Mecánica Computacional Vol. XXII M. B. Rosales, V. H. Cortínez y D. V. Bambill (Editores) Bahía Blanca, Argentina, Noviembre 2003.

SIMULACIÓN NUMÉRICA DE PROBLEMAS CON SUPERFICIES MÓVILES UTILIZANDO UNA TÉCNICA DE REPRESENTACIÓN NODAL MEJORADA

Marcela Cruchaga¹, Diego Celentano¹ y Tayfun Tezduyar²

¹ Departamento de Ingeniería Mecánica Universidad de Santiago Chile, Av. Bdo. O'Higgins 3363, Santiago, Chile e-mail: mcruchag@lauca.usach.cl, dcelenta@lauca.usach.cl ² Team for Advanced Flow Simulation and Modelling (T*AFSM) Mechanical Engineering, Rice University – MS 321, Houston TX 77005, USA email: tezduyar@mems.rice.edu

Palabras clave: mecánica de fluidos, superficies móviles, métodos numéricos.

Resumen. En este trabajo se presenta una técnica numérica para el cálculo de la posición transitoria de interfaces entre dos líquidos que no se mezclan. La metodología propuesta se basa en algoritmos de seguimiento extensamente utilizados en otros métodos numéricos proponiendo incorporar mejoras para una descripción más precisa de la discontinuidad abrupta que representa el frente material. En particular, se intenta reproducir las propiedades de definición no difusa del frente y el control global de masa obtenidas en técnicas de seguimiento lagrangeano del frente. El dominio es discretizado utilizando una malla fija de elementos finitos. La interfaz se identifica con una función escalón cuya representación nodal se utiliza para actualizar la posición del frente. Las capacidades del método se analizan en dos problemas: llenado de un canal escalón y colapso de una columna de agua. Los resultados obtenidos se comparan con los calculados utilizando otras técnicas numéricas y con mediciones experimentales reportadas en la literatura.

1. INTRODUCCIÓN

Es un factor ampliamente reconocido el interés que distintas áreas de ingeniería tienen en el estudio del movimiento de superficies entre dos fluidos. En particular, diversos procesos de manufactura requieren determinar la evolución de la posición de un frente material, como por ejemplo durante el llenado de moldes o procesos de colada. Muchos han sido los aportes realizados en la última década para la simulación numérica de la evolución de interfaces. En este campo se han encontrado dificultades en el desarrollo de algoritmos que predigan con exactitud la posición de un frente material que evoluciona con el tiempo. La mayoría de los inconvenientes se deben a que los algoritmos numéricos deben resolver el problema de cambio de propiedades significativas en el dominio de análisis y conservación global del volumen bajo condiciones de flujos convectivos. Si bien muchos de los desarrollos han logrado controlar el error introducido por las causas mencionadas y permiten la predicción de la evolución temporal de interfaces, la mayoría requiere de un refinamiento en las discretizaciones prohibitivo en análisis industriales. Por tal motivo, se cree que aún hoy es relevante el estudio y evaluación de las técnicas preexistentes en término de las mencionadas deficiencias y el desarrollo de alternativas numéricas para el tratamiento de las mismas. En el marco del método de elementos finitos pueden distinguirse dos familias de técnicas numéricas para el tratamiento de interfaces. Una en que la solución del problema de mecánica de fluidos se resuelve en una malla variable en el tiempo y otra en que la malla es fija. En el primer grupo, un único material ocupa el dominio variable y la interfaz es representada por el contorno del dominio quedando su movimiento determinado por la deformación de la malla de elementos finitos. Entre estas metodologías pueden mencionarse las reconocidas aproximaciones mixtas eulereanas-lagrangeanas (ALE) [1] y las técnicas de dominio deformable (DSD/SST) [2]. Si bien estas soluciones son muy precisas, la dificultad en la deformación de la malla, la necesidad de remallado y la dificultad de elección de la velocidad con que mover la malla, motivaron el empleo de técnicas de malla fija. Dentro de este último grupo, se analiza un dominio fijo por lo cual la interfaz es definida con una función que identifica dos medios en el dominio (por ejemplo, uno es el material con que se llena un molde y el otro medio es el aire desplazado). Esta función es conocida como de pseudoconcentración y el frente se identifica con un valor prefijado de dicha función. La actualización temporal de la posición del frente se realiza utilizando la ecuación de convección de dicha función [3]. La solución numérica de dicha ecuación trae serias dificultades, en particular en campos altamente convectivos el análisis transitorio presenta severas oscilaciones y difusión numéricas. Muchos métodos numéricos se han desarrollado basándose en este concepto y han sido aplicado a procesos de llenado y conformado [4-8]. Más recientemente se han desarrollado algoritmos para incrementar la precisión en la solución mejorando, por ejemplo, la conservación global del volumen y enriqueciendo la interpolación de las incógnitas en las cercanías del frente [9-12]. De diferentes maneras estos métodos introducen una regularización de la solución, muchas veces mediante alisado y redefinición adecuada la de misma para evitar las mencionadas dificultades.

Una propuesta alternativa dentro del grupo de métodos de malla fija es describir la interfaz

mediante puntos que sirven de marcadores y cuya trayectoria se sigue lagrangeanamente [13-15]. Esta técnica con mejoras en la conservación global del volumen y técnicas mejoradas de integración (MLIT) [16-17] permiten una solución adecuada al problema de seguimiento de la interfaz. Sin embargo, conserva la mayor dificultad de los métodos lagrangeanos: la gran distorsión de la malla definida por los marcadores.

En este trabajo se propone evaluar el comportamiento de un método desarrollado con el objetivo de conservar la facilidad de definición y actualización de los métodos de malla fija con pseudo-concentración preservando una definición escalón del frente material para evitar la difusión y las oscilaciones numéricas en los resultados. Esta técnica esta basada en el método denominado ETILT introducido en [9] y constituye una alternativa de programación de dicho método.

La metodología propuesta se describe brevemente en la Sección 2. Los resultados obtenidos en el análisis del llenado de un canal en escalón y el colapso de una columna de agua son presentados en la Sección 3.

2. MÉTODO PARA EL SEGUIMIENTO DEL FRENTE (ETILT)

La metodología propone describir la posición de la interfaz con una función escalón llamada ϕ^{he} . Los nodos de la malla de elementos finitos en los que se calcula el problema de mecánica de fluidos pertenecen al medio 1 o al medio 2. La definición de las propiedades, densidad ρ y viscosidad dinámica μ , se basa en la distribución ϕ^{he} :

$$\rho^{h} = \phi^{he} \rho_{1} + (1 - \phi^{he}) \rho_{2}. \tag{1}$$

$$\mu^{h} = \phi^{he} \mu_{1} + (1 - \phi^{he}) \mu_{2}.$$
⁽²⁾

En elementos cruzados por la interfaz, la integración para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes se realiza por subelementos [16-17] por lo cual los puntos de integración adoptan las propiedades de uno u otro medio. Esto difiere de otras técnicas numéricas donde las propiedades en los puntos de integración toman valores proporcionales a la función suavizada que representa la interfaz.

Para obtener la posición de la interfaz en un tiempo n+1, se obtiene primero la función ϕ^h representación nodal de ϕ^{he} utilizando una proyección de cuadrados mínimos:

$$\int_{\Omega} \psi^{h} \left(\phi^{h}_{n} - \phi^{he}_{n} \right) d\Omega = 0, \tag{3}$$

donde ψ^h es la función de peso. Una vez obtenida ψ^h se actualiza su posición utilizando la ecuación de convección:

$$\partial \varphi / \partial t + \mathbf{u} \cdot \partial \varphi / \partial \mathbf{x} = 0. \tag{4}$$

Una vez obtenida la posición actualizada ϕ_{n+1}^{h} se obtiene ϕ_{n+1}^{he} mediante la proyección expresada en cuadrados mínimos como:

$$\int_{\Omega} (\psi^{he}_{n+1})_{P} ((\phi^{he}_{n+1})_{P} - \phi^{h}_{n+1}) d\Omega = 0,$$
(5)

y un algoritmo de corrección de volumen que garantice:

$$VOL(\varphi_{n+1}^{he}) = VOL(\varphi_{n}^{he}).$$
(6)

El subíndice P en la ecuación (5) indica los una distribución escalón que satisface la proyección pero que no satisface necesariamente la conservación de volumen. Como solución de la ecuación (5) se adopta (ϕ^{he}_{n+1})_P = H($\phi^{h}_{n+1} - Z$), siendo H la función escalón (o Heaviside) y $0 \le Z \le 1$. Por simplicidad se fija Z=0.5. La conservación de volumen expresada simbólicamente por la ecuación 6, se escribe en forma más general como:

$$\int_{\Omega} \left(\phi_{n+1}^{he} - \phi_{n}^{he} \right) d\Omega = Q, \tag{7}$$

donde Q es la masa que físicamente ingresa o sale del dominio en el intervalo [n,n+1]. Para sistemas cerrados Q=0.0. Se define la tasa de masa desbalanceada como:

$$R_{m} = \int_{\Omega} \left(\phi^{he}_{n+1} - \phi^{he}_{n} \right) d\Omega / Q, \qquad (8)$$

para $Q \neq 0$, y

$$R_{m} = \int_{\Omega} \phi^{he}_{n+1} d\Omega / \int_{\Omega} \phi^{he}_{n} d\Omega, \qquad (9)$$

para Q=0. La solución de la ecuación (7) se realiza iterativamente hasta satisfacer la condición R_m =1.0 para conservar el volumen. La corrección del volumen puede calcularse modificando la posición de la interfaz en la dirección de los lados de los elementos [9] o modificando los valores nodales de ϕ^h_{n+1} de acuerdo a la siguiente expresión:

$$\varphi_{n+1,i+1}^{h} = \varphi_{n}^{h} + (\varphi_{n+1,i}^{h} - \varphi_{n}^{h})/(R_{m})^{k}, \qquad (10)$$

donde k=sign($\varphi_{n+1,i}^{h} - \varphi_{n}^{h}$) e *i* es el índice de la iteración.

La proyección descrita por la ecuación (3) fija los valores de la representación nodal φ^h en 1.0 y 0.0 consistentemente en los nodos que no pertenecen al elemento cruzado por el frente y sus inmediatos aledaños. Es decir, no se necesita, como en otros métodos, predeterminar a que distancia del frente se desea acotar la función que representa la interfaz. Por otro lado, la proyección (3) debe conservar la posición espacial del frente, es decir, por la definición adoptada en la metodología debe conservar H($\varphi^h_n - 0.5$). Una opción sencilla para conservar esta condición es no modificar los valores de la representación nodal en los nodos de los elementos atravesados por el frente.

3. EJEMPLOS NUMÉRICOS

3.1 Llenado de un canal en escalón

Este ejemplo fue propuesto en [4] como prueba numérica preliminar del proceso de llenado de

moldes. El problema fue analizado con MLIT en [17] y se lo presenta en el presente trabajo con la finalidad de ilustrar brevemente el efecto de la proyección definida por la ecuación (3) y para comparar los resultados del ETILT con los del MLIT. La Figura 1(a) ilustra la geometría, propiedades y condiciones de contorno del problema estudiado. La posición inicial del frente es X=0.02 m avanzado en el canal inferior. Las paredes se consideran deslizantes y en la sección de salida se impone la condición de tracción nula. El paso de tiempo utilizado para el análisis es 0.01s. El dominio se discretizó utilizando 700 elementos de cuatro nodos isoparamétricos.



Figura 1. Llenado de un canal en escalón: (a) geometría, (b) líneas de nivel de la función ϕ^h obtenida con ETILT y (b) líneas de nivel de la función ϕ^h obtenidas con un método standard.

La Figura 1(b) muestra las líneas de nivel para la función φ^{h} representación nodal de la función Heaviside en la interfaz. Puede notarse la ausencia de difusión en su distribución en contraste con el resultado obtenido para las curvas de la función pseudo-concentración obtenidas con un método standard [3]. La evolución de la interfaz es muy similar a la obtenida con ETILT[17]. Estos resultados no se muestran.

3.2 Colapso de una columna de agua

El colapso de una columna de agua ha sido estudiado experimentalmente en [19,22]. Diversos autores [18, 20, 21] han utilizado este problema para validar los algoritmos utilizados contrastando los resultados obtenidos con los valores experimentales mencionados. En este trabajo se propone validar la metodología propuesta comparando los resultados numéricos obtenidos en este estudio con los publicados utilizando otras metodologías y con las

mediciones físicas reportadas. También se compararán los resultados con los obtenidos con MLIT.

La Figura 2(a) muestra en forma esquemática la disposición inicial del sistema a analizar. Para el cálculo se supone que la compuerta se abre instantáneamente y que se parte del reposo. El movimiento se desarrolla bajo la acción de la gravedad g=9.8m/s². Se presentan los resultados para L=0.05715m. Las paredes se consideran deslizantes. Las propiedades de los medios se adoptan en un primer análisis iguales a las reportadas en [18] para el agua ρ =1000 kg/m³ y μ =0.5 kg/ms y para el aire se adopta ρ =1 kg/m³ y μ =0.001 kg/ms. El paso de tiempo utilizado en el análisis es 0.001s.

En las Figuras 2(b, c y d) se muestra la evolución temporal de la posición del punto de la columna de agua en contacto con la pared inferior del canal (punto B de la Figura 2(a)). Las gráficas se presentan en función del tiempo adimensional definido como $t(g/L)^{1/2}$ siendo t el tiempo real y la distancia adimensional x/L. La Figura 2(b) presenta los resultados obtenidos con ETILT utilizando una malla regular de 120x45 elementos junto con los obtenidos con MLIT, los reportados en [18] utilizando un método sin malla y los valores experimentales [19]. Se puede observar un comportamiento satisfactorio de la evolución del punto en estudio. Se realizó un pequeño análisis de sensibilidad de los resultados respecto a la discretización espacial utilizando una malla de 40x15. Los resultados se presentan en la Figura 2(c) mostrando prácticamente insensibilidad al tamaño de malla. Se evaluó además el comportamiento del algoritmo cuando se considera la densidad real del agua, es decir, μ =0.001 kg/ms. La evolución del punto B se muestra e la Figura 2(d) conjuntamente con los valores experimentales. Puede observarse que los resultados numéricos están adelantados en el tiempo respecto a las mediciones. Sin embargo la curva numérica está desplazada en casi un tiempo constante respecto a la experimental mostrando la misma curvatura. Esta diferencia puede deberse a que la apertura de la compuerta en la experiencia no es instantánea como se supuso en la simulación. La diferencia entre las curvas en tiempo real es de 0,012s, un intervalo muy corto como para ser medido en el inicio de la experiencia de acuerdo a lo reportado en [19].

La Figura 3 muestra la evolución de la superficie interfaz para distintos instantes en comparación con los resultados obtenidos con MLIT mostrando similitud en las predicciones.

CONCLUSIÓN

En este trabajo se presentó la resolución del problema del seguimiento de una superficie interfaz utilizando una metodología de cálculo de malla fija. La metodología propuesta no presenta resultados difusivos a pesar de usar una ecuación de convección para determinar el movimiento de la interfaz incorporando además un algoritmo de control global de volumen. Por otro lado, la metodología inhibe consistentemente la propagación de oscilaciones numéricas en los resultados. Las predicciones obtenidas de la superficie interfaz han sido satisfactoriamente comparadas con las obtenidas utilizando otros métodos numéricos y con valores experimentales reportados en la literatura.



Figura 2. Colapso de una columna de agua de relación de aspecto 1, L=0.05715m. (a) Esquema del problema. Evolución temporal de la posición del punto B para (b) malla fina y μ =0.5 kg/ms, (c) malla gruesa y μ =0.5 kg/ms, (d) malla fina y μ =0.001 kg/ms.



ETILT

MLIT

Figura 3. Evolución de la superficie interfaz en distintos instantes del análisis del colapso de una columna de agua de aspecto unitario (L=0.05715). Comparación entre ETILT y MLIT.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a CONICYT – Proyectos FONDECYT 1020029 y 7020029 y DICYT/USACH por el soporte brindado a este trabajo.

BIBLIOGRAFIA

- [1] Huerta A. and Liu W., "Viscous flow with large free surface motion", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 69, 277-324 (1988).
- [2] Tezduyar T., "Stabilized finite element formulations for incompressible flow computations", *Advances in Applied Mechanics*, 28, 1-44 (1991).
- [3] Thompson E., "Use of pseudo-concentrations to follow creeping viscous flows during transient analysis", *International Journal For Numerical Methods in Engineering*, 6, 749-761 (1986).
- [4] Dhatt G., Gao D. and Ben Cheikh A., "A finite element simulation of metal flow in moulds", *International Journal For Numerical Methods in Engineering*, 30, 821-831 (1990).
- [5] Usmani A., Cross J. and Lewis R., "A finite element model for the simulations of mould filling in metal casting and the associated heat transfer", *International Journal For Numerical Methods in Engineering*, 35, 787-806 (1992).
- [6] Codina R., Schäfer U. and Oñate E., "Mould filling simulation using finite elements", International Journal for Numerical Methods in Heat and Fluid Flow, 4, 421-310 (1994).
- [7] Zhang Y., Liu W. and Wang H., "Cast filling simulations of thin-walled cavities", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 128, 199-230 (1995).
- [8] Lewis R. and Ravindran K., "Finite element simulation of metal casting", *International Journal For Numerical Methods in Engineering*, 47, 29-59 (2000).
- [9] Tezduyar T., "Finite element methods for flow problems with moving boundaries and interfaces", *Archives of Computational Methods in Engineering*, 8, 83-130 (2001).
- [10] Tezduyar T., "Interface-Tracking and Interface-Capturing Techniques for Computation of Two-Fluid Flows", *Proceedings of the First MIT Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics*, Boston, Massachusetts (2001).
- [11] Tezduyar T., "Finite Element Interface-Tracking and Interface-Capturing Techniques for Flows with Moving Boundaries and Interfaces", ASME Paper IMECE2001/HTD-24206, Proceedings of the ASME Symposium on Fluid-Physics and Heat Transfer for Macroand Micro-Scale Gas-Liquid and Phase-Change Flows, ASME, New York, New York, CD-ROM (2001).

- [12] Tezduyar T., "Stabilized finite element formulations and interface-tracking and interface-capturing techniques for incompressible flows", *Proceedings of the Workshop on Numerical Simulations of Incompressible Flows*, Half Moon Bay, California (2001).
- [13] Cruchaga M., Oñate E. and Idelsohn S., "On the pseudomaterial approach for the analysis of transient forming processes", *Communications in Numerical Methods in Engineering*, 11, 137-148 (1995).
- [14] Cruchaga M.A. and Oñate E., "A finite element formulation for incompressible flow problems using a generalized streamline operator", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 143, 49-67 (1997).
- [15] Cruchaga M. and Oñate E., "A generalized streamline finite element approach for the analysis of incompressible flow problems including moving surfaces", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 173, 241-255 (1999).
- [16] Cruchaga M., Celentano D. and Tezduyar T., "A moving Lagrangian interface technique for flow computations over fixed meshes", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 191, 525-543 (2001).
- [17] Cruchaga M., Celentano D. and Tezduyar T., "Computation of mould filling processes with a moving lagrangean interface technique", *Communications in Numerical Methods in Engineering*, 18, 483-493 (2002).
- [18] Bonet J. and Look T., "Variational and momentum preservation aspects of smooth particle hydrodynamic formulations", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 180, 97-115 (1999).
- [19] Martin J. and Moyce W., "An experimental study of the collapse of liquid columns on a rigid horizontal plane", *Phil. Tran. Royal Society London*, 244, 312-324 (1952).
- [20] García V., Muñoz-Cobo J. and López L., "Use of high accuracy schemes to handle free surfaces in computing unsteady two-phase flows", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 162, 271-286 (1998).
- [21] Idelsohn S., Storti M. and Oñate E., "Lagrangian formulations to solve free surfaces incompressible inviscid fluid flows", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 191, 583-593 (2001).
- [22] Koshizuka S., Tamako H. and Oka Y., "A particle method for incompressible viscous flow with fluid fragmentation", *Comput. Fluid Dyn. J.*, 4, 29 (1995).