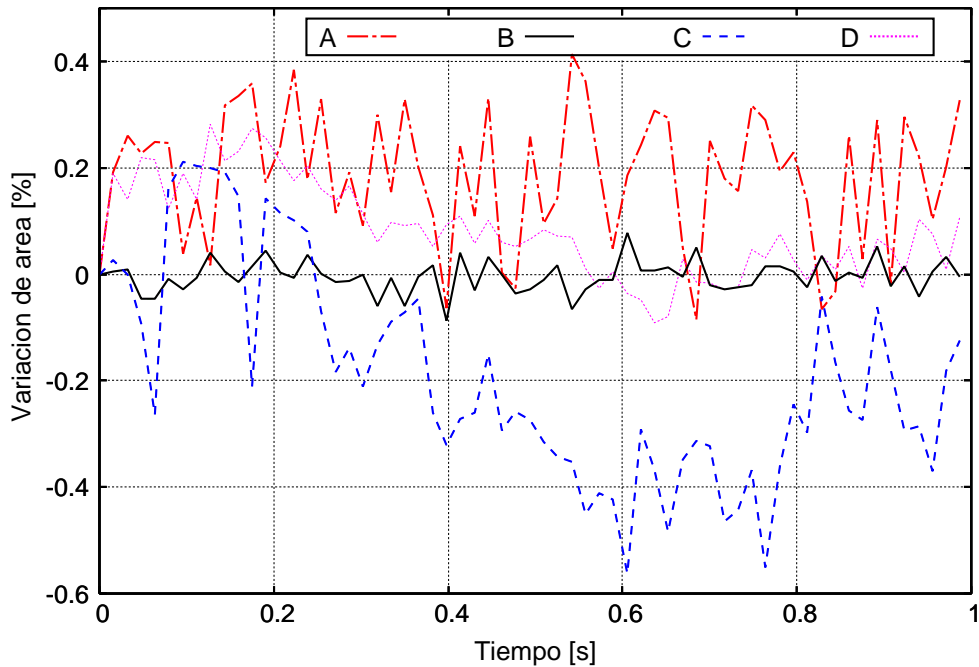


Figura 6.8: Variación del área de $\phi < 0$ a lo largo del análisis en el problema del disco ranurado.

La variación del volumen, o en este caso del área, de la región encerrada por $\phi = 0$ es a lo sumo de 0.6%, y es mayor para las discretizaciones con elementos de mayor tamaño. Estos parámetros son resumidos en la Fig. 6.8, donde puede verse que para las alternativas con renormalización las variaciones de área son de menor amplitud e incluso de variación más uniforme al avanzar el análisis en el tiempo.

El caso B, de mayor refinamiento, es el que mejor reproduce la solución exacta (Fig. 6.6), lo cual permite verificar que el método de advección de la función de nivel con renormalización cumple con la propiedad de convergencia en malla. En relación con los resultados obtenidos en la Sec. 5.1.4.1, esta alternativa de advección con renormalización periódica muestra un mejor desempeño.

Debido a que las discretizaciones empleadas en la evaluación de este ejemplo son las mismas que las de la Sec. 6.3.2, el desempeño computacional del algoritmo

multiparalelo en uno y más procesadores resulta análogo al que se presentará en la citada sección.

6.3.2. Vórtice bidimensional

El problema de la “burbuja” sometida a un campo de deformaciones introducido en la Sec. 5.2.2 es retomado para evaluar el funcionamiento del algoritmo de advección-renormalización continua, en sus dos variantes.

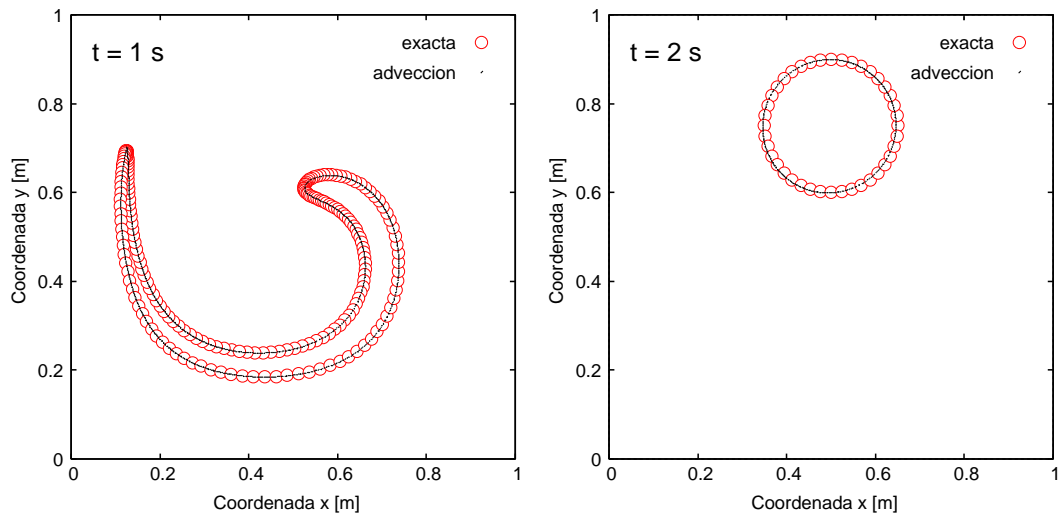


Figura 6.9: Curva de $\phi = 0$ en $t = 1$ s y $t = 2$ s para el vórtice 2D resuelto mediante advección sin estabilización.

Variante 1

La primer variante consiste en calcular la posición de la curva $\phi = 0$ en tiempo $t = 1$ s, para luego invertir el campo de velocidades y analizar la magnitud de la diferencia entre la posición inicial de dicha curva y la obtenida en $t = 2$ s, que debe ser idéntica a la inicial.

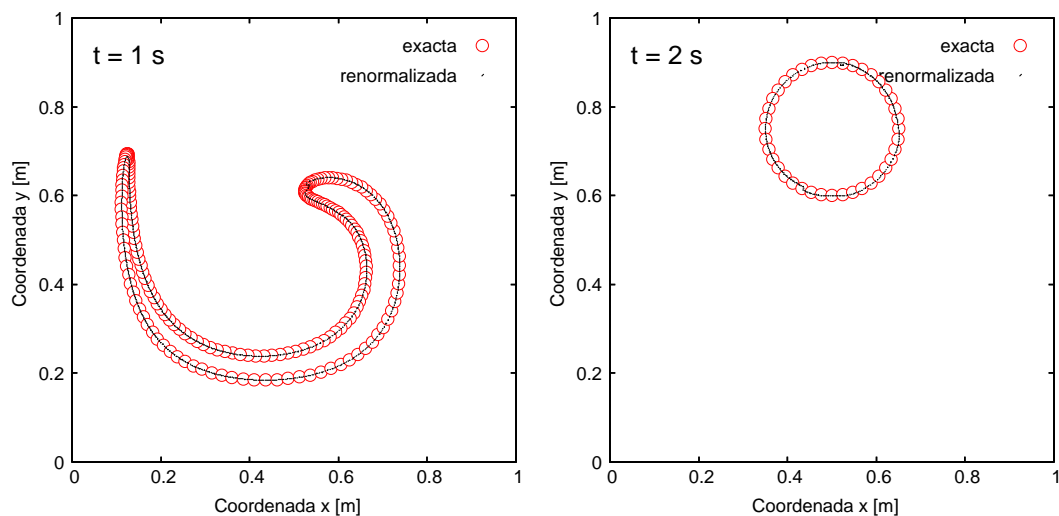


Figura 6.10: Curva de $\phi = 0$ en $t = 1$ s y $t = 2$ s para el vórtice 2D resuelto mediante advección sin estabilización renormalizada.

Esta primer variante fue resuelta de dos maneras: la primera consistió en un problema de advección pura, sin estabilización ni renormalización, que debido a la suavidad del campo de velocidades y de la función de nivel ϕ advectada muestra un muy buen resultado en la Fig. 6.9. El mismo problema fue resuelto para una renormalización cada $n_{\text{reno}} = 10$ pasos de tiempo (Fig. 6.10), con los parámetros $\kappa = (2h)^2 = 0.0039 \text{ m}^2$ y $M = 2000$. En ambos casos, el dominio se discretizó mediante unos 131000 elementos triangulares lineales, de a 256 elementos por lado, y para $\text{Co} = 0.5$ se determinó $\Delta t = 1.95 \times 10^{-3} \text{ s}$.

Si bien las diferencias entre los resultados obtenidos para advección con y sin estabilización no muestran diferencias notables, sí debe destacarse que para $t = 2 \text{ s}$ el caso renormalizado muestra una mejor aproximación a la solución exacta. Por otro lado, la variación en el volumen de $\phi > 0$ es muy escasa para $t = 2 \text{ s}$ en ambos casos: los errores son de 0.18 % para transporte y de 0.14 % para el transporte reinicializado.

Variante 2

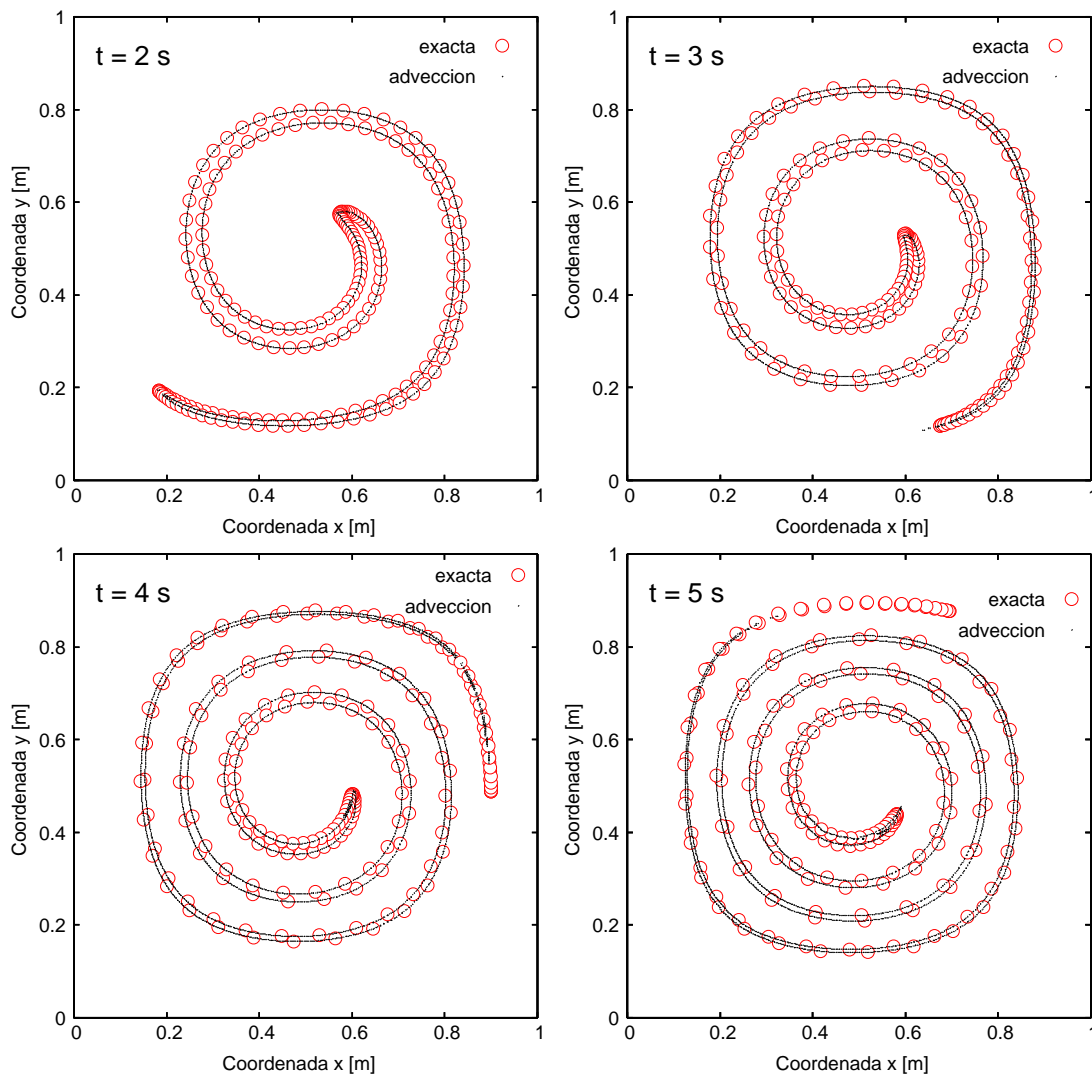


Figura 6.11: Curva de $\phi = 0$ en distintos instantes para el vórtice 2D resuelto mediante advección sin estabilización (A).

Esta variante consiste en mantener el campo de velocidades inicial dado por las Ecs. (5.15) y (5.16) hasta $t = 5$ s, tras lo cual se aprecia la transformación del disco en una especie de cinta delimitada por la curva de $\phi = 0$, circunstancia que constituye una exigencia en cuanto a conservación de masa y a la habilidad del algoritmo para seguir de manera precisa la deformación de la “burbuja”.

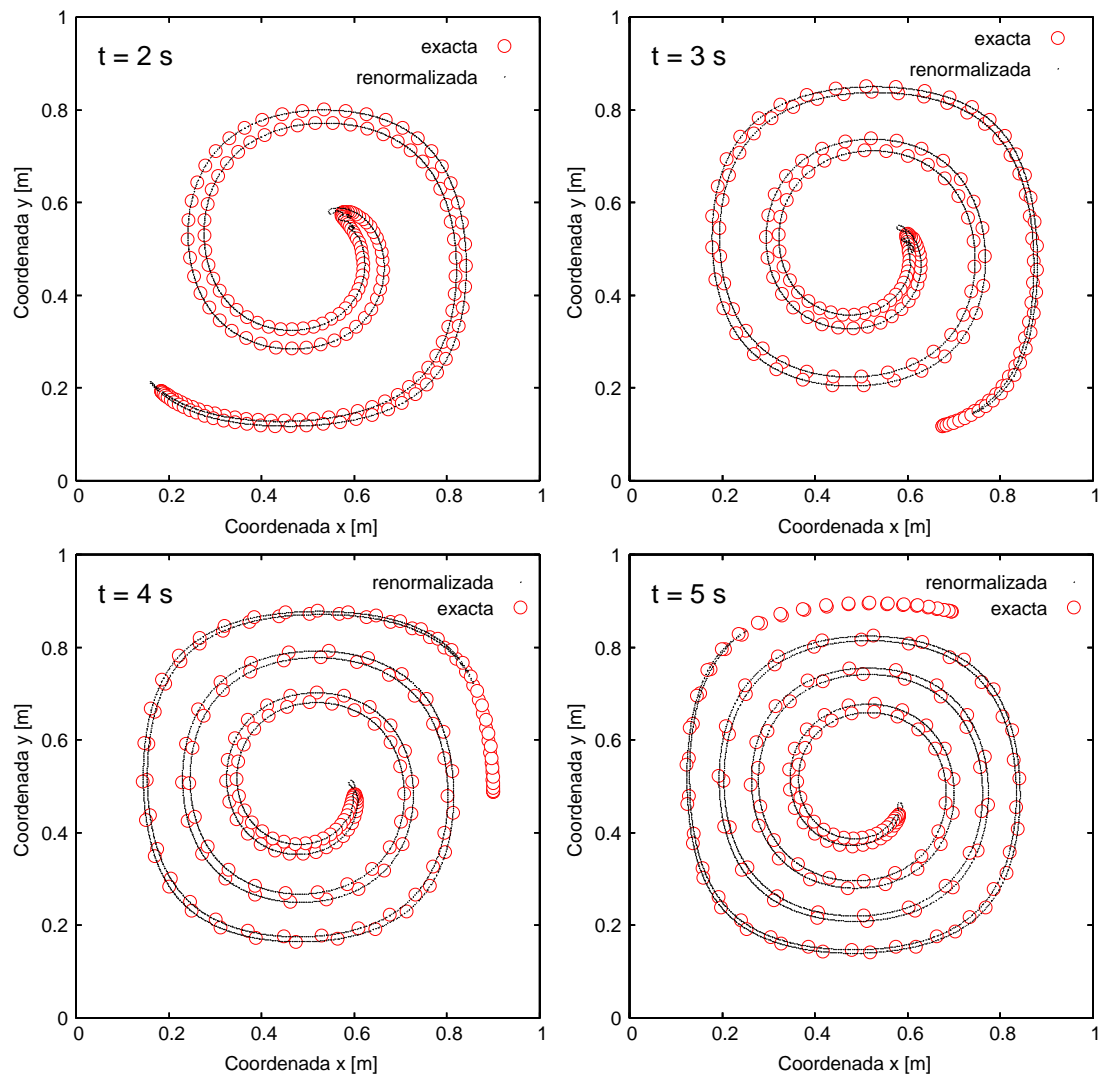


Figura 6.12: Curva de $\phi = 0$ en distintos instantes para el vórtice 2D resuelto mediante advección renormalizada (B).

En esta oportunidad, el problema se resolvió de tres maneras distintas:

- A. mediante advección pura, sin estabilización, para una discretización uniforme de alrededor de 131000 elementos triangulares lineales, a razón de 256 elementos por lado del dominio;
- B. con advección y renormalización cada $n_{\text{reno}} = 10$ pasos de tiempo, sobre la misma discretización que en A, con $\kappa = h^2 = 1.53 \times 10^{-5} \text{ m}^2$ y $M = 2000$;
- C. como en B, pero para 512 elementos por lado, renormalizado con $\kappa = h^2 = 3.81 \times 10^{-6} \text{ m}^2$ y $M = 2000$.

En las tres alternativas se mantuvo $\text{Co} = 0.5$, con lo cual en A y B se adoptó $\Delta t = 1.95 \times 10^{-3}$ s, mientras que para C fue $\Delta t = 9.77 \times 10^{-4}$ s.

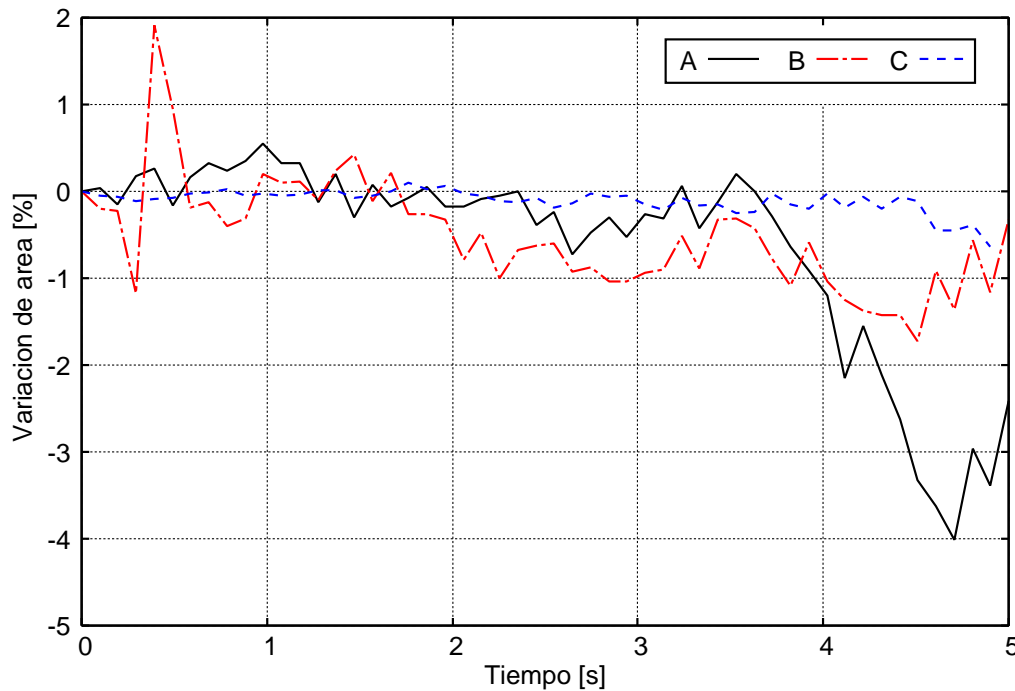


Figura 6.13: Variación del área de $\phi > 0$ según las alternativas propuestas para el vórtice 2D.

Una observación de las Figs. 6.11 y 6.12 muestra nuevamente escasa diferencia en la calidad de las soluciones entre las alternativas de transporte puro y la de transporte más renormalización, e incluso cierta ventaja en la curva sin renormalizar. A pesar de ello, la evaluación de otros parámetros hace que dicha ventaja sea menor a otras que provee la renormalización, como por ejemplo la conservación de masa. En la Fig. 6.13 se ha graficado la variación de la cantidad de líquido ($\phi > 0$) en función del tiempo, donde se evidencia que para $t > 4$ s la disminución de volumen en el caso A pasa a ser más notoria, en tanto que el refinamiento de la malla que caracteriza el caso C hace que las variaciones sean siempre de menor magnitud.

Otro aspecto a tener en cuenta al evaluar el desempeño de la metodología de renormalización es el uso de una formulación en la cual puede o no incluirse estabilización al resolver el transporte. Para los ejemplos englobados en la Sec. 6.3, las soluciones numéricas renormalizadas han sido obtenidas sin ningún tipo de estabilización en la instancia de transporte de la función de nivel ϕ . En este caso, la solución obtenida para el caso A tampoco fue estabilizada numéricamente, lo que trae las siguientes consecuencias: (i) la solución es menos difusiva, lo cual explica su buen desempeño en el seguimiento de $\phi = 0$, y (ii) se presentan inestabilidades en el campo solución, que para $t = 5$ s se aprecian en la sección transversal de la solución practicada sobre $y = 0.5$ m, en la Fig. 6.14, donde se incluye además la variación para el caso B, de igual discretización.

El uso de una metodología estabilizada con SUPG para la advección del campo de ϕ conlleva una difusión numérica tal que las regiones estrechas, que en este caso son de $\phi > 0$, sean suavizadas a lo largo del análisis tanto en el valor de ϕ como en el contorno de la curva $\phi = 0$. Para ilustrar esta circunstancia, se resolvió el caso A con estabilización SUPG estándar y se obtuvieron los resultados mostrados en

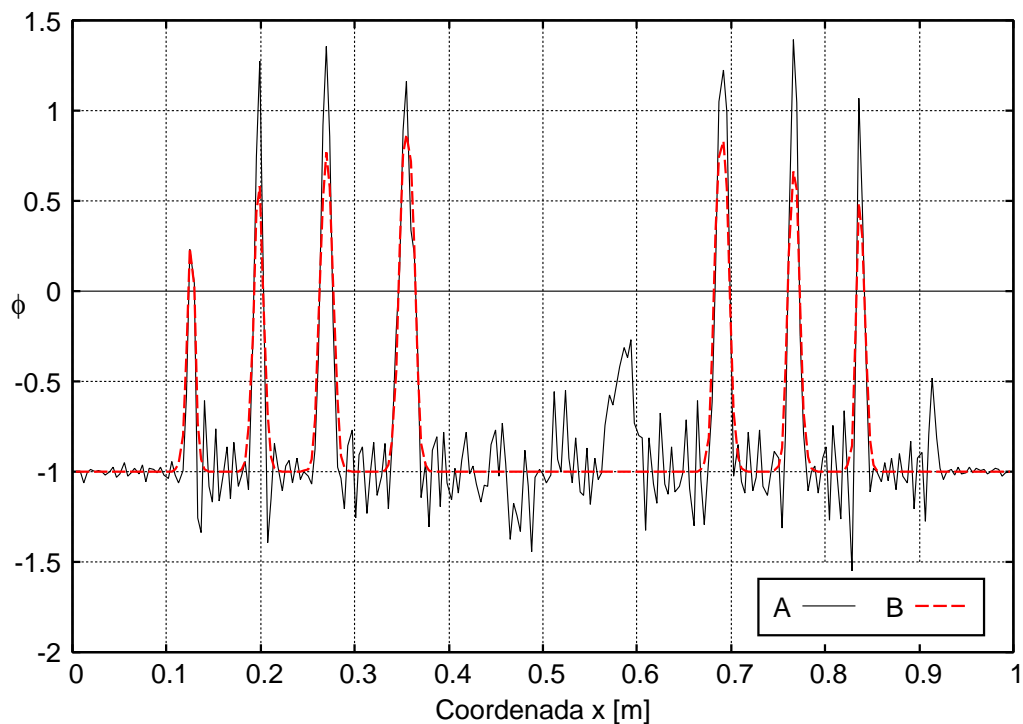


Figura 6.14: Sección en $y = 0.5$ m del vórtice bidimensional en $t = 5$ s para las resoluciones A y B.

la Fig. 6.15, que muestran una disminución del 26 % en el área de función de nivel positiva, ya que la figura prácticamente ha desaparecido en el extremo más delgado, en tanto que la sección en $y = 0.5$ m muestra la variación de ϕ de manera suavizada, aunque aún así se identifican picos en torno a $\phi = -1$.

Para completar la exposición del ejemplo, se presenta la curva de $\phi = 0$ (Fig. 6.16) obtenida al resolver con la discretización más refinada, variante C, que muestra un seguimiento mucho mejor de la forma exacta de la curva en relación a las alternativas A y B de las Figs. 6.11 y 6.12, especialmente en el extremo exterior de la curva representada.

En referencia al método de Olsson y Kreiss [OK05], véase la Sec. 2.3.3.3, al realizar un análisis con los resultados para 256 elementos por lado, en su caso cuadrángulos, se aprecia la fragmentación de la fase “líquida” a partir de $t = 2$ s, lo cual se acentúa para instantes siguientes, pero no se verifica para el presente método, por ejemplo, en el caso B (Fig. 6.12), a pesar de su similitud con el dicha publicación.

Tiempos de ejecución

Los tiempos de ejecución y los parámetros de caracterización de paralelismo, definidos mediante las Ecs. (4.46) y (4.47) para aceleramiento y eficiencia porcentual, respectivamente, fueron establecidos para dos discretizaciones.

En primer lugar, se llevaron adelante mediciones de tiempo con la malla de 256 elementos por lado durante 100 pasos de tiempo y para distinta cantidad de procesadores del *cluster* Aquiles [Aqu08], resultando los tiempos, el aceleramiento y la eficiencia porcentual según la cantidad de procesadores p dados en la Tabla 6.1.

Es llamativa en la Tabla 6.1 la presencia de valores de aceleramiento ligeramente

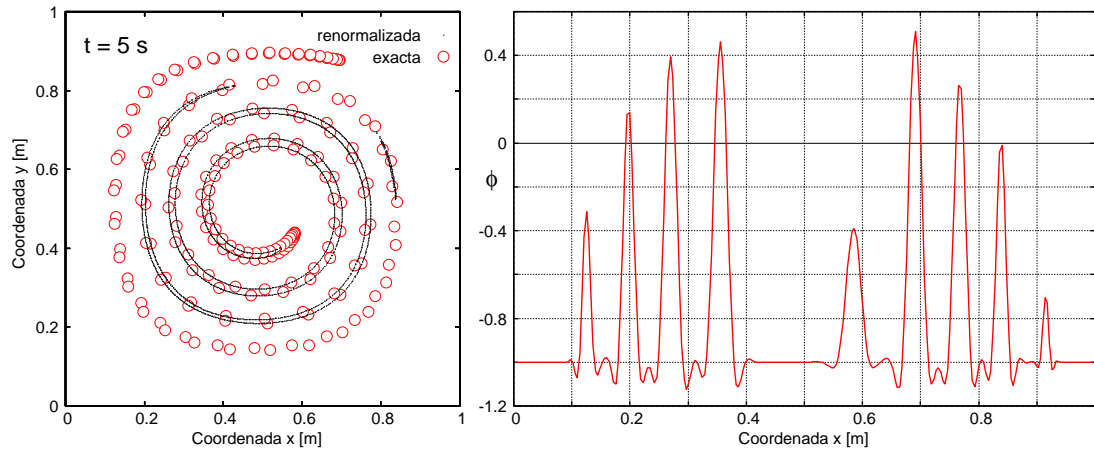


Figura 6.15: Vórtice bidimensional resuelto mediante transporte estabilizado con SUPG en $t = 5$ s. A la izquierda, curva de $\phi = 0$. A la derecha, sección en $y = 0.5$ m.

p	t_p [s]	t_p [min]	S_p	$E\%$
1	1871.3	31.18	-	-
2	883.0	14.72	2.12	105
4	458.4	7.64	4.08	102
8	312.7	5.21	5.98	75
16	228.3	3.80	8.20	51

Tabla 6.1: Tiempos de ejecución t_p , en segundos y en minutos, aceleramiento S_p y eficiencia $E\%$ para distinta cantidad de procesadores p en el problema del vórtice bidimensional a lo largo de $100 \Delta t$.

superiores a p, lo que se denomina *speedup* superlineal. Esto podría deberse a que, al particionar el problema, cada procesador recibe tal cantidad de información que ésta permanece en las jerarquías superiores de la memoria, reduciendo sustancialmente los tiempos de acceso a ésta y compensando otros factores que producen el efecto contrario, como el incremento de los tiempos de comunicación al aumentar p.

En la discretización de 512 elementos por lado se determinaron los tiempos de ejecución con $p = 1$ y $p = 15$ procesadores para 10 pasos de tiempo, resultando $t_1 = 21.32$ min y $t_{15} = 2.11$ min, siendo para este último caso $S_{15} = 10.09$ y $E\% = 67$. A los fines prácticos, si debiera resolverse este problema en un único procesador, los 5120 pasos de tiempo insumirían prácticamente 182 hs de cálculo, es decir, 7 días y 14 hs, en tanto que con $p = 15$ bastarían 18 hs para obtener el resultado final.

6.3.3. Campo de deformación tridimensional

Un caso tridimensional análogo al 2D de la Sec. 6.3.2 fue introducido por LeVeque [LeV96], para luego ser considerado por otros autores [EC07, EFM02, GNNB08]. El ejemplo consiste en la deformación de una esfera de radio $r_e = 0.15$ m delimitada por la superficie de nivel $\phi = 0$, cuyo centro se encuentra en coordenadas $(0.35, 0.35, 0.35)$ m, dentro del cubo unitario, para el campo de velocidades siguien-

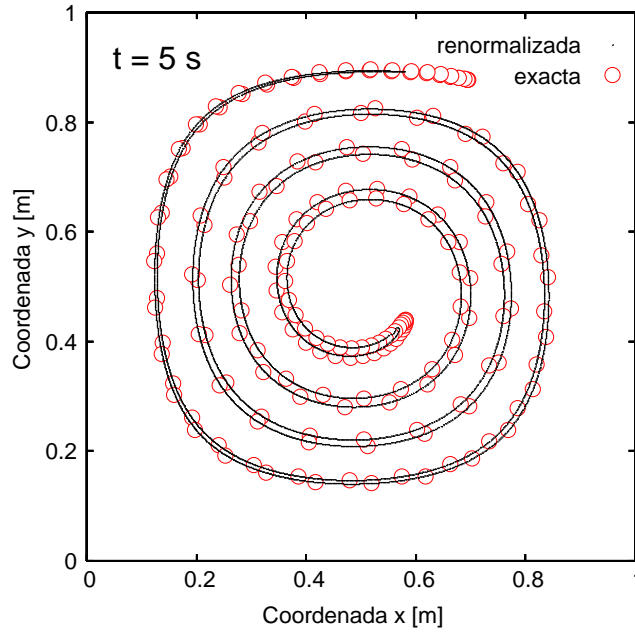


Figura 6.16: Curva de $\phi = 0$ en $t = 5$ s en el vórtice 2D resuelto con advección renormalizada, variante C.

te,

$$\begin{cases} v_x &= 2 \sin^2(\pi x) \sin(2\pi y) \sin(2\pi z) \cos\left(\frac{\pi t}{T_e}\right); \\ v_y &= -\sin(2\pi x) \sin^2(\pi y) \sin(2\pi z) \cos\left(\frac{\pi t}{T_e}\right); \\ v_z &= -\sin(2\pi x) \sin(2\pi y) \sin^2(\pi z) \cos\left(\frac{\pi t}{T_e}\right); \end{cases} \quad (6.15)$$

en las cuales se adopta un período $T_e = 3$ s. La evolución temporal propuesta genera dos vórtices contra-rotantes que a su vez producen una deformación creciente entre $t = 0$ y $t = 1.5$ s, resultando una forma aplastada y doblada sobre sí misma, en tanto que la inversión de las velocidades que se produce a partir de $t = 1.5$ s y hasta $t = 3$ s tiende a que se recupere la esfera inicial, permitiendo un análisis de la capacidad de representación de la interfase para el método.

El análisis se realizó sobre una malla de 100^3 hexahedros, con renormalización cada $n_{\text{reno}} = 5$ pasos de tiempo, $\Delta t = 0.0025$ s, $\kappa = 4h^2 = 4 \times 10^{-4}$ m² y $M = 2000$. La Fig. 6.17 muestra la evolución temporal de la superficie definida por $\phi = 0$, en la cual puede verse la aparición de un orificio en $t = 1.875$ s, mientras que la superficie de $\phi = 0$ muestra diferencias en las formas registradas entre $t = 3$ s y $t = 0$, y entre $t = 2.625$ s y $t = 0.375$ s, cuando deberían ser correspondientemente iguales debido al campo de velocidades impuesto. Estas diferencias pueden ser disminuidas mediante el refinamiento de la malla de elementos finitos empleada o, inclusive, bajando κ , esto es, disminuyendo el espesor de la transición para evitar la aparición de oquedades en los instantes en que la región encerrada resulta muy delgada.

En relación a la calidad de la solución, para la misma discretización, los resultados mostrados por Enright *et al.* [EFFM02] muestran para una metodología clásica de LS la desaparición de buena parte de la región de $\phi > 0$, en tanto que para un LS de partículas se obtiene una mejor calidad que para el resultado obtenido con el presente método, aunque con una representación más pobre en etapas intermedias.

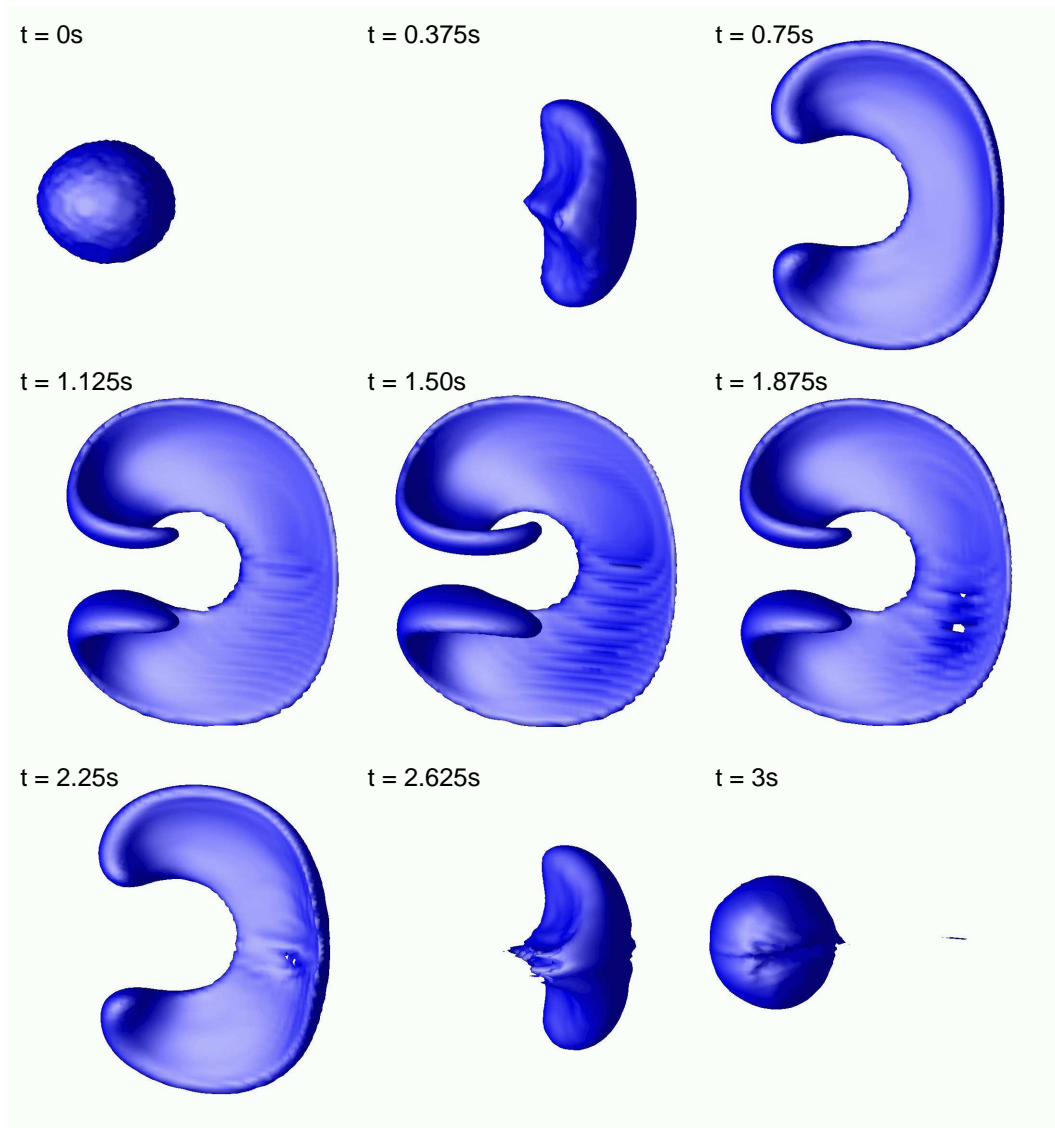


Figura 6.17: Superficie de $\phi = 0$ para distintos instantes en el vórtice 3D resuelto con advección renormalizada.

En una malla de tetrahedros de $h \approx 0.0075$ m y un paso de tiempo $\Delta t = 0.02$ s, Elias y Coutinho [EC07] obtienen con VOF resultados similares a los presentados en esta Tesis en cuanto a la forma final, aunque muestran dificultades en instantes intermedios con la aparición de oquedades. Este mismo ejemplo es muy bien resuelto con la metodología de seguimiento de interfase tipo *Moving-Least-Squares* de Gois *et al.* [GNNB08], pero para discretizaciones de 256^3 o 512^3 elementos, con lo cual no es posible establecer una comparación directa.

La resolución del ejemplo cuyos resultados se presentan insumió 16 hs y 40 min de procesamiento en 31 nodos *Pentium IV* del *cluster* Aquiles [Aqu08]. Cabe aclarar que no fue posible estimar tiempos de ejecución en un único procesador del *cluster* debido a la gran cantidad de incógnitas a resolver para 100^3 elementos. Por ello, se calcularon los tiempos de ejecución para una discretización de 75^3 elementos durante $10 \Delta t$, y con ellos se estimaron los tiempos requeridos para completar los 900 pasos de tiempo que corresponden al período completo, indicados en la Tabla 6.2. A su

vez, en la misma tabla se incluyen el aceleramiento S_p y la eficiencia porcentual $E\%$ para la cantidad de procesadores p .

p	t_p [min]	t_p [hs]	S_p	$E\%$
1	5218.5	86:58	-	-
4	2415.0	40:15	2.16	54
16	708.0	11:48	7.37	46
31	417.5	06:58	12.5	40

Tabla 6.2: Tiempos de ejecución t_p para un período, que comprende $900\Delta t$, aceleramiento S_p y eficiencia $E\%$ según el número de procesadores p en el problema del campo de deformaciones tridimensional para 75^3 elementos.

Además, se estimó el tiempo de resolución de este mismo problema para una discretización de 150^3 elementos, esto es, 3 375 000 hexahedros, que sería de 50 hs con 25 min para los 1800 pasos de tiempo necesarios en 40 procesadores de Aquiles, en el caso óptimo de no compartir recursos con otros usuarios.

6.4. Ejemplos de flujo con superficie libre

6.4.1. Pequeños desplazamientos

El método de captura de interfase propuesto persigue fundamentalmente los casos de grandes desplazamientos de la SL, pero igualmente admite una validación

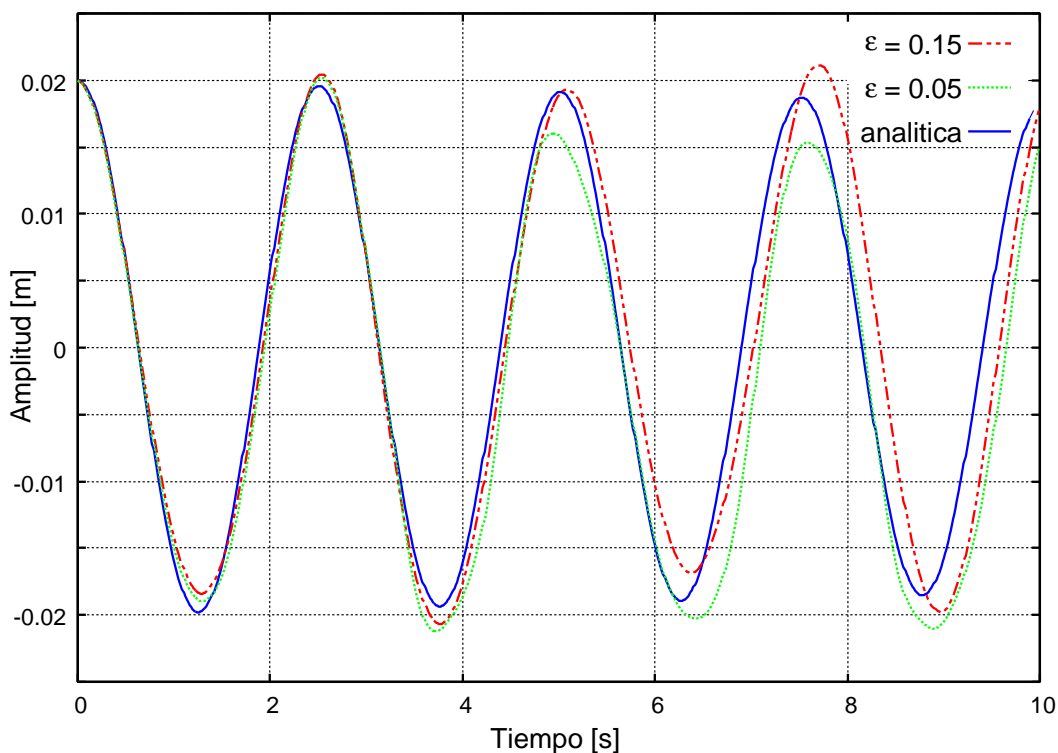


Figura 6.18: Desplazamiento de la SL sobre el lado izquierdo del dominio para el problema de *sloshing* con pequeños desplazamientos resuelto sin renormalización.

para pequeños desplazamientos. Para ello, el problema seleccionado consiste en el movimiento de la interfase entre dos fluidos viscosos con una onda sinusoidal como condición inicial, cuya amplitud es amortiguada por la viscosidad del fluido durante la evolución temporal. Este ejemplo ha sido introducido en la Sec. 5.1.4.2, y se ha repetido para esta metodología con los mismos datos físicos, geométricos, de discretización temporal y espacial, así como también condiciones de contorno.

La resolución de las distintas variantes a presentar de este problema fue realizada en el procesador de la computadora de escritorio o en pocos procesadores del *cluster*, debido a su bajo costo computacional.

En primer lugar, se presentan los resultados obtenidos realizando la advección de la función ϕ estabilizada con SUPG sin reinicialización. La Fig. 6.18 muestra la evolución de la altura de la SL medida sobre la sección izquierda del dominio para dos anchos distintos de la franja de transición: $\varepsilon = 0.15$ m y $\varepsilon = 0.05$ m, donde puede verse que una transición más ancha permite un mejor seguimiento de la SL, con menor pérdida de amplitud. Además, dicho ancho de transición no se ve modificado de manera significativa a lo largo del análisis, lo cual puede verse en el perfil de ϕ sobre la izquierda para el último instante del análisis ($t = t_f$), en la Fig. 6.19. También se monitoreó la variación del área de $\phi > 0$, es decir, la

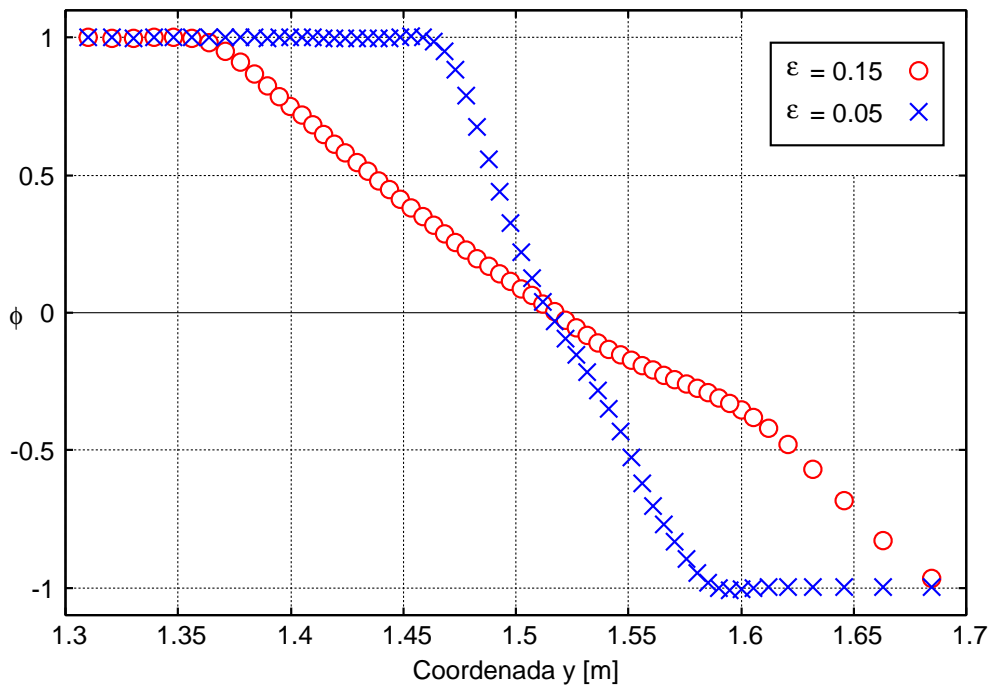


Figura 6.19: Transición de ϕ en $t = t_f$ para la sección de la izquierda del dominio del problema de Prosperetti resuelto sin renormalización.

conservación del fluido inferior, que resulta ser menor para el caso de $\varepsilon = 0.15$ m, en tanto que para $\varepsilon = 0.05$ m es alrededor de seis veces mayor, esto es, 0.05% y 0.3% respectivamente, como se indica en la Fig. 6.20. Si bien una faja de transición de menor ancho permite una integración con propiedades menos perturbadas al resolver el problema del fluido, la advección del campo de ϕ es más precisa cuanto más suave es el paso de un fluido al otro, y es por ello que cuando ε es mayor, la disminución en la masa de líquido es menor.

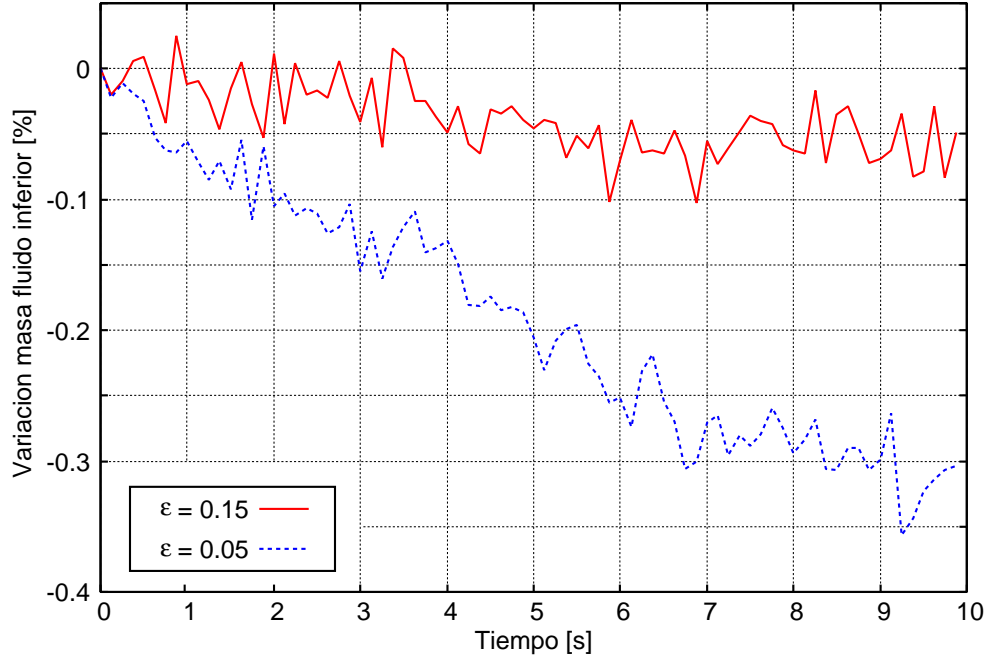


Figura 6.20: Variación de la masa de fluido inferior en el problema de *sloshing* resuelto con advección sin renormalizar.

Debido a la escasa magnitud de los desplazamientos de la SL, no es necesario realizar la renormalización del campo de ϕ . No obstante, se realizaron análisis numéricos incluyendo esta instancia para evaluar su influencia sobre los resultados que aporta el paso de advección. Para ello, se propuso $M = 100$, para experimentar con parámetros de renormalización $\kappa = (4h)^2$ o $\kappa = (8h)^2$, y con $n_{\text{reno}} = 5$ o $n_{\text{reno}} = 10$, comparando los resultados con aquellos obtenidos únicamente con advección. La primer comparación se realiza entre la solución analítica y las curvas de amplitud obtenida para distintos valores de n_{reno} , Fig. 6.21, en el caso de $\kappa = (8h)^2$, soluciones numéricas entre las cuales hay muy escasa diferencia para amplitudes máximas, pero un desempeño apenas mejor en amplitudes mínimas para $n_{\text{reno}} = 5$. Al igual que con los desplazamientos de la SL, la variación de la masa es muy similar en ambos casos, como se ve en la Fig. 6.22, aunque en este caso puede verificarse que la disminución del valor de los picos de amplitud está relacionada estrechamente con el descenso de la masa del fluido, ya que una pérdida de 0.18% en relación a H_l es equivalente a bajar el cero de la función analítica en 0.003 m (Fig. 6.21).

Entre las diferencias de interés entre el problema resuelto con y sin renormalización se encuentra la del perfil de transición entre $\phi = 1$ y $\phi = -1$, representado para una resolución sin reinicialización con $\varepsilon = 0.15$ m y otra reinicializada cada $n_{\text{reno}} = 10$ con $\kappa = (8h)^2$ en la Fig. 6.23. La diferencia sustancial entre ellos es la regularidad de la transición para $n_{\text{reno}} = 10$, que se produce en una faja de alrededor de 64 elementos, en tanto que la solución no renormalizada muestra algunas perturbaciones en relación a la variación inicial, propuesta lineal.

Por otro lado, en cuanto a la curva de desplazamiento vertical de la superficie libre medida a la izquierda del dominio, en la Fig. 6.24 se han superpuesto la curva analítica, la curva obtenida para advección con $\varepsilon = 0.15$ m y las determinadas con renormalización cada 10 pasos de tiempo ($n_{\text{reno}} = 10$) para los casos de $\kappa = (8h)^2$

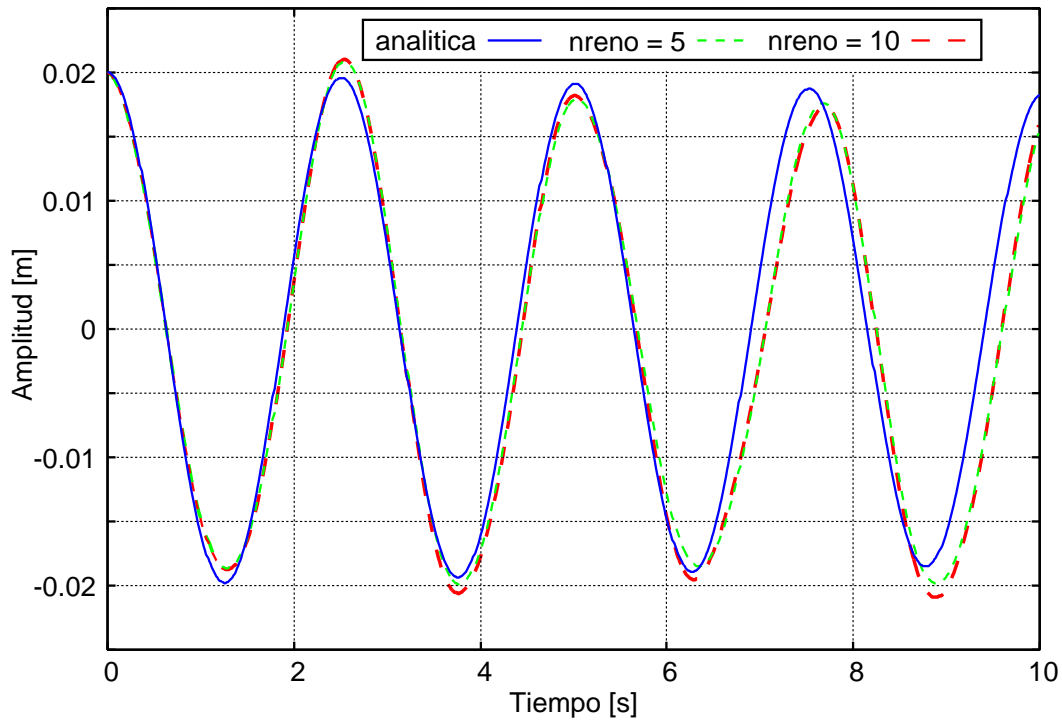


Figura 6.21: Desplazamiento de la SL sobre el lado izquierdo del dominio para el problema de *sloshing* con pequeños desplazamientos con renormalización periódica.

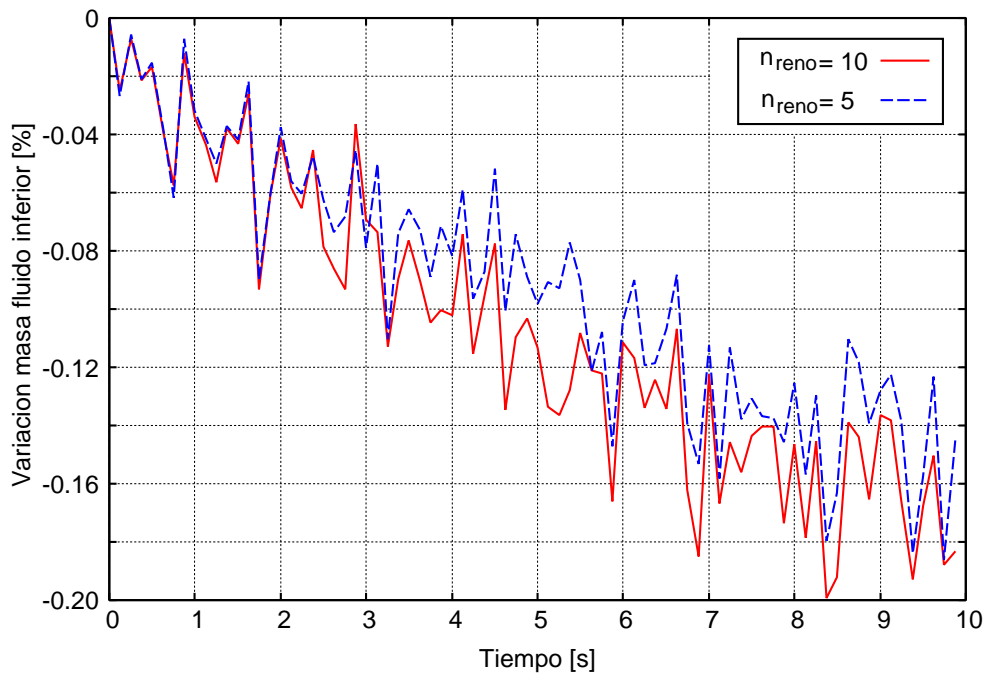


Figura 6.22: Variación de la masa del líquido inferior en el problema de pequeños desplazamientos con renormalización periódica.

y $\kappa = (4h)^2$. En las curvas de las resoluciones numéricas se destaca la pérdida de altura que se verifica cuando la transición es más estrecha ($\kappa = (4h)^2$), en tanto que las dos curvas numéricas restantes se aproximan mejor a la analítica.

Este problema ha sido resuelto en Herrman [Her08] y en Carrica *et al.* [CWS04],

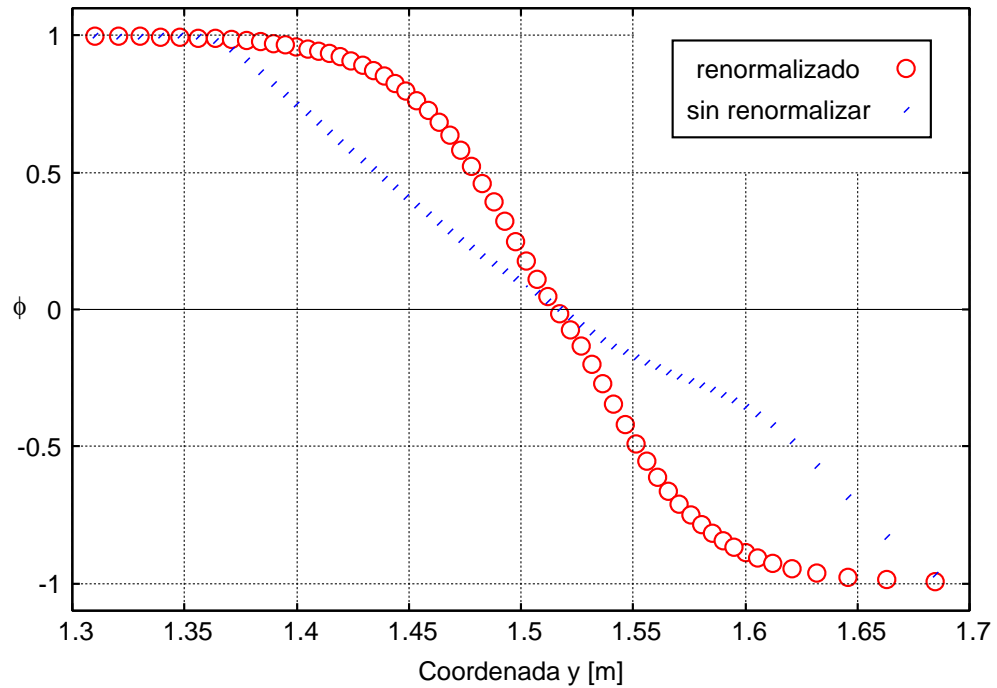


Figura 6.23: Comparación de perfiles de transición sobre la izquierda del dominio en $t = t_f$ para resolución con y sin renormalización.

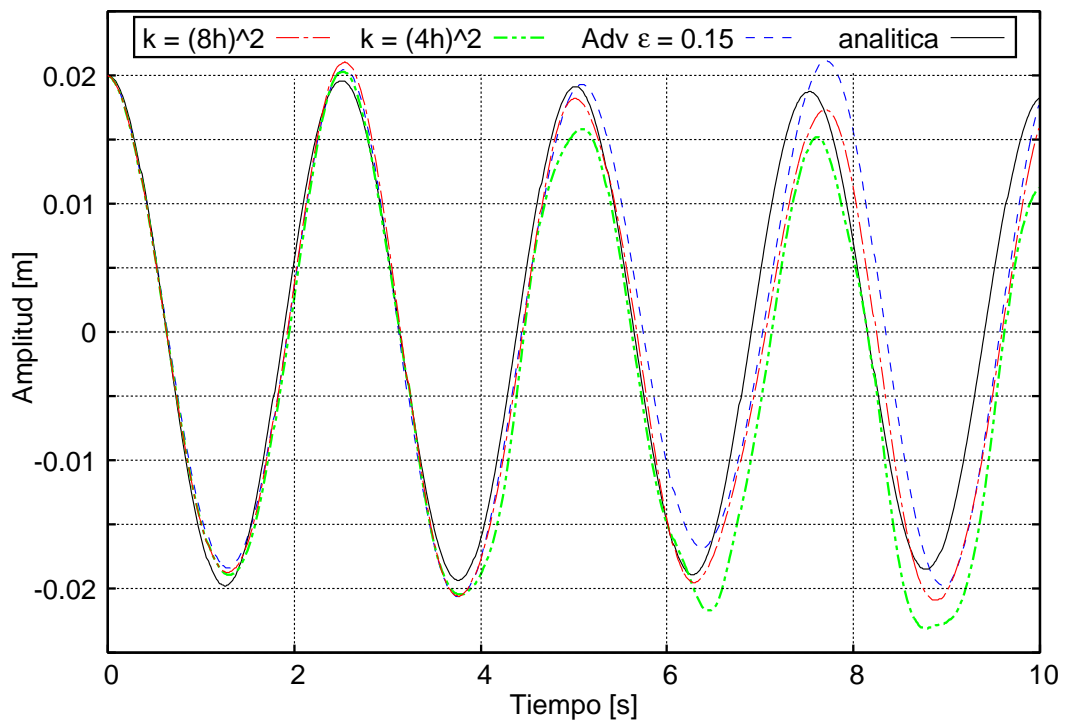


Figura 6.24: Curvas de evolución de amplitud para el problema de Prosperetti con y sin renormalización.

en tanto que un ejemplo similar fue abordado Sussman *et al.* [SFSO98], entre otros, mediante metodologías tipo LS, siendo los resultados obtenidos a través del método presentado en esta Tesis de calidad comparable a los citados, en particular los

resueltos sin renormalización.

La resolución de este ejemplo permite extraer determinadas conclusiones sobre la metodología. En primer lugar, el empleo de un paso de renormalización periódico no aporta mejoras de importancia a la resolución cuando los desplazamientos de la superficie libre ($\phi = 0$) son de escasa magnitud y las velocidades de los fluidos son pequeñas. Además, se comprobó que, con o sin reinicialización, una transición más ancha mejora sustancialmente los resultados, no sólo en relación al movimiento de la SL sino también con respecto a la conservación de masa.

6.4.2. Colapso de una columna de agua en 2D

El problema de rotura de presa empleado para evaluar la advección auto-renormalizada en la Sec. 5.1.4.3 es resuelto mediante advección renormalizada sobre una geometría distinta a la anterior, en la cual el dominio Ω es de un ancho de $W_d = 0.228$ m y $H_d = 0.228$ m de altura, en tanto que la columna de agua está definida por $W_c = 0.057$ m y $H_c = 0.114$ m. Estas dimensiones, con una relación de aspecto $r_a = H_c/W_c = 2$ para la columna a colapsar, coinciden con las adoptadas por Martin y Moyce [MM52] para reportar resultados sobre modelos físicos, los cuales serán tomados como referentes para la validación de la metodología.

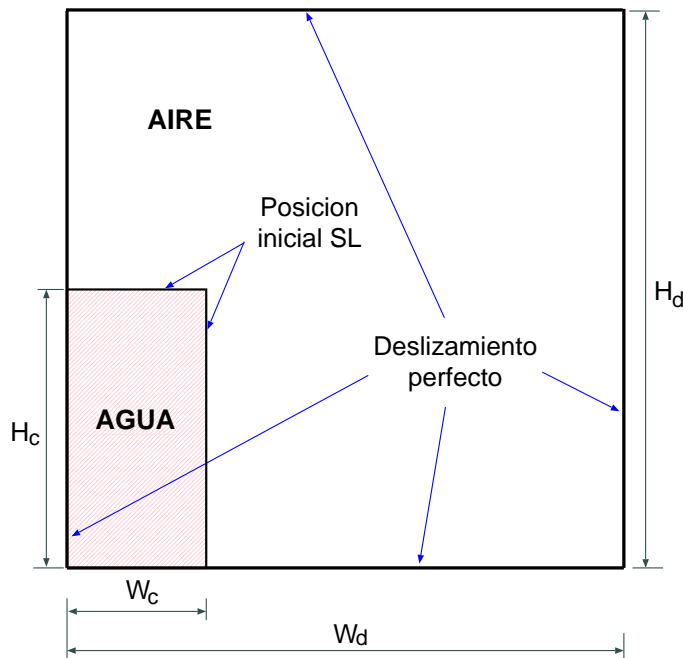


Figura 6.25: Geometría para el problema de colapso de una columna de agua.

Las propiedades de los fluidos son las correspondientes al agua en la fase líquida, con densidad $\rho_l = 1000$ kg/m³ y viscosidad dinámica $\mu_l = 1.0 \times 10^{-3}$ kg/(m s), y para la fase gaseosa son $\rho_g = 1$ kg/m³ y $\mu_g = 1.0 \times 10^{-5}$ kg/(m s), respectivamente.

Las condiciones de contorno para el problema de NS son de deslizamiento sobre todo el contorno del dominio, es decir, $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$ con \mathbf{n} el vector normal a la pared, como se indica en la Fig. 6.25, y la presión se encuentra impuesta en $p = 0$ en la frontera superior. El problema de advección, a resolver en ADVDF, no requiere condiciones de contorno sobre la función de nivel ϕ pues no hay secciones

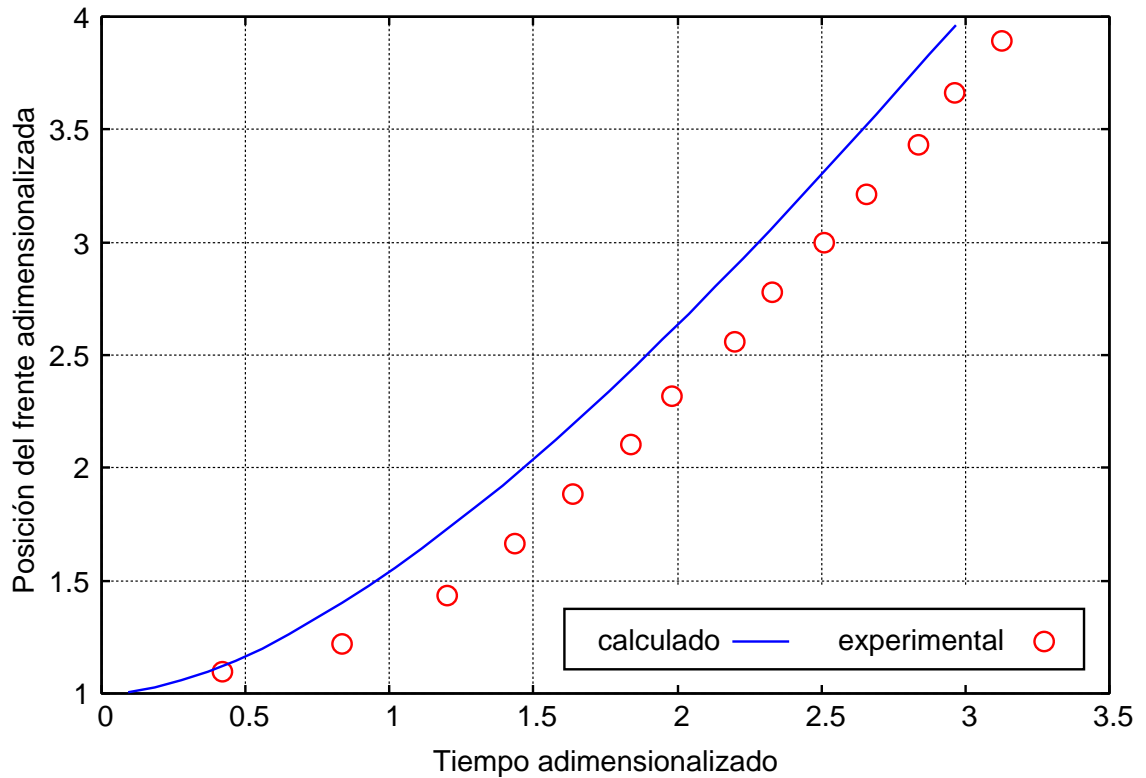


Figura 6.26: Avance del frente de onda en función del tiempo para el problema de colapso de la columna de agua.

de ingreso de fluido. En lo que refiere a condiciones de iniciales, dado que ambos fluidos se encuentran en reposo al momento de liberar la columna de agua a la acción de la gravedad, es $\mathbf{v}_0 = \mathbf{0}$ en el problema del fluido, mientras que el mapa de ϕ está definido de manera tal que los nodos correspondientes a la columna de agua verifican $0 < \phi \leq 1$ y los restantes se encuentran incluidos en el intervalo $-1 \leq \phi < 0$, con $\phi = 0$ indicando la posición inicial de la SL. Una vez que el análisis ha comenzado, la columna de agua se ve afectada por la aceleración vertical de la gravedad, $g = 9.81 \text{ m/s}^2$, y colapsa.

La simulación computacional fue llevada adelante hasta un tiempo final $t_f = 5.0 \text{ s}$ en 10000 pasos de tiempo, a razón de un $\Delta t = 0.0005 \text{ s}$, con integración implícita en las instancias de ADVDFIF y NS. La malla de elementos finitos se compone de elementos triangulares con lados de $h \approx 0.0014 \text{ m}$, conformando una grilla estructurada de alrededor de 26000 nodos, refinada en la parte inferior derecha del dominio, siendo utilizada tanto para la resolución del NS como para las de ADVDFIF y RENOR.

Los parámetros de renormalización adoptados son $\kappa = (2.5h)^2 = 1.27 \times 10^{-5} \text{ m}^2$ y $M = 1000$, con renormalización en todos los pasos de tiempo debido a la complejidad que muestra el patrón de flujo.

La Fig. 6.26 representa en ordenadas la posición del agua en dirección horizontal adimensionalizada con el ancho de la columna W_c , y en abscisas el tiempo adimensionalizado $t^* = t\sqrt{2g/W_c}$, para los datos experimentales de Martin y Moyce [MM52] y para los resultados numéricos obtenidos. Como puede verse, la curva calculada no coincide exactamente con la obtenida en los ensayos, pero se verifica que la pendien-

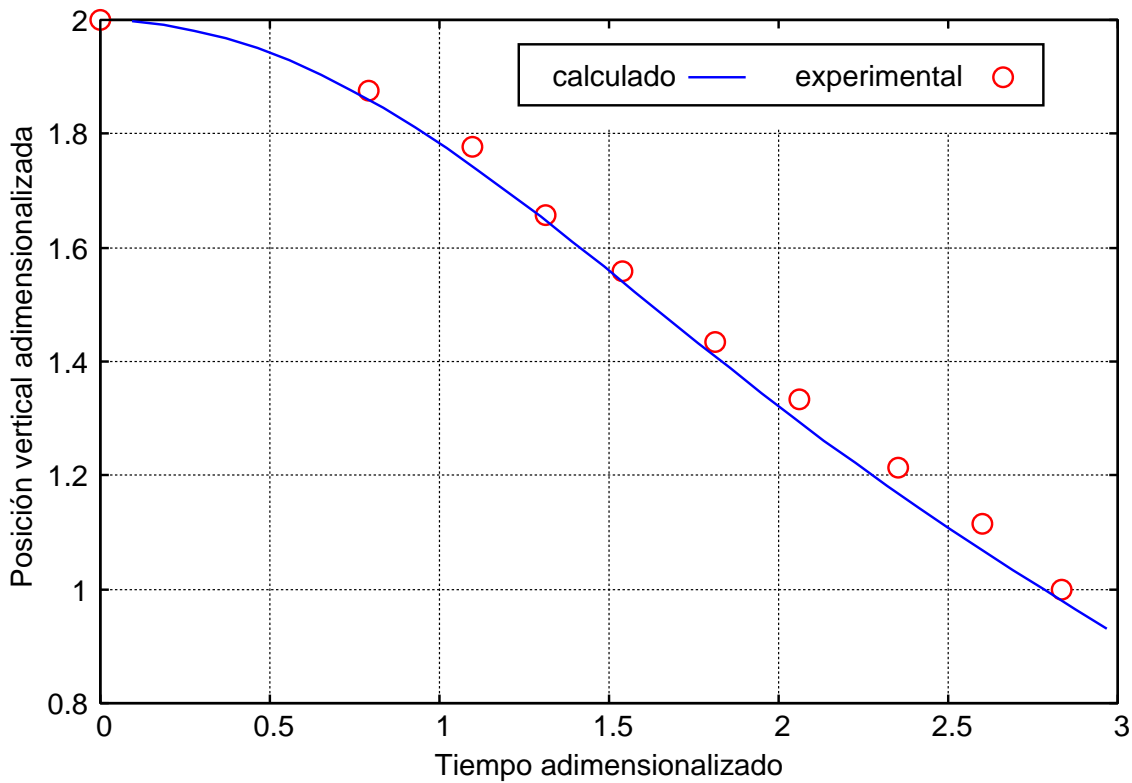


Figura 6.27: Descenso de la columna de agua sobre la izquierda en función del tiempo.

te del tramo recto copia muy bien la experimental, esto es, la velocidad del frente de avance de agua es bien capturada. La diferencia entre el resultado numérico y las mediciones, de $\Delta t^* \approx 0.25$, es atribuible al tiempo que requiere la remoción de la compuerta en el experimento real y que no es considerado en la simulación computacional, lo cual conlleva una liberación más rápida del fluido, y por ello el adelanto de la curva. Los resultados presentados por Cruchaga *et al.* [CCT07a] muestran un comportamiento similar en relación al adelanto de la simulación numérica, aunque del orden de $\Delta t^* \approx 0.13$, pues en su caso es $\Delta t \approx 0.01$ s y $W_c = 0.114$ m. Por su parte, Elias y Coutinho [EC07] obtienen una curva numérica con las mismas características que se aprecian Fig. 6.26.

En la Fig. 6.27 se muestra la altura de agua sobre la pared izquierda del dominio adimensionalizado con el ancho de la columna W_c en las ordenadas, y el tiempo adimensionalizado $t^* = t\sqrt{2g/W_c}$ en abscisas. Al igual que en la figura anterior, la simulación numérica se ha desplazado más rápido de lo que marcan los experimentos en alrededor de $\Delta t^* < 0.1$, pero la velocidad media es del mismo orden que la medida en el modelo físico, referencia dada también por Martin y Moyce [MM52]. Nuevamente, en referencia a Cruchaga *et al.* [CCT07a], se aprecia el mismo efecto en las simulaciones numéricas análogas, aunque obtienen mejores resultados al considerar la fricción de las paredes. Por su lado, Tang *et al.* logran un buen ajuste de la curva de descenso, con algunos puntos experimentales por encima y otros por debajo de ella.

En la Fig. 6.28 se representa el campo de ϕ en diferentes instantes de la simulación. Se destaca en ella el efecto de la renormalización al mantener constante

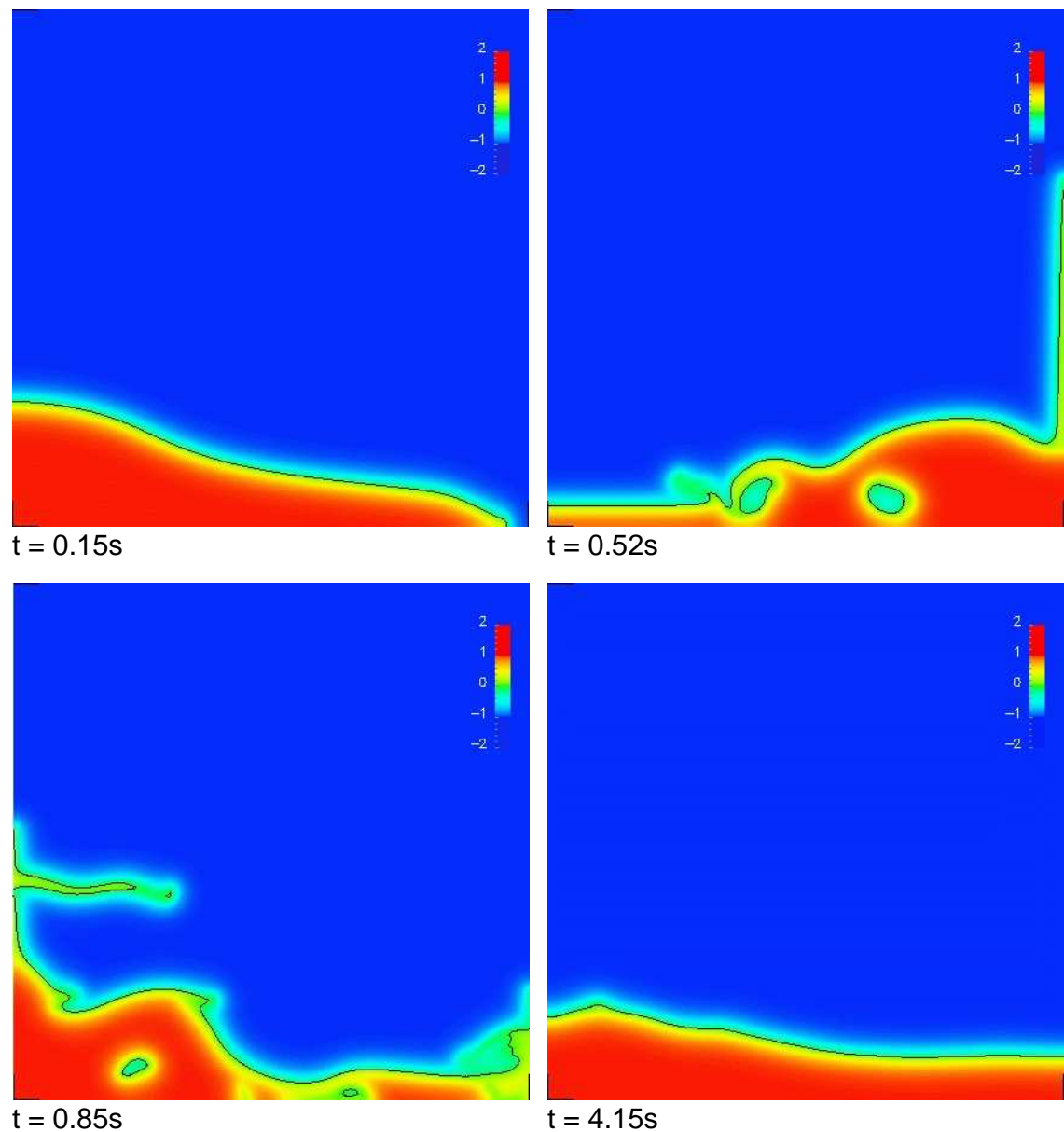


Figura 6.28: Campo de la función de nivel ϕ para distintos instantes en el problema de rotura de presa.

el espesor de la faja de transición, lo cual no era logrado al emplear la advección auto-renormalizada en la Sec. 5.1.4.3.

En lo que respecta a la conservación de la masa del agua, para la discretización temporal y espacial adoptada se verificó una disminución del 9% para $t = 1.10$ s, pero una pérdida final del orden del 7.5%, con escasa variación a partir de $t = 4$ s, lo cual se encuentra representado en la curva de la Fig. 6.29. Las mayores variaciones en el volumen de agua se producen en los instantes en para los cuales el flujo muestra las mayores velocidades, en tanto que para las últimas instancias la curva de descenso tiende a estacionarse. Es notable la diferencia en la magnitud de la pérdida de área de $\phi > 0$ entre los casos de advección-renormalización (Sec. 6.3) y aquellos en los que interviene además la determinación del estado en el fluido, NS. Esto puede deberse a que en este último módulo, al resolverse el problema discreto, el

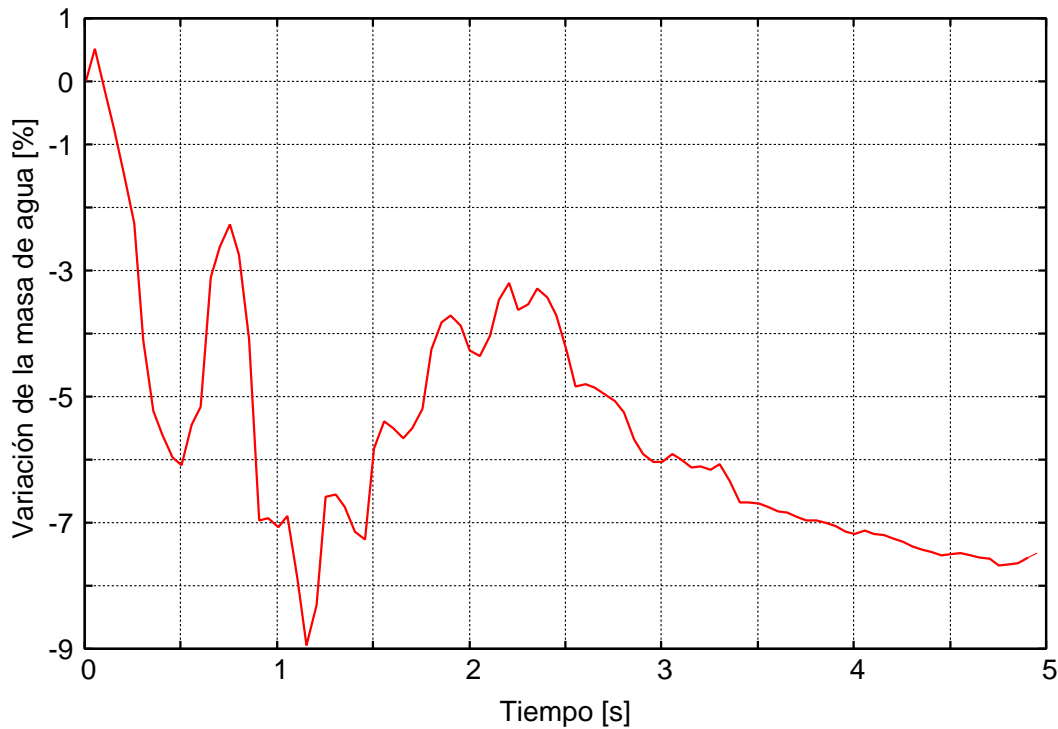


Figura 6.29: Evolución de la masa en función del tiempo para el problema 2D de colapso de la columna de agua.

campo de velocidades puede no satisfacer completamente la condición de solenoidal ($\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$), induciendo a errores al resolver la advección de ϕ con la Ec. (6.4). Una mejora inmediata sería un mayor refinamiento de la malla en las regiones cercanas al fondo y los laterales, donde se aprecia la desaparición de algunas gotas de agua al evolucionar la simulación. En otras aproximaciones, es usual introducir en la etapa de reinicialización un mecanismo de control de masa o de volumen, de característica global [CCT07a], esto es, sobre todo el dominio, o local, en las adyacencias de la interfase [MBD06].

Si se resuelve este problema para las dimensiones presentadas en la Sec. 5.1.4.3, con $W_d = 4.00$ m, $H_d = 3.00$ m, $W_c = 1.00$ m, $H_c = 2.00$ m, $\Delta t = 0.005$ s y malla con refinamiento equivalente, las curvas de avance del frente y de descenso de la columna adimensionalizadas muestran un comportamiento muy similar al registrado en el caso antes presentado en esta misma sección.

Las primeras etapas de simulación del desmoronamiento de la columna de agua para $W_c = 0.0571$ m se grafican en la Fig. 6.30. Esta primera fase, en la que aún no se produce rotura de la SL, es fácilmente resuelta por el algoritmo, incluso con $n_{\text{reino}} > 1$, ya que los cambios de forma de la interfase son suaves. Debe tenerse en cuenta que las Figs. 6.26 y 6.27 abarcan sólo parte de esta etapa inicial, esto es, antes que el fluido impacte contra el límite derecho del dominio.

Las etapas intermedias del desarrollo del ejemplo, véase la Fig. 6.31, muestran cómo la interfase se dobla sobre sí misma, encerrando algo de aire, hasta retornar a la pared izquierda. Los últimos pasos de tiempo de la simulación, a partir de $t = 1$ s, muestran en la Fig. 6.32 la disminución de los desplazamientos del fluido, y el estacionamiento del agua en el fondo del recinto.

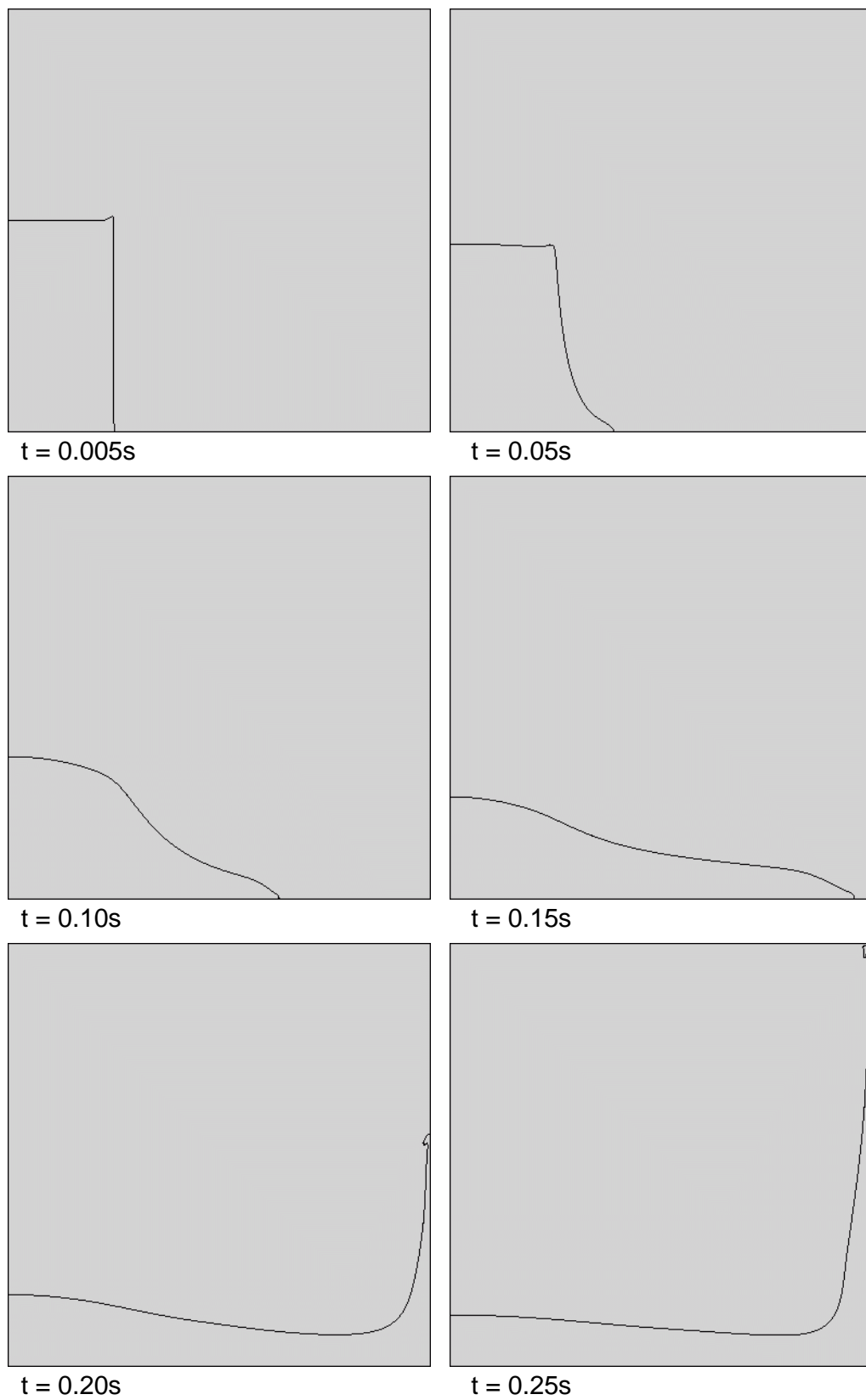


Figura 6.30: Instantes iniciales del colapso de la columna de agua.

Las estimaciones de aceleramiento S_p y eficiencia porcentual $E_{\%}$ para este problema se realizaron sobre 100 pasos de tiempo, es decir, el 1% del total de la simulación

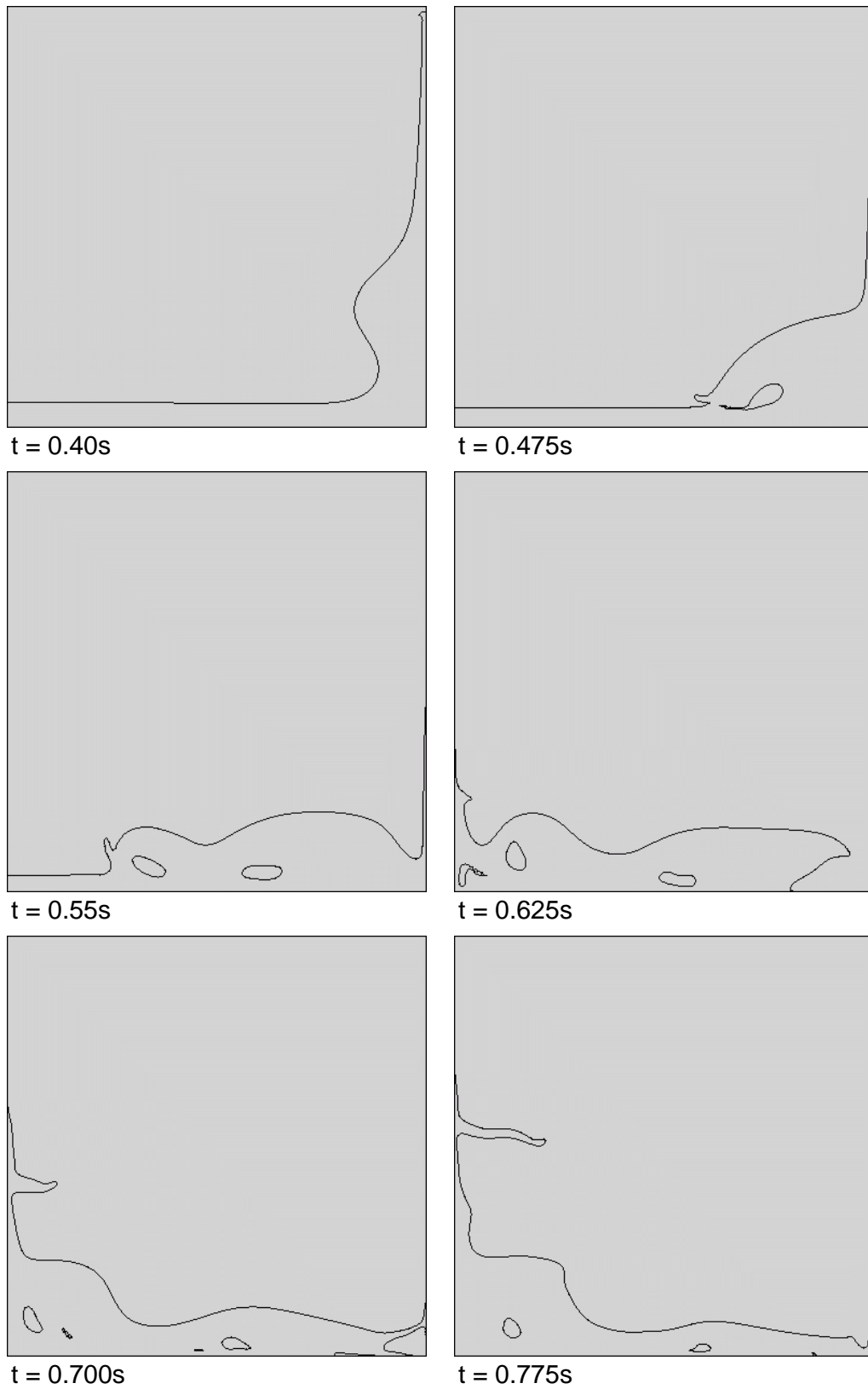


Figura 6.31: Pasos intermedios en el problema de rotura de la presa.

presentada. Los parámetros mencionados se encuentran resumidos en la Tabla 6.3. Obsérvese que, de no disponerse de recursos de ejecución en paralelo, la ejecución

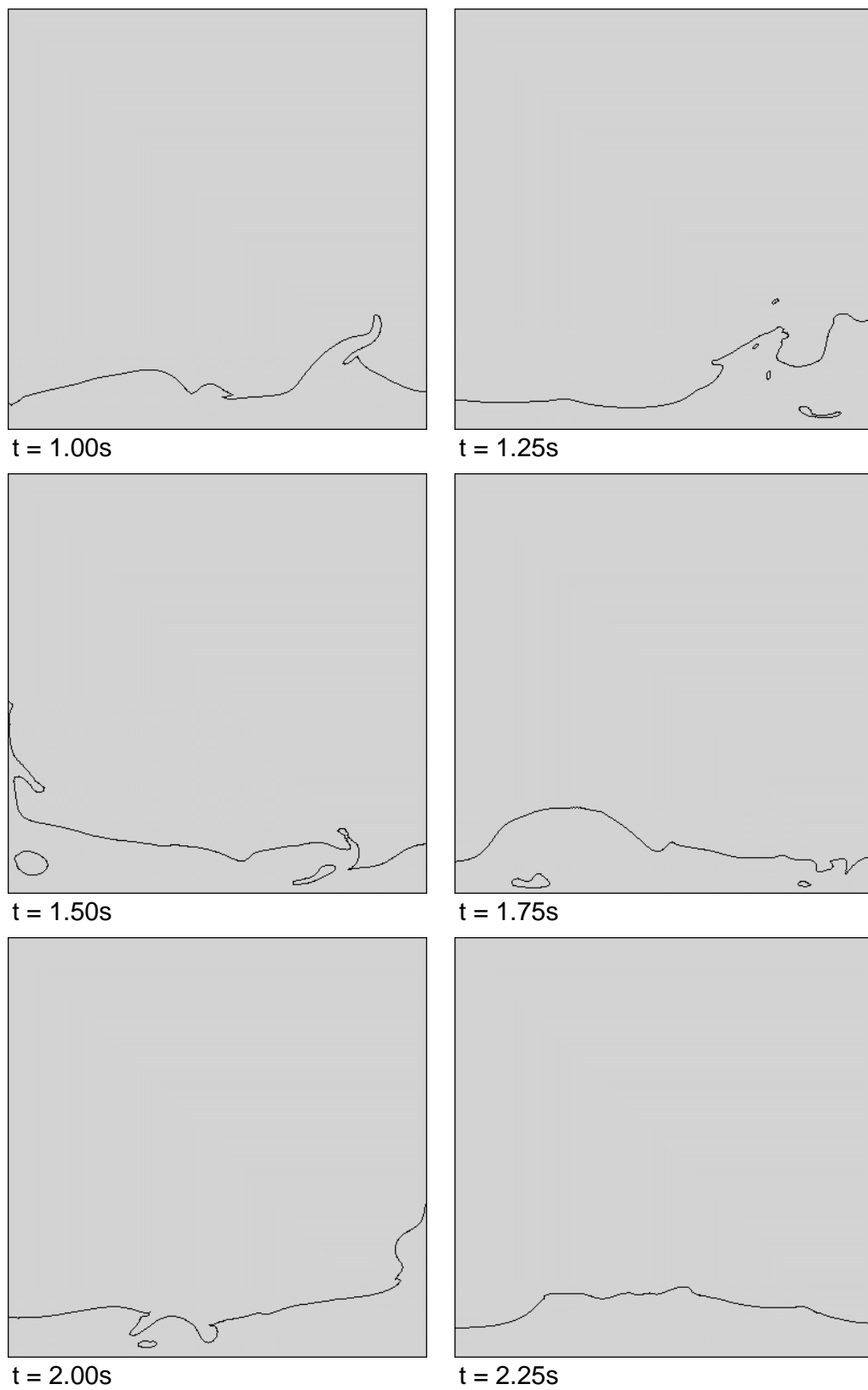


Figura 6.32: Etapas finales en el problema de colapso de la columna de agua.

de 10000 pasos de tiempo en un único procesador insumiría casi 7 días.

p	t_p [min]	S_p	$E_{\%}$
1	99.18	-	-
2	63.92	1.55	78
4	44.78	2.21	55
8	36.80	2.70	34
16	33.52	2.96	18

Tabla 6.3: Tiempos de ejecución t_p , aceleramiento S_p y eficiencia $E_{\%}$ según el número de procesadores p en el colapso de la columna de agua 2D para 100 pasos de tiempo.

6.4.3. Colapso de una columna de agua en 3D

El colapso de una columna de agua de sección cilíndrica en un ambiente de aire fue estudiado experimentalmente por Martin y Moyce [MM52], al igual que el ejemplo anterior. En este caso, se propone realizar la simulación computacional de un cuarto de la columna ensayada para el dominio cuya geometría se describe en la Fig. 6.33, con condiciones de contorno apropiadas para respetar la simetría del experimento. Este test ha sido reproducido por otros autores [ATU07, CCB08, TLW08] mediante distintos métodos numéricos.

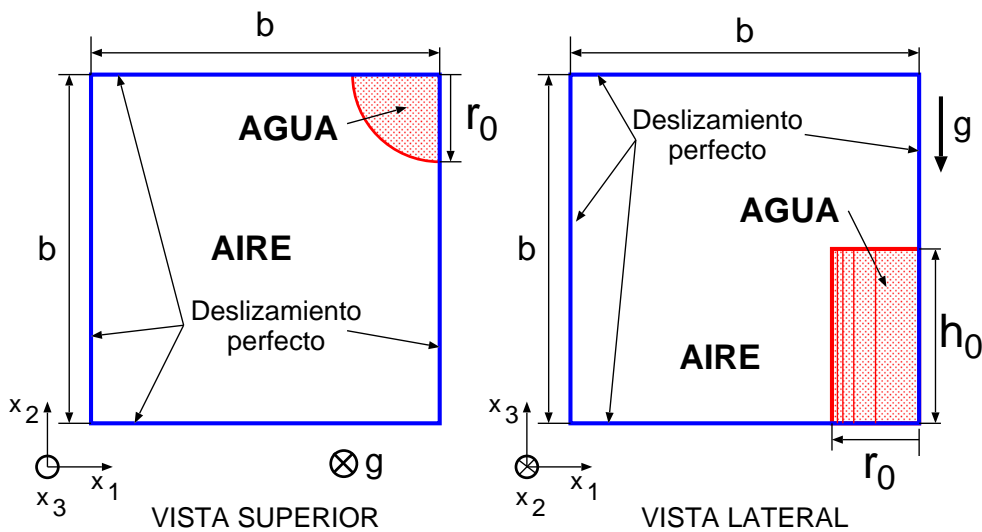


Figura 6.33: Geometría del problema de colapso de una columna cilíndrica de agua.

En la Fig. 6.33 se indican las dimensiones del dominio, que consiste en un cubo de longitud de arista $b = 0.2284$ m, en el cual la ubicación inicial de la columna de agua es con su centro en la esquina $(x_1, x_2) = (0.2284, 0.2284)$ m, y para un radio inicial $r_0 = 0.0571$ m, con una relación de aspecto $r_a = 2$, lo que se corresponde con una altura de agua $h_0 = 0.1142$ m.

El dominio es sometido a una aceleración gravitacional $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ en dirección $-x_3$, la cual genera el desmoronamiento de la columna a partir del tiempo inicial t_0 . Los parámetros de los fluidos son densidad $\rho_l = 1000 \text{ kg/m}^3$ y viscosidad dinámica $\mu_l = 1.0 \times 10^{-3} \text{ kg/(m s)}$ para el agua, y $\rho_g = 1 \text{ kg/m}^3$ y $\mu_g = 1.0 \times 10^{-5} \text{ kg/(m s)}$ para el aire, respectivamente.

La simulación mediante el MEF con captura de interfase y renormalización para la SL se realizó con una discretización estructurada de hexahedros regulares a razón

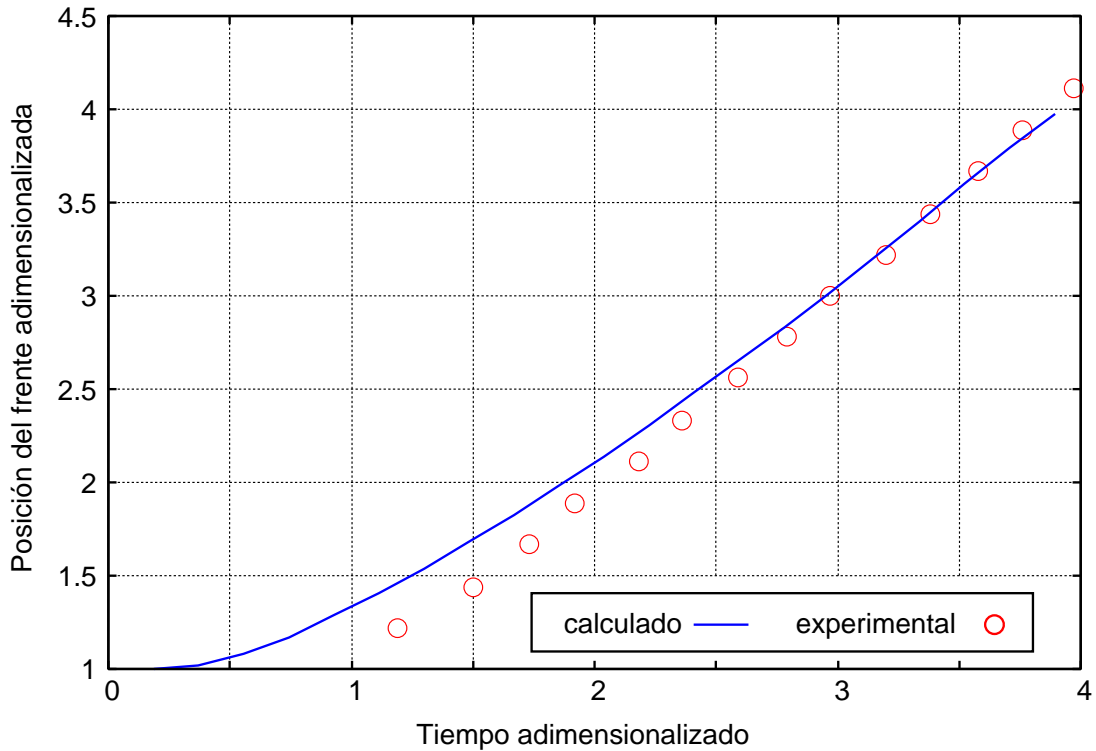


Figura 6.34: Avance relativo a r_0 del frente de agua en función del tiempo adimensionalizado para el problema 3D de colapso de la columna de agua cilíndrica.

de 50 elementos por arista, de $h \approx 4.5 \times 10^{-3}$ m de tamaño, para 1000 pasos de tiempo y con $\Delta t = 0.001$ s. La integración temporal se adoptó implícita para las instancias de NS y ADVDF. La renormalización se propuso con $\kappa = (2h)^2 = 8.35 \times 10^{-5}$ m² y $M = 5000$. Las condiciones de contorno para el problema de NS fueron propuestas como de deslizamiento perfecto en todas las paredes del dominio, en tanto que, dado que no existen secciones de entrada de fluido, no es necesario establecer condición alguna para la instancia de ADVDF.

Los resultados obtenidos mediante el análisis se encuentran representados en las Figs. 6.34 a 6.36. Los resultados experimentales [MM52] proveen datos sobre el avance del frente de agua adimensionalizado con el radio inicial r_0 de la columna de agua, en función de un tiempo también adimensionalizado como $t^* = t\sqrt{2g/r_0}$. Al realizar la comparación con la curva numérica (Fig. 6.34) se obtiene un buen ajuste, especialmente para $t^* > 2.5$. En este caso, no se cuenta con resultados del modelo físico que permitan comparar el descenso del tope de la columna graficado en la Fig. 6.35 con parámetros adimensionalizados de manera análoga a la figura anterior.

La Fig. 6.36 muestra el desmoronamiento de la columna de agua para distintos instantes. En ella puede verse la simetría de los resultados y, en los primeros pasos de tiempo, cierta falta de suavidad de la superficie libre, lo cual puede atribuirse al escaso refinamiento de la discretización adoptada.

En relación a resultados obtenidos por otros autores, Tang *et al.* [TLW08] logran un buen ajuste de la curva de la Fig. 6.34, con una discretización no especificada, hasta $t^* \approx 2.5$, pero luego se apartan de los resultados del modelo físico con una pendiente un tanto desviada, siendo el resultado final de calidad similar al obtenido por el método desarrollado en esta Tesis en cuanto a la magnitud del error. Por

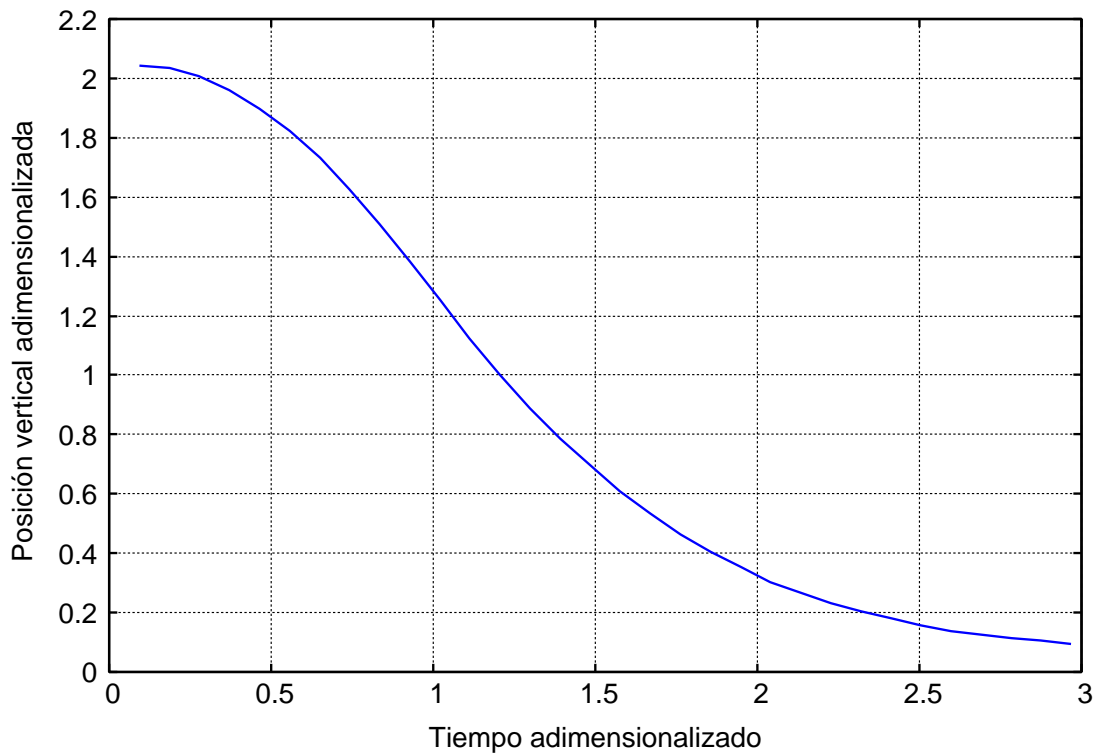


Figura 6.35: Descenso de la parte superior de la columna de agua 3D en función del tiempo adimensionalizado.

su parte, Akin y Tezduyar [ATU07] citan las mismas referencias para los datos experimentales, pero los valores representados difieren de éstos, de manera que no es posible realizar una comparación con el método numérico presentado en dicha publicación.

Los resultados presentados fueron obtenidos mediante la ejecución del algoritmo en 29 procesadores del *cluster* Aquiles, en un total de 22hs con 19min de cálculo. La Tabla 6.4 resume mediciones de tiempos de ejecución para 10 pasos de tiempo $t_p(10)$ en distinta cantidad de procesadores p determinados en el mismo *cluster*, así como también la estimación para 1000 pasos temporales, el aceleramiento S_p y la eficiencia $E\%$. En dicha tabla se aprecia inmediatamente la ventaja del paralelismo para la resolución del problema, ya que de no disponerse de un *cluster* los tiempos de ejecución serían prohibitivos para la discretización adoptada.

p	$t_p(10)$ [min]	$t_p(1000)$ [hs]	S_p	$E\%$
1	205.15	341 (14 días)	-	-
2	106.28	177:07	1.93	97
4	54.34	90:34	3.78	94
8	30.43	50:43	6.74	84
16	16.97	28:17	12.09	76
29	13.39	22:19	14.40	49

Tabla 6.4: Tiempos de ejecución de 10 pasos de tiempo $t_p(10)$, tiempos estimados $t_p(1000)$ para $1000\Delta t$, aceleramiento S_p y eficiencia $E\%$ según la cantidad de procesadores p en el ejemplo de desmoronamiento de la columna de agua en 3D.

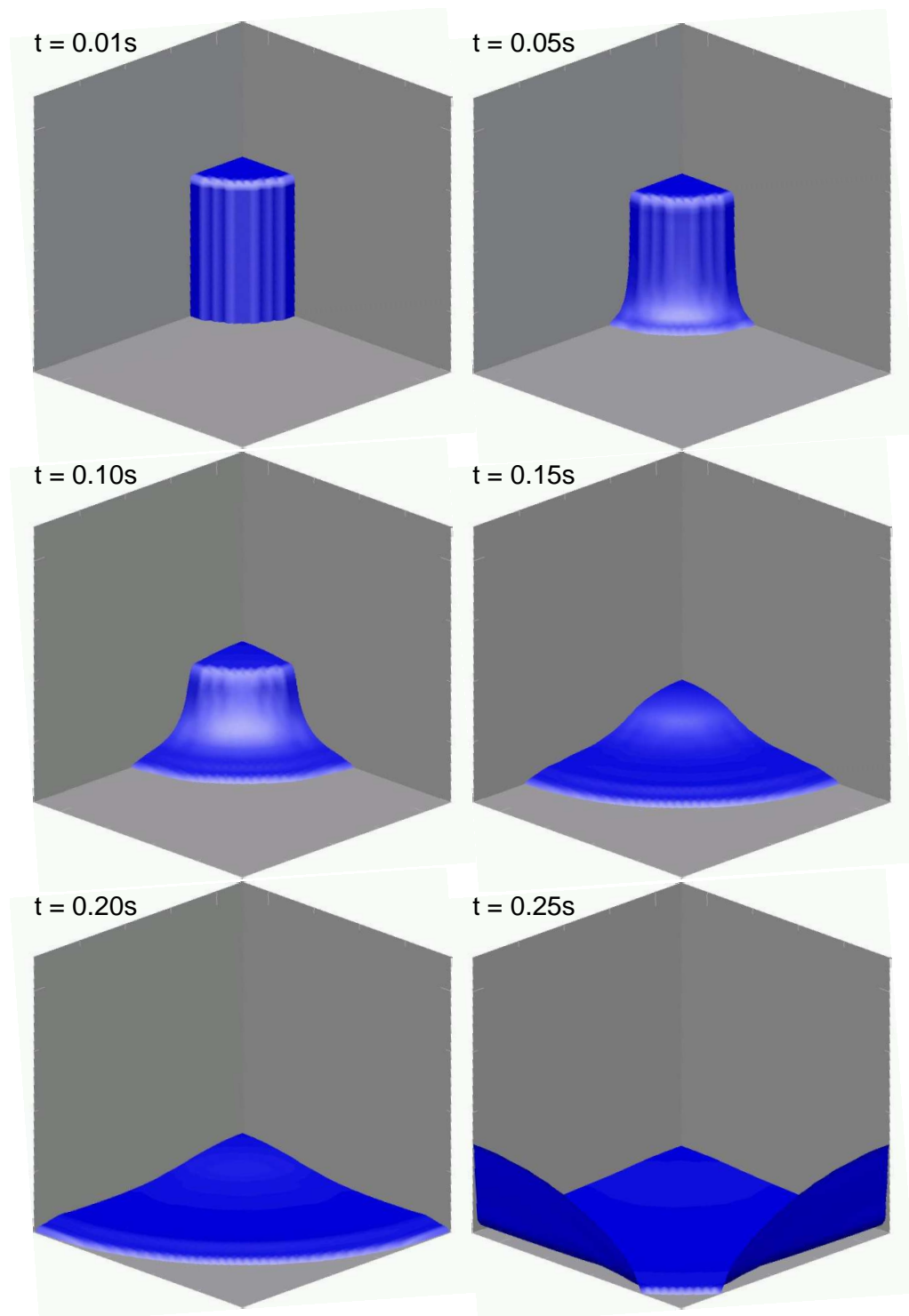


Figura 6.36: Etapas iniciales en el problema de colapso de la columna de agua 3D.

Capítulo 7

Conclusiones

7.1. Metodología de seguimiento de interfase lagrangiana-euleriana arbitraria

Se ha desarrollado una metodología de seguimiento de la superficie libre aplicable a desplazamientos tanto pequeños como de mediana magnitud, en problemas estacionarios y transitorios, en los cuales la interfase no sufre roturas o desprendimiento de fluido de importancia. En ella, se simula únicamente un líquido, sin intervención de la parte gaseosa ni de la tensión superficial, en dominios bidimensionales o tridimensionales.

La estrategia consiste en la resolución de tres instancias, la primera de las cuales determina el estado en el fluido NS con elementos estabilizados con SUPG/PSPG, seguida de la determinación de la nueva posición de la superficie libre, y finalizada con la actualización de la posición de los nodos de la discretización espacial, todas ellas realizadas en cada paso de tiempo y mediante el MEF. Para todas estas etapas se comprobó la convergencia en malla del método propuesto.

Se puso énfasis en la obtención de una curva de interfase sin inestabilidades numéricas, ya sea mediante un operador de suavizado (Sec. 4.3.1) o a través de un transporte de la elevación nodal de la superficie libre estabilizado con SUPG (Sec. 4.3.2), el último de los cuales mostró un muy buen desempeño en problemas de velocidades predominantes en dirección paralela a la de la interfase, como el del tanque sometido a aceleraciones horizontales, Sec. 4.5.2, y el del *bump*, Sec. 4.5.3.

En lo referido a las estrategias de actualización o movimiento de malla empleadas, la de resolución de un problema pseudoelástico y la de minimización de la distorsión de la malla, ambas propuestas son útiles para problemas de pequeños desplazamientos, siendo en ese caso más sencilla de aplicar la de resolución del problema pseudoelástico. No obstante, en problemas como el del drenaje de la Sec. 4.5.5, el método de minimización de distorsión de los elementos resulta más robusto frente a grandes deformaciones de la malla.

Se verificó además que la disminución del paso de tiempo, al igual que el refinamiento de la malla, provee soluciones más precisas. En relación a esto, se determinó que la realización de un paso de predicción para la posición de la superficie libre prácticamente equivale a la reducción a la mitad del paso de tiempo, como en el ejemplo del tanque de la Sec. 4.5.2.

Los diversos ejemplos de la Sec. 4.5 fueron en su mayoría contrastados con solu-

ciones de referencia, especialmente el del cilindro de base anular en 3D y el desagüe de pileta, ninguno de los cuales fue hallado en otras publicaciones como test para métodos de elementos finitos. En los restantes ejemplos, las soluciones obtenidas fueron comparadas con otros resultados numéricos, mostrando similitud con los referenciados.

Una de las dificultades halladas durante el desarrollo de la metodología fue la simulación en problemas con dominios abiertos, como en el problema del *bump* en la Sec. 4.5.3 y el del desagüe 3D de la Sec. 4.5.5. En el primero de ellos se obtuvo la solución únicamente para el caso de flujo supercrítico, en tanto que el segundo de ellos requirió la programación de un *hook* especial. Estos inconvenientes indican que es preciso delinear estrategias más específicas para el tratamiento de las condiciones de contorno en fronteras con entrada y salida de fluido.

7.2. Metodología de captura de interfase *level set*

La estrategia de captura de interfase mediante elementos finitos propuesta para problemas en los cuales se produce la pérdida de unicidad de la interfase, especialmente no estacionarios, consiste en el modelado tanto del líquido cuya SL se analiza como el del gas en un único dominio, distinguiendo las fases gracias al uso de una función de nivel ϕ para la cual $\phi > 0$ marca la región líquida, $\phi < 0$ la gaseosa, y con $\phi = 0$ se identifica frontera entre ellas.

La metodología se desarrolla en tres etapas: la primera corresponde a la resolución de las ecuaciones de NS para establecer las velocidades y presiones en el dominio completo, abarcando líquido y gas; la segunda consiste en la advección de la función de nivel ϕ ; la tercera, que puede no realizarse en todos los pasos de tiempo, se encarga de mantener la regularidad de la función de nivel, especialmente sobre la faja de transición entre las fases.

La manera en que se delineó el método para la resolución de las ecuaciones de NS en la Sec. 6.1.1 hace posible la simulación no sólo de casos con superficie libre, sino también flujo a dos fases, siendo además un método robusto capaz de resolver problemas en los cuales la relación de densidades ρ_l/ρ_g es elevada, como es demostrado en los ejemplos de desmoronamiento de columnas de agua, en las Secs. 5.1.4.3, 6.4.2 y 6.4.3.

La segunda etapa de la resolución, que se encarga de transportar el campo de ϕ , fue propuesta en principio como una advección auto-renormalizada de la función de nivel en la Sec. 5.1 para tratar de evitar el uso de una instancia de renormalización. Esta aproximación fue dejada de lado, pese a que mostró resultados aceptables, pues requería igualmente una tercer instancia para renormalizar ϕ sin reportar ventajas mayores que la advección convencional sobre la función de nivel.

La evaluación de varios de los ejemplos de la Sec. 6.3 evidencian un buen desempeño de la instancia de advección de ϕ sin realizar una reinicialización, como en el ejemplo del disco ranurado (Sec. 6.3.1). A pesar de ello, en el caso del vórtice bidimensional de la Sec. 6.3.2 se comprobó que el seguimiento de $\phi = 0$ sin una estabilización numérica es muy bueno, pero presenta inestabilidades, en tanto que el mismo problema resuelto con SUPG produce una difusión tal que la figura tiende a desaparecer muy notoriamente. Estos análisis confirmaron la necesidad de emplear una renormalización, en especial cuando las deformaciones de la SL son de mediana

magnitud o mayor, que a su vez hace innecesario estabilizar numéricamente la etapa de transporte de la función de nivel, ya que la reinicialización evita la propagación de oscilaciones numéricas entre pasos de tiempo consecutivos.

Se exploraron dos metodologías distintas para la renormalización del campo de ϕ , ambas consistentes en la resolución de una ecuación de reacción-difusión con un término de penalidad para conservar la masa en referencia al paso de advección. En la primera alternativa, Sec. 5.2, el término de penalidad consiste en una función discontinua en la interfase, del tipo Heaviside, la cual aportó resultados poco satisfactorios, como en el ejemplo del vórtice bidimensional en la Sec. 5.2.2. Al incorporar una función continua en el término de penalización, véase la Sec. 6.1.3, los resultados mejoraron sensiblemente y se adoptó esta última como metodología de renormalización definitiva. Esta alternativa requiere definir únicamente dos coeficientes: el que define el espesor de la capa de transición en el término difusivo, κ , que es $O(h^2)$, y el del término de penalización M , siendo $O(100) \leq M \leq O(1000)$.

La convergencia en malla de la metodología se ha demostrado para el problema del vórtice bidimensional de la Sec. 6.3.2, mientras que otros resultados no incorporados en esta Tesis indican lo mismo para el problema de colapso de la columna de agua de la Sec. 6.4.2.

Las soluciones obtenidas con este método en las Secs. 6.3 y 6.4 han sido comparadas con soluciones conocidas y, en la mayoría de los casos, con resultados obtenidos por otros autores, mostrando tendencias similares a las reportadas en la bibliografía.

La mayor parte de los ejemplos presentados en el Cap. 6 no se caracterizan por una superficie libre con movimientos acotados en cierta región del dominio, circunstancia en la cual se podría realizar un refinamiento en la malla de elementos finitos para aumentar la precisión en la captura de la interfase y aprovechar mejor las ventajas del método.

La propiedad de conservación de masa es prácticamente verificada en los ejemplos de advección con renormalización de la Sec. 6.3, pero no es del todo satisfactoria en los casos que integran además el problema de NS, como los de la Sec. 6.4, donde las mayores pérdidas de fluido se producen en coincidencia con las etapas en que las velocidades son más elevadas, como en el ejemplo de colapso de una columna de agua en la Sec. 6.4.2. Este hecho muestra la necesidad de alguna estrategia de control de volumen, en principio de características locales, a ser ejecutada en conjunto con la renormalización de la función de nivel.

7.3. Conclusión general

Se han formulado dos estrategias para la resolución de problemas de flujo con superficie libre para fluidos newtonianos en circunstancias de flujo incompresible e isotérmico, mediante la resolución de las ecuaciones de NS y metodologías complementarias novedosas, abarcando problemas transientes en dos y tres dimensiones.

Las aproximaciones presentadas resultan complementarias en lo que refiere a su campo de aplicación, pues la metodología de seguimiento de interfase es aplicable a problemas de pequeños desplazamientos, en los cuales la superficie libre no pierde unicidad, en tanto que la de captura de interfase es apta para problemas con grandes deformaciones en la interfase, incluyendo el pliegue sobre sí misma o la rotura de la interfase. En cuanto a casos límite entre campos de aplicación, debe tenerse presente

que la alternativa ALE resulta más económica en términos de costos computacionales, ya que simula únicamente la fase líquida y, en lugar de resolver tres problemas sobre el dominio n -dimensional completo como en el método de captura, resuelve dos sobre las n -dimensiones y el restante en $(n - 1)$ -dimensiones.

Ambas estrategias fueron estudiadas y contrastadas con soluciones analíticas, semi-analíticas e información de ensayos experimentales, proveyendo resultados muy satisfactorios para los diversos ejemplos, incluyendo convergencia en malla. Igualmente, se citan como referencia resultados de simulaciones computacionales por distintos métodos, llevadas a cabo por otros autores, incluyendo bibliografía reciente.

En lo relativo al acoplamiento débil de los módulos de resolución, no se registraron inconvenientes durante la ejecución multiparalela, incluso para los problemas de mayor cantidad de grados de libertad, que fueron resueltos empleando hasta treinta nodos del *cluster* Aquiles. Además, el trabajo por módulos permite la eliminación, el remplazo o la modificación de cada *solver* de manera independiente.

La ejecución los algoritmos en paralelo produjo en la mayoría de los casos una sensible reducción de tiempos de ejecución en ambos paradigmas, ALE y LS, especialmente en la resolución de problemas en tres dimensiones espaciales que de otra manera hubieran sido prácticamente imposibles de abordar de manera secuencial, como ser el caso de agitación en 3D de la Sec. 4.5.4, el drenaje central de la Sec. 4.5.5, el campo de deformación tridimensional en la Sec. 6.3.3 y el colapso de la columna cilíndrica presentado en 6.4.3. Algunos parámetros representativos del desempeño en paralelo de los métodos presentados, el aceleramiento o *speedup* S_p y la eficiencia porcentual $E\%$, fueron reportados en la mayor parte de los ejemplos resueltos mediante procesamiento distribuido, constituyendo información de referencia para nuevos análisis.

7.4. Problemas abiertos

Entre los aspectos a considerar para ambas estrategias se encuentra la proposición de mejores estrategias para la consideración de condiciones de contorno en el tratamiento de flujo entrante y saliente, lo cual permitirá una ampliación del espectro de aplicaciones, como ser problemas de hidrodinámica naval o canales abiertos, entre otros. Otro aspecto no considerado ha sido la turbulencia, cuya complejidad amerita un estudio particular antes de su inclusión en flujos con superficie libre.

La estrategia de captura de interfase, puede mejorar sustancialmente su desempeño al incorporar la adaptatividad de mallas, teniendo en cuenta que la propia función de nivel ϕ puede proveer la información necesaria para el criterio de adaptatividad a adoptar. Para esta misma propuesta, es necesario e inmediato incorporar un método que permita mejorar la conservación de masa.

Por último, el empleo conjunto de los métodos ALE y de captura de interfase, de implementación relativamente sencilla, permitirá abordar casos tales como los de objetos flotantes u otros tipos de interacción fluido-estructura, posibilitando la consideración de problemas que no atañen sólo a la superficie libre sino también a una aproximación multifísica más global.

Apéndice A

Deducción de Ecuaciones en forma ALE

El presente apéndice contiene la derivación de las expresiones de velocidades y, por extensión, las de conservación de masa y cantidad de movimiento empleadas en la elaboración de la presente Tesis, habiendo tomado como referencia en cuanto a desarrollo y nomenclatura a Donea y Huerta [DH03] y a Folch Durán [FD00], en el caso de fluido homogéneo.

A.1. Derivadas

Sea $f = f(\mathbf{x}, t)$ la cantidad física escalar a describir sobre los distintos referenciales introducidos en la Sec. 3.1.1, de manera tal que

$$\mathcal{G} = f(\mathbf{x}, t) = f^*(\boldsymbol{\chi}, t) = f^{**}(\mathbf{X}, t). \quad (\text{A.1})$$

Por definición, la derivada material o total es la derivada parcial con respecto al tiempo t evaluada en el marco material,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial t} \Big|_{\mathbf{x}} &= \frac{\partial f^{**}}{\partial t} \\ &= \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{\mathbf{x}} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} \Big|_{\mathbf{x}} \\ &= \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{\mathbf{x}} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f; \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

en la cual \mathbf{v} es la velocidad material o absoluta. Por otro lado,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial t} \Big|_{\mathbf{x}} &= \frac{\partial f^*}{\partial t} \\ &= \frac{\partial f^*}{\partial t} \Big|_{\boldsymbol{\chi}} + \frac{\partial f^*}{\partial \boldsymbol{\chi}} \frac{\partial \boldsymbol{\chi}}{\partial t} \Big|_{\mathbf{x}} \\ &= \frac{\partial f^*}{\partial t} \Big|_{\boldsymbol{\chi}} + \mathbf{w} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\chi}} f^*; \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

siendo \mathbf{w} la velocidad de la partícula con respecto a la configuración referencial arbitraria.

En el caso especial en que la coordenada espacial \mathbf{x} es adoptada como campo \mathcal{G} , siendo $\mathbf{x}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{x}^*(\boldsymbol{\chi}, t) = \mathbf{x}^{**}(\mathbf{X}, t)$, y empleando las Ecs. (A.2) y (A.3),

$$\left. \frac{\partial \mathbf{x}^{**}}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} = \left. \frac{\partial \mathbf{x}^*}{\partial t} \right|_{\boldsymbol{\chi}} + \frac{\partial \mathbf{x}^*}{\partial \boldsymbol{\chi}} \left. \frac{\partial \boldsymbol{\chi}}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} = \left. \frac{\partial \mathbf{x}^*}{\partial t} \right|_{\boldsymbol{\chi}} + \mathbf{w} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}^*}{\partial \boldsymbol{\chi}}; \quad (\text{A.4})$$

de donde:

$$\left. \frac{\partial \mathbf{x}^{**}}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} - \left. \frac{\partial \mathbf{x}^*}{\partial t} \right|_{\boldsymbol{\chi}} = \mathbf{w} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}^*}{\partial \boldsymbol{\chi}}; \quad (\text{A.5})$$

y, por cuanto de la Ec. (A.1) es

$$\left. \frac{\partial \mathbf{x}^{**}}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} = \left. \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}}; \quad (\text{A.6})$$

resulta:

$$\left. \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} - \left. \frac{\partial \mathbf{x}^*}{\partial t} \right|_{\boldsymbol{\chi}} = \mathbf{v} - \hat{\mathbf{v}}; \quad (\text{A.7})$$

a partir de la cual se define la velocidad convectiva \mathbf{c} de la partícula como la velocidad de la partícula material descontada la velocidad de la configuración de referencia, o velocidad de la malla,

$$\mathbf{c} = \mathbf{v} - \hat{\mathbf{v}} = \mathbf{w} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}^*}{\partial \boldsymbol{\chi}}. \quad (\text{A.8})$$

Esta definición implica que con $\hat{\mathbf{v}} = 0$ se recupera la configuración euleriana y se tiene que $\mathbf{c} = \mathbf{v}$, en tanto que para velocidad relativa nula ($\mathbf{w} = 0$) se tiene que la convección es nula $\mathbf{c} = 0$, lo que equivale a que la velocidad de la malla $\hat{\mathbf{v}}$ coincide con la velocidad material, es decir $\mathbf{v} = \hat{\mathbf{v}}$, e indica que el referencial es lagrangiano.

Para finalmente obtener la derivada material ALE, se requieren las siguientes expresiones:

$$\left. \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} = \left. \frac{\partial f^{**}}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} = \left. \frac{\partial f^*}{\partial t} \right|_{\boldsymbol{\chi}} + \frac{\partial f^*}{\partial \boldsymbol{\chi}} \left. \frac{\partial \boldsymbol{\chi}}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}}; \quad (\text{A.9})$$

$$\left. \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f; \quad (\text{A.10})$$

$$\frac{\partial f^*}{\partial \boldsymbol{\chi}} = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \boldsymbol{\chi}}. \quad (\text{A.11})$$

Con (A.11) en (A.9):

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} &= \left. \frac{\partial f^*}{\partial t} \right|_{\boldsymbol{\chi}} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \left. \frac{\partial \boldsymbol{\chi}}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \boldsymbol{\chi}}; \\ &= \left. \frac{\partial f^*}{\partial t} \right|_{\boldsymbol{\chi}} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \left(\mathbf{w} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \boldsymbol{\chi}} \right) \\ &= \left. \frac{\partial f^*}{\partial t} \right|_{\boldsymbol{\chi}} + \mathbf{c} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f; \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

que es la derivada de f para la partícula \mathbf{X} dada como suma de la derivada local con respecto a la configuración de referencia $\boldsymbol{\chi}$, arbitraria, más el término convectivo que tiene en cuenta el movimiento relativo entre los sistemas referenciales y materiales. Esta expresión, tras simplificar la notación, pues

$$\left(\frac{\partial f^*}{\partial t} \right)_{\boldsymbol{\chi}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\boldsymbol{\chi}}, \quad (\text{A.13})$$

es la denominada “Ecuación Fundamental ALE” [DH03], Ec. (3.8). Continuando con la igualdad entre (A.12) y (A.10), entonces

$$\frac{\partial f}{\partial t}\Big|_{\mathbf{x}} = \frac{\partial f^*}{\partial t}\Big|_{\boldsymbol{\chi}} + (\mathbf{c} - \mathbf{v}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f; \quad (\text{A.14})$$

lo cual permite arribar a:

$$\frac{\partial f}{\partial t}\Big|_{\mathbf{x}} = \frac{\partial f^*}{\partial t}\Big|_{\boldsymbol{\chi}} - \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f; \quad (\text{A.15})$$

que es la derivada material de f en el sistema espacial en función de la velocidad de la malla $\hat{\mathbf{v}}$.

A.2. Derivadas con respecto al tiempo de integrales sobre volúmenes móviles

La tasa de cambio de integrales de funciones escalares o vectoriales sobre un volumen móvil ocupado por fluido son el punto de partida de las formas integrales de las leyes de conservación básicas.

En un determinado instante t , para un volumen material V_t delimitado por una superficie cerrada y suave S_t cuyos puntos se mueven con velocidad material $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$, la derivada material de una función escalar suave $f(\mathbf{x}, t)$ definida sobre V_t está dada por el *Teorema de Transporte de Reynolds* (TTR) [DH03]:

$$\frac{d}{dt} \int_{V_t} f(\mathbf{x}, t) dV = \int_{V_c \equiv V_t} \frac{\partial f(\mathbf{x}, t)}{\partial t} dV + \int_{S_c \equiv S_t} f(\mathbf{x}, t) \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS; \quad (\text{A.16})$$

siendo V_c y S_c el volumen y la superficie de control, respectivamente, que coinciden con V_t y S_t en el instante t , y \mathbf{n} es la normal unitaria saliente de la superficie de control S_c . El primer término de la derecha contiene la derivada temporal local de la integral de volumen, mientras que el segundo cuantifica el flujo de $f(\mathbf{x}, t)$ a través de la misma superficie de control S_c .

En un paradigma ALE, el volumen de control V_t es arbitrario y su frontera S_t se mueve con la velocidad de la configuración de referencia $\hat{\mathbf{v}}$, y el TTR pasa a tener la forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}\Big|_{\boldsymbol{\chi}} \int_{V_t} f(\mathbf{x}, t) dV = \int_{V_t} \frac{\partial f(\mathbf{x}, t)}{\partial t}\Big|_{\mathbf{x}} dV + \int_{S_t} f(\mathbf{x}, t) \hat{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{n} dS; \quad (\text{A.17})$$

expresión mediante la cual se obtienen las formas integrales ALE de las ecuaciones de conservación.

A.3. Ecuaciones de Navier–Stokes en forma ALE

Las ecuaciones de NS que a considerar en su forma ALE son las de conservación de masa y de cantidad de movimiento. En el primer caso, el punto de partida para la deducción es la forma diferencial

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}\Big|_{\mathbf{x}} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0. \quad (\text{A.18})$$

Teniendo en cuenta la propiedad de la Ec. (A.15),

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \Big|_{\mathbf{x}} = \frac{\partial \rho}{\partial t} \Big|_{\boldsymbol{\chi}} - \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \rho; \quad (\text{A.19})$$

y operando sobre la Ec. (A.18),

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \Big|_{\boldsymbol{\chi}} + (\mathbf{v} - \hat{\mathbf{v}}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \rho + \rho \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v} = 0; \quad (\text{A.20})$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \Big|_{\boldsymbol{\chi}} + \mathbf{c} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \rho + \rho \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (\text{A.21})$$

Al recurrir a la hipótesis de densidad constante, resultan $\partial_t \rho = 0$ y $\nabla_{\mathbf{x}} \rho = 0$, a lo cual se suma la simplificación en la notación al eliminar el subíndice \mathbf{x} del operador divergencia, y resulta:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0; \quad (\text{A.22})$$

que es la condición de incompresibilidad. Obsérvese que esta condición se verifica independientemente del referencial, ya que las velocidades con respecto a las configuraciones de referencia y material no intervienen.

Tomando como punto de partida la ecuación de cantidad de movimiento dada en la forma

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \rho \mathbf{f} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \boldsymbol{\sigma}; \quad (\text{A.23})$$

en la cual las fuerzas de cuerpo están dadas por el primer término de la derecha, en tanto que el segundo incluye el aporte de las fuerzas viscosas, con los respectivos parámetros definidos en la Sec. 3.2.1. Reescribiendo la derivada material a través de la Ec. (A.12) en la forma

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \Big|_{\boldsymbol{\chi}} + \mathbf{c} \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v}; \quad (\text{A.24})$$

operando y simplificando la notación en la misma forma que antes, la conservación de cantidad de movimiento en el marco de referencia arbitrario, esto es, en forma ALE, resulta:

$$\rho (\partial_t \mathbf{v} + \mathbf{c} \cdot \nabla \mathbf{v} - \mathbf{f}) - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0. \quad (\text{A.25})$$

Apéndice B

Discretización de la Cinemática de la Superficie Libre

B.1. Discretización de la ecuación de transporte de la superficie libre estabilizada en 2D

A partir del problema resumido en la Sec. 4.3.2.3, dado de la siguiente forma: hallar $\eta^h \in \mathcal{S}_{SL}^h$ tal que

$$a(w^h, \eta^h) + c(v_{\parallel}; w^h, \eta^h) + \sum_e \int_{\Omega'_e} \left(v_{\parallel} \frac{\partial w^h}{\partial x_1} \right) \tau_S^e \left(\frac{\partial \eta^h}{\partial t} + v_{\parallel} \frac{\partial \eta^h}{\partial x_1} - s \right) d\Omega'_e = (w^h, s);$$

para todo $w^h \in \mathcal{W}_{SL}^h$, con \mathcal{W}_{SL}^h y \mathcal{S}_{SL}^h subespacios de dimensión finita de \mathcal{W}_{SL} y \mathcal{S}_{SL} , los espacios funcionales que se corresponden con \mathcal{W} y \mathcal{S} de la Sec. 4.3.2.1 para problemas unidimensionales, respectivamente.

Para la resolución numérica de esta ecuación, se recurre a un método de elementos finitos estabilizado mediante SUPG [BH82], en este caso unidimensional, en los cuales las funciones de interpolación lineales son las siguientes,

$$N_i = N_i(x); \tag{B.1}$$

$$N_j = N_j(x); \tag{B.2}$$

asociadas a los nodos i, j del elemento e de longitud $h^e = x_j - x_i$, como el representado en la Fig. B.1, de manera tal que son

$$N_i = \frac{x_j - x}{x_j - x_i} = \frac{x_j - x}{h^e}; \tag{B.3}$$

$$N_j = \frac{x - x_i}{x_j - x_i} = \frac{x - x_i}{h^e}; \tag{B.4}$$

y los correspondientes gradientes,

$$\nabla N_i = \frac{-1}{h^e}; \tag{B.5}$$

$$\nabla N_j = \frac{1}{h^e}. \tag{B.6}$$

Cada uno de los términos de la Ec. (4.30) es resuelto a nivel elemental, lo cual se indica con el supraíndice e , tal como en todas las expresiones de los siguientes párrafos.

Sea

$$w^h = \sum_{e=1}^E w^e; \quad (\text{B.7})$$

siendo E la cantidad de nodos por elemento, y en la cual w^e representa al vector de funciones de forma para el elemento e ,

$$\mathbf{w}^e = \begin{bmatrix} N_i \\ N_j \end{bmatrix}. \quad (\text{B.8})$$

En el caso del término temporal,

$$\begin{aligned} a^e(w^h, \eta^h) &= \int_{\Omega^e} \mathbf{w}^e \frac{\partial \boldsymbol{\eta}^e}{\partial t} d\Omega^e \\ &= \int_{x_i}^{x_j} \begin{bmatrix} N_i \\ N_j \end{bmatrix} [N_i (\eta_t)_i \quad N_j (\eta_t)_j] dx \\ &= \int_{x_i}^{x_j} \begin{bmatrix} N_i \\ N_j \end{bmatrix} [N_i \quad N_j] dx \begin{bmatrix} (\eta_t)_i \\ (\eta_t)_j \end{bmatrix} \\ &= \frac{h^e}{3} \begin{bmatrix} 1 & 1/2 \\ 1/2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (\eta_t)_i \\ (\eta_t)_j \end{bmatrix}; \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

siendo $\eta_t = \partial \eta / \partial t$ y considerando que cada elemento es $\Omega^e = (\Omega'_{SL})^e$, para relacionar la notación con la ya empleada en la Sec. 4.3.2.1. En este caso, las matrices elementales que surgen de la integración son la de masa,

$$\mathbf{M}^e = \frac{h^e}{3} \begin{bmatrix} 1 & 1/2 \\ 1/2 & 1 \end{bmatrix}; \quad (\text{B.10})$$

y el vector elemental de la derivada temporal de la altura de la SL,

$$(\boldsymbol{\eta}_t)^e = \begin{bmatrix} (\eta_t)_i \\ (\eta_t)_j \end{bmatrix}. \quad (\text{B.11})$$

El término convectivo es discretizado como sigue,

$$\begin{aligned} c^e(v_{\parallel}; w^h, \eta^h) &= \int_{\Omega^e} \mathbf{w}^e \left(\mathbf{v}_{\parallel}^e \cdot \hat{\nabla} \boldsymbol{\eta}^e \right) d\Omega^e \\ &= \int_{x_i}^{x_j} \begin{bmatrix} N_i \\ N_j \end{bmatrix} [(v_{\parallel})_i \nabla N_i \quad (v_{\parallel})_j \nabla N_j] \begin{bmatrix} \eta_i \\ \eta_j \end{bmatrix} dx \\ &= \int_{x_i}^{x_j} \begin{bmatrix} (v_{\parallel})_i N_i \nabla N_i & (v_{\parallel})_j N_i \nabla N_j \\ (v_{\parallel})_i N_j \nabla N_i & (v_{\parallel})_j N_j \nabla N_j \end{bmatrix} dx \begin{bmatrix} \eta_i \\ \eta_j \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -(v_{\parallel})_i & (v_{\parallel})_j \\ -(v_{\parallel})_i & (v_{\parallel})_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \eta_i \\ \eta_j \end{bmatrix}; \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

recordando que, cuando la superficie libre es 1D, \mathbf{v}_{\parallel} es un escalar por nodo y corresponde a v_{\parallel} . De este proceso surge la matriz de convección,

$$\mathbf{C}^e = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -(v_{\parallel})_i & (v_{\parallel})_j \\ -(v_{\parallel})_i & (v_{\parallel})_j \end{bmatrix}; \quad (\text{B.13})$$

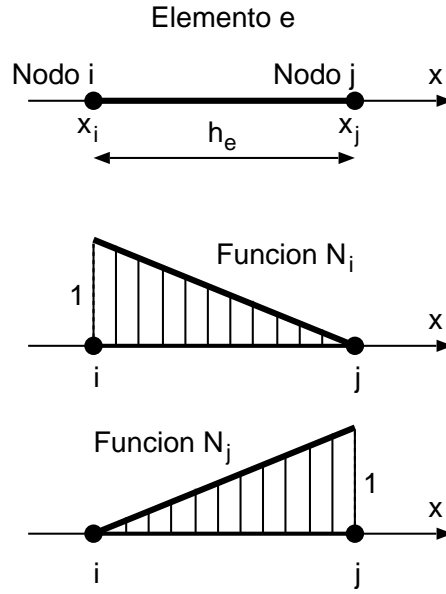


Figura B.1: Elemento genérico y funciones de forma para la resolución de la ecuación de transporte de la superficie libre en dominios 2D para el flujo.

que multiplica al vector elemental de la elevación de la superficie libre,

$$\boldsymbol{\eta}^e = \begin{bmatrix} \eta_i \\ \eta_j \end{bmatrix}. \quad (\text{B.14})$$

El primero de los términos estabilizados se integra de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega^e} \left(v_{\parallel} \frac{\partial w^h}{\partial x_1} \right) \tau_S^e \left(\frac{\partial \eta^h}{\partial t} \right) d\Omega^e &= \int_{\Omega^e} (\mathbf{v}_{\parallel}^e \cdot \nabla \mathbf{w}^e) \tau_S^e \frac{\partial \boldsymbol{\eta}^e}{\partial t} d\Omega^e \\ &= \int_{x_i}^{x_j} \begin{bmatrix} (v_{\parallel})_i & \nabla N_i \\ (v_{\parallel})_j & \nabla N_j \end{bmatrix} \tau_S^e [N_i (\eta_t)_i \quad N_j (\eta_t)_j] dx \\ &= \tau_S^e \int_{x_i}^{x_j} \begin{bmatrix} (v_{\parallel})_i & \nabla N_i \\ (v_{\parallel})_j & \nabla N_j \end{bmatrix} [N_i \quad N_j] dx \begin{bmatrix} (\eta_t)_i \\ (\eta_t)_j \end{bmatrix} \\ &= \frac{\tau_S^e}{2} \begin{bmatrix} -(v_{\parallel})_i & -(v_{\parallel})_i \\ (v_{\parallel})_j & (v_{\parallel})_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (\eta_t)_i \\ (\eta_t)_j \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

En esta oportunidad, la matriz de estabilización se parece a la convectiva, y se la denomina aquí como matriz de pseudo-convección elemental,

$$\mathbf{C}_S^e = \frac{\tau_S^e}{2} \begin{bmatrix} -(v_{\parallel})_i & -(v_{\parallel})_i \\ (v_{\parallel})_j & (v_{\parallel})_j \end{bmatrix}, \quad (\text{B.16})$$

en unidades de longitud, que afecta a la derivada temporal de la incógnita.

El término estabilizado relativo al gradiente de la elevación es considerado como

sigue:

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega^e} \left(v_{\parallel} \frac{\partial w^h}{\partial x_1} \right) \tau_S^e \left(v_{\parallel} \frac{\partial \eta^h}{\partial x_1} \right) d\Omega^e &= \int_{\Omega^e} (\mathbf{v}_{\parallel}^e \cdot \nabla \mathbf{w}^e) \tau_S^e (\mathbf{v}_{\parallel}^e \cdot \nabla \boldsymbol{\eta}^e) d\Omega^e \\
&= \int_{x_i}^{x_j} \begin{bmatrix} (v_{\parallel})_i \nabla N_i \\ (v_{\parallel})_j \nabla N_j \end{bmatrix} \tau_S^e [(v_{\parallel})_i \nabla N_i \quad (v_{\parallel})_j \nabla N_j] \begin{bmatrix} \eta_i \\ \eta_j \end{bmatrix} dx \\
&= \tau_S^e \int_{x_i}^{x_j} \begin{bmatrix} (v_{\parallel})_i \nabla N_i \\ (v_{\parallel})_j \nabla N_j \end{bmatrix} [(v_{\parallel})_i \nabla N_i \quad (v_{\parallel})_j \nabla N_j] dx \begin{bmatrix} \eta_i \\ \eta_j \end{bmatrix} \\
&= \frac{\tau_S^e}{h^e} \begin{bmatrix} (v_{\parallel})_i^2 & -(v_{\parallel})_j (v_{\parallel})_i \\ -(v_{\parallel})_i (v_{\parallel})_j & (v_{\parallel})_j^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (\eta_t)_i \\ (\eta_t)_j \end{bmatrix}.
\end{aligned} \tag{B.17}$$

Esta operatoria genera la aparición de una matriz de pseudo-difusión, cuya forma elemental es la siguiente:

$$\mathbf{K}_S^e = \frac{\tau_S^e}{h^e} \begin{bmatrix} (v_{\parallel})_i^2 & -(v_{\parallel})_j (v_{\parallel})_i \\ -(v_{\parallel})_i (v_{\parallel})_j & (v_{\parallel})_j^2 \end{bmatrix}, \tag{B.18}$$

que premultiplica a $\boldsymbol{\eta}^e$ en la expresión completa.

Para el término independiente en el residuo, se opera de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega^e} \left(v_{\parallel} \frac{\partial w^h}{\partial x_1} \right) \tau_S^e (-s) d\Omega^e &= \int_{\Omega^e} (\mathbf{v}_{\parallel}^e \cdot \nabla \mathbf{w}^e) \tau_S^e (-\mathbf{s}^e) d\Omega^e \\
&= - \int_{x_i}^{x_j} \begin{bmatrix} (v_{\parallel})_i \nabla N_i \\ (v_{\parallel})_j \nabla N_j \end{bmatrix} \tau_S^e [N_i \ s_i \quad N_j \ s_j] dx \\
&= -\tau_S^e \int_{x_i}^{x_j} \begin{bmatrix} (v_{\parallel})_i \nabla N_i \\ (v_{\parallel})_j \nabla N_j \end{bmatrix} [N_i \ N_j] dx \begin{bmatrix} s_i \\ s_j \end{bmatrix} \\
&= -\frac{\tau_S^e}{2} \begin{bmatrix} -(v_{\parallel})_i & -(v_{\parallel})_i \\ (v_{\parallel})_j & (v_{\parallel})_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_i \\ s_j \end{bmatrix},
\end{aligned} \tag{B.19}$$

en la cual aparece nuevamente la matriz elemental \mathbf{C}_S^e , esta vez multiplicando al término fuente de la ecuación, constituido por la velocidad vertical del fluido en los nodos del elemento,

$$\mathbf{s}^e = \begin{bmatrix} s_i \\ s_j \end{bmatrix}. \tag{B.20}$$

Por último, para el tratamiento del término fuente pesado con w^h , se tiene:

$$\begin{aligned}
(w^h, s) &= \int_{\Omega^e} \mathbf{w}^e \mathbf{s}^e d\Omega^e \\
&= \int_{x_i}^{x_j} \begin{bmatrix} N_i \\ N_j \end{bmatrix} [N_i \ s_i \quad N_j \ s_j] dx \\
&= \int_{x_i}^{x_j} \begin{bmatrix} N_i \\ N_j \end{bmatrix} [N_i \ N_j] dx \begin{bmatrix} s_i \\ s_j \end{bmatrix} \\
&= \frac{h^e}{3} \begin{bmatrix} 1 & 1/2 \\ 1/2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_i \\ s_j \end{bmatrix},
\end{aligned} \tag{B.21}$$

es decir, nuevamente una matriz de masa distribuida \mathbf{M}^e , que multiplica a \mathbf{s}^e .

En resumidas cuentas, la expresión discreta del problema, para cada elemento, puede escribirse como:

$$[\mathbf{M}^e + \mathbf{C}_S^e] (\boldsymbol{\eta}_t)^e + [\mathbf{C}^e + \mathbf{K}_S^e] \boldsymbol{\eta}^e = [\mathbf{M}^e + \mathbf{C}_S^e] \mathbf{s}^e. \quad (\text{B.22})$$

Realizando el ensamble de matrices y vectores, se arriba a la Ec. (4.32):

$$(\mathbf{M} + \mathbf{C}_S) \boldsymbol{\eta}_t + (\mathbf{C} + \mathbf{K}_S) \boldsymbol{\eta} = (\mathbf{M} + \mathbf{C}_S) \mathbf{s} .$$

Para la integración temporal se adopta la Ec. (4.33):

$$\boldsymbol{\eta}_t \approx \frac{\boldsymbol{\eta}^{(n+1)} - \boldsymbol{\eta}^n}{\Delta t};$$

para Δt constante e indicado el paso de tiempo en con el superíndice entre paréntesis. Aplicando la regla del trapecio para un parámetro de integración temporal $\alpha \in [0, 1]$ [DH03],

$$\begin{aligned} & \left(\mathbf{M} + \mathbf{C}_S^{(n+1)} \right) \frac{\boldsymbol{\eta}^{(n+1)} - \boldsymbol{\eta}^{(n)}}{\Delta t} + \alpha \left(\mathbf{C}^{(n+1)} + \mathbf{K}_S^{(n+1)} \right) \boldsymbol{\eta}^{(n+1)} = \\ & \left(\mathbf{M} + \mathbf{C}_S^{(n+1)} \right) \left[\alpha \mathbf{s}^{(n+1)} + (1 - \alpha) \mathbf{s}^{(n)} \right] - (1 - \alpha) \left(\mathbf{C}^{(n+1)} + \mathbf{K}_S^{(n+1)} \right) \boldsymbol{\eta}^{(n)} . \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

Agrupando términos, se arriba a la expresión programada, en este caso, la Ec. (4.34):

$$\begin{aligned} & \left[\mathbf{M} + \mathbf{C}_S^{(n+1)} + \alpha \Delta t \left(\mathbf{C}^{(n+1)} + \mathbf{K}_S^{(n+1)} \right) \right] \boldsymbol{\eta}^{(n+1)} = \\ & \left(\mathbf{M} + \mathbf{C}_S^{(n+1)} \right) \left[\alpha \Delta t \mathbf{s}^{(n+1)} + (1 - \alpha) \Delta t \mathbf{s}^{(n)} + \boldsymbol{\eta}^{(n)} \right] - (1 - \alpha) \Delta t \left(\mathbf{C}^{(n+1)} + \mathbf{K}_S^{(n+1)} \right) \boldsymbol{\eta}^{(n)} . \end{aligned}$$

Apéndice C

Nomenclatura

C.1. Acrónimos

- 1D, 2D, 3D, nD: unidimensional, bidimensional, tridimensional o n -dimensional, respectivamente.
- ADVDF: solver de advección-difusión en PETSc-FEM;
- ALE: metodología lagrangiana-euleriana arbitraria, siglas del inglés *Arbitrary Lagrangian-Eulerian*;
- CFL: condición de Courant-Friedrichs-Lewy;
- EDO: Ecuación Diferencial Ordinaria;
- GPL: *General Public License*;
- LS: *Level Set*;
- FIFO: *first in first out*;
- FMM: *Fast Marching Method*;
- MDF: Método de Diferencias Finitas;
- MEF: Método de Elementos Finitos;
- MPI: *Message Passing Interface*;
- MVF: Método de Volúmenes Finitos;
- NS: Navier–Stokes y, eventualmente, solver de resolución de las ecuaciones de NS en PETSc-FEM;
- PFEM: *Particle Finite Element Method*;
- PETSc: *Portable Extensible Toolkit for Scientific Calculations*;
- PETSc-FEM: programa de elementos finitos orientado a objetos para multifísica y con procesamiento distribuido, basado en MPI y PETSc;

- PSPG: *pressure stabilizing/Petrov-Galerkin*
- PVI: Problema de Valor Inicial;
- RENOR: instancia de renormalización en el paradigma LS;
- SL: superficie libre;
- SPH: *Smooth Particle Hydrodynamics*;
- SUPG: *streamline upwind/Petrov-Galerkin*;
- TTR: Teorema de Transporte de Reynolds;
- VOF: *Volume Of Fluid*;

C.2. Notación

C.2.1. Elementos generales

- *Índices*: para los tensores, los superíndices indican los pasos de tiempo y los subíndices la numeración nodal.
- \mathbf{I} - tensor identidad;
- $(\dots)^T$ - indica transposición;
- δ_{ij} - tensor de Kronecker;

C.2.2. Parámetros de las ecuaciones

- Co - número de Courant;
- C_r - parámetro de regularización de LS;
- \mathbf{c} - velocidad convectiva: es la velocidad relativa entre la configuración espacial y la de referencia;
- \mathcal{E} - conjunto de elementos finitos que componen un dominio Ω_t ;
- \mathbf{E} - vector de condiciones de contorno mixtas;
- \tilde{E} - módulo de elasticidad longitudinal del pseudo-material sólido;
- $E_{\%}$ - eficiencia porcentual de un programa ejecutado en paralelo;
- F - fracción de volumen de un fluido en una celda, en VOF;
- \mathbf{F} - vector de condiciones de contorno Dirichlet;
- Fr - número de Froude, $Fr = U/\sqrt{gL}$;
- \mathbf{f} - fuerzas de masa;

- \mathbf{G} - matrices de términos de presión;
- H - parámetro de proyección de la normal a la SL sobre la espina;
- $H(\phi)$ - función de Heaviside;
- $H_\varepsilon(\phi)$ - función de Heaviside suavizada en LS;
- $\tilde{H}(\phi)$ - función de Heaviside suavizada para el método de captura;
- h - tamaño típico de elementos en la malla global;
- \mathbf{K} - matrices de términos viscosos;
- l_i - longitud de la arista i de un elemento;
- \mathbf{M} - matrices de masa;
- M - parámetro de penalización en la renormalización para la alternativa LS;
- \mathbf{n} - vector normal a la SL;
- $\mathbf{n}(\mathbf{x})$ - vector normal a la SL en el nodo \mathbf{x} .
- $N_j(\mathbf{x})$ - función de interpolación del MEF para el nodo j .
- p - cantidad de procesadores empleados para un proceso en cálculo distribuido;
- p - presión;
- $-p\mathbf{I}$ - parte isotrópica del tensor de tensiones en el fluido $\boldsymbol{\sigma}$;
- P_{atm} - presión atmosférica;
- q - indicador de calidad para minimización de la distorsión de elementos;
- r - exponente del factor de rigidez para el problema pseudoelástico no lineal;
- Re - número de Reynolds, $\text{Re} = UL/\nu$;
- $\hat{\mathbf{s}}_j$ - dirección de la espina;
- \mathcal{S} - operador de suavizado para la superficie libre;
- S_p - aceleramiento o *speedup* para p procesadores en procesamiento distribuido;
- Δt - paso de tiempo;
- t - tiempo, $t \in [0, T]$;
- t_0 - tiempo inicial;
- t_p - tiempo de ejecución en p procesadores para cálculo en paralelo;
- T - tiempo final;
- \mathbf{T} - parte desviadora del tensor de tensiones en el fluido $\boldsymbol{\sigma}$;

- \mathbf{u} - desplazamiento nodal en el proceso de actualización de la malla, elástico, mediante optimización u otro;
- \mathbf{v} - velocidad absoluta o material;
- $\hat{\mathbf{v}}$ - velocidad de deriva: del marco referencial con respecto al espacial;
- \mathbf{w} - velocidad relativa, de la partícula en la configuración de referencia.
- \mathbf{x} - vector posición, representa coordenada en el dominio espacial;
- \mathbf{x}_j^n - vector posición del nodo j en el paso de tiempo n ;
- \mathbf{x}_j^0 - vector posición inicial del nodo j ;
- \mathbf{X} - coordenada en el dominio material;
- α - parámetro de integración temporal;
- β - coeficiente de deslizamiento;
- δ - tensor de parámetros de estabilización de SUPG;
- ι - tensor de parámetros de estabilización de PSPG;
- η_j - coordenada escalar del nodo j sobre la dirección de la espina $\hat{\mathbf{s}}_j$ medida desde $\mathbf{x}_{0,j}$;
- ε - semiespesor de la transición de ϕ en LS;
- $\tilde{\varepsilon}$ - proporción sobre el semiespesor de la transición de ϕ en LS para interpolación de las propiedades del fluido en el problema de NS;
- ϵ - tensor de deformación en el problema pseudo-elástico;
- γ - coeficiente de suavizado para la SL;
- κ - parámetro de difusión para la renormalización acotada de ϕ ;
- $\kappa(\phi)$ - parámetro del término difusivo para la advección auto-renormalizada de ϕ ;
- κ_{ref} - parámetro de referencia para el cálculo de $\kappa(\phi)$.
- μ - viscosidad dinámica;
- $\tilde{\mu}, \tilde{\lambda}$ - constantes elásticas de Lamé para el problema pseudoelástico;
- $\hat{\mu}$ - parámetro de Olsson para el método de LS conservativo;
- $\nu = \mu/\rho$ - viscosidad cinemática;
- ν_{LSIC} - viscosidad característica en LSIC;
- $\tilde{\nu}$ - coeficiente de Poisson para el problema pseudo-elástico;

- φ - mapeo de coordenadas materiales a coordenadas espaciales;
- ϕ - función de nivel (*level set function*);
- Φ - mapeo de coordenadas referenciales a coordenadas espaciales;
- Ψ - mapeo de coordenadas referenciales a coordenadas materiales;
- ρ - densidad del fluido;
- ρ_g - densidad del gas en *level set*;
- ρ_l - densidad del líquido en *level set*;
- σ - tensor de tensiones en el fluido;
- τ - tiempo característico o artificial;
- τ_S - tiempo característico para SUPG sobre la SL;
- τ_{SUPG} - tiempo característico en SUPG;
- τ_{PSPG} - tiempo característico en PSPG;
- $\Gamma = \partial\Omega$ - frontera, tal como:
 - Γ_D - contornos sobre paredes sólidas, condiciones Dirichlet;
 - Γ_t - interfaces en general;
 - Γ_{SL} - SL;
 - Γ_I - interfase en LS;
- Ω - dominio espacial;
- $\Omega_t = \Omega(t)$ - dominio espacial de estudio en el tiempo t ;
- $\Omega_{\mathbf{x}}$ - dominio en la configuración espacial;
- $\Omega_{\mathbf{X}}$ - dominio en la configuración material;
- Ω_{χ} - dominio en la configuración de referencia;
- Ω_l - dominio que representa la región líquida, o más densa, en LS;
- Ω_g - dominio que representa la región gaseosa, o menos densa, en LS;
- χ - coordenada en el sistema de coordenadas de referencia.

Bibliografía

- [ABD08] E. Audusse, M. O. Bristeau, y A. Decoene. Numerical simulations of 3D free surface flows by a multilayer Saint-Venant model. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 56(3):331–350, 2008.
- [AF06] B. Ataie-Ashtiani y L. Farhadi. A stable moving-particle semi-implicit method for free surface flows. *Fluid Dynamics Research*, 38(4):241–256, Abril 2006.
- [AMS03] E. Aulisa, S. Manservigi, y R. Scardovelli. A mixed markers and volume-of-fluid method for the reconstruction and advection of interfaces in two-phase and free-boundary flows. *Journal of Computational Physics*, 188(2):611–639, 2003.
- [AMS04] E. Aulisa, S. Manservigi, y R. Scardovelli. A surface marker algorithm coupled to an area-preserving marker redistribution method for three-dimensional interface tracking. *Journal of Computational Physics*, 197(2):555–584, 2004.
- [AMSZ03] E. Aulisa, S. Manservigi, R. Scardovelli, y S. Zaleski. A geometrical area-preserving Volume-of-Fluid advection method. *Journal of Computational Physics*, 192(1):355–364, 2003.
- [AMSZ07] E. Aulisa, S. Manservigi, R. Scardovelli, y S. Zaleski. Interface reconstruction with least-squares fit and split advection in three-dimensional Cartesian geometry. *Journal of Computational Physics*, 225(2):2301–2319, 2007.
- [Aqu07] Cluster Geronimo en CIMEC. <http://www.cimec.org.ar/geronimo>, 2007.
- [Aqu08] Cluster Aquiles en CIMEC. <http://www.cimec.org.ar/aquiles>, 2008.
- [AS99] D. Adalsteinsson y J. A. Sethian. The fast construction of extension velocities in level set methods. *Journal of Computational Physics*, 148(1):2–22, Enero 1999.
- [ASF08] B. Ataie-Ashtiani, G. Shobeyri, y L. Farhadi. Modified incompressible SPH method for simulating free surface problems. *Fluid Dynamics Research*, 40(9):637–661, Septiembre 2008.
- [ATU07] J. E. Akin, T. E. Tezduyar, y M. Ungor. Computation of flow problems with the mixed interface-tracking/interface-capturing technique (MITICT). *Computers & Fluids*, 36(1):2–11, Enero 2007.

- [BA02] M. Behr y F. Abraham. Free surface flow simulations in the presence of inclined walls. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 191(47-48):5467–5483, 2002.
- [Bab71] I. Babuška. Error-bounds for finite element method. *Numerische Mathematik*, 16(4):322–333, Enero 1971.
- [BBE⁺05] S. Balay, K. Buschelman, V. Eijkhout, W. Gropp, D. Kaushik, M. Knepley, L. McInnes, B. Smith, y H. Zhang. PETSc 2.3.0 users manual. Technical Report UC-405, Argonne Nat. Lab., 2005.
- [BBS06] K. C. Biswal, S. K. Bhattacharyya, y P. K. Sinha. Non-linear sloshing in partially liquid filled containers with baffles. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 68(3):317–337, 2006.
- [BCG89] J. B. Bell, P. Colella, y H. M. Glaz. A second-order projection method for the incompressible Navier–Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 85(2):257–283, Diciembre 1989.
- [BDESN04] L. Battaglia, J. D’ Elía, M. Storti, y N. Nigro. Parallel implementations of free surface flows. En G. Buscaglia, E. Dari, y O. Zamonsky, editores, *Mecánica Computacional*, volumen XXIII, pp. 3119–3132, San Carlos de Bariloche, Noviembre 08-11 2004.
- [BDESN05] L. Battaglia, J. D’ Elía, M. A. Storti, y N. M. Nigro. Free-surface flows in a multi-physics programming paradigm. En A. Larreteguy, editor, *Mecánica Computacional*, volumen XXIV, pp. 105–116, Noviembre 16-18 2005.
- [BDESN06] L. Battaglia, J. D’ Elía, M. A. Storti, y N. M. Nigro. Numerical simulation of transient free surface flows using a moving mesh technique. *ASME Journal of Applied Mechanics*, 73(6):1017–1025, Noviembre 2006.
- [Beo08] The Beowulf Project. <http://www.beowulf.org>, 2008.
- [BFSDE06] L. Battaglia, G. J. Franck, M. A. Storti, y J. D’ Elía. Numerical simulation of free-surface flows with volume control. En A. Cardona, N. Nigro, V. Sonzogni, y M. Storti, editores, *Mecánica Computacional*, volumen XXV, pp. 169–183, Noviembre 7-10 2006.
- [BH82] A. Brooks y T. J. R. Hughes. Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics Engineering*, 32(1-3):199–259, Septiembre 1982.
- [Bou95] A. Bourlioux. A coupled level-set volume-of-fluid algorithm for tracking material interfaces. En *Proceedings of the 6th International Symposium on Computational Fluid Dynamics, Lake Tahoe, Ca.*, 1995.
- [Bre74] F. Brezzi. On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from Lagrangian multipliers. *R.A.I.R.O. Anal. Numér.*, 8(R-2):129–151, 1974.

- [BSDE07] L. Battaglia, M. A. Storti, y J. D' Elía. Stabilized free surface flows. En S. Elaskar, E. Pilotta, y G. Torres, editores, *Mecánica Computacional*, volumen XXVI, pp. 1013–1030, Octubre 2-5 2007.
- [BSDE08] L. Battaglia, M. A. Storti, y J. D' Elía. An interface capturing finite element approach for free surface flows using unstructured grids. En Cardona, Storti, y Zuppa, editores, *Mecánica Computacional*, volumen XXVII, pp. 33–48, San Luis, Noviembre 10-13 2008.
- [BTA08] A. Baghlani, N. Talebbeydokhti, y M. Abedini. A shock-capturing model based on flux-vector splitting method in boundary-fitted curvilinear coordinates. *Applied Mathematical Modelling*, 32(3):249–266, Marzo 2008.
- [BW00] H. Braess y P. Wriggers. Arbitrary lagrangian eulerian finite element analysis of free surface flow. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190(1-2):95 – 109, 2000.
- [Cal05] N. A. Calvo. *Generación de mallas tridimensionales por métodos duales*. PhD thesis, Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas, Universidad Nacional del Litoral, 2005.
- [CC05] A. H. Coppola-Owen y R. Codina. Improving Eulerian two-phase flow finite element approximation with discontinuous gradient pressure shape functions. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 49(12):1287–1304, Diciembre 2005.
- [CC07] A. H. Coppola-Owen y R. Codina. A finite element model for free surface flows on fixed meshes. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 54(10):1151–1171, Agosto 2007.
- [CCB08] M. A. Cruchaga, D. J. Celentano, y P. Brei tkopf. Modeling two-fluid interfaces for 3D flow problems. En Cardona, Storti, y Zuppa, editores, *Mecánica Computacional*, volumen XXVII, pp. 209–209, San Luis, Noviembre 10-13 2008.
- [CCT05] M. A. Cruchaga, D. J. Celentano, y T. E. Tezduyar. Moving-interface computations with the edge-tracked interface locator technique (ETILT). *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 47:451–469, 2005.
- [CCT07a] M. A. Cruchaga, D. J. Celentano, y T. E. Tezduyar. Collapse of a liquid column: numerical simulation and experimental validation. *Computational Mechanics*, 39:453–476, 2007.
- [CCT07b] M. A. Cruchaga, D. J. Celentano, y T. E. Tezduyar. A numerical model based on the mixed interface-tracking/interface-capturing technique (MITICT) for flows with fluid-solid and fluid-fluid interfaces. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 54(6-8):1021–1030, Junio 2007.
- [CFA01] R. Caiden, R. P. Fedkiw, y C. Anderson. A numerical method for two-phase flow consisting of separate compressible and incompressible regions. *Journal of Computational Physics*, 166(1):1–27, 2001.

- [CIM08] CIMEC. Centro Internacional de Métodos Computacionales en Ingeniería. <http://www.cimec.org.ar>, 2008.
- [CL03] A. Colagrossi y M. Landrini. Numerical simulation of interfacial flows by smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 191(2):448–475, Noviembre 2003.
- [CMR08] G. Compere, E. Marchandise, y J.-F. Remacle. Transient adaptivity applied to two-phase incompressible flows. *Journal of Computational Physics*, 227(3):1923–1942, Enero 2008.
- [CT08] L.-T. Cheng y Y.-H. Tsai. Redistancing by flow of time dependent Eikonal equation. *Journal of Computational Physics*, 227(8):4002–4017, Abril 2008.
- [CWS04] P. M. Carrica, R. V. Wilson, y F. Stern. Single-phase level set methods for unsteady viscous free-surface flows. En G. Buscaglia, E. Dari, y O. Zamosky, editores, *Mecánica Computacional*, volumen XXIII, pp. 1613–1631, Bariloche, Noviembre 2004.
- [DDSV93] J. J. Dongarra, I. S. Duff, D. C. Sorensen, y H. A. van der Vorst. *Solving linear systems on Vector and Shared Memory Computers*. SIAM, 1993.
- [DGN04] F. Duarte, R. Gormaz, y S. Natesan. Arbitrary Lagrangian-Eulerian method for Navier–Stokes equations with moving boundaries. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193(45-47):4819–4836, 2004.
- [DH03] J. Donea y A. Huerta. *Finite Element Methods for Flow Problems*. John Wiley & Sons, 2003.
- [DLFP06] D. A. Di Pietro, S. Lo Forte, y N. Parolini. Mass preserving finite element implementations of the level set method. *Applied Numerical Mathematics*, 56(9):1179–1195, Septiembre 2006.
- [dMN⁺04] F. S. de Sousa, N. Mangiavacchi, L. G. Nonato, A. Castelo, M. F. Tomé, V. G. Ferreira, J. A. Cuminato, y S. McKee. A front-tracking/front-capturing method for the simulation of 3D multi-fluid flows with free surfaces. *Journal of Computational Physics*, 198(2):469–499, 2004.
- [DPIOA07] F. Del Pin, S. Idelsohn, E. Oñate, y R. Aubry. The ALE/Lagrangian particle finite element method: A new approach to computation of free-surface flows and fluid-object interactions. *Computers & Fluids*, 36(1):27–38, Enero 2007.
- [EC07] R. Elias y A. L. G. A. Coutinho. Stabilized edge-based finite element simulation of free-surface flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 54(6-8):965–993, Junio 2007.
- [EFFM02] D. Enright, R. Fedkiw, J. Ferziger, y I. Mitchell. A hybrid particle level set method for improved interface capturing. *Journal of Computational Physics*, 183(1):83–116, Noviembre 2002.

- [EMC07] R. Elias, M. A. D. Martins, y A. L. G. A. Coutinho. Simple finite element-based computation of distance functions in unstructured grids. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 72(9):1095–1110, Noviembre 2007.
- [ET98] A. Esmaeeli y G. Tryggvason. Direct numerical simulations of bubbly flows. Part 1. Low Reynolds number arrays. *Journal of Fluid Mechanics*, 377:313–345, 1998.
- [ET99] A. Esmaeeli y G. Tryggvason. Direct numerical simulations of bubbly flows. Part 2. Moderate Reynolds number arrays. *Journal of Fluid Mechanics*, 385:325–358, 1999.
- [FD00] A. Folch Duran. *A numerical formulation to solve the ALE Navier–Stokes equations applied to the withdrawal of magma chambers*. PhD thesis, Universitat Politècnica de Catalunya, Abril 2000.
- [FH95] L. K. Forbes y G. C. Hocking. The bath-plug vortex. *Journal of Fluid Mechanics*, 284:43–62, 1995.
- [Fre08] Free Software Foundation. The GNU Project. <http://www.gnu.org>, 2008.
- [FS82] L. K. Forbes y L. W. Schwartz. Free-surface flows over a semicircular obstruction. *Journal of Fluid Mechanics Digital Archive*, 144:299–314, 1982.
- [GBT99] I. Güler, M. Behr, y T. Tezduyar. Parallel finite element computation of free-surface flows. *Computational Mechanics*, 23(2):117–123, Marzo 1999.
- [GE99] J. García Espinosa. *Un Método de Elementos Finitos para Análisis Hidrodinámico de Estructuras Navales*. PhD thesis, Universidad Politècnica de Catalunya, 1999.
- [GLN⁺99] D. Gueyffier, J. Li, A. Nadim, R. Scardovelli, y S. Zaleski. Volume-of-Fluid interface tracking with smoothed surface stress methods for three-dimensional flows. *Journal of Computational Physics*, 152:423–456, 1999.
- [GNNB08] J. P. Gois, A. Nakano, L. G. Nonato, y G. C. Buscaglia. Front tracking with moving-least-squares surfaces. *Journal of Computational Physics*, 227(22):9643–9669, Noviembre 2008.
- [Gro05] J. Grooss. *A Level Set Discontinuous Galerkin Method for Free Surface Flows - and Water-Wave Modeling*. PhD thesis, Informatics and Mathematical Modelling, Technical University of Denmark, DTU, Richard Petersens Plads, Building 321, DK-2800 Kgs. Lyngby, 2005.
- [GS99] M. D. Giavedoni y F. A. Saita. The rear meniscus of a long bubble steadily displacing a newtonian liquid in a capillary tube. *Physics of Fluids*, 11(4):786–794, 1999.
- [GS03] I. Ginzburg y K. Steiner. Lattice Boltzmann model for free-surface flow and its application to filling process in casting. *Journal of Computational Physics*, 185(1):61–99, Febrero 2003.

- [HB79] T. Hughes y A. Brooks. A multi-dimensional upwind scheme with no crosswind diffusion. *Finite Element Methods for Convection Dominated Flows*, 34:19–35, 1979.
- [HCS07] J. Huang, P. M. Carrica, y F. Stern. Coupled ghost fluid/two-phase level set method for curvilinear body-fitted grids. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 55(9):867–897, 2007.
- [Hei04] M. Heil. An efficient solver for the fully coupled solution of large-displacement fluid-structure interaction problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193(1-2):1–23, Enero 2004.
- [Her07] J.-M. Hervouet. *Hydrodynamics of free surface flows. Modelling with the finite element method*. Wiley, 2007.
- [Her08] M. Herrmann. A balanced force refined level set grid method for two-phase flows on unstructured flow solver grids. *Journal of Computational Physics*, 227(4):2674–2706., Febrero 2008.
- [HHA07] H. Hernández-Barrios, E. Heredia-Zavoni, y A. A. Aldama-Rodríguez. Nonlinear sloshing response of cylindrical tanks subjected to earthquake ground motion. *Engineering Structures*, 29(12):3364 – 3376, 2007.
- [HKC04] P. D. Hieu, T. Katsutoshi, y V. T. Ca. Numerical simulation of breaking waves using a two-phase flow model. *Applied Mathematical Modelling*, 28(11):983–1005, Noviembre 2004.
- [HL88] A. Huerta y W. K. Liu. Viscous flow with large free surface motion. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 69:277–324, 1988.
- [HLZ81] T. J. R. Hughes, W. K. Liu, y T. K. Zimmermann. Lagrangian-Eulerian finite element formulation for incompressible viscous flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 29(3):329–349, Diciembre 1981.
- [HN81] C. W. Hirt y B. D. Nichols. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, 39(1):201–225, Enero 1981.
- [HW65] F. H. Harlow y J. E. Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Physics of Fluids*, 8(12):2182–2189, Diciembre 1965.
- [Hys07] S.-R. Hysing. *Numerical Simulation of Immiscible Fluids with FEM Level Set Techniques*. PhD thesis, Dortmund - Germany, 2007.
- [IMLO08] S. R. Idelsohn, J. Marti, A. Limache, y E. Oñate. Unified Lagrangian formulation for elastic solids and incompressible fluids: Application to fluid-structure interaction problems via the PFEM. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(19-20):1762–1776, Marzo 2008.

- [IODP04] S. R. Idelsohn, E. Oñate, y F. Del Pin. The Particle Finite Element Method: a powerful tool to solve incompressible flows with free-surfaces and breaking waves. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 61(7):964–984, 2004.
- [IQ08] K. Ito y Z. Qiao. A high order compact MAC finite difference scheme for the Stokes equations: Augmented variable approach. *Journal of Computational Physics*, 227(17):8177–8190, Septiembre 2008.
- [JS05] R.-T. Jung y T. Sato. Numerical simulation of high Schmidt number flow over a droplet by using moving unstructured mesh. *Journal of Computational Physics*, 203(1):221–249, Febrero 2005.
- [JT94] A. A. Johnson y T. E. Tezduyar. Mesh update strategies in parallel finite element computations of flow problems with moving boundaries and interfaces. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 119(1-2):73–94, Noviembre 1994.
- [Kle05] K. M. T. Kleefsman. *Water Impact Loading on Offshore Structures. A Numerical Study*. PhD thesis, Rijksuniversiteit, 2005.
- [KPL03] M. S. Kim, J. S. Park, y W. I. Lee. A new VOF-based numerical scheme for the simulation of fluid flow with free surface. Part II: application to the cavity filling and sloshing problems. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 42:791–812, 2003.
- [Kul98] V. D. Kulkarni. A piecewise linear interface tracking method for 3-D Eulerian incompressible fluid flows. Master’s thesis, Department of Mechanical and Aerospace Engineering, Carleton University, Ottawa, Canada, 1998.
- [Lad69] O. A. Ladyzhenskaya. *The mathematical theory of viscous incompressible flow*. Gordon and Breach, New York-London, 1969.
- [Lan98] C. B. Laney. *Computational Gasdynamics*. Cambridge University Press, 1998.
- [LeV96] R. J. LeVeque. High-resolution conservative algorithms for advection in incompressible flow. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 33(2):627–665, 1996.
- [Li95] J. Li. Calcul d’interface affine par morceaux. *C. R. Acad. Sci. Paris - Série II b*, 320:391–396, 1995.
- [Lin08] Linux. Linux documentation project. <http://www.linux.org/>, 2008.
- [LIRO07] A. Limache, S. Idelsohn, R. Rossi, y E. Oñate. The violation of objectivity in Laplace formulations of the Navier–Stokes equations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 54(6-8):639 – 664, Marzo 2007.
- [LJS08] Z. Li, F. A. Jaber, y T. I.-P. Shih. A hybrid Lagrangian-Eulerian particle-level set method for numerical simulations of two-fluid turbulent flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 56(12):2271–2300, 2008.

- [LNS08] E. J. López, N. M. Nigro, y M. A. Storti. Simultaneous untangling and smoothing of moving grids. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 76(7):994–1019, Noviembre 2008.
- [LNST07] E. J. López, N. M. Nigro, M. A. Storti, y J. A. Toth. A minimal element distortion strategy for computational mesh dynamics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 69(9):1898–1929, Febrero 2007.
- [Log94] J. D. Logan. *An introduction to nonlinear partial differential equations*. Pure and Applied Mathematics. Wiley-Interscience, 1994.
- [LYO06] R. Löhner, C. Yang, y E. Oñate. On the simulation of flows with violent free surface motion. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195(41-43):5597–5620, 2006.
- [MA95a] F. Mashayek y N. Ashgriz. A hybrid finite-element - volume-of-fluid method for simulating free surface flows and interfaces. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 20(12):1363–1380, 1995.
- [MA95b] F. Mashayek y N. Ashgriz. A spine-flux method for simulating free surface flows. *Journal of Computational Physics*, 122(2):367–379, Diciembre 1995.
- [Mad05] S. Madasu. Capillary impregnation in a flexible slit: a finite element formulation. *Journal of Computational Physics*, 206(1):277–301, Junio 2005.
- [Mar08] J. M. Martí. *El método de elementos finitos de partículas en interacción fluido-estructura*. PhD thesis, Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas, Universidad Nacional del Litoral (UNL), Santa Fe, Argentina, 2008.
- [MBD06] F. Mut, G. C. Buscaglia, y E. A. Dari. New mass-conserving algorithm for level set redistancing on unstructured meshes. *Journal of Applied Mechanics*, 73(6):1011–1016, Noviembre 2006.
- [MBK⁺87] A. D. Myshkis, V. G. Babskii, N. D. Kopachevskii, L. A. Slobozhanin, y A. D. Tyuptsov. *Low-Gravity Fluid Mechanics*. Springer-Verlag, 1987.
- [MM52] J. C. Martin y W. J. Moyce. An experimental study of the collapse of liquid columns on a rigid horizontal plane. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 244(882):312–324, Marzo 1952.
- [MP66] N. Moiseev y A. A. Petrov. The calculation of free oscillations of a liquid in a motionless container. En Dryden y Von Kármán, editores, *Advances in Applied Mechanics*, volumen 9, pp. 91–155. Academic Press, 1966.
- [MPI08] MPI. Message Passing Interface. <http://www.mpi-forum.org>, 2008.
- [MPR99] V. Maronnier, M. Picasso, y J. Rappaz. Numerical simulation of free surface flows. *Journal of Computational Physics*, 155(2):439–455, 1999.

- [MR06] E. Marchandise y J.-F. Remacle. A stabilized finite element method using a discontinuous level set approach for solving two phase incompressible flows. *Journal of Computational Physics*, 219(2):780–800, 2006.
- [NW76] W. F. Noh y P. Woodward. SLIC (Simple Line Interface Calculation). Technical report, Lawrence Livermore Laboratory, 1976.
- [OF01] S. Osher y R. P. Fedkiw. Level set methods: An overview and some recent results. *Journal of Computational Physics*, 169:463–502, 2001.
- [OK05] E. Olsson y G. Kreiss. A conservative level set method for two phase flow. *Journal of Computational Physics*, 210(1):225–246, Noviembre 2005.
- [OKZ07] E. Olsson, G. Kreiss, y S. Zahedi. A conservative level set method for two phase flow II. *Journal of Computational Physics*, 225(1):785–807, Julio 2007.
- [OS88] S. Osher y J. A. Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, 79(1):12–49, Noviembre 1988.
- [OTCM08] C. M. Oishi, M. F. Tome, J. A. Cuminato, y S. McKee. An implicit technique for solving 3D low Reynolds number moving free surface flows. *Journal of Computational Physics*, 227(16):7446–7468, Agosto 2008.
- [Par04] N. Parolini. *Computational Fluid Dynamics for Naval Engineering Problems*. PhD thesis, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, 2004.
- [Ped03] J. Pedlosky. *Waves in the ocean and atmosphere. Introduction to wave dynamics*. Springer, 2003.
- [PET08] PETSc-FEM. A general purpose, parallel, multi-physics FEM program. <http://www.cimec.org.ar/petscfem>, 2008.
- [PKV04] S. Papaspyrou, S. A. Karamanos, y D. Valougeorgis. Response of half-full horizontal cylinders under transverse excitation. *Journal of Fluids and Structures*, 19(7):985–1003, Agosto 2004.
- [PP04] J. E. Pilliod y E. G. Puckett. Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces. *Journal of Computational Physics*, 199:465–502, 2004.
- [Pro81] A. Prosperetti. Motion of two superposed viscous fluids. *Physic of Fluids*, 24(7):1217–1223, Julio 1981.
- [PVK04] S. Papaspyrou, D. Valougeorgis, y S. A. Karamanos. Sloshing effects in half-full horizontal cylindrical vessels under longitudinal excitation. *ASME-Journal of Applied Mechanics*, 71(2):255–265, Marzo 2004.
- [Ram90] B. Ramaswamy. Numerical simulation of unsteady viscous free surface flow. *Journal of Computational Physics*, 90(2):396–430, Octubre 1990.

- [RK98] W. J. Rider y D. B. Kothe. Reconstructing volume tracking. *Journal of Computational Physics*, 141(2):112–152, 1998.
- [RM03] S. Rabier y M. Medale. Computation of free surface flows with a projection FEM in a moving mesh framework. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192(41-42):4703–4721, Octubre 2003.
- [RMB07] M. Raessi, J. Mostaghimi, y M. Bussmann. Advecting normal vectors: A new method for calculating interface normals and curvatures when modeling two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 226(1):774–797, 2007.
- [SAB⁺99] M. Sussman, A. S. Almgren, J. B. Bell, P. Colella, L. H. Howell, y M. L. Welcome. An adaptive level set approach for incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 148(1):81–124, Enero 1999.
- [Set95] J. A. Sethian. A fast marching level set method for monotonically advancing fronts. National Academy of Sciences, 1995.
- [SFDO91] A. Soulaïmani, M. Fortin, G. Dhatt, y Y. Ouellet. Finite element simulation of two- and three-dimensional free surface flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 86(3):265–296, Abril 1991.
- [SFSO98] M. Sussman, E. Fatemi, P. Smereka, y S. Osher. An improved level set method for incompressible two-phase flows. *Computers & Fluids*, 27(5-6):663–680, Junio 1998.
- [SH07] T. Sawada y T. Hisada. Fluid-structure interaction analysis of the two-dimensional flag-in-wind problem by an interface-tracking ALE finite element method. *Computers & Fluids*, 36(1):136–146, Enero 2007.
- [SL00] S. Shin y W. I. Lee. Finite element analysis of incompressible viscous flow with moving free surface by selective volume of fluid method. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 21:197–206, 2000.
- [SP96] C. Succi y F. Papetti. *An Introduction to parallel computational Fluid Dynamic*. Nova Science Publishers Inc., 1996.
- [SP00] M. Sussman y E. G. Puckett. A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3D and axisymmetric incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 162(2):301–337, 2000.
- [SP07] M. A. Storti y R. R. Paz. Métodos iterativos para la solución de problemas lineales y no-lineales. notas del curso, 2007.
- [Spu97] J. Spurk. *Fluid mechanics: problems and solutions*. Springer-Verlag, Germany, 1997.
- [SS81] H. Saito y L. E. Scriven. Study of coating flow by the finite element method. *Journal of Computational Physics*, 42(1):53–76, Julio 1981.
- [SS97] M. Sussman y P. Smereka. Axisymmetric free boundary problems. *Journal of Fluid Mechanics*, 341:269–294, 1997.

- [SSH⁺07] M. Sussman, K. Smith, M. Hussaini, M. Ohta, y R. Zhi-Wei. A sharp interface method for incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 221(2):469–505, 2007.
- [STB04] K. Stein, T. E. Tezduyar, y R. Benney. Automatic mesh update with the solid-extension mesh moving technique. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193(21-22):2019–2032, Mayo 2004.
- [Sto57] J. J. Stoker. *Water waves. The mathematical theory with applications*, volumen IV of *Pure and Applied Mathematics*. Interscience, 1957.
- [SURS96] W. Shyy, H. S. Udaykumar, M. M. Rao, y R. W. Smith. *Computational Fluid Dynamics with Moving Boundaries*. Taylor and Francis, 1996.
- [Sus05] M. Sussman. A parallelized, adaptive algorithm for multiphase flows in general geometries. *Computers and Structures*, 83(6-7):435–444, 2005.
- [SYNS02] V. Sonzogni, A. Yommi, N. Nigro, y M. Storti. A parallel finite element program on a Beowulf Cluster. *Advances in Engineering Software*, 33(7-10):427–443, Julio-Octubre 2002.
- [SZ99] R. Scardovelli y S. Zaleski. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annual Reviews in Fluid Mechanics*, 31:567–603, 1999.
- [SZ00] R. Scardovelli y S. Zaleski. Analytical relations connecting linear interfaces and volume fractions in rectangular grids. *Journal of Computational Physics*, 164(1):228–237, 2000.
- [SZ01] M. Souli y J. P. Zolesio. Arbitrary Lagrangian-Eulerian and free surface methods in fluid mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 191(3-5):451–466, 2001.
- [SZ03] R. Scardovelli y S. Zaleski. Interface reconstruction with least-square fit and split Eulerian-Lagrangian advection. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 41:251–274, 2003.
- [TAB⁺93] T. Tezduyar, S. Aliabadi, M. Behr, A. Johnson, y S. Mittal. Parallel finite-element computation of 3D flows. *Computer*, 26(10):27–36, Octubre 1993.
- [TAB98] T. Tezduyar, S. Aliabadi, y M. Behr. Enhanced-Discretization Interface-Capturing Technique (EDICT) for computation of unsteady flows with interfaces. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 155:235–248, 1998.
- [TBJ⁺08] G. Thömmes, J. Becker, M. Junk, A. K. Vaikuntam, D. Kehrwald, A. Klar, K. Steiner, y A. Wiegmann. A Lattice Boltzmann Method for immiscible multiphase flow simulations using the level set method. Technical Report 134, Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik (ITWM), 2008.

- [TBL92] T. E. Tezduyar, M. Behr, y J. Liou. A new strategy for finite element computations involving moving boundaries and interfaces—the deforming-spatial-domain/space-time procedure: I. the concept and the preliminary numerical tests. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 94(3):339–351, Febrero 1992.
- [TBML92] T. E. Tezduyar, M. Behr, S. Mittal, y J. Liou. A new strategy for finite element computations involving moving boundaries and interfaces—the deforming-spatial-domain/space-time procedure: II. computation of free-surface flows, two-liquid flows, and flows with drifting cylinders. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 94(3):353–371, Febrero 1992.
- [Tez91] T. E. Tezduyar. Stabilized finite element formulations for incompressible flow computations. *Advances in Applied Mechanics*, 28:1–44, 1991.
- [Tez01] T. E. Tezduyar. Finite element methods for flow problems with moving boundaries and interfaces. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 8(2):83–130, Junio 2001.
- [Tez06] T. E. Tezduyar. Interface-tracking and interface-capturing techniques for finite element computation of moving boundaries and interfaces. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195(23-24):2983–3000, Abril 2006.
- [TFC⁺01] M. Tomé, A. Filho, J. Cuminato, N. Mangiavacchi, y S. McKee. GENS-MAC3D: a numerical method for solving unsteady three-dimensional free surface flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 37(7):747–796, 2001.
- [TLW08] B. Tang, J.-f. Li, y T.-s. Wang. Viscous flow with free surface motion by least square finite element method. *Applied Mathematics and Mechanics*, 29(7):943–952, Julio 2008.
- [TMRS92] T. E. Tezduyar, S. Mittal, S. E. Ray, y R. Shih. Incompressible flow computations with stabilized bilinear and linear-equal-order interpolation velocity-pressure elements. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 95(2):221–242, Marzo 1992.
- [TO00] T. E. Tezduyar y Y. Osawa. Finite element stabilization parameters computed from element matrices and vectors. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190(3-4):411–430, Octubre 2000.
- [TSKS04] T. Tezduyar, S. Sathe, R. Keedy, y K. Stein. Space-time techniques for finite element computation of flows with moving boundaries and interfaces. En *III Congreso Internacional sobre Métodos Numéricos en Ingeniería y Ciencias Aplicadas*, 2004.
- [UT92] S. O. Unverdi y G. Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 100:25–37, 1992.

- [Whi68] S. Whitaker. *Introduction to Fluid Mechanics*. Physical and Chemical Engineering Series. Prentice-Hall, 1968.
- [Whi91] F. M. White. *Viscous Fluid Flow*. Mc. Graw Hill, 1991.
- [Whi97] F. M. White. *Fluid Mechanics - 4a Edición*. Mc. Graw Hill, 1997.
- [XA04] Z. Xu y M. Accorsi. Finite element mesh update methods for fluid-structure interaction simulation. *Finite Element in Analysis and Design*, 40(9-10):1259–1269, Junio 2004.
- [YJ06] X. Yang y A. J. James. Analytic relations for reconstructing piecewise linear interfaces in triangular and tetrahedral grids. *Journal of Computational Physics*, 214(1):41–54, Mayo 2006.
- [YJL⁺06] X. Yang, A. J. James, J. Lowengrub, X. Zheng, y V. Cristini. An adaptive coupled level-set/volume-of-fluid interface capturing method for unstructured triangular grids. *Journal of Computational Physics*, 217(2):364–394, Septiembre 2006.
- [Zal79] S. T. Zalesak. Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids. *Journal of Computational Physics*, 31(3):335–362, Junio 1979.