

OPCIONES EN LA FORMULACION POR ELEMENTOS FINITOS PARA LA FUERZA DE TENSION SUPERFICIAL

Roberto F. Ausas^a, Enzo A. Dari^a y Gustavo C. Buscaglia^b

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

^b*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, Tensión Superficial, Laplace–Beltrami.

Resumen.

En este trabajo se estudian algunas opciones a ser tomadas en cuenta en una formulación por elementos finitos empleando un método de tipo level set en problemas que incluyen efectos de tensión superficial. En primer lugar, se analiza brevemente el uso de interpolantes discontinuos para la presión (más detalles se dan en otro trabajo presentado por los autores). Por otra parte, se propone emplear una aproximación del tipo Laplace–Beltrami para la curvatura, lo cual aparece en forma natural en la formulación variacional del problema evitando definir regularizaciones para la delta de Dirac. Como se verá, esta aproximación también resulta útil para introducir ángulos de contacto en los puntos triples. Se estudian con cierto detalle diferentes posibilidades para imponer la fuerza de tensión superficial en un problema académico y finalmente se presentan varios ejemplos numéricos en dos y tres dimensiones espaciales, de flujos dominados por la tensión superficial involucrando deformaciones más severas de la interfase.

1. INTRODUCCION

Existen varias aplicaciones físicas e industriales en las cuales los efectos de *tensión superficial* juegan un rol importante, entre éstos encontramos por ejemplo, la formación de nubes de gotas o sprays y otros problemas de flujo a superficie libre donde las escalas espaciales involucradas son pequeñas. El modelado numérico de esta clase de problemas presenta varios desafíos debido esencialmente al carácter singular de la fuerza de tensión superficial y a la discontinuidad que ésta introduce en el campo de presiones.

Como es bien sabido, existen básicamente dos tipos de metodologías para simular flujos que involucran una interfase móvil: los métodos de *malla móvil* y los métodos de *malla fija*. En el primer caso, hallamos las técnicas de tipo ALE (Arbitrary–Lagrangian–Eulerian) y los métodos puramente Lagrangianos, así como también el método spatial–domain/space–time (DSD/ST) introducido por Tezduyar et al. (1992a,b) con una filosofía similar a los métodos ALE, en los cuales la interfase está representada por los bordes de una malla móvil. En este tipo de métodos, la fuerza de tensión superficial aparece como una condición a imponer sobre los bordes de dicha malla. Por ejemplo, en Saksono y Perić (2006a,b) se emplea una técnica de tipo Lagrangiana para simular problemas estáticos y dinámicos involucrando gotas. Por otra parte, en Bellet (2001); Dettmer et al. (2003); Dettmer y Perić (2006) son estudiados diferentes problemas que involucran efectos de tensión superficial, por medio de formulaciones de tipo ALE. Estos métodos en general se consideran precisos, pero poco robustos para tratar problemas en los cuales se observan deformaciones severas de la interfase, tal como en los problemas de coalescencia y ruptura de gotas. Dentro de los métodos de malla fija, encontramos las técnicas de tipo *Level Set*, en las cuales, la interfase está embebida en una función escalar continua definida sobre una malla fija. En este tipo de formulaciones, que se consideran más robustas para capturar grandes deformaciones de la interfase, aunque menos precisas, la fuerza de tensión superficial aparece como una fuerza singular concentrada en la interfase y normal a ésta, que viene dada por

$$\mathbf{F}_S = \gamma \kappa \mathbf{n}_S \delta_S \quad (1)$$

donde γ es el coeficiente de tensión superficial, κ es la curvatura de la interfase \mathcal{S} , \mathbf{n}_S es la normal unitaria a \mathcal{S} y δ_S es la delta de Dirac superficial. Los desafíos computacionales en este caso están relacionados esencialmente con las dos cuestiones siguientes

- 1 La interpolación de variables discontinuas a través de \mathcal{S} ;
- 2 El cómputo efectivo de \mathbf{F}_S ;

Respecto al primer punto en la lista, como es bien sabido, la presencia de fuerzas singulares, tales como la de tensión superficial, produce discontinuidades a través de \mathcal{S} en las tensiones normales. Para lograr ordenes óptimos de convergencia de las formulaciones numéricas empleadas, se hace necesario mejorar el tratamiento de la presión, mediante la introducción de mejoras en los espacios de elementos finitos. Debe notarse que esto debe hacerse en forma dinámica dado que la superficie se encuentra en movimiento. Algunas propuestas para mejorar el tratamiento de la presión pueden ser halladas en literatura (ver e.g. Belytschko et al. (2001); Chessa y Belytschko (2003); Gross y Reusken (2007a) y referencias allí). En este trabajo se emplea un nuevo espacio de elementos finitos que consiste en una modificación del espacio usual P_1 y que permite un tratamiento discontinuo para la presión en aquellos elementos que son cortados por la interfase. Detalles pueden ser encontrados en otro artículo presentado por los autores (Ausas et al., 2009). El foco principal de este artículo se encuentra en el segundo punto de la lista dada

arriba. En varias formulaciones en la literatura, la fuerza de tensión superficial es modelada en las ecuaciones de Navier–Stokes como una fuerza de *volumen* mediante la introducción de alguna regularización δ_S^ϵ para la delta de Dirac. Las dos formulaciones más usuales son el método CSF (Continuum Surface Force) debido a Brackbill et al. (1992) el método CST (Continuum Surface Tension) debido a Chang et al. (1996). La precisión de tales métodos no está claramente establecida y podría depender de parámetros ajustables que aparecen en la regularización escogida para δ_S . Luego, es necesario computar la curvatura de la interfase, sin embargo, el cómputo de dicha curvatura en una formulación de tipo level set puede presentar ciertos inconvenientes, contrariamente a la creencia popular, ya que implica diferenciación hasta segundo orden de la función de level set que contiene la información geométrica de la interfase. Como se menciona en Marchandise et al. (2007) la diferenciación directa de la función de level set no siempre resulta convergente para la curvatura, debido por ejemplo, a perturbaciones de alta frecuencia introducidas en la función de level set por los procesos de reinicialización u otras causas. A fines de evitar estas dificultades, es necesario emplear técnicas de cuadrados mínimos (Marchandise et al., 2007; Cummins et al., 2005; Shepel y Smith, 2006), o bien alguna técnica de regularización tal como se propone en Olsson et al. (2007); Tornberg y Engquist (2000). Otra posibilidad, que es empleada en este trabajo, consiste simplemente en emplear la delta de Dirac exacta y una representación del tipo Laplace–Beltrami para la curvatura. Dentro del contexto de las formulaciones Eulerianas, esto fue primero introducido por Lafaurie et al. (1994) y más recientemente por Ganesan et al. (2007) y Gross y Reusken (2007b). Un beneficio adicional de esta clase de formulaciones es que la introducción de ángulos de contacto en los puntos triples aparece en forma natural en la formulación variacional del problema.

El resto del artículo se encuentra organizado de la siguiente forma. En primer lugar se describe el problema matemático y se presenta su formulación variacional continua y discreta. Se dan detalles sobre el tratamiento numérico para la tensión superficial y se comenta brevemente sobre el espacio de presiones discontinuas que se emplea. Luego, se presentan algunos ejemplos numéricos de flujos dominados por la tensión superficial, en dos y tres dimensiones espaciales. Al final se esbozan algunas conclusiones.

2. FORMULACION CONTINUA DEL PROBLEMA

Consideramos el problema de dos fluidos inmiscibles separados por una interfase material S en un dominio $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ($d = 2$ ó 3). Suponemos que el dominio Ω está dividido en subdominios disjuntos Ω_1 y Ω_2 por una curva S , la cual puede ser cerrada, es decir, pudiéramos ocurrir que $\partial\Omega \cap S \neq \emptyset$ (ver figura 1). Luego, al tiempo t se tiene

$$\Omega = \Omega_1(t) \cup \Omega_2(t), \quad S(t) = \Omega_1(t) \cap \Omega_2(t).$$

En este trabajo se estudian problemas gobernados por las ecuaciones de Navier–Stokes incompresibles en presencia de fuerzas singulares tales como la de tensión superficial. Las ecuaciones de gobierno pueden ser escritas como sigue

$$\rho(\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) - \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla p = \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}_S, \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0,$$

donde \mathbf{u} es el campo de velocidades, p el campo de presiones, \mathbf{g} una fuerza de volumen y \mathbf{F}_S la fuerza de tensión superficial definida en (1). En este trabajo se considera la condición

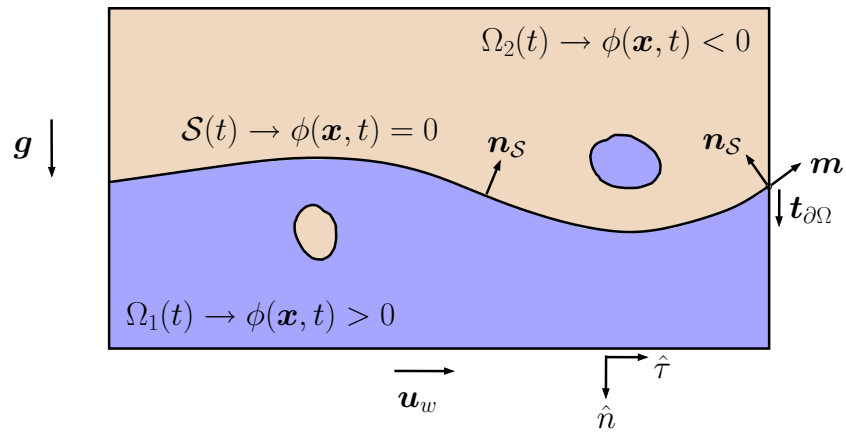


Figura 1: Dominio computacional Ω e interfase \mathcal{S} . Se indican los vectores usados para la condición de contorno GNBC.

de contorno GNBC (Generalized Navier Boundary Condition) sobre $\partial\Omega$, la cual siguiendo a Gerbeau y Lelievre (2008) resulta

$$(\mathbf{u} - \mathbf{u}_w) \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0 \quad (3)$$

$$\beta(\mathbf{u} - \mathbf{u}_w) \cdot \hat{\boldsymbol{\tau}} + \sigma \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\boldsymbol{\tau}} + \gamma (\mathbf{m} \cdot \mathbf{t}_{\partial\Omega} - \cos \theta_s) \mathbf{t}_{\partial\Omega} \cdot \hat{\boldsymbol{\tau}} \delta_{\partial\mathcal{S}_h} = 0$$

para cualquier vector $\hat{\boldsymbol{\tau}}$ tangente a $\partial\Omega$. En (3), \mathbf{u}_w es la velocidad de la pared, β el coeficiente de slip, $\mathbf{t}_{\partial\Omega}$ es un vector tangente a $\partial\Omega$ y normal a \mathcal{S} y θ_s es el ángulo de contacto estático. (ver figura 1). Por un lado, la primera condición en (3) es estándar e indica simplemente la no penetración del fluido. Además se considerará que $\mathbf{u}_w \cdot \hat{\mathbf{n}}_{\partial\Omega} = 0$. Por otro lado, la segunda condición incorpora la diferencia entre el ángulo de contacto dinámico y el ángulo de contacto estático. Obviamente esta contribución desaparece cuando $\partial\mathcal{S} = \emptyset$. En este caso, debe notarse que para valores muy grandes de β , lo cual ocurre en la mayoría de las aplicaciones, esta condición de contorno se reduce a la condición clásica de no deslizamiento. Sin embargo, cuando $\partial\mathcal{S} \neq \emptyset$ se hace necesario tomar en cuenta (3) para evitar la contradicción de tener una línea de contacto que debe moverse, con la condición de no deslizamiento (i.e. la línea de contacto se quedaría pegada a la pared).

Continuando con la descripción del problema, resulta claro que las propiedades materiales son en general discontinuas en \mathcal{S} , es decir, la densidad y viscosidad de los fluidos deben ser computadas de acuerdo a

$$(\rho(\mathbf{x}, t), \mu(\mathbf{x}, t)) = \begin{cases} (\rho_1, \mu_1) & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_1 \\ (\rho_2, \mu_2) & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_2 \end{cases} \quad (4)$$

Finalmente, las ecs. (2) deben ser suplementadas con las siguientes condiciones de acoplamiento en la interfase

$$[\mathbf{u}]_{\mathcal{S}} = 0, \quad (5)$$

$$[\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n}]_{\mathcal{S}} = \mathbf{F}_{\mathcal{S}}, \quad (6)$$

donde $[\cdot]_{\mathcal{S}}$ denota el salto de una cantidad a través de \mathcal{S} . En este caso, la condición (6) puede ser escrita alternativamente de la siguiente forma

$$[-p + 2\mu \frac{\partial u_{\mathbf{n}}}{\partial \mathbf{n}}]_{\mathcal{S}} = \gamma \kappa_{\mathcal{S}}, \quad (7)$$

En este trabajo se considera una formulación de tipo level set para representar la interfase material. Como es bien sabido, en esta clase de formulaciones, la interfase se encuentra embebida en una función escalar continua ϕ definida en todo el dominio y cuya superficie de nivel cero representa a $\mathcal{S}(t)$, es decir

$$\mathcal{S}(t) = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d \text{ s.t. } \phi(\mathbf{x}, t) = 0 \}. \quad (8)$$

La función de level set ϕ es advectada por el campo de velocidades \mathbf{u} de acuerdo a la siguiente ecuación de transporte

$$\partial_t \phi + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = 0. \quad (9)$$

No es difícil demostrar que en esta clase de formulaciones, las condiciones de acoplamiento en la interfase (5) y (6) se satisfacen en forma automática.

Una de las ventajas que hacen atractivo al método de level set, es que ciertas propiedades geométricas de la interfase pueden ser computadas en forma directa a partir de la función ϕ como sigue

$$\mathbf{n}(\mathbf{x}) = \frac{\nabla \phi(\mathbf{x})}{\|\nabla \phi(\mathbf{x})\|}, \quad \kappa(\mathbf{x}) = -\nabla \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}), \quad (10)$$

Si bien la función ϕ se encuentra definida en todo el dominio, estas cantidades tienen significado físico sólo para aquellos puntos \mathbf{x} pertenecientes a la interfase \mathcal{S} . Como se mencionó, a simple vista puede parecer simple el cálculo de dichas propiedades geométricas, sin embargo, surgen ciertas complicaciones en el caso discreto, especialmente para el cómputo de la curvatura, lo cual de acuerdo a (10) implica diferenciar hasta segundo orden la función de level set. Más adelante en el trabajo se comenta sobre esta cuestión.

3. DISCRETIZACION DEL PROBLEMA

En esta sección se presenta la forma variacional continua y discreta del problema y se discuten los detalles relacionados con el tratamiento de la fuerza debido a la tensión superficial, que es el principal objetivo del trabajo.

Sean \mathcal{V} , \mathcal{Q} y \mathcal{W} espacios funcionales para los campos de velocidad, presión y función de level set respectivamente. Entonces, la forma débil del problema de dos fluidos se escribe como sigue

Hallar $(\mathbf{u}, p, \phi) \in \mathcal{V} \times \mathcal{Q} \times \mathcal{W} \times (0, T)$ tal que

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} \rho (\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \mathbf{g}) \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} 2\mu \nabla^S \mathbf{u} : \nabla \mathbf{v} \, d\mathbf{x} - \int_{\partial\Omega} \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v} \, ds - \\
- \int_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} + f_S(\mathbf{v}) = 0 \\
\int_{\Omega} q \nabla \cdot \mathbf{u} \, d\mathbf{x} = 0 \\
\int_{\Omega} (\partial_t \phi + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi) \cdot w \, d\mathbf{x} = 0
\end{aligned} \tag{11}$$

$\forall(\mathbf{v}, q, w) \in \mathcal{V} \times \mathcal{Q} \times \mathcal{W}$. Respecto a la ecuación (11), nótese que por claridad, el residuo variacional ha sido dividido en tres partes, claramente asociadas a la ecuación de momento y condición de incompresibilidad (2) y a la ecuación de level set (9). En segundo lugar, la densidad ρ y viscosidad μ , deben ser computadas según (4), lo cual depende de la función de level set como sigue

$$(\rho(\mathbf{x}, t), \mu(\mathbf{x}, t)) = \begin{cases} (\rho_1, \mu_1) & \text{si } \phi(\mathbf{x}, t) > 0 \\ (\rho_2, \mu_2) & \text{si } \phi(\mathbf{x}, t) < 0 \end{cases} \tag{12}$$

Finalmente, $f_S(\mathbf{v})$ representa la forma variacional de la contribución debido a la tensión superficial, la cual se discutirá luego con más detalle. En lo que sigue el símbolo $d\mathbf{x}$ en todas las integrales será omitido por brevedad.

El siguiente paso consiste en la discretización temporal del problema, para lo cual se emplea una regla trapezoidal, resultando la siguiente forma semidiscreta de (11)

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

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} \mathcal{G}_{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} 2\mu \nabla^S \mathbf{u}^{n+\theta} : \nabla \mathbf{v} \, d\mathbf{x} - \int_{\partial\Omega} \boldsymbol{\sigma}^{n+1} \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v} \, ds - \\
- \int_{\Omega} p^{n+1} \nabla \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} + f_S^{n+\theta}(\mathbf{v}) = 0 \\
\int_{\Omega} q \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} \, d\mathbf{x} = 0 \\
\int_{\Omega} \left(\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\delta t} + \mathbf{u}^{n+\theta} \cdot \nabla \phi^{n+\theta} \right) \cdot w \, d\mathbf{x} = 0
\end{aligned} \tag{13}$$

$\forall(\mathbf{v}, q, w) \in \mathcal{V} \times \mathcal{Q} \times \mathcal{W}$.

donde δt es el paso de tiempo, el parámetro $\theta \in [0, 1]$ y $\mathcal{G}_{\mathbf{u}}$ viene dado por

$$\mathcal{G}_{\mathbf{u}} = \rho \left(\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\delta t} + \mathbf{u}^{n+\theta} \cdot \nabla \mathbf{u}^{n+\theta} - \mathbf{g}^{n+1} \right) \tag{14}$$

3.1. Formulación Variacional Discreta y términos de estabilización

La formulación discreta se sigue de (13) empleando el método de Galerkin. El método de estabilización empleado en este trabajo, es el método ASGS (Algebraic subgrid Scale) el cual puede ser consultado por ejemplo en Codina (2001). En primer lugar, para simplificar la notación se introduce el producto escalar estándar en $L^2(\Omega)$, denotado por (\cdot, \cdot) . Luego, sea \mathcal{T}_h una partición de elementos finitos de Ω , la cual no necesariamente conforma con la interfase discreta \mathcal{S}_h , es decir, la interfase \mathcal{S}_h puede atravesar los elementos de la partición. Ahora, si \mathcal{V}_h , \mathcal{Q}_h y \mathcal{W}_h son la contraparte discreta de los espacios de velocidad, presión y level set respectivamente, entonces, la formulación variacional discreta del problema, incluyendo los términos de estabilización para el método ASGS viene dada por

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

$$(\mathcal{G}_{\mathbf{u}_h}, \mathbf{v}_h) + (2\mu \nabla^S \mathbf{u}_h^{n+\theta}, \nabla \mathbf{v}_h) - (\sigma_h \hat{n}_h, \mathbf{v}_h) - (p_h^{n+1}, \nabla \cdot \mathbf{v}_h) + f_{\mathcal{S}_h}^{n+\theta_s}(\mathbf{v}_h) + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \frac{\tau_K}{\rho} (\mathcal{G}_{\mathbf{u}_h} + \nabla p_h^{n+1}, c_{up} \mathbf{u}_h^{n+\theta} \cdot \nabla \mathbf{v}_h + c_{es} \nabla q_h)_K = 0 \quad (15)$$

$$(q_h, \nabla \cdot \mathbf{u}_h^{n+1}) + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} (\delta_K \nabla \cdot \mathbf{u}_h^{n+\theta}, \nabla \cdot \mathbf{v}_h)_K = 0 \quad (16)$$

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} (\mathcal{G}_\phi, w_h + \tau_K \mathbf{u}_h^{n+\theta} \cdot \nabla w_h)_K = 0 \quad (17)$$

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

donde $\mathcal{G}_{\mathbf{u}_h}$ es la forma discreta de $\mathcal{G}_{\mathbf{u}}$ dado en (14) y el término \mathcal{G}_ϕ viene dado por

$$\mathcal{G}_\phi = \frac{\phi_h^{n+1} - \phi_h^n}{\delta t} + \mathbf{u}_h^{n+\theta} \cdot \nabla [\theta \phi_h^{n+1} + (1 - \theta) \phi_h^n], \quad (18)$$

donde las constantes de estabilización por elemento vienen dadas por

$$\tau_K = \left[c_1 \frac{\nu}{h_K^2} + c_2 \frac{|\mathbf{u}_h|_{\infty, K}}{h_K} \right]^{-1} \quad \delta_K = 2\mu + \rho |\mathbf{u}_h|_{\infty, K} h_K, \quad (19)$$

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. Luego, c_{up} y c_{es} son factores algorítmicos de upwind y de estabilización para lograr una convergencia óptima del método numérico en cada caso particular.

3.2. Tratamiento de la Tensión Superficial

El foco principal de este artículo está relacionado con el tratamiento de la fuerza debido a la tensión superficial en formulaciones de elementos finitos que emplean un esquema de tipo level set para discretizar la interfase.

Se pueden hallar en la literatura dos tipos de tratamientos para la contribución debido a la tensión superficial $f_{\mathcal{S}_h}(\mathbf{v})$. Uno de los métodos más populares, consiste simplemente en el cómputo de la curvatura de la interfase y la utilización de una delta de Dirac regularizada alrededor de la misma como sigue

$$f_{S_h}(\mathbf{v}_h) = \gamma \int_{\Omega} \delta_S^\epsilon \kappa_h \mathbf{n}_h \cdot \mathbf{v}_h \, d\mathbf{x} \quad (20)$$

(la dependencia temporal se ha omitido por simplicidad). Debe notarse que la integral es efectuada sobre todo el dominio computacional Ω y que el coeficiente de tensión superficial se ha asumido constante. En (20), δ_S^ϵ es la forma regularizada de la delta de Dirac. En la literatura se da especial atención a la cuestión de elegir apropiadamente δ_S^ϵ , como puede ser consultado en [Marchandise et al. \(2007\)](#); [Kothe et al. \(96-0859\)](#); [Williams et al. \(1999\)](#) y otras referencias que pueden ser allí encontradas. En este caso, la curvatura es computada de acuerdo a

$$\kappa_h(\mathbf{x}) = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla \phi_h}{\|\nabla \phi_h\|} \right) \quad (21)$$

la cual está definida $\forall \mathbf{x} \in \Omega$. Como se mencionó en la introducción, el cómputo de la curvatura κ_h puede resultar problemático, ya que implica diferenciación hasta segundo orden de la función de level set, con lo cual, se hace necesario emplear procedimientos de suavizado y/o regularización. De hecho, el cómputo de κ_h debe ser efectuado en dos pasos si se emplean elementos lineales para la función de level set, ya que primero debe computarse $\mathbf{n}_h = \nabla \phi / \|\nabla \phi\|$, que será constante por elemento, luego computar $\Pi \mathbf{n}_h$, la proyección de \mathbf{n}_h sobre \mathcal{W}_h para finalmente computar $\kappa_h = -\nabla \cdot \Pi \mathbf{n}_h$. Un segundo método que puede ser también hallado en la literatura y se adopta en este trabajo, consiste en utilizar la delta de Dirac exacta

$$f_{S_h}(\mathbf{v}_h) = \gamma \int_{S_h} \kappa_h \mathbf{n}_h \cdot \mathbf{v}_h \, ds \quad (22)$$

y luego emplear una aproximación del tipo Laplace–Beltrami para la curvatura, tal como se explica a continuación. Debe notarse en este caso, que la integral es realizada sobre S_h y que κ_h y \mathbf{n}_h son propiedades intrínsecas de la interfase S_h .

Aproximación de Laplace–Beltrami para κ

En el primer lugar, se introducen algunas definiciones y notación. (todos los detalles pueden ser encontrados en [Ganesan et al. \(2007\)](#); [Gilbarg y Trudinger \(1983\)](#)).

Para una función $\psi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ definimos su derivada tangencial $\nabla_s \psi$ a lo largo de la interfase S como

$$\nabla_s \psi = \nabla \psi - (\mathbf{n} \cdot \nabla \psi) \mathbf{n} \quad (23)$$

donde $\nabla \psi$ es el gradiente usual de ψ en \mathbb{R}^d . Si bien, ψ (así como $\nabla \psi$) están definidos para todo \mathbf{x} en Ω , se puede demostrar que los valores de $\nabla_s \psi$ dependen sólo de la restricción de ψ a S . Ahora, podemos escribir alternativamente (23) como

$$\nabla_s \psi = \delta_i(\psi) \mathbf{e}_i \quad (24)$$

donde \mathbf{e}_i es el i -ésimo vector de la base canónica en \mathbb{R}^d y $\delta_i(\psi)$ está dada por

$$\delta_i(\psi) = \left(\frac{\partial}{\partial x_i} - \mathbf{n}_i \mathbf{n}_j \frac{\partial}{\partial x_j} \right) (\psi) \quad (25)$$

En este punto, podemos introducir el operador de Laplace–Beltrami Δ_s , que está definido como

$$\Delta_s(\psi) = \delta_i(\delta_i(\psi)) \quad (26)$$

Luego, para una función vectorial Ψ , la fórmula (26) es aplicada componente a componente, i.e.

$$\Delta_s \Psi = \Delta_s(\Psi_i) \mathbf{e}_i \quad (27)$$

A continuación usamos la siguiente identidad

$$\kappa_h \mathbf{n}_h = \Delta_s \text{id}_{\mathcal{S}_h} \quad (28)$$

donde $\text{id}_{\mathcal{S}_h} : \mathcal{S}_h \rightarrow \mathbb{R}^d$ es la identidad sobre \mathcal{S}_h , i.e. $\text{id}_{\mathcal{S}_h} = \mathbf{x}$. Si, multiplicamos luego por una función de prueba \mathbf{v}_h a ambos lados de (28), y luego se integra, obtenemos

$$\int_{\mathcal{S}_h} \kappa_h \mathbf{n}_h \cdot \mathbf{v}_h \, ds = \int_{\mathcal{S}_h} \Delta_s \text{id}_{\mathcal{S}_h} \cdot \mathbf{v}_h \, ds \quad (29)$$

lo cual, luego de integración por partes, resulta en el siguiente resultado de importancia

$$\int_{\mathcal{S}_h} \kappa_h \mathbf{n}_h \cdot \mathbf{v}_h \, ds = - \int_{\mathcal{S}_h} \nabla_s \text{id}_{\mathcal{S}_h} : \nabla_s \mathbf{v}_h \, ds + \int_{\partial \mathcal{S}_h} \mathbf{m} \cdot \mathbf{v}_h \, dl \quad (30)$$

donde \mathbf{m} es un vector que es tangente a \mathcal{S}_h y ortogonal a $\partial \mathcal{S}_h$. Luego, el primer término en (30) puede ser alternativamente escrito como sigue

$$\int_{\mathcal{S}_h} \nabla_s \text{id}_{\mathcal{S}_h} : \nabla_s \mathbf{v}_h \, ds = \int_{\mathcal{S}_h} (\mathbb{I} - \mathbf{n}_h \otimes \mathbf{n}_h) : \nabla \mathbf{v}_h \, ds \quad (31)$$

Debe notarse que para computar la contribución de la tensión superficial, en este caso no es necesaria la diferenciación hasta segundo orden de la función de level set o ninguna proyección, como en el caso anterior. Además, el cómputo se hace muy simple, ya que el integrando en (31) es constante por elemento (recordar que ϕ es interpolada linealmente en cada elemento), con lo cual, (31) toma la siguiente forma

$$\mathbf{f}_{\mathcal{S}_h}(\mathbf{v}_h) = \sum_{K \in \mathcal{K}} \gamma \int_{\mathcal{S}_h(K)} (\mathbb{I} - \mathbf{n}_h \otimes \mathbf{n}_h) : \nabla \mathbf{v}_h \, ds = \sum_{K \in \mathcal{K}} \gamma (\mathbb{I} - \mathbf{n}_h^K \otimes \mathbf{n}_h^K) : \nabla \mathbf{v}_h \, \ell_{\mathcal{S}_h(K)} \quad (32)$$

donde \mathbf{n}_h^K es el vector normal a $\mathcal{S}_h(K)$, la restricción de \mathcal{S}_h dentro del elemento K , es decir

$$\mathbf{n}_h^K = \frac{\nabla \phi_h}{\|\nabla \phi_h\|} \Big|_{\mathcal{S}_h(K)} \quad (33)$$

que de hecho toma el mismo valor constante en todo el elemento. En (32) $\ell_{\mathcal{S}_h(K)}$ denota la medida de $\mathcal{S}_h(K)$, la cual está simplemente dada por

$$\ell_{\mathcal{S}_h(K)} = \int_{\mathcal{S}_h(K)} ds \quad (34)$$

Finalmente, combinando el tercer término en (15) con el lado derecho de (30) y tomando en cuenta las condición GNBC dada en (3), se puede escribir

$$\int_{\partial\Omega} \boldsymbol{\sigma}_h \hat{\mathbf{n}}_h \cdot \mathbf{v}_h ds + \gamma \int_{\partial\mathcal{S}_h} \mathbf{m} \cdot \mathbf{v}_h dl = -\beta \int_{\partial\Omega} (\mathbf{u} - \mathbf{u}_w) \cdot \mathbf{v}_h ds + \gamma \int_{\partial\mathcal{S}_h} \cos \theta_s \mathbf{t}_{\partial\Omega} \cdot \mathbf{v}_h dl \quad (35)$$

la cual resulta de fácil implementación en códigos de elementos finitos y permite incluir de manera natural las condiciones de contorno apropiadas en los puntos de contacto.

3.3. Comentarios adicionales sobre la formulación numérica

Antes de pasar a los resultados numéricos, conviene comentar sobre otros detalles involucrados en la formulación numérica del problema.

En primer lugar, los espacios de elementos finitos \mathcal{V}_h , \mathcal{Q}_h y \mathcal{W}_h , para la velocidad, la presión y la función de level set, están conformados por funciones lineales, aunque debe hacerse una salvedad en el caso del espacio \mathcal{Q}_h . En este caso, para capturar la discontinuidad en la presión debido a la presencia de la tensión superficial, se propone modificar las funciones de base usuales P_1 solo en aquellos elementos que son atravesados por la interfase. Esta modificación obviamente debe ser efectuada en forma dinámica dado que la interfase se encuentra en movimiento. Los detalles sobre el nuevo espacio de presiones así originado son presentados en otro artículo de los autores, aquí simplemente se muestra en el caso bidimensional como lucen típicamente las funciones de forma en un elemento que es atravesado por la interfase (ver figura 2). Debe notarse que, dado que la función de level set ϕ es lineal por elemento, la interfase está conformada por un segmento de recta. En la figura se puede también observar que a fines de capturar la discontinuidad existente, tanto en la presión como en las propiedades materiales (densidad y viscosidad), es necesario integrar exactamente en los elementos de interfase, y por lo tanto modificar la cuadratura utilizada de acuerdo a la posición de la misma. Finalmente, cabe mencionar, que en los casos donde sea necesario, se empleará en forma periódica un esquema de reinicialización presentado anteriormente (ver Mut et al. (2006); Ausas et al. (2008)), para mantener la distorsión de la función de level set bajo control.

El sistema no lineal obtenido es resuelto mediante un esquema de Newton–Raphson con cómputo exacto del Jacobiano, excepto para aquellas contribuciones que involucran diferenciación con respecto a la función de level set en los elementos cortados por la interfase, donde se efectúa diferenciación numérica. A su vez, los sistemas lineales en cada iteración son resueltos empleando un método directo en problemas con menos de 10^5 incógnitas, mientras que para problemas de mayor tamaño, un método GMRES con preconditionamiento ASM con descomposición LU incompleta por bloques, empleando las bibliotecas Petsc (Balay et al., 2003).

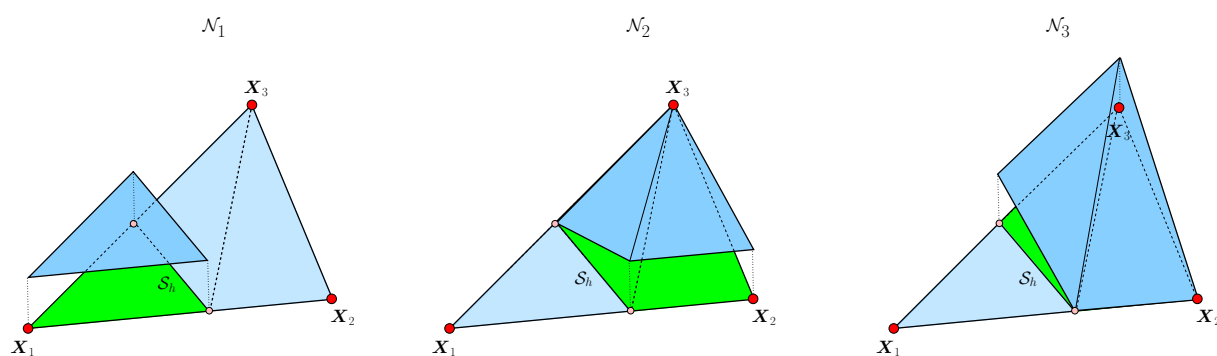


Figura 2: Funciones de forma para el nuevo espacio de presiones en el caso bidimensional

4. EJEMPLOS NUMERICOS

En esta sección se presentan varios ejemplos numéricos en dos y tres dimensiones espaciales. Los parámetros relevantes para caracterizar algunos de los problemas a estudiar son el número de Reynolds ($Re = \frac{\rho_1 U d}{\mu_1}$), el número de Weber ($We = \frac{\rho_1 U^2 d}{\gamma}$) y el cociente de densidades ($r_\rho = \rho_1/\rho_2$) y de viscosidades ($r_\mu = \mu_1/\mu_2$). Otros parámetros de importancia son el número de Laplace ($La = \gamma \rho d / \mu^2$) y el número de capilaridad ($Ca = U \mu / \gamma$). En primer lugar se estudian algunos problemas académicos y se comparan resultados con otros hallados en la literatura. Luego se estudia el problema de una gota apoyada sobre una superficie para evaluar la condición GNBC y finalmente algunos problemas que involucran deformaciones más importantes de la interfase. En todos los casos, los valores de los parámetros materiales que se dan pueden ser interpretados en cualquier sistema consistente de unidades. En varios de los casos presentados, la elección de los parámetros es realizada para reproducir exactamente las condiciones en otros trabajos hallados en la literatura.

4.1. Un problema académico

El problema más simple para investigar consiste en una burbuja circular inmersa en un fluido. En este problema clásico (originalmente propuesto por Popinet y Zaleski (1999)), la solución exacta corresponde a un campo de velocidades idénticamente nulo y un campo de presiones con una discontinuidad en la interfase, que de acuerdo a la ley de Young-Laplace es proporcional al coeficiente de tensión superficial y a la curvatura, i.e. la velocidad viene dada por

$$\mathbf{u} = 0 \tag{36}$$

y el campo de presiones por

$$p = \begin{cases} \gamma/R & \text{if } \|\mathbf{x}\| \leq R \\ 0 & \text{if } \|\mathbf{x}\| > R \end{cases} \tag{37}$$

con R el radio de la burbuja ($= 1/\kappa$) y donde el salto de presión en la interfase queda expresado como

$$[p]_s = \frac{\gamma}{R}$$

Debido a los errores de discretización inherentes al método numérico, se desarrollan velocidades espurias cerca de la interfase, que contaminan la solución y posiblemente alteren la ubicación de la interfase en alguna medida. En lo que sigue se emplea el espacio de presiones antes descripto. En este tipo de problemas, un correcto tratamiento de la presión es esencial para minimizar estas corrientes espurias. Esto se ilustra en la figura 3 donde se muestra el campo de velocidades para una burbuja, empleando el espacio de presiones discontinuas (izquierda) y el espacio usual de funciones continuas P_1 (derecha) (nótese la escala de los vectores en cada caso). Para continuar con el problema, se ubica una burbuja circular de diámetro $d = 2$ en un dominio cuadrado de lado $L = 4$. La viscosidad μ y densidad ρ son ambas iguales a 1, la fuerza de gravedad es despreciada y el coeficiente de tensión superficial se hace igual a 100, de tal forma que el valor del número de Laplace resulte igual a 200. Los parámetros son así escogidos para comparar resultados exactamente bajo las mismas condiciones que en otros trabajos hallados en la literatura. En todas las paredes del dominio se consideran condiciones de deslizamiento. Los parámetros de estabilización c_{es} and c_{up} se toman iguales a 0,05 y 0,1 respectivamente. En este caso no se emplea el esquema de reinicialización. La idea consiste en investigar el comportamiento de las corrientes espurias como función del espaciado de malla h ($= L/N$). En la Tabla 1 presentamos el valor del número de capilaridad Ca para diferentes resoluciones y comparamos los resultados con aquellos en [Marchandise et al. \(2007\)](#). Debe destacarse que el número de capilaridad es medido luego de 250 unidades de tiempo característico ($t_s = d\mu/\gamma$) considerando el máximo valor del módulo de la velocidad U en el dominio. Para todos los casos, se ha usado un paso de tiempo $\delta t = 0,01$. Como se observa en la tabla, las corrientes espurias o parásitas son bastante pequeñas tomando en cuenta el elevado valor para el coeficiente de tensión superficial considerado.

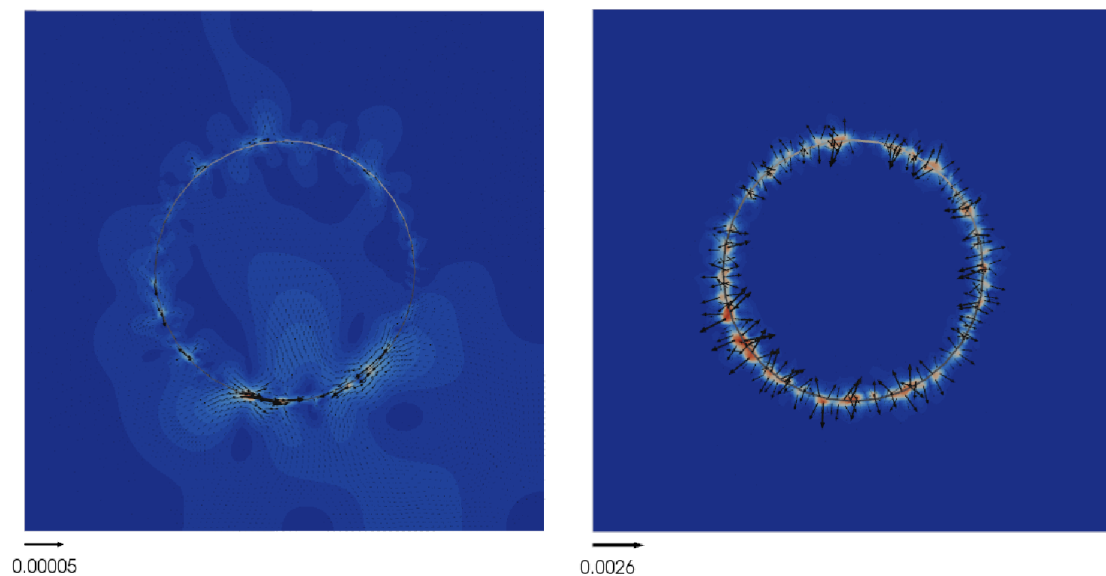


Figura 3: Módulo de la velocidad para una burbuja inmersa en un fluido. Notar la escala de los vectores en cada gráfico. Izquierda: espacio de presiones discontinuas (máximo=0,00005, rojo). Derecha: espacio usual P_1 (máximo=0,0028, rojo). El mínimo en ambos casos corresponde al valor 0 en azul.

En la Tabla 1 se puede apreciar que el método propuesto en [Marchandise et al. \(2007\)](#) y el propuesto en este trabajo poseen órdenes de convergencia similares para el máximo de las corrientes espurias.

Tabla 1: Número de capilaridad Ca luego de 250 unidades de tiempo para diferentes resoluciones de malla y para un número de Laplace $La = 200$.

h	<i>Este trabajo</i>	<i>Marchandise et al. (2007)</i>
$L/30$	$4,09 \cdot 10^{-5}$	$1,29 \cdot 10^{-4}$
$L/60$	$3,73 \cdot 10^{-5}$	$6,43 \cdot 10^{-5}$
$L/120$	$1,50 \cdot 10^{-5}$	$3,18 \cdot 10^{-5}$
$L/240$	$4,98 \cdot 10^{-6}$	$1,12 \cdot 10^{-5}$

Un segundo test consiste en el cómputo del número de capilaridad Ca para diferentes valores del número de Laplace La para una resolución de malla fija. En este caso, comparamos resultados con aquellos de [Marchandise et al. \(2007\)](#), [Popinet y Zaleski \(1999\)](#) y [Shin y Juric \(2002\)](#). Se considera un espaciado h igual a $L/32$. En [Lafaurie et al. \(1994\)](#) se sugiere que las corrientes espurias deben ser proporcionales a γ/μ , lo cual es equivalente a tener un valor Ca esencialmente constante como se indica en la Tabla 2. En este caso se varía el coeficiente de tensión superficial γ para lograr los diferentes valores de La .

Tabla 2: Número de capilaridad Ca luego de 250 unidades de tiempo características para diferentes valores del número de Laplace La . Resolución $h = L/32$.

$La = \gamma \rho d / \mu^2$	12	120	1200	12000
$Ca = U \mu / \gamma$				
<i>Este trabajo</i>	$1,03 \cdot 10^{-4}$	$1,03 \cdot 10^{-4}$	$1,03 \cdot 10^{-4}$	$1,02 \cdot 10^{-4}$
<i>Marchandise et al. (2007)</i>	$8,51 \cdot 10^{-5}$	$8,62 \cdot 10^{-5}$	$8,59 \cdot 10^{-5}$	$8,31 \cdot 10^{-5}$
<i>Popinet y Zaleski (1999)</i>	$8,50 \cdot 10^{-6}$	$6,76 \cdot 10^{-6}$	$5,71 \cdot 10^{-6}$	$5,99 \cdot 10^{-6}$
<i>Shin y Juric (2002)</i>	$2,18 \cdot 10^{-6}$	$2,18 \cdot 10^{-6}$	$2,18 \cdot 10^{-6}$	$2,22 \cdot 10^{-6}$

Antes de dejar los ejemplos académicos, resulta instructivo analizar las soluciones obtenidas para el problema de la burbuja, empleando diferentes opciones en el cómputo específico de la tensión superficial. Para simplificar el análisis, se considera una densidad despreciable e igual para ambos fluidos y se deja fija la interfase, es decir, se suprime el transporte. Ahora consideramos las siguientes posibilidades

Op₁ Aplicar la fuerza del problema exacto directamente;

Op₂ Aplicar el operador de Laplace–Beltrami;

Obviamente, la primera opción solo puede ser utilizada en un problema académico como el que nos ocupa, donde se conoce el valor de dicha fuerza ($= \frac{\gamma}{R} \int_{S_h} \mathbf{n}_e \cdot \mathbf{v}_h ds$). La segunda opción es la que se empleó anteriormente. A su vez, vamos a evaluar también, cuál es el efecto de detectar la interfase S_h en forma exacta, es decir, buscando los segmentos de recta en cada elemento, que pasan por las intersecciones que corresponden a un círculo exacto, o bien, simplemente interpolando la función de level set linealmente. Luego, la posibilidad de tomar una normal constante por elemento o bien la normal exacta a un círculo, que varía punto a punto a lo largo de la interfase, deben ser consideradas también. Los resultados se resumen en la Tabla 3

En la tabla se observa que el valor de Ca (o lo que es equivalente, el máximo de las corrientes espurias) es despreciable cuando se considera una fuerza constante e igual en cada elemento, lo

Tabla 3: Número de capilaridad Ca considerando las diferentes opciones para el cómputo de la tensión superficial en el problema académico de la burbuja.

Opción	<i>Normal Exacta</i> $n_e^K(x)$	<i>Normal Exacta</i> $n_e^K = cte$	<i>Normal Linear</i> $n_h^K = cte$
1	0,000192	$\sim 10^{-16}$	$\sim 10^{-16}$
2	0,000260	0,000284	0,002168

cual de hecho se cumple para cualquier poligonal cerrada, pues en ese caso la solución exacta del problema pertenece al espacio discreto empleado. En el resto de los casos, los desbalances producidos en el cómputo de las fuerzas interfaciales, debido a las aproximaciones realizadas, originan velocidades espurias. El peor resultado corresponde al caso en que se hace la detección empleando interpolantes lineales y el operador de Laplace–Beltrami y el mejor resultado corresponde al caso en que se emplea un segmento de recta que pasa por las intersecciones correspondientes a un círculo exacto. Resultados numéricamente similares a éste último se obtienen empleando interpolantes cuadráticos para la función de level set en lugar de la detección exacta, la cual obviamente no es siempre posible.

4.2. Gotas sobre una superficie

En este ejemplo numérico se estudia la utilización de la condición de contorno GNBC antes explicada. Para ello, se considera el problema de una gota de líquido de densidad $\rho_1 = 1$ y viscosidad $\mu_1 = 1$, apoyada sobre una superficie en la cual se impone el ángulo de contacto estático θ_s . La condición inicial, corresponde a un semicírculo de radio $R = 0,125$, centrado en $[0,5, 0]$ en el dominio computacional $[0, 1] \times [0, 0,25]$. En este caso, se utilizan los siguientes parámetros materiales y numéricos

$$\gamma = 1, \quad r_\rho = 100, \quad r_\mu = 100, \quad \beta = 1$$

$$\delta t = 0,001, \quad c_{es} = 0,05, \quad c_{up} = 0,1$$

La reinicialización es aplicada cada 20 pasos de tiempo, aunque en este tipo de problemas no es mandatorio utilizarla, dado que la deformación de la interfase no es severa. Se considera condición de libre deslizamiento en el resto de las paredes, donde $\partial\mathcal{S}_h = 0$. En la figura 4 se muestran los resultados considerando dos valores para el ángulo de contacto. En la parte superior se muestra la evolución temporal hacia el estacionario, cuando el ángulo de contacto $\theta_s = 45^\circ$ y en la parte inferior cuando $\theta_s = 135^\circ$, medidos como se indican en la figura. En ambos casos, la gota esencialmente permanece centrada en su posición original, pero por claridad se han apartado en el gráfico las formas correspondientes a diferentes tiempos mostrados en la figura.

4.3. Burbuja ascendente hacia un superficie

Este ejemplo consiste de una burbuja que asciende bajo la acción de la gravedad inmersa en un fluido de densidad $\rho_1 = 1000$ hacia una superficie libre. En este caso se quiere estudiar el fenómeno de ruptura cuando la burbuja alcanza la superficie. Inicialmente se ubica una burbuja circular de diámetro d igual a 0,01, centrada en $(0,02, 0,025)$ en la caja rectangular $[0, 0,04] \times [0, 0,06]$, con la superficie libre horizontal a una distancia de 0,032 medida desde el fondo del

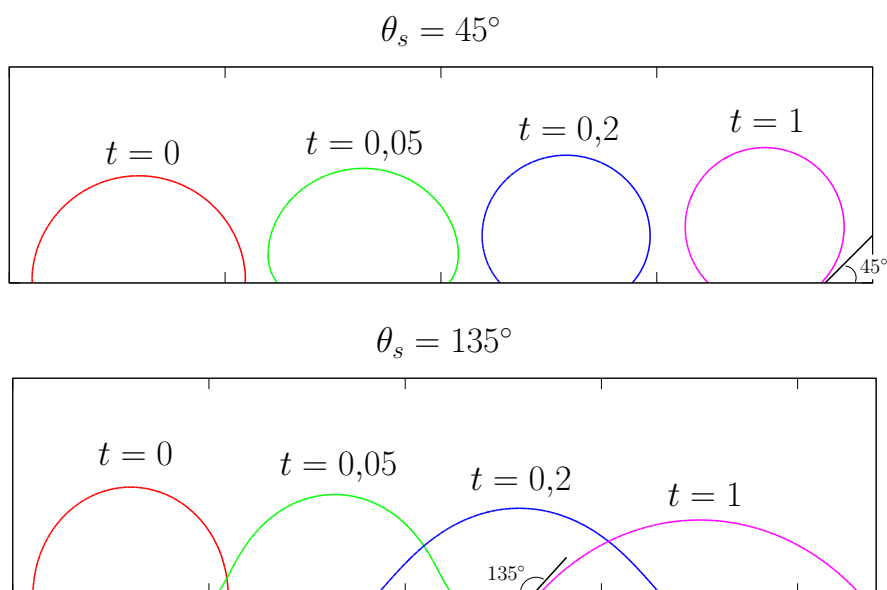


Figura 4: Evolución de una gota apoyada sobre una superficie para estudiar la condición GNBC. Arriba se impone un ángulo de contacto $\theta_s = 45^\circ$ y abajo se impone $\theta_s = 135^\circ$.

dominio, el cual es discretizado con una malla no estructurada con cerca de 28000 triángulos y refinada en una banda alrededor de la posición inicial de la superficie libre.

Los siguientes parámetros son considerados para la simulación

$$\gamma = 0,1, \quad r_\rho = 100, \quad r_\mu = 100$$

$$We = 10, \quad Re = 10$$

donde el número de Reynolds Re es computado empleando una velocidad de referencia igual a \sqrt{gd} . El líquido empleado en este caso puede considerarse similar al agua aunque con un coeficiente de tensión superficial algo superior.

La burbuja asciende mientras se deforma ella misma y a la superficie libre y a un dado tiempo ($t \approx 0,06$) se produce la ruptura. Como resultado, queda una pequeña gota que luego cae a la superficie. (ver figura 5). Justo en el instante de la ruptura, las escalas de tiempo del problema se hacen muy pequeñas con lo cual es necesario reducir el paso de tiempo, aún empleando esquemas implícitos. Durante la mayor parte de la simulación el paso de tiempo empleado es $\sim 1,7 \cdot 10^{-4}$, que luego es reducido a $\sim 8,3 \cdot 10^{-5}$ para capturar la ruptura.

4.4. Burbujas ascendentes en 3D

En este problema se estudia el ascenso de dos burbujas inmersas en un fluido de densidad $\rho_1 = 1$ y viscosidad $\mu_1 = 0,1$. El diámetro de las burbujas se toma igual a 1 en ambos casos. Las mismas ascienden bajo la acción de un campo gravitatorio en el dominio computacional $\Omega = [0, 3] \times [0, 3] \times [0, 4]$, el cual es discretizado con una malla de 885000 tetrahedros. Inicialmente, las burbujas son ubicadas en las posiciones $[1,5, 1,5, 2,25]$ y $[1,5, 1,75, 1]$ respectivamente, es decir, las mismas no se encuentran alineadas. Luego, se utilizan los siguientes parámetros para la simulación propuestos en [Marchandise et al. \(2007\)](#)

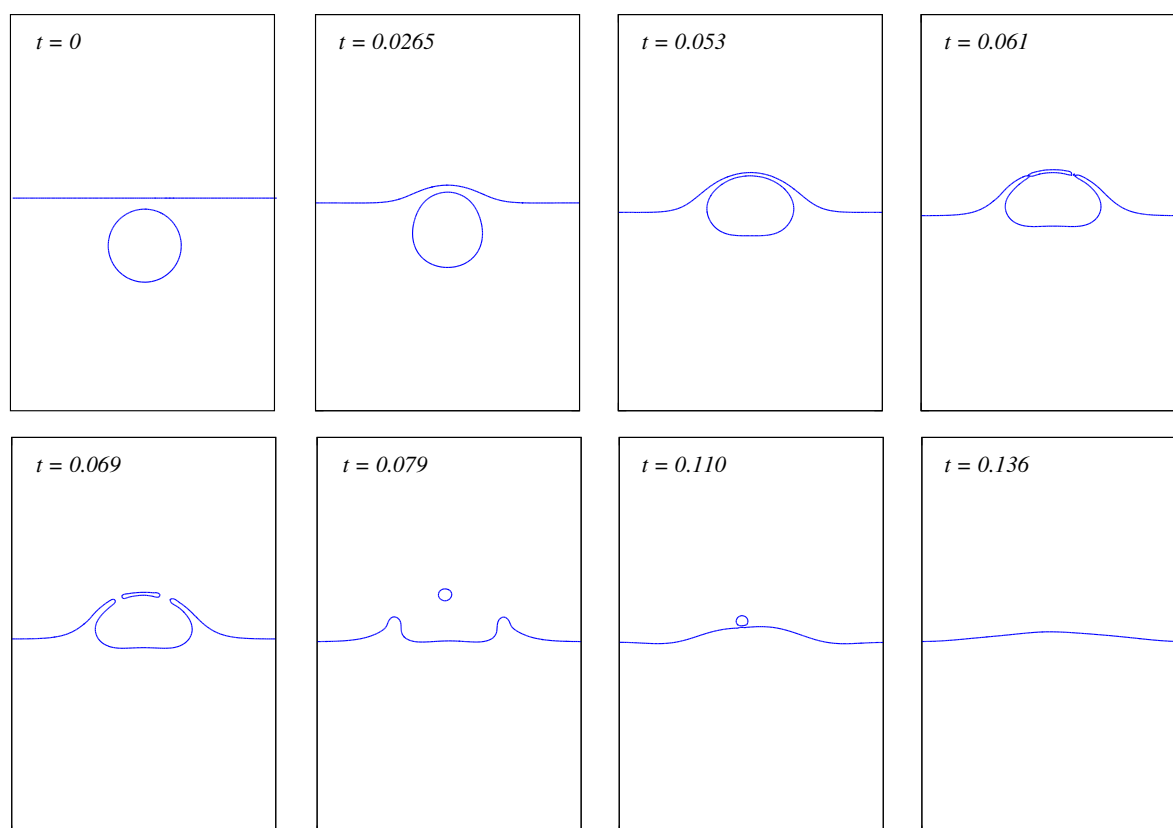


Figura 5: Evolución de la burbuja ascendente hacia una superficie libre para observar el fenómeno de ruptura.

$$\gamma = 0,2, \quad r_\rho = 25, \quad r_\mu = 20,$$

$$\delta t = 0,001, \quad c_{es} = 0,05, \quad c_{up} = 0,1$$

En la figura 6 se muestran los resultados a diferentes tiempos. Como se puede observar, la burbuja inferior comienza a penetrar en la cavidad que se forma en la burbuja superior. Los resultados muestran gran similitud con los presentados en [Marchandise et al. \(2007\)](#). En este caso, no tiene sentido continuar la simulación más allá del tiempo mostrado en la figura, debido a que con la resolución empleada no se pueden capturar las importantes deformaciones que sufre la interfase especialmente en la parte inferior de las burbujas.

5. CONCLUSIONES

En este trabajo se estudian diversas cuestiones relacionadas con el tratamiento de la fuerza de tensión superficial en formulaciones de elementos finitos donde se emplea el método de level set para el seguimiento de una interfase móvil. En primer lugar se formula el problema matemático completo y su discretización por el método de elementos finitos. La tensión superficial se incluye mediante una aproximación del tipo Laplace–Beltrami para la curvatura con lo cual se puede imponer en forma natural la condición de contorno GNBC para el tratamiento de la línea de contacto. Se estudió el problema académico de una burbuja inmersa en un fluido y se compararon los resultados numéricos con otros hallados en la literatura. En este caso particular se muestra que el número de capilaridad se mantiene esencialmente constante considerando

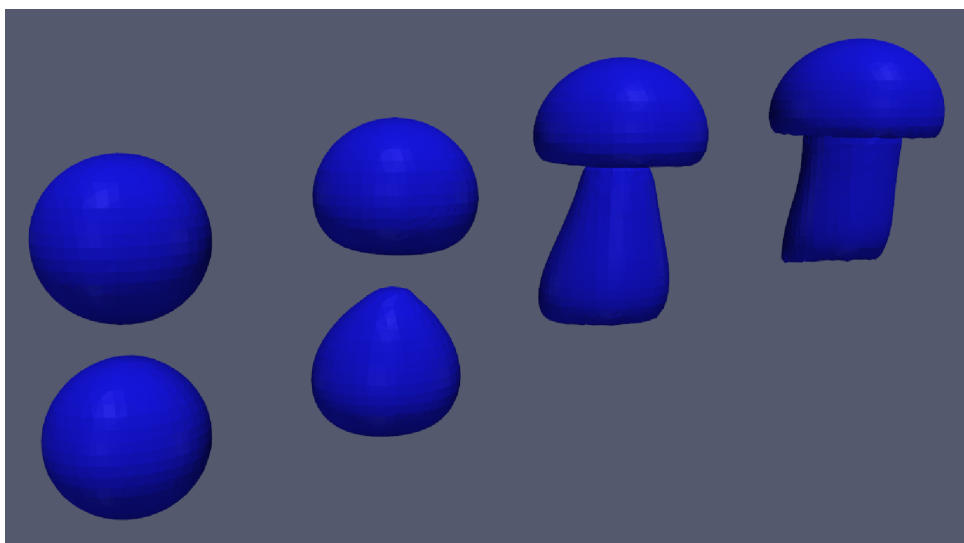


Figura 6: Evolución de las dos burbujas ascendentes. Las soluciones a diferentes tiempos son apartadas entre sí por claridad.

diferentes valores del número de Laplace. Para este problema académico, se analizaron además varias formas de imponer la fuerza de tensión superficial y detectar la interfase. De esta forma es posible apreciar como el desbalance de fuerzas en una poligonal cerrada da origen a velocidades espurias de diferente magnitud según la forma en que se computa la tensión superficial. La formulación numérica presentada es luego empleada para resolver varios problemas hallados en la literatura. Por un lado se estudió el problema del ángulo de contacto para una gota apoyada sobre una superficie, para mostrar el efecto de la condición GNBC, la cual es de simple implementación. Finalmente se mostraron resultados numéricos involucrando deformaciones severas de la interfase.

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 CMAME*, 2009.
- Ausas R.F., Buscaglia G.C., y Dari E.A. A mass-preserving geometry-based reinitialization method for the level set function. *Serie Mecánica Computacional*, XXVII:13–32, 2008.
- Balay S., Gropp W., McInnes L., y Smith B. *Petsc users manual*. Argonne National Laboratory, 2003.
- Bellet M. Implementation of surface tension with wall adhesion effects in a three-dimensional finite element model for fluid flow. *Commun. Numer. Meth. Engng.*, 17:563–579, 2001.
- Belytschko T., Moës N., Usui S., y Parimi C. Arbitrary discontinuities in finite elements. *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 50:993–1013, 2001.
- Brackbill J., Kothe C., y Zemach D. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 100(2):335–354, 1992.
- Chang Y., Hou T., Merriman B., y Osher S. A level set formulation of eulerian capturing

- methods for incompressible fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 124:449–464, 1996.
- Chessa J. y Belytschko T. A extended finite element method for two-phase fluids. *Journal of Applied Mechanics*, 70:10–17, 2003.
- Codina R. A stabilized finite element method for generalized stationary incompressible flows. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 190:2681–2706, 2001.
- Cummins S., Francois M., y Kothe D. Estimating curvature from volume fraction. *Computers and Structures*, 83:425–434, 2005.
- Dettmer W. y Perić D. A computational framework for free surface fluid flows accounting for surface tension. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 195:3038–3071, 2006.
- Dettmer W., Saksono P., y Perić D. On a finite element formulation for incompressible Newtonian fluid flows on moving domains in the presence of surface tension. *Commun. Numer. Meth. Engrg.*, 19:659–668, 2003.
- 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.
- Gerbeau J.F. y Lelievre T. Generalized navier boundary condition and geometric conservation law for surface tension. *Raport de recherche, Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique*, 6551, 2008.
- Gilbarg D. y Trudinger N. *Elliptic partial differential equations of second order*. Springer-Verlag, Berlin, Second edition, 1983.
- Gross S. y Reusken A. An extended pressure finite element space for two-phase incompressible flows with surface tension. *Journal of Computational Physics*, 224:40–58, 2007a.
- Gross S. y Reusken A. Finite element discretization error analysis of a surface tension force in two-phase incompressible flows. *SIAM J. Numer. Anal.*, 45:1679–1700, 2007b.
- Kothe D., Rider W., Mosso S., Brock J., y Hochstein J. Volume tracking of interfaces having surface tension in two and three dimensions. *AIAA*, 96-0859.
- 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., Chevaugnon 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.
- 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.
- Olsson E., Kreiss G., y Zahedi S. A conservative level set method for two phase flow II. *Journal of Computational Physics*, 225:785–807, 2007.
- Popinet S. y Zaleski S. A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 30:775–793, 1999.
- Saksono P. y Perić D. On finite element modelling of surface tension: Variational formulation and applications - part I: Quasistatic problems. *Comput. Mech.*, 38:265–281, 2006a.
- Saksono P. y Perić D. On finite element modelling of surface tension: Variational formulation and applications - part II: Dynamic problems. *Comput. Mech.*, 38:265–281, 2006b.
- Shepel S. y Smith B. New finite-element/finite-volume level set formulation for modelling two-phase incompressible flows. *Journal of Computational Physics*, 218:479–494, 2006.
- Shin S. y Juric D. Modelling three-dimensional multiphase flow using a level contour reconstruction method for front tracking without connectivity. *Journal of Computational Physics*, 180:427–470, 2002.

- Tezduyar T., Behr M., y Liou J. 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. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 94:339–351, 1992a.
- Tezduyar T., Behr M., y Mittal S. 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. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 17:563–579, 1992b.
- Tornberg A.K. y Engquist T. A finite element based level-set method for multiphase flow applications. *Computing and Visualization in Science*, 3:93–101, 2000.
- Williams M., Kothe D., y Puckett E. *Fluid dynamics at interfaces. Chapter 23. Accuracy and convergence of continuum Surface-Tension models*. Cambridge University Press, 1999.