

## UNA FORMULACION MONOLITICA PARA FLUJOS A SUPERFICIE LIBRE CON CALCULO NUMERICO DEL JACOBIANO

**Roberto F. Ausas<sup>a</sup>, Enzo A. Dari<sup>a</sup> y Gustavo C. Buscaglia<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>*Grupo de Mecánica Computacional, Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro, Av. Bustillo 9500, Bariloche, Argentina, rfausas@gmail.com*

<sup>b</sup>*Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Univ. de São Paulo, São Carlos, Brasil, gustavo.buscaglia@gmail.com*

**Palabras Clave:** Flujos a Superficie Libre, Método de Level Set, Esquemas monolíticos.

### **Resumen.**

En este trabajo presentamos una formulación de elementos finitos estabilizada con interpolación lineal para todos los campos, para la simulación de flujos a superficie libre, basada en el método de level set. Se estudia la utilización de un esquema monolítico de cálculo en el cual, velocidad, presión y posición de la interfase material son obtenidas en forma simultánea mediante un esquema de Newton–Raphson. Notando que ciertas componentes del jacobiano no pueden ser computadas exactamente en aquellos elementos de la malla que son atrevidos por la interfase, se propone computarlas mediante diferenciación numérica respecto a la función de level set de los residuos en la formulación variacional discreta, para así mejorar la convergencia del proceso iterativo no lineal. Presentamos varios detalles relacionados con la implementación numérica del problema. Finalmente, se muestran varios ejemplos numéricos donde se analizan las ventajas del tratamiento monolítico y de la diferenciación numérica del jacobiano.

## 1. INTRODUCCION

La simulación de flujos a superficie libre o flujos de dos fases inmiscibles, en los cuales hay una gran diferencia de densidad entre las fases, siempre ha presentado desafíos dentro de la mecánica computacional. Debido a la nueva escala espacial introducida por la presencia de una interfase, la discretización de este tipo de problemas suele presentar dificultades relacionadas principalmente con la conservación de la masa y la robustez de los algoritmos de cálculo.

Varios métodos y formulaciones han sido propuestos, los cuales básicamente se pueden clasificar en dos categorías: los métodos Lagrangianos y los métodos Eulerianos. Dentro de la primer categoría, encontramos los métodos de tipo ALE (Arbitrary–Lagrangian–Eulerian) (Hirt et al., 1974; Hughes et al., 1981) y los métodos puramente Lagrangianos (Bach y Hassager, 1985; Ramaswamy et al., 1986, 1987; Radovitzky y Ortiz, 1998). Por otra parte, dentro de los métodos Eulerianos encontramos por ejemplo el método Volume–of–fluid (Hirt y Nichols, 1981) y el método de Level Set (Osher y Sethian, 1988; Sethian, 1999) entre los más populares. En el primer caso, la interfase es reconstruida en base a una función auxiliar que representa la fracción de volumen ocupada por cada fluido en una dada celda computacional. En el segundo caso, que es usado en este trabajo, la interfase está implícitamente representada por la curva de nivel cero de una función escalar, que generalmente se escoge como la distancia a la interfase por razones de regularidad. En ambos casos, estas funciones auxiliares son transportadas en una malla fija por el campo de velocidad local, para lo cual, varios esquemas numéricos han sido propuestos en la literatura (para esquemas de diferencias finitas ver e.g. Shu y Osher (1988); Harten y Osher (1987); Jiang y Peng (2000) y en el contexto de los elementos finitos ver Di Pietro et al. (2006); Marchandise et al. (2006)). Estos métodos suelen ser robustos y por lo tanto apropiados para capturar grandes deformaciones de las interfaces móviles, aunque tienen la desventaja de que su discretización generalmente sufre de excesiva difusión y no conserva la masa en comparación a otros métodos, aunque algunas mejoras han sido propuestas recientemente (Enright et al., 2005, 2002; Sussman y Puckett, 2000; Sussman, 2003).

En esta clase de problemas, existe un fuerte acoplamiento no lineal entre las variables fluido–dinámicas (velocidad y presión) y la posición de la interfase, que viene determinada justamente por el transporte de la función de level set por dicho campo de velocidades. Un esquema numérico de tipo Newton–Raphson para resolver este problema, requiere el cómputo de una matriz tangente, que no puede en general ser hecho en forma exacta, debido justamente a la presencia de la interfase, donde las propiedades materiales, tales como densidad y viscosidad, se hacen discontinuas. En este trabajo proponemos, para aquellas contribuciones donde corresponda, reemplazar el cómputo exacto del jacobiano por uno aproximado mediante diferenciación numérica con respecto a la función de level set, de los residuos correspondientes en la formulación variacional, y así mejorar la convergencia del método iterativo.

El resto del trabajo se encuentra organizado como sigue: en primer lugar presentamos la formulación matemática completa del problema y su discretización por el método de elementos finitos, para mostrar el acoplamiento existente entre las diferentes variables involucradas, luego comentamos sobre algunos detalles de implementación: brevemente sobre el cómputo de la fuerza de tensión superficial, luego sobre la integración exacta de los residuos de la formulación variacional en aquellos elementos de la malla que son atravesados por la interfase y finalmente sobre el cómputo numérico del Jacobiano. Al final, presentamos varios ejemplos numéricos.

## 2. DESCRIPCION DEL PROBLEMA

El foco principal de este trabajo está en la resolución de problemas de flujos en presencia de una interfase móvil. En primer lugar queremos mostrar el acoplamiento existente entre las variables fluido–dinámicas, velocidad  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  y presión  $p(\mathbf{x}, t)$ , y la posición de la interfase. Consideremos el problema de dos fluidos inmiscibles en un dominio  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ , ( $d = 2$  ó  $3$ ) tal que  $\Omega = \Omega_1(t) \cup \Omega_2(t)$ . Sea  $\mathcal{S}(t) = \Omega_1(t) \cap \Omega_2(t)$  la interfase que separa al fluido 1 del fluido 2, los cuales poseen diferentes densidades y viscosidades (ver figura 1). Este problema está gobernado esencialmente por las ecuaciones de Navier–Stokes, que en una formulación de dos fluidos incompresibles, con condiciones de contorno e iniciales apropiadas, quedan expresadas de la siguiente forma

Hallar  $(\mathbf{u}(\mathbf{x}, t), p(\mathbf{x}, t))$  tal que

$$\begin{aligned} \rho_i(\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) - \mu_i \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla p &= \rho_i \mathbf{g} \quad \text{in } \Omega_i, \quad t \in (0, T), \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \quad \text{in } \Omega_i, \quad t \in (0, T), \\ \mathbf{u} &= \mathbf{u}_0 \quad \text{on } \Omega, \quad t = 0, \end{aligned} \quad (1)$$

donde  $i = 1, 2$ ,  $[0, T]$  es el intervalo de tiempo de interés,  $\rho_i$  y  $\mu_i$  son la densidad y viscosidad respectivamente para el fluido  $i$ ,  $\mathbf{g}$  es un campo de fuerzas volumétrico externo y  $\mathbf{u}_0$  es la condición inicial para la velocidad. Finalmente, condiciones de contorno apropiadas deben ser impuestas sobre  $\partial\Omega$  y las siguientes condiciones de acoplamiento se deben cumplir en la interfase  $\mathcal{S}$

$$\begin{aligned} [\mathbf{u}]_{\mathcal{S}} &= 0, \\ [\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n}]_{\mathcal{S}} &= \gamma \kappa \mathbf{n}_{\mathcal{S}}, \end{aligned} \quad (2)$$

donde  $\gamma$  es el coeficiente de tensión superficial,  $\kappa$  es la curvatura de la interfase y  $\mathbf{n}$  es la normal a  $\mathcal{S}$  (en este trabajo se empleará la convención de tomarla exterior saliente al dominio  $\Omega_1$ ). La primera condición en (2) simplemente expresa el hecho de que la velocidad es continua a través de  $\mathcal{S}$ , mientras que la segunda condición expresa el salto en las tensiones normales que aparece en  $\mathcal{S}$  cuando los efectos de tensión superficial están presentes.

En una formulación del tipo level set, la interfase  $\mathcal{S}(t)$  está implícitamente dada por la curva de nivel cero de una función continua  $\phi : \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ , i.e.

$$\mathcal{S}(t) = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d \text{ s.t. } \phi(\mathbf{x}, t) = 0 \}. \quad (3)$$

La evolución de esta interfase está determinada por la advección de la función  $\phi$  por el campo de velocidad local, de acuerdo a la siguiente ecuación de transporte hiperbólica

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = 0. \quad (4)$$

con  $\phi(\mathbf{x}, 0) = \phi_0(\mathbf{x})$  y condiciones de borde apropiadas en puntos  $\mathbf{x} \in \partial\Omega$  donde  $\mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0$ .

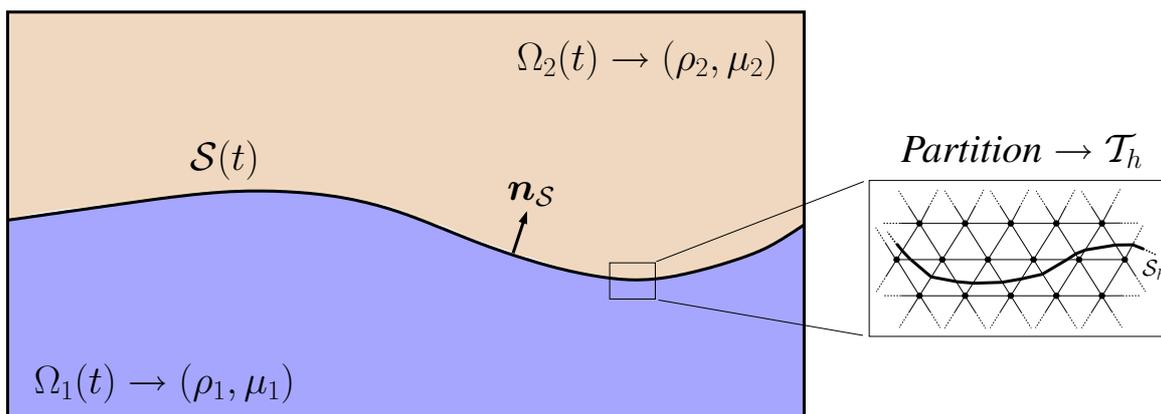


Figura 1: Dominio computacional  $\Omega$  mostrando los dominios  $\Omega_1(t)$  y  $\Omega_2(t)$  y la interfase  $\mathcal{S}(t)$ . En el detalle se muestra la partición de elementos finitos y la interfase discreta  $\mathcal{S}_h$ .

Al acoplamiento no lineal entre las variables fluido–dinámicas expresado en las ecuaciones (1) y (4), se debe agregar, que el campo de vectores normales  $\mathbf{n}(\mathbf{x})$  y la curvatura de la interfase  $\kappa(\mathbf{x})$  se computan a cada tiempo  $t$  a partir de la función de level set, de la siguiente forma

$$\mathbf{n}(\mathbf{x}) = \frac{\nabla\phi(\mathbf{x})}{\|\nabla\phi(\mathbf{x})\|}, \tag{5}$$

$$\kappa(\mathbf{x}) = -\nabla \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}), \tag{6}$$

las cuales por supuesto sólo tienen significado físico para  $\mathbf{x} \in \mathcal{S}$ .

En la siguiente sección se formula variacionalmente el problema y se discute su discretización en el tiempo y en el espacio por el método de elementos finitos.

### 3. FORMULACION NUMERICA

En este trabajo se emplea una formulación de tipo Galerkin junto con un esquema trapecoidal para la discretización temporal. El método de estabilización escogido, que permite igual interpolación para la velocidad y presión, es el método ASGS (Algebraic Subgrid Scale) el cual es similar al método GLS (Galerkin Least Squares), de hecho idéntico para elementos lineales, y puede ser hallado en cualquier referencia estándar sobre el tema (ver e.g. Codina (2001)).

#### 3.1. Formulación Variacional Discreta

Sea  $\mathcal{T}_h$  una partición de elementos finitos de  $\Omega$  y sean  $\mathcal{V}_h$ ,  $\mathcal{Q}_h$  y  $\mathcal{W}_h$  los espacios discretos de velocidad, presión y level set respectivamente. Para simplificar la notación se introduce el producto escalar estándar en  $L^2(\Omega)$ , denotado por  $(\cdot, \cdot)$ , luego, la formulación variacional discreta del problema, incluyendo los términos de estabilización necesarios y considerando por simplicidad condiciones de Neumann homogéneas, es como sigue

Hallar  $(\mathbf{u}_h^{n+1}, p_h^{n+1}, \phi_h^{n+1}) \in \mathcal{V}_h \times \mathcal{Q}_h \times \mathcal{W}_h$  tal que

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_1 = & (\mathcal{G}_u, \mathbf{v}_h) + (2\mu(\phi^{n+\theta_S}) \nabla^S \mathbf{u}_h^{n+\theta}, \nabla \mathbf{v}_h) - (p_h^{n+1}, \nabla \cdot \mathbf{v}_h) + f_{S_h}^{n+\theta_S}(\mathbf{v}_h) + \\ & + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \frac{\tau_K}{\rho(\phi^{n+\theta_S})} (\mathcal{G}_u + \nabla p_h^{n+1}, c_{up} \mathbf{u}_h^{n+\theta_T} \cdot \nabla \mathbf{v}_h + c_{es} \nabla q_h)_K = 0 \end{aligned} \quad (7)$$

$$\mathcal{R}_2 = (q_h, \nabla \cdot \mathbf{u}_h^{n+\theta}) + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} (\delta_K \nabla \cdot \mathbf{u}_h^{n+\theta}, \nabla \cdot \mathbf{v}_h)_K = 0 \quad (8)$$

$$\mathcal{R}_3 = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} (\mathcal{G}_\phi, w_h + \tau_K \mathbf{u}_h^{n+\theta_T} \cdot \nabla w_h)_K = 0 \quad (9)$$

$\forall(\mathbf{v}_h, q_h, w_h) \in \mathcal{V}_h \times \mathcal{Q}_h \times \mathcal{W}_h$ .

donde  $\mathcal{G}_u$  y  $\mathcal{G}_\phi$  vienen dados por

$$\mathcal{G}_u = \rho(\phi^{n+\theta_S}) \left( \frac{\mathbf{u}_h^{n+1} - \mathbf{u}_h^n}{\delta t} + \mathbf{u}_h^{n+\theta_T} \cdot \nabla \mathbf{u}_h^{n+\theta} - \mathbf{g}^{n+\theta} \right), \quad (10)$$

$$\mathcal{G}_\phi = \frac{\phi_h^{n+1} - \mathcal{U}(\phi_h^n)}{\delta t} + \mathbf{u}_h^{n+\theta_T} \cdot \nabla [\theta \phi_h^{n+1} + (1 - \theta) \mathcal{U}(\phi_h^n)], \quad (11)$$

donde  $\delta t$  es el paso de tiempo y cualquier cantidad tal como  $\mathbf{u}_h^{n+\theta}$  al tiempo  $n + \theta$  se calcula como

$$\mathbf{u}_h^{n+\theta} = \theta \mathbf{u}_h^{n+1} + (1 - \theta) \mathbf{u}_h^n, \quad (12)$$

con expresiones similares para otras variables. Respecto a los parámetros de avance temporal, obviamente, existen varias posibilidades a ser tomadas en cuenta para ciertas contribuciones específicas en la formulación variacional. Así por ejemplo, pueden ser atrasados/adelantados los términos convectivos en la ecuación de momento y en la ecuación de level set, aquellos debidos a la tensión superficial, etc.. En general para el parámetro  $\theta$  se adopta un valor igual a 1, quedando los parámetros  $\{\theta_T, \theta_S\}$  a definir para estudiar diferentes esquemas de acoplamiento entre las variables del problema como veremos más adelante. Un tratamiento monolítico del mismo tendrá  $\theta_T = \theta_S = 1$ , aunque estamos interesados en estudiar diferentes esquemas de acoplamiento variando el parámetro  $\theta_S$ . En relación con ésto, debe notarse la dependencia explícita de las propiedades materiales con la función de level set, dadas por  $\rho(\phi^{n+\theta_S})$  y  $\mu(\phi^{n+\theta_S})$ , lo cual se puede escribir en términos de la función salto de Heaviside como sigue

$$\rho = \rho_1 \mathcal{H}(\phi) + \rho_2 (1 - \mathcal{H}(\phi)), \quad (13)$$

$$\mu = \mu_1 \mathcal{H}(\phi) + \mu_2 (1 - \mathcal{H}(\phi)) \quad (14)$$

lo cual es equivalente a escribir para un dado punto  $\mathbf{x}$  y al tiempo  $t$  lo siguiente

$$(\rho(\mathbf{x}, t), \mu(\mathbf{x}, t)) = \begin{cases} (\rho_1, \mu_1) & \text{si } \phi_h(\mathbf{x}, t) > 0 \\ (\rho_2, \mu_2) & \text{si } \phi_h(\mathbf{x}, t) < 0 \end{cases} \quad (15)$$

Finalmente, las constantes de estabilización por elemento vienen dadas por

$$\tau_K = \left[ c_1 \frac{\nu}{h_K^2} + c_2 \frac{|\mathbf{u}_h|_{\infty, K}}{h_K} \right]^{-1} \quad \delta_K = 2\mu + \rho |\mathbf{u}_h|_{\infty, K} h_K, \quad (16)$$

con  $h_K$  el diámetro del elemento  $K$ ,  $|\mathbf{u}_h|_{\infty, K}$  el supremo de la norma de la velocidad en  $K$  y  $c_1$  y  $c_2$  constantes que para el caso de elementos lineales se toman iguales a 4 y 2 respectivamente. En (7) se han introducido factores algorítmicos de upwind y de estabilización  $c_{up}$  y  $c_{es}$  respectivamente, que son ajustados dependiendo del problema particular para lograr una convergencia óptima del método numérico. Valores típicos de estos parámetros son 0,05 y 0,1 respectivamente. En problemas que involucran tensión superficial, se ha escogido igualar éstos a cero en aquellos elementos cortados por  $\mathcal{S}_h$  (es decir, aquellos elementos en los cuales  $\phi_h$  cambia de signo). Si bien esto no está justificado en principio y podría llevar a una pérdida de estabilidad del método numérico, no se han observado hasta el momento modos espurios de presión en los tests numéricos realizados. Los autores no conocen al momento ningún estudio en la bibliografía sobre métodos estabilizados en problemas que involucran fuerzas singulares. En este punto se debe mencionar que los espacios  $\mathcal{V}_h$ ,  $\mathcal{Q}_h$  y  $\mathcal{W}_h$  usados en este trabajo están hechos de funciones lineales continuas, salvo en el caso de existir la fuerza de tensión superficial, donde se modifica el espacio  $\mathcal{Q}_h$  de acuerdo a Ausas et al. (2009) con el fin de capturar la discontinuidad en el campo de presiones. Dicha modificación es sólo efectuada en aquellos elementos que son atravesados por la interfase.

A continuación presentamos ciertos detalles relacionados con la implementación numérica de la formulación dada y se discute la cuestión del acoplamiento entre las incógnitas del problema.

### 3.2. Reinicialización de la función de level set

En (11) hemos introducido el mapeo  $\mathcal{U} : \mathcal{W}_h \rightarrow \mathcal{W}_h$  para incorporar la reinicialización de la función de level set. En este trabajo se emplea un procedimiento de reinicialización geométrico que preserva la masa mediante ajustes locales por elemento y que ya ha sido explicado anteriormente (Ausas et al., 2008; Mut et al., 2006). En el caso de no emplear dicho procedimiento,  $\mathcal{U}(\phi_h^n)$  será simplemente  $\phi_h^n$ . La conveniencia de utilizar cualquier esquema de reinicialización depende del problema específico, ya que debe tomarse en cuenta que dichos procedimientos pueden alterar la interfase en alguna medida. En general, se hace recomendable emplearlos en problemas donde la interfase sufre cambios severos a lo largo del tiempo para así mantener bajo control las distorsiones en la función de level set.

### 3.3. Cómputo de la fuerza de tensión superficial

Respecto a la fuerza de tensión superficial que aparece en (7), su contribución es obviamente no nula sólo en aquellos elementos  $K \in \mathcal{K} \subset \mathcal{T}_h$  en los cuales  $\phi_h$  cambia de signo, es decir, aquellos elementos en los cuales está contenida la interfase  $\mathcal{S}_h$ . En este trabajo, se emplea una representación del tipo Laplace–Beltrami para la curvatura (Lafaurie et al., 1994; Ganesan et al., 2007), para lo cual se emplea la siguiente identidad usual en Geometría Diferencial

$$\kappa_h^{n+\theta_s} \mathbf{n}_h^{n+\theta_s} = \Delta_s \text{id}_{\mathcal{S}_h^{n+\theta_s}} \quad (17)$$

donde  $\text{id}_{\mathcal{S}_h} : \mathcal{S}_h \rightarrow \mathbb{R}^d$  es la identidad sobre  $\mathcal{S}_h$ . Luego, multiplicando por una función de prueba  $\mathbf{v}_h$  a ambos lados e integrando por partes, se obtiene

$$\int_{\mathcal{S}_h^{n+\theta_s}} \kappa_h^{n+\theta_s} \mathbf{n}_h^{n+\theta_s} \cdot \mathbf{v}_h \, ds = - \int_{\mathcal{S}_h^{n+\theta_s}} \nabla_s \text{id}_{\mathcal{S}_h^{n+\theta_s}} : \nabla_s \mathbf{v}_h \, ds \quad (18)$$

de lo cual resulta

$$f_{\mathcal{S}_h^{n+\theta_s}}(\mathbf{v}_h) = -\gamma \int_{\mathcal{S}_h^{n+\theta_s}} (\mathbb{I} - \mathbf{n}_h^{n+\theta_s} \otimes \mathbf{n}_h^{n+\theta_s}) : \nabla_s \mathbf{v}_h \, ds \quad (19)$$

que es válido para una interfase cerrada o en el caso de curvas abiertas, cuando el ángulo de contacto con las paredes sólidas se toma igual a  $90^\circ$ . Una discusión detallada sobre el tratamiento de la tensión superficial con este tipo de formulaciones, incluyendo el tratamiento de la línea de contacto en problemas más generales, se hace en otro artículo que es presentado por los autores (“Opciones en la formulación por elementos finitos para la fuerza de tensión superficial”).

### 3.4. Integración exacta en los elementos de interfase

Debido a que la función de level set es interpolada linealmente en cada elemento de la partición  $\mathcal{T}_h$ , su reconstrucción en dichos elementos consistirá simplemente en segmentos de recta/facetas planas en dos/tres dimensiones espaciales. Debemos recordar que las propiedades materiales son discontinuas en la interfase como se observa en (15). En varias formulaciones en la literatura, las propiedades materiales en los elementos que son atravesados por la interfase se computan efectuando un promedio pesado por la fracción de volumen de cada fase en dicho elemento, i.e.

$$\rho = \alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2, \quad \mu = \alpha_1 \mu_1 + \alpha_2 \mu_2,$$

donde la fracción de volumen  $\alpha_i$  ( $i = 1, 2$ ) para un elemento  $K \in \mathcal{T}_h$  viene dada por

$$\alpha_1 = \frac{1}{V_K} \int_{V_K} \mathcal{H}(\phi) \, d\mathbf{x}, \quad \alpha_2 = \frac{1}{V_K} \int_{V_K} (1 - \mathcal{H}(\phi)) \, d\mathbf{x} \quad (20)$$

En este trabajo, así como en otros en la literatura (Minev et al., 2003; Marchandise y Remacle, 2006; Marchandise et al., 2007), se propone considerar la discontinuidad en las propiedades materiales, para lo cual es necesario integrar la formulación variacional (7)–(9) en forma exacta, siguiendo a la interfase dentro de cada elemento. Para ello, se deben dividir aquellos símplices en  $\mathcal{K}$  en  $n_{sub}$  nuevos subsímplices y cambiar la regla de cuadratura de acuerdo a esta subdivisión tal como se muestra, por ejemplo, en el lado izquierdo de la figura 2. Si se hace un tratamiento monolítico del problema, la subdivisión de cada símplice debe ser hecha en forma dinámica, pues, dependiendo de  $\theta_S$ , la interfase puede no estar congelada a lo largo de las iteraciones. En la figura 2 se muestra como hacer esta subdivisión para un elemento típico  $\Omega^e$  en el caso de triángulos (en 2D). En tres dimensiones se tiene que considerar por separado el caso en que la interfase resultante sea una faceta triangular o una faceta cuadrangular como se indica en la figura. Se muestra la subdivisión sólo en el primero de los casos por simplicidad. Además de lo ya dicho, la subdivisión de los elementos no presenta dificultades adicionales.

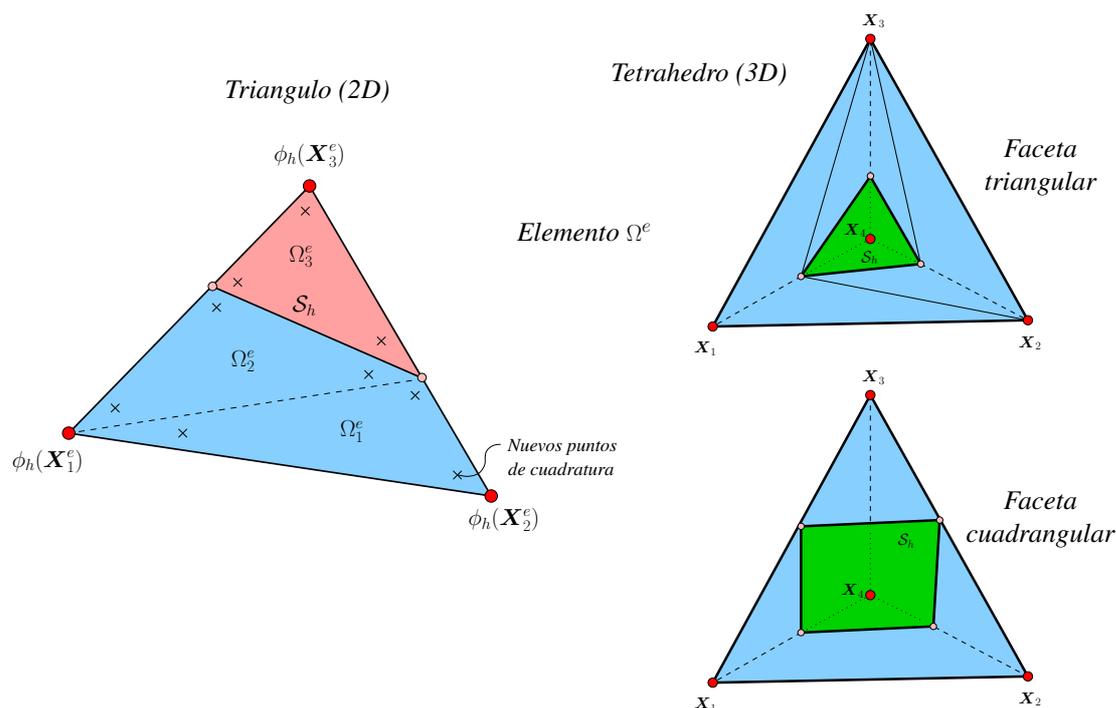


Figura 2: Detección de la interfase  $S_h$  en un elemento lineal  $\Omega_e$  típico. En el triángulo bidimensional (izquierda), así como en el tetrahedro con la interfase formada por una faceta triangular (derecha–arriba) se muestra la subdivisión en varios subelementos para efectuar la integración exacta.

### 3.5. Discusión sobre el Acoplamiento

Además de las no linealidades usuales en las ecuaciones de Navier–Stokes, resulta claro de la formulación numérica presentada arriba, que existe un fuerte acoplamiento entre las variables fluido–dinámicas (velocidad y presión) y la función de level set, debido a la dependencia de la densidad y viscosidad con la posición de la interfase (15) y debido al cómputo de la fuerza de tensión superficial (19). En este último caso, de hecho, en la formulación presentada, las funciones de forma de presión y los coeficientes de estabilización también dependen de la posición de la interfase, pues éstas dependen de la forma en que los elementos son atrevidos por la misma. Un tratamiento monolítico del problema, como es bien sabido, presenta serias dificultades en relación con la resolución del problema algebraico resultante de la discretización. Estas dificultades se traducen en una pobre convergencia de los métodos iterativos. De hecho, el cómputo de una matriz tangente exacta no es posible en aquellos elementos de la partición que son cortados por la interfase, debido a la no diferenciabilidad, en muchos casos, de los residuos variacionales (7)–(8) con respecto a la función de level set, de la cual dependen en forma explícita. Ahora, como se dejó ver anteriormente, el grado de acoplamiento existente en la formulación discreta del problema, dependerá del conjunto de valores adoptados para los coeficientes de avance temporal  $\{\theta_C, \theta_S\}$  cuyo efecto se mostrará luego en los ejemplo numéricos. En conexión con esto, en este punto es conveniente introducir las dos escalas temporales a tener presentes en el problema, que son

- $T_g = 1/\sqrt{gk}$  (debido a la gravedad)
- $T_\gamma = \sqrt{\rho/k^3\gamma}$  (debido a la tensión superficial)

donde  $k$  es el número de onda. Dependiendo de los valores adoptados para los parámetros de avance temporal, el paso de tiempo debe ser escogido tomando en cuenta el tamaño local de la malla  $h$  y de acuerdo a la velocidad  $c = 1/kT$ , resultando eventualmente la siguiente restricción para el paso de tiempo

$$\delta t = \min\{\sqrt{h/g}, \sqrt{\rho h^3/\gamma}\} \quad (21)$$

### Cómputo del Jacobiano - Tratamiento Monolítico de la interfase

En este trabajo se emplea el método Newton–Raphson para el tratamiento de las no linealidades. Una opción que se propone para el cómputo del Jacobiano se pasa a comentar a continuación. En primer lugar, supongamos que la matriz tangente  $\mathbb{S}$  del problema tiene la siguiente contribución elemental

$$\mathbb{S}^e = \begin{bmatrix} \mathcal{R}_{1,u} & \mathcal{R}_{1,p} & \mathcal{R}_{1,\phi} \\ \mathcal{R}_{2,u} & \mathcal{R}_{2,p} & \mathcal{R}_{2,\phi} \\ \mathcal{R}_{3,u} & 0 & \mathcal{R}_{3,\phi} \end{bmatrix}, \quad (22)$$

donde los residuos  $\mathcal{R}_1$ ,  $\mathcal{R}_2$  y  $\mathcal{R}_3$  han sido definidos en (7)–(9). En (22) aparecen distintas contribuciones. Por un lado, aparece un bloque nulo, debido a que claramente la ecuación de level set no tiene una dependencia explícita con la presión. Luego, la mayoría de las componentes en  $\mathbb{S}^e$ , como es bien sabido, pueden ser calculadas exactamente. Por otra parte, los bloques  $\mathcal{R}_{i,\phi}$  ( $i = 1, 2$ ) son idénticamente nulos en los elementos de  $\mathcal{T}_h$  que no son atravesados por la interfase. La dificultad aparece en el cálculo de las componentes que involucran diferenciación con respecto a la función de level set en los elementos atravesados por la interfase, dado que no pueden ser obtenidas en forma exacta. Obviamente, una primera aproximación, a  $\mathbb{S}^e$ , consiste en tomar  $\mathcal{R}_{i,\phi} = 0$  ( $i = 1, 2$ ). Para mejorar esto, en un tratamiento monolítico de la interfase, se propone simplemente emplear un esquema de diferenciación numérica de los residuos  $\mathcal{R}_i$  ( $i = 1, 2$ ) como se detalla a continuación. Consideremos entonces la interpolación de la función de level set dentro del elemento  $\Omega_e$  que viene dada por

$$\phi_h(\mathbf{x})|_{\Omega_e} = \sum_I \mathcal{N}_I(\mathbf{x}) \phi_I, \quad I = 1, \dots, N \quad (23)$$

donde  $\mathcal{N}_I$  es la  $I$ -ésima función de base del elemento y  $\phi_I$  el correspondiente valor nodal de la función de level set. Ahora, si efectuamos perturbaciones a los valores de  $\phi_I$  de tamaño  $\varepsilon_I$  en forma independiente para cada valor de  $I$ , podemos computar una aproximación para la contribución  $I$ -ésima de los bloques  $\mathcal{R}_{i,\phi}$  como sigue

$$\mathcal{R}_{i,\phi}^I = \frac{\mathcal{R}_i(\phi_1, \dots, \phi_I + \varepsilon_I, \dots, \phi_N) - \mathcal{R}_i(\phi_1, \dots, \phi_N)}{\varepsilon_I}, \quad i = 1, 2 \quad (24)$$

El valor de  $\varepsilon_I$  es escogido de tal forma que, un elemento que originalmente es atravesado por la interfase, no deje de serlo debido a la perturbación efectuada, aunque ésta no es la única opción. En la práctica, la perturbación es alguna fracción pequeña del valor de  $\phi_I$ , para lo cual hemos hallado que una perturbación cercana al 1 % suele resultar apropiado en la mayoría de casos. Como resultado de ésto, el número de iteraciones no lineales requeridas para lograr la convergencia a cada paso de tiempo puede ser reducido, dependiendo en general del problema a tratar y del paso de tiempo  $\delta t$  empleado.

## 4. RESULTADOS NUMERICOS

### 4.1. Ruptura de Gotas

En este caso se estudia la formación de gotas en presencia de tensión superficial y de un campo gravitatorio. Este es un problema interesante, dado que las escalas de tiempo involucradas varían notablemente a lo largo del tiempo. En la figura 3 se muestra un esquema con la geometría considerada. En este caso se considera simetría de revolución alrededor del eje  $z$  indicado en la figura. El mismo problema es estudiado con cierto detalle, aunque en tres dimensiones espaciales en Gueyffier et al. (1999), donde aparecen resultados similares a los que se presentan en este trabajo. Los siguientes parámetros son empleados para la simulación

$$\begin{aligned} \rho_1 &= 0,1, & \mu_1 &= 0,001, & \rho_2 &= 0,01, & \mu_2 &= 0,0001 \\ \gamma &= 0,5, & g &= 980, & c_{es} &= 0,01, & c_{up} &= 0,15 \end{aligned}$$

y el dominio computacional es discretizado con una malla no estructurada de aproximadamente 62000 triángulos. Además de las condiciones mostradas en la figura 3, en las dos entradas se impone una condición de Dirichlet constante y uniforme para la función de level set. En la salida no se especifican condiciones de contorno y en la pared restante se considera una condición de libre deslizamiento. Los resultados aparecen en la figura 4 donde se muestra la evolución de la gota hasta la ruptura. Las gotas se forman en la parte superior y comienzan a crecer hasta que se produce una estricción y finalmente la separación. Las escalas temporales del problema son largas al principio de la simulación y se reducen notablemente al acercarse el punto de ruptura, con lo cual en este tipo de problemas es conveniente efectuar un tratamiento monolítico de la interfase pero al mismo tiempo, adaptar el paso temporal para capturar la dinámica de interés. Nótese el tiempo indicado en cada cuadro (por razones de claridad solo se ha graficado la parte relevante del dominio de cálculo).

### 4.2. Inestabilidad de Rayleigh–Taylor

En este problema se estudia la evolución de una interfase separando dos fluidos con diferentes densidades en presencia de un campo gravitatorio, en el dominio computacional  $[0, 0,5] \times [0, 4]$ . Se ha incluido también la fuerza de tensión superficial en la simulación. El objetivo en este caso, consiste en estudiar el comportamiento de las soluciones de acuerdo a si se emplea o no un tratamiento monolítico de la interfase. Los siguientes parámetros materiales son empleados en la simulación que corresponden a valores típicos para este test clásico que puede ser hallado en la literatura (Puckett et al., 1997).

$$\begin{aligned} \rho_1 &= 1,225, & \mu_1 &= 0,00513, & \rho_2 &= 0,1694, & \mu_2 &= 0,00513 \\ \gamma &= 0,1, & g &= 9,8, & c_{es} &= 0,05, & c_{up} &= 0,1 \end{aligned}$$

Se considera simetría alrededor del eje vertical y condiciones de libre deslizamiento en el resto de las paredes. En la figura 5 se muestra la evolución de la interfase donde se comparan los resultados obtenidos empleando  $\theta_S = 0$  (verde) y  $\theta_S = 1$  (rojo) sobre una malla con  $h = 1/96$  y con un paso de tiempo  $\delta t = 0,001$ . Las soluciones son comparadas con resultados obtenidos sobre una malla con un tamaño de elemento tres veces más pequeño respecto a las originales y empleando un paso de tiempo  $\delta t = 0,0005$  con tratamiento implícito para la interfase. Resultados similares son obtenidos empleando  $\theta_S = 0,5$ . Este ejemplo muestra que el tratamiento

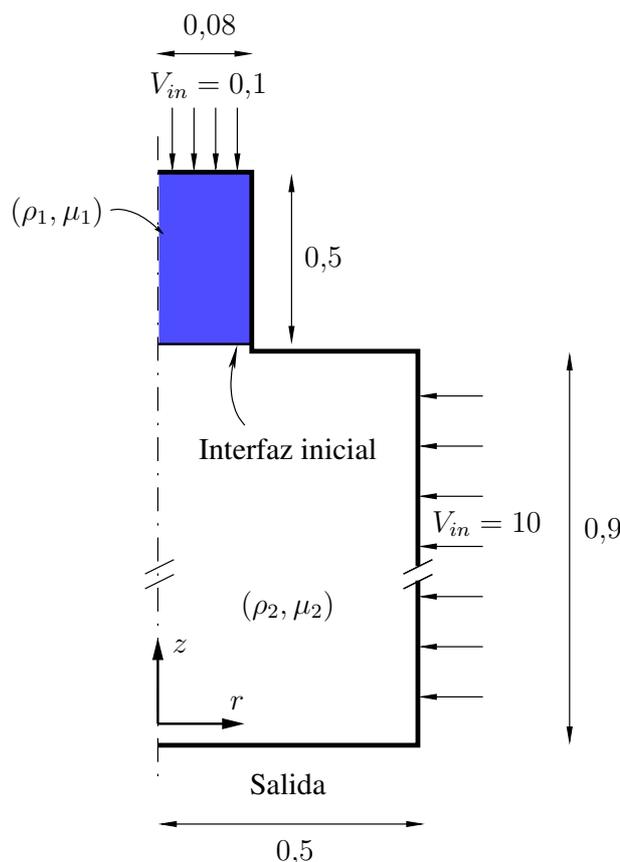


Figura 3: Geometría para estudiar la ruptura de gotas. Se considera simetría de revolución con respecto al eje  $z$  indicado en la figura.

monolítico de la interfase puede tener un efecto apreciable en la dinámica final obtenida, lo cual se manifiesta principalmente sobre el final de la simulación cuando la interfase sufre las deformaciones más grandes.

### 4.3. Burbujas Ascendentes

En este problema clásico estudiado en la literatura, se analiza el efecto de la diferenciación numérica para el cómputo de Jacobiano, en términos del número de iteraciones no lineales necesarias para la convergencia del método de Newton–Raphson empleado. Consideramos la evolución de una burbuja inicialmente circular en el dominio computacional  $\Omega = [0, 3] \times [0, 6]$  bajo el efecto de la gravedad. La burbuja está inicialmente centrada en  $(1,5, 1)$  y su diámetro inicial  $d$  es igual a 1. El problema se encuentra caracterizado por el número de Morton y el número de Weber, así como también por el cociente entre densidades y entre viscosidades, que vienen dados por

$$Mo = \frac{g\mu_1^4}{\rho_1\gamma^3}, \quad We = \frac{\Delta\rho g d^2}{\gamma}, \quad r_\rho = \frac{\rho_1}{\rho_2}, \quad r_\mu = \frac{\mu_1}{\mu_2} \quad (25)$$

Cambiando la densidad  $\rho_1$  y viscosidad  $\mu_1$  y dejando el valor de la gravedad  $g$  y tensión superficial  $\gamma$  fijos, podemos obtener diferentes valores de los parámetros adimensionales que gobiernan el problema, de tal forma de explorar diferentes regímenes, los cuales son bien conocidos en la literatura (Clift y Weber, 1978). En la ecuación (25), típicamente,  $\Delta\rho \approx \rho_1$ , lo cual es vá-

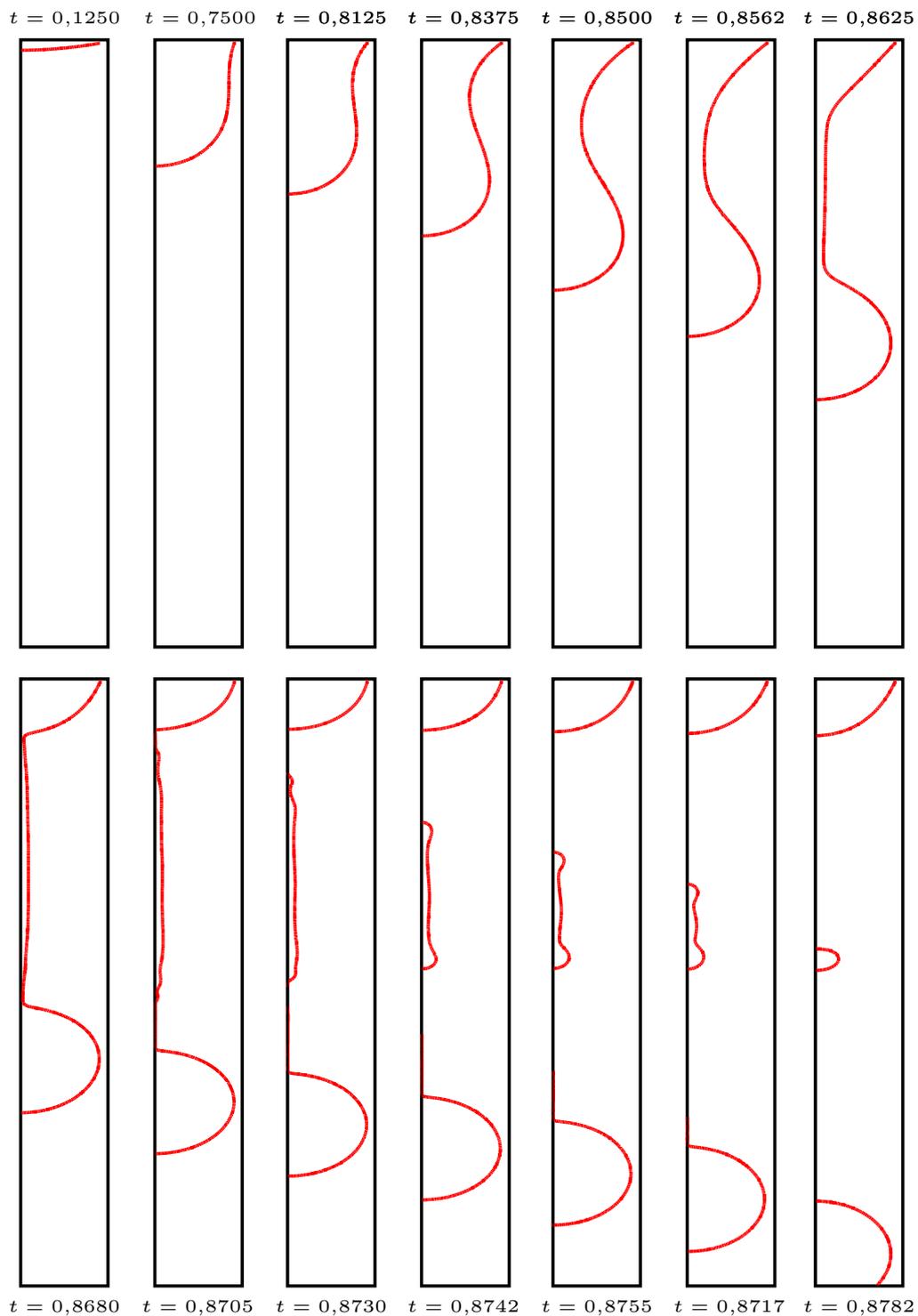


Figura 4: Ruptura de una gota. Notar el tiempo correspondiente a cada cuadro y como las escalas de tiempo se hacen mas pequeñas al acercarse el momento de la ruptura.

lido para burbujas de aire en agua por ejemplo. Luego, siguiendo a [Marchandise et al. \(2007\)](#), consideramos cuatro casos correspondientes a diversas combinaciones de  $Mo$  y  $We$ , que son

(a) **Burbujas Circulares:**  $Mo = 10$ ,  $We = 1$

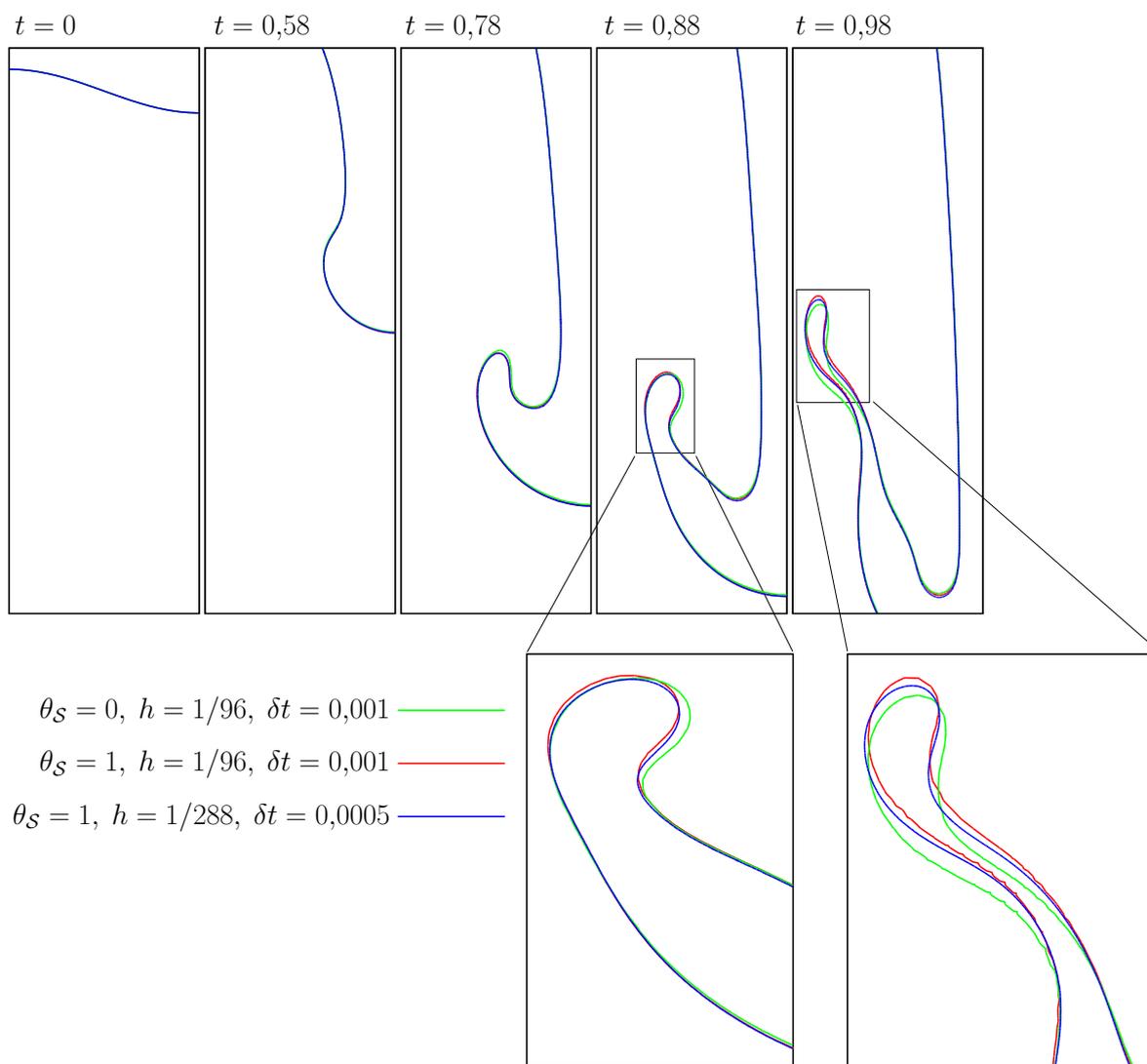


Figura 5: Evolución de la interfase empleando diferentes valores para el parámetro de avance temporal  $\theta_S$ . Verde:  $\theta_S = 0$ . Rojo:  $\theta_S = 1$ . Comparación con la solución obtenida empleando una malla con 3 niveles de refinamiento respecto a las soluciones mostradas (azul).

(b) **Burbujas Elipsoidales:**  $Mo = 0,1$ ,  $We = 10$

(c) **Burbujas Skirt:**  $Mo = 1$ ,  $We = 100$

(d) **Burbujas Dimple:**  $Mo = 1000$ ,  $We = 100$

Además, los siguientes parámetros físicos son considerados en las simulaciones bidimensionales

$$\gamma = 0,1, \quad g = 10, \quad r_\rho = 1000, \quad r_\mu = 1000$$

$$\delta t = 0,001, \quad c_{es} = 0,005, \quad c_{up} = 0,1$$

El dominio computacional es discretizado con 10000 triángulos. Dado que el tamaño del dominio puede tener una influencia en la deformación de las burbujas, se consideran condiciones de

libre deslizamiento para limitar la influencia de las paredes. En este caso, el procedimiento de reinicialización es efectuado cada dos pasos de tiempo.

En la figura 6 mostramos la evolución de la burbuja en todos los casos considerados. La burbuja se acelera inicialmente y luego de un cierto tiempo, que depende del caso particular considerado, ésta continua subiendo con velocidad y forma constante. Los diferentes regímenes pueden ser claramente distinguidos observando la forma de las burbujas. En la Tabla 1 se reporta la masa de fluido 2 (aire) que se pierde entre los instantes inicial y final mostrados en la figura, así como también el número de Reynolds, el cual es definido como

$$Re = \frac{\rho_1 U_\infty d}{\mu_1} \quad (26)$$

donde la velocidad de referencia  $U_\infty$  es calculada realizando una regresión lineal del gráfico de posición del centro de masa de la burbuja versus tiempo, despreciando los transitorios iniciales. Los resultados aquí mostrados no son completamente comparables a los de [Marchandise et al. \(2007\)](#) ya que en nuestro caso las simulaciones son en dos dimensiones espaciales mientras que en el otro caso son en tres dimensiones, sin embargo se aprecian similitudes cualitativas importantes en la formas finales que se obtienen para las burbujas al igual que en los regímenes mostrados en [Clift y Weber \(1978\)](#). En el tercer caso (régimen Skirt), debido a la deformación severa sufrida por la burbuja y la aparición de escalas espaciales que no son bien resueltas por la malla usada, los resultados respecto a conservación de la masa son bastante pobres en comparación al resto de los casos. En relación al uso de la diferenciación numérica para el cómputo del Jacobiano, en el primer caso por ejemplo, el número promedio de iteraciones no lineales por paso de tiempo necesarias para lograr la convergencia fue  $\sim 3$ , mientras que sin emplear ésta son necesarias  $\sim 5,9$  iteraciones, pero en el cuarto caso por ejemplo, esta diferencia es bastante menor, siendo necesarias 2 iteraciones no lineales por paso empleando la diferenciación numérica y 3 en caso contrario.

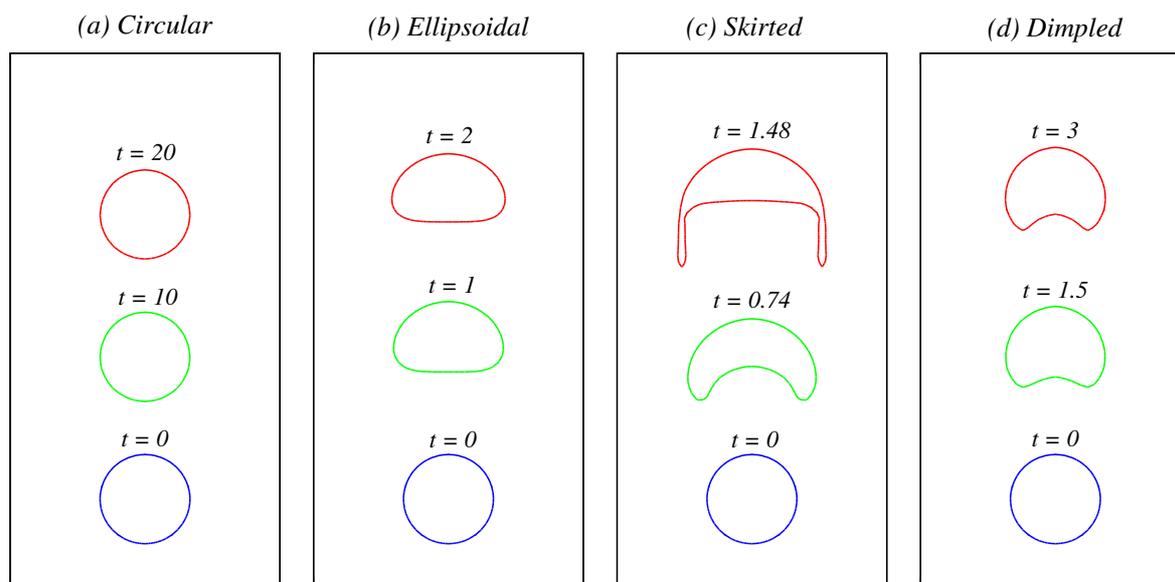


Figura 6: Evolución de las burbujas ascendentes en los diferentes regímenes. En todos los casos, las burbujas a diferentes tiempo han sido apartadas unas de otras para evitar superposición en el gráfico.

Tabla 1: Número de Reynolds y masa del fluido 2 perdida entre los tiempos inicial y final mostrados en la figura 6.

Regimen	$Re = \rho_1 U_\infty d / \mu_1$	Masa perdida [%]
Circular (a)	0,02	0,7
Elipsoidal (b)	3,90	0,8
Skirt (c)	12,9	3,1
Dimple (d)	1,53	1,1

## 5. CONCLUSIONES

En este trabajo se presenta una formulación de elementos finitos estabilizada para la resolución de problemas de dos fluidos empleando la técnica de level set. Se presenta la formulación matemática completa del problema y se discute el acoplamiento entre las variables involucradas, lo cual es esencialmente controlado por un parámetro de avance temporal en la formulación numérica. Se explican algunos detalles relacionados con la implementación, en particular, se menciona el esquema de reinicialización empleado, se comenta sobre la integración exacta en los elementos que son cortados por la interfase y brevemente sobre el tratamiento de la fuerza de tensión de superficial. Luego se explica el cómputo numérico del Jacobiano para aquellas componentes que involucran diferenciación con respecto a la función de level set. En varios ejemplos numéricos, involucrando deformaciones severas de la interfase, se observa que la elección del esquema de cálculo tiene efectos apreciables en los resultados numéricos y que un tratamiento monolítico de la interfase puede resultar conveniente. Además, se observa que la convergencia del esquema iterativo para la resolución del problema no lineal resultante puede ser mejorada empleando la diferenciación numérica en el cómputo del Jacobiano.

## 6. AGRADECIMIENTOS

RFA recibe beca de Conicet (Argentina). EAD pertenece a Conicet (Argentina). GCB agradece a CNPq y FAPESP (Brazil).

## REFERENCIAS

- Ausas R., Sousa F., y Buscaglia G. An improved finite element space for discontinuous pressures. *submitted to CNMAC*, 2009.
- Ausas R.F., Buscaglia G.C., y Dari E.A. A mass-preserving geometry-based reinitialization method for the level set function. *Serie Mécanica Computacional*, XXVII:13–32, 2008.
- Bach P. y Hassager O. An algorithm for the use of the lagrangian finite element method for the analysis of two dimensional fluid mechanics with applications to free surface flow. *J. Fluid Mech.*, 152:173–190, 1985.
- Clift R. y Weber M. *Bubbles, Drops and Particles*. Academic Press, New York, 1978.
- Codina R. A stabilized finite element method for generalized stationary incompressible flows. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 190:2681–2706, 2001.
- Di Pietro D., Lo Forte S., y Parolini N. Mass preserving finite element implementations of the level set method. *Applied Numerical Mathematics*, 56:1179–1195, 2006.
- Enright D., Fedkiw R., Ferziger J., y Mitchell I. A hybrid particle level set method for improved interface capturing. *Computers and Structures*, 83:479–490, 2002.
- Enright D., Losasso F., y Fedkiw R. A fast and accurate semi-Lagrangian particle level set

- method. *Computers and Structures*, 83:479–490, 2005.
- Ganesan S., Matthies G., y Tobiska L. On spurious velocities in incompressible flow problems with interfaces. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 196:1193–1202, 2007.
- Gueyffier D., Lie J., Nadim A., Scardovelli R., y Zaleski S. Volume-of-fluid interface tracking with smoothed surface stress methods for three-dimensional flows. *J. Computat. Phys.*, 152:423–456, 1999.
- Harten A. y Osher S. Uniformly high-order accurate essentially non-oscillatory schemes I. *SIAM J. Numer. Anal.*, 24:279–309, 1987.
- Hirt C., Amsden A., y Cook J. An Arbitrary-Lagrangian-Eulerian computing method for all flow speeds. *J. Computat. Phys.*, 14:227–253, 1974.
- Hirt C. y Nichols H. Volume of fluid (VOF) methods for the dynamics of free boundaries. *Applied Numerical Mathematics*, 39:201–225, 1981.
- Hughes T., Liu W., y Zimmermann T. Lagrangian-Eulerian finite element formulation for incompressible viscous flows. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 29:329–349, 1981.
- Jiang G.S. y Peng D. Weighted ENO schemes for Hamilton-Jacobi equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 21:2126–2144, 2000.
- Lafaurie B., Nardone C., Scardovelli R., Zaleski S., y Zanetti G. Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with SURFER. *Journal of Computational Physics*, 113:134–147, 1994.
- Marchandise E., Geuzaine P., Chevaugeon N., y Remacle J.F. A stabilized finite element method using a discontinuous level set approach for the computation of bubble dynamics. *Journal of Computational Physics*, 225:949–974, 2007.
- Marchandise E. y Remacle J.F. A stabilized finite element method using a discontinuous level set approach for solving two phase incompressible flows. *Journal of Computational Physics*, 219:780–800, 2006.
- Marchandise E., Remacle J.F., y Chevaugeon N. A quadrature-free discontinuous Galerkin method for the level set equation. *J. Comp. Phys.*, 212:338–357, 2006.
- Minev P., Chen T., y Nandakumar K. A finite element technique for multifluid incompressible flow using Eulerian grids. *Journal of Computational Physics*, 187:225–273, 2003.
- Mut F., Buscaglia G., y Dari E. New mass-conserving algorithm for level set redistancing on unstructured meshes. *Journal of Applied Mechanics*, 73:1011–1016, 2006.
- Osher S. y Sethian J. Front propagating with curvature-dependent speed: algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, 79:12–49, 1988.
- Puckett E., Almgren A., Bell J., Marcus D., y Rider W. A high order projection method for tracking fluids interfaces in variable density incompressible flows. *J. Comp. Phys.*, 100:269–282, 1997.
- Radovitzky R. y Ortiz M. Lagrangian finite element analysis of newtonian fluid flows. *Int. J. Num. Meth. Engrg.*, 43:607–619, 1998.
- Ramaswamy B., Kawahara M., y Nakayama T. Lagrangian finite element method for the simulation of two dimensional slowing problems. *Int. J. Num. Meth. Fluids*, 6:659–670, 1986.
- Ramaswamy B., Kawahara M., y Nakayama T. Lagrangian finite element analysis applied to viscous free surface fluid flow. *Int. J. Num. Meth. Fluids*, 7:953–984, 1987.
- Sethian J. Level set methods and fast marching methods: Evolving interfaces in computational geometry. *Computer Vision and Material Science*, Cambridge University Press, 1999.
- Shu C. y Osher S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *J. Comput. Phys.*, 77:439–471, 1988.
- Sussman M. A second order coupled level set and volume of fluid method for computing growth

and collapse of vapor bubbles. *J. Comp. Phys.*, 187:110–136, 2003.  
Sussman M. y Puckett E. A coupled level set and volume of fluid method for computing 3D and axisymmetric incompressible two phase flows. *J. Comp. Phys.*, 162:301–337, 2000.