

UNA ESTRATEGIA DE ACOPLAMIENTO CONSERVATIVA Y MONÓTONA PARA MALLAS NO COINCIDENTES EN PROBLEMAS MULTIFÍSICA PARTICIONADOS

Pablo S. Vera^{b,a}, Fabrizio J. Piva^{b,a}, Gustavo Ríos Rodríguez^a, Luciano Garelli^a y Mario A. Storti^a

^a*Centro de Investigación de Métodos Computacionales (CIMEC), Colectora Ruta Nacional N° 168, Km 0, Paraje El Pozo, 3000 Santa Fe, Argentina, cimec@cimec.unl.edu.ar, <http://www.cimec.santafe-conicet.gov.ar>.*

^b*Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas (FICH), Universidad Nacional del Litoral, Ruta Nacional N° 168 - Km 472,4, 3000 Santa Fe, Argentina, fich@unl.edu.ar, <http://www.fich.unl.edu.ar/>*

Palabras Clave: algoritmo de proyección conservativa, interacción fluido estructura, mallas no coincidentes, preservación de monotonidad y positividad de la solución.

Resumen. Las simulaciones numéricas de problemas multifísica se han vuelto populares en una gran cantidad de aplicaciones ingenieriles, tales como las simulaciones de problemas de interacción fluido-estructura. Como la complejidad de tales simulaciones ha aumentado debido a la introducción de otros fenómenos físicos, como los termodinámicos y los acústicos, es conveniente considerar estrategias de solución particionadas con el fin de reutilizar algoritmos (denominados solvers) específicos son capaces de resolver tales problemas independientemente, sin introducir mayores modificaciones a los códigos. En éste escenario, es deseable poder utilizar diferentes discretizaciones para cada subdominio del problema. Sin embargo, esto introduce la necesidad de proyectar soluciones desde la interfaz de un subdominio a otro, para transferir los desplazamientos y velocidades de los contornos de los subdominios y sincronizar los solvers. Por lo tanto, en este trabajo un esquema de proyección monótono y conservativo es introducido y utilizado para acoplar un solver computacional de dinámica de fluidos y uno de dinámica de estructuras. La precisión y consistencia, así como también las propiedades de conservación y monotonidad, serán evaluadas sobre dominios 2D cuyas interfaces de interacción son 1D. Finalmente se hará un análisis de las fortalezas y debilidades presentes en el algoritmo de proyección de soluciones.

1. INTRODUCCIÓN

La resolución de problemas multifísica, tanto académicos como industriales, cada vez más complejos y con mayor grado de detalle, ha llevado a que las soluciones numéricas sean cada vez más frecuentes, requiriendo métodos específicos para el acoplamiento de los dominios intervinientes. Una de las ramas de la multifísica involucra a los fenómenos de interacción fluido-estructura (o FSI, por *fluid-structure interaction*) los cuales abarcan un amplio conjunto de conceptos, tanto de las técnicas puramente numéricas, como de los conocimientos teóricos asociados a los campos de la fluido dinámica y la mecánica estructural. En este sentido, a partir de los años '90, cada vez más investigadores y desarrolladores de soluciones ingenieriles se volcaron al estudio de dichos fenómenos, incorporando en la rama FSI todos los conocimientos adquiridos individualmente en los campos Computational Fluid Dynamics (CFD) y Computational Structure Dynamics (CSD). Si bien para tal época estas dos ramas ya contaban con *solvers* CFD/CSD capaces de representar diversos fenómenos físicos complejos, no existían métodos que pudieran vincular las capacidades de resolución de ambas ramas para simular problemas multifísica, es decir donde la estructura y el fluido interactúan a través de sus respectivos contornos. Dicha zona de interacción se define comúnmente como *interfaz de acoplamiento*.

Asimismo, hoy en día existen muchas formas de simular computacionalmente la interacción entre una estructura y un fluido. Las técnicas mayormente estudiadas son las de acoplamiento *monolítico* (Garelli, 2011, p. 29) y acoplamiento *particionado* (Gatzhammer, 2014). La principal diferencia entre ambas es que la primera consiste en una aproximación que aplica un único método de discretización al problema de FSI en su conjunto, utilizando un único software de resolución para resolver un sistema de ecuaciones de manera simultánea; la mayor desventaja en este caso, radica en que la matriz del sistema puede estar mal condicionada debido a la diferencia de rigidez y discretización del fluido y la estructura. Sumado a ello, el esquema monolítico puede ser matemáticamente inmanejable o su implementación puede ser una tarea muy laboriosa; además la formulación se alteraría significativamente si diferentes modelos de estructura y fluidos fueran considerados (Garelli, 2011; Hron y Turek, 2006).

Por otra parte, la técnica de solución que utiliza un esquema particionado propone reutilizar solvers de CFD y CSD ya existentes, los cuales se convierten en subprogramas que son llamados desde un programa máster que gestiona las aplicaciones multidisciplinarias, así como la transferencia de información en la interfaz de acoplamiento entre los códigos (como por ejemplo, las condiciones de borde, las coordenadas, etc.).

Teniendo en cuenta lo anteriormente mencionado, en el resto del trabajo se desarrollará y analizará numéricamente técnicas y conceptos aplicados al método de solución particionado, para resolver el problema de la transferencia de información entre los códigos en la interfaz común a ambos dominios. Sumado a esto, cuando las variables intervinientes (por ejemplo, presión, densidad, velocidad, etc.) contienen discontinuidades finitas de tipo salto o altos gradientes en la zona de interacción entre el fluido y la estructura, los métodos tradicionalmente utilizados para la transferencia de datos entre mallas no coincidentes, pueden arribar a soluciones que no son capaces de aproximar fielmente dichos saltos, ya que en tales casos generan oscilaciones (*over/undershoots*) espurias en las cercanías de las discontinuidades, como se puede observar en el caso de ejemplo presentado en la fig. (1).

La presencia de estos *over/undershoots* indica que nuevos máximos y mínimos que no estaban presentes en la solución original se encuentran en la solución proyectada. A causa de ello, los estados que solamente tienen sentido físico cuando sus valores son positivos (como por ejemplo la presión o la densidad), dejan de tenerlo cuando se vuelven negativos, produciendo

Ejemplo de ausencia de monotonicidad y positividad en la proyección

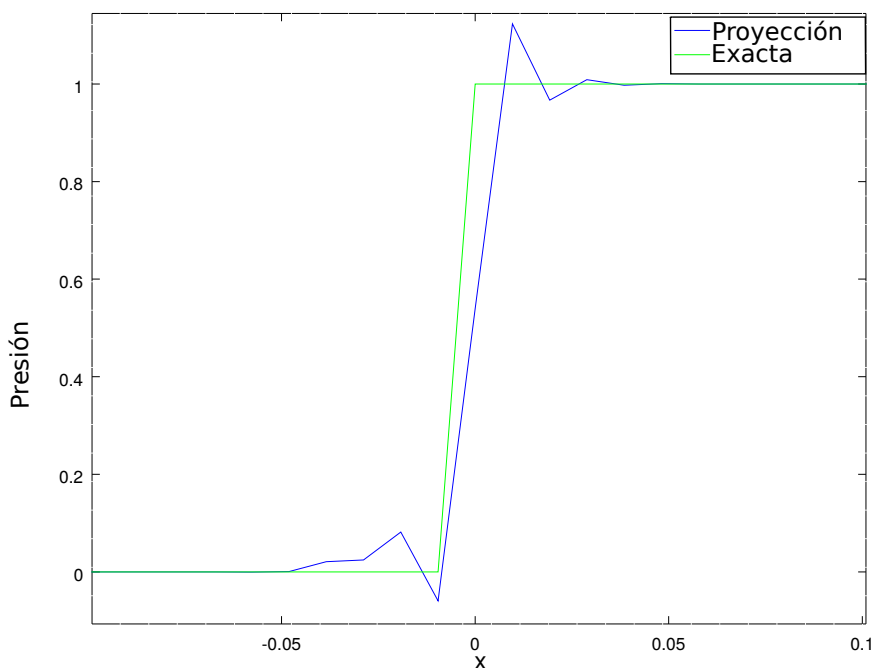


Figura 1: Presencia de *over/undershoots* en el estado proyectado.

una interrupción en la simulación. Por esta razón, en la metodología propuesta en el presente trabajo, utilizaremos técnicas de proyección de soluciones tradicionales en FSI junto con un método de corrección de las mismas, denominado *Flux-Corrected Transport (FCT)*, para asegurar la positividad (ausencia de valores negativos espurios) y la monotonicidad (es decir, asegurar la ausencia de *over/undershoots* en la solución proyectada).

Finalmente, todos los análisis se realizarán sobre dominios 2D, involucrando interfaces 1D. En la figura 1 puede observarse una proyección realizada de la presión entre mallas no coincidentes, presentando los problemas de ausencia de monotonicidad y positividad simultáneamente.

2. HISTORIA Y GESTACIÓN DE FCT

Durante la década de 1960 diversos investigadores se centraron en la mejora de los modelos numéricos existentes, para aproximar de manera confiable las soluciones a las ecuaciones que modelan el comportamiento de un fluido, denominadas *ecuaciones de Navier-Stokes*. Algunas de tales ecuaciones son (consultar (Hirsch, 2007, cap. 1) para una deducción detallada de las mismas):

1. Ecuación de *conservación de la masa*: Sea $\rho(\mathbf{x}, t)$ la densidad de masa de un fluido definida dentro del volumen $\Omega(t)$. Esta ecuación establece que la tasa de cambio total de la masa contenida en $\Omega(t)$ debe ser siempre nula (ver figura 2). Matemáticamente esto significa que la derivada material de la cantidad total de masa debe ser nula para todo

instante de tiempo t :

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \left[\int_{\Omega(t)} \rho(\mathbf{x}, t) d\Omega \right] &= \int_{\Omega(t)} \frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} d\Omega \\ &= \int_{\Omega(t)} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) d\Omega \\ &= 0 \end{aligned} \quad (1)$$

donde $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ es la velocidad del fluido en un punto \mathbf{x} de Ω y en un instante t . La ecuación (1) debe ser nula para cualquier volumen $\Omega(t)$ arbitrario y por lo tanto es igualmente válido expresarla de la siguiente manera:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (2)$$

Esta ecuación modela el comportamiento de los fluidos *compresibles e incompresibles*. Sin embargo, en el último caso ρ es constante dentro del volumen Ω y la ecuación (2) se ve reducida a la siguiente expresión:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (3)$$

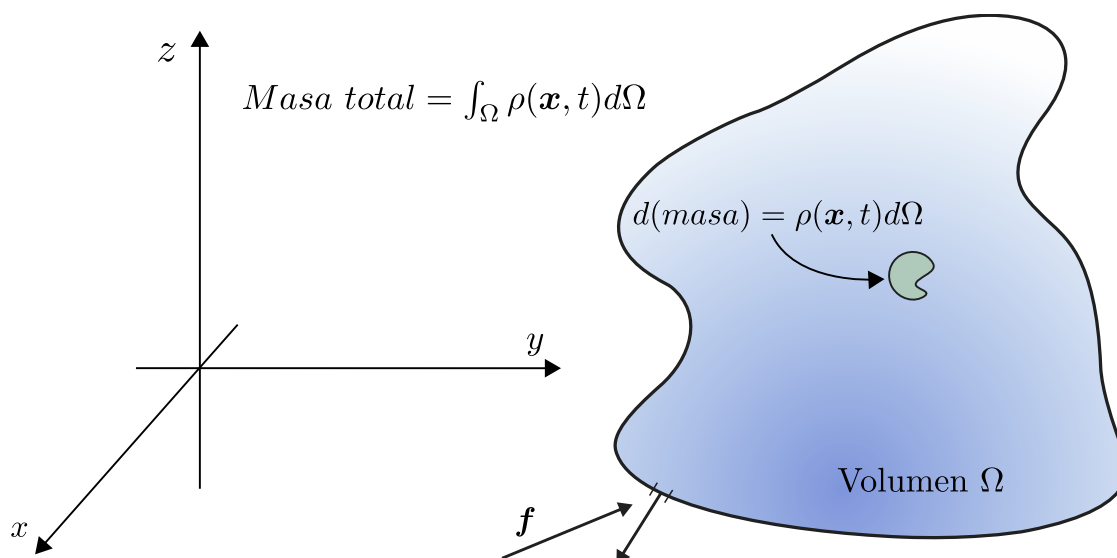


Figura 2: Volumen definido por Ω con densidad de masa ρ , bajo el efecto de una fuerza externa \mathbf{f} .

2. Ecuación de *conservación del momento o la cantidad de movimiento*: Esta ecuación establece que dentro del volumen de fluido Ω debe conservarse la cantidad total de movimiento. La ecuación diferencial parcial que modela este hecho para un medio incompresible es:

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + (\rho \mathbf{v}) \cdot (\nabla \mathbf{v}) = \mu \nabla^2 \mathbf{v} + \rho \mathbf{f} - \nabla p \quad (4)$$

donde $p(\mathbf{x}, t)$ es la presión, μ es el coeficiente de viscosidad y \mathbf{f} es una fuerza externa que se aplica al volumen Ω . Cuando el coeficiente de viscosidad μ es nulo, el modelo se convierte en la ecuación de movimiento de Euler.

De la ecuación (2) se puede obtener la ecuación de advección pura, es decir la ecuación de sólo transporte donde una determinada densidad de masa es transportada por el efecto de un campo de velocidad \mathbf{v} . Cuando estamos trabajando sólo en una dimensión y con velocidad constante, la ecuación de transporte presenta la siguiente forma

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -v \frac{\partial \rho}{\partial x} \quad (5)$$

En la ecuación (5) hay que tener en cuenta que la presencia de derivadas convectivas, junto con velocidades no constantes, es lo que hace a estas ecuaciones difícil de resolver numéricamente en más de 2 dimensiones (Kuzmin et al., 2012, cap. 1). El hecho de considerar a la velocidad como una constante disminuye la complejidad a la hora de resolver tal ecuación en una dimensión.

Diversos esquemas numéricos tales como diferencias finitas, elementos finitos, características, cuasipartículas y métodos espectrales (Kuzmin et al., 2012, p. 2) han surgido desde hace unos 30 años aproximadamente para poder resolver de la manera mas fehaciente posible las ecuaciones anteriormente mencionadas. La formulación mas intuitiva para encontrar una aproximación por diferencias finitas a una ecuación diferencial, en una malla con espaciado uniforme, consiste en expandir las derivadas en series de Taylor, con todas las variantes que ello implica (centradas, hacia adelante, hacia atrás). Esta forma de aproximación tiene algunas fortalezas, entre lo que se puede mencionar: sencillez, facil asociación con las ecuaciones diferenciales, precisión en problemas con perfiles que varían muy poco (es decir, aquellos que no poseen discontinuidades), facilidad de análisis de amplitud y error de fase mediante la técnica de Von-Neumann¹, entre otras. De todos modos, es importante destacar que tiene algunas desventajas considerables, como ser:

- Funciona solo cuando el concepto de "orden" tiene sentido, es decir, cuando la escala de variación es muy grande comparado con el espaciado de la malla, de tal forma que el truncamiento de los términos de alto orden de la aproximación de Taylor sea justificada. Esto puede verse reflejado matemáticamente en el número de Courant $\epsilon = v \frac{\delta t}{\delta x}$.
- Si el esquema en diferencias es de alto orden, la solución aproximada oscila frente a discontinuidades de tipo salto. Este hecho es conocido como efecto de Gibbs en el intervalo discreto (o fenómeno de Gibbs cuando se trata de la transformada de Fourier), que contribuye a aumentar el error de aproximación en las vecindades de discontinuidades con altos gradientes.
- Si el esquema en diferencias es de bajo orden, la solución aproximada introduce mayor *viscosidad numérica*² en comparación a la que se introduce en los esquemas numéricos de alto orden, lo que se traduce en curvas aproximantes suaves en puntos donde precisamente se requiere respetar las altas variaciones (sharpness).

¹Técnica desarrollada por John Von-Neumann en la primera mitad del siglo XX, para estudiar la estabilidad de los métodos numéricos basados en diferencias finitas utilizando la transformada de Fourier (Hirsch, 2007, cap. 7).

²El término de *viscosidad numérica* fue utilizado e impuesto por John Von-Neumann para referirse a una cantidad numérica artificial, generada por el error de truncamiento propio de los métodos de diferencias finitas (Hirsch, 2007, p. 293).

Una gran cantidad de esquemas numéricos surgieron a partir de esta técnica, tales como Leapfrog, Lax-Friedrichs, Lax-Wendroff, entre otros; cada uno con una forma de aproximar las derivadas de manera diferente. Sin embargo, el punto clave radica en que la aproximación por series de Taylor falla porque no asegura *positividad*, una propiedad a veces denominada monotonidad (Kuzmin et al., 2012, cap. 1). Este hecho junto con la introducción de difusión numérica motivaron a la gestación de FCT. A continuación se explicarán los fundamentos básicos de la misma.

3. FUNDAMENTOS DE FCT Y FORMULACIÓN MATEMÁTICA

Un algoritmo FCT consiste básicamente en tres componentes bien diferenciados:

1. Un algoritmo que se comporta como un esquema numérico de alto orden cuando los flujos numéricos son suaves.
2. Un algoritmo que se comporta como un esquema numérico de bajo orden cuando los flujos son carentes de suavidad.
3. Un limitador de flujo el cual calcula los pesos asignados a los flujos de alto y bajo orden en varias regiones del campo de flujo.

Estos componentes son las bases para el diseño de un algoritmo de este tipo. Si bien el método nació para resolver las ecuaciones de la fluidodinámica, su primer formulación surgió para resolver la ecuación de transporte (5) que se materializó en el algoritmo denominado SHASTA a mediados de 1971. El algoritmo tiene como principal objetivo obtener soluciones no solo monótonas sino también carentes de oscilaciones, combinando conjuntamente las ventajas de los esquemas numéricos de bajo y alto orden. Una característica importante de este algoritmo es que trabaja sobre soluciones dependientes del tiempo, por lo que para obtener la solución del instante $(n + 1)$ se utiliza la solución obtenida previamente en el instante n .

En este punto no debe perderse de vista que el principal objetivo es aplicar FCT al problema de proyectar una solución de una malla a la otra; lo cual implica que la variable temporal no será utilizada como en la concepción original de FCT, sino que la solución de la malla desconocida se obtendrá a partir de la malla conocida. Asimismo, dado que FCT necesita soluciones de alto y bajo orden, a continuación se explicará cómo se calcularán estas soluciones.

3.1. Cálculo de la solución de alto orden: proyección conservativa

Consideremos los dominios discretos Π_A y Π_B , cuyas interfaces están conformadas por las mallas Γ_A con n_A nodos, y Γ_B con n_B nodos, con $\Gamma_A \neq \Gamma_B$ (ver fig. 3). Cuando se conocen los estados \mathbf{u}^A en los nodos de la malla A y se desconocen en la B , estos sólo aproximan puntualmente el valor verdadero de \mathbf{u} ; sin embargo, desde el enfoque FEM es posible aproximar el valor de \mathbf{u} en un determinado punto \mathbf{x} de la interfaz mediante la función que se define de la siguiente manera

$$\mathbf{u}^\alpha(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n_\alpha} N_i^\alpha(\mathbf{x}) \mathbf{u}_i^\alpha \quad (6)$$

donde $\alpha \in \{A, B\}$ y N_i^α son las funciones de forma de cada contorno discreto Γ_α .

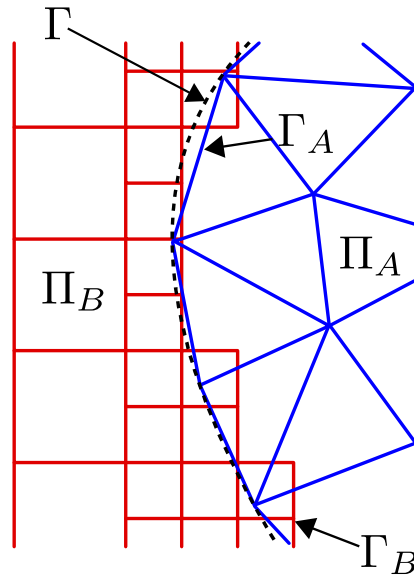


Figura 3: Ejemplo de interfaz continua y discreta.

Cuando los contornos no son coincidentes, no es posible asegurar que exista igualdad entre $\mathbf{u}^A(\mathbf{x})$ y $\mathbf{u}^B(\mathbf{x})$ cuando $\mathbf{x} \in \Gamma_A$ o $\mathbf{x} \in \Gamma_B$. Sin embargo, en el caso continuo lo que realmente sucede es lo opuesto, es decir sobre todo el contorno Γ la siguiente igualdad es satisfecha exactamente

$$\mathbf{u}^B(\mathbf{x}) = \mathbf{u}^A(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma \tag{7}$$

Pero es posible utilizar un camino igualmente válido tanto para el caso continuo como para el caso discreto, debilitando la igualdad (7) mediante el Método de Residuos Ponderados (MRP). En este sentido, si en una malla se desconocen los estados, éstos pueden ser aproximados resolviendo el sistema de ecuaciones que genera MRP. Así, multiplicando cada lado de la ecuación (7) por un conjunto de funciones peso W_i e integrando a cada lado se obtiene la ecuación (8).

$$\int_{\Gamma} W_i(\mathbf{x})\mathbf{u}^B(\mathbf{x})d\Gamma = \int_{\Gamma} W_i(\mathbf{x})\mathbf{u}^A(\mathbf{x})d\Gamma \tag{8}$$

Con ello se logra una igualdad integral o ponderada, perdiendo precisión puntual entre los estados. Luego, si se aplica la ecuación discreta (6) junto con la formulación de Galerkin haciendo $W_i = N_i$ y se reacomodan los términos, se obtiene

$$\sum_{j=1}^{n_B} \left[\int_{\Gamma} N_i^B(\mathbf{x})N_j^B(\mathbf{x})d\Gamma \right] \mathbf{u}_j^B = \sum_{k=1}^{n_A} \left[\int_{\Gamma} N_i^A(\mathbf{x})N_k^A(\mathbf{x})d\Gamma \right] \mathbf{u}_k^A \tag{9}$$

esto puede escribirse en forma matricial como se observa a continuación

$$C_{BB}\mathbf{u}^B = C_{BA}\mathbf{u}^A \tag{10}$$

de esta manera, sólo queda por resolver el sistema para poder obtener \mathbf{u}^B .

Analizando la formulación de esta técnica, se espera que la solución proyectada no respete algunas propiedades como suavidad y/o preservación de la positividad. De esta manera, como la formulación matemática del método prioriza la conservación de las cantidades físicas en la interfaz (lo cual puede verse en la ec. (8)), grandes oscilaciones estarán presentes en la solución

obtenida por la aproximación conservativa (De Boer, 2008, p. 25). Por tal motivo es posible encontrar similitudes entre este tipo de proyección y los esquemas basados en diferencias finitas de alto orden utilizados en las técnicas CFD, donde a mayor orden de aproximación a las derivadas parciales, mayor será la cantidad de oscilaciones presentes en la solución final. Por lo tanto, de aquí en adelante, se hará referencia al método de proyección conservativa como un método de alto orden.

3.2. Acoplamiento y corrección de soluciones en FCT

Una vez definida la metodología para obtener la solución de alto orden, es posible aplicar la estrategia de corrección de soluciones FCT al problema de la proyección de estados. En este sentido, (Dmitri et al., 2010) propusieron una formulación de FCT para problemas de acoplamiento la cual restringe la diferencia entre la solución de alto orden U_i^h (obtenida en este caso mediante la proyección conservativa) y otra de bajo orden U_i^L . Debido a la naturaleza de ambas soluciones, la diferencia entre los valores nodales U_i^h y U_i^L debe descomponerse en la sumatoria de flujos numéricos ponderados (Dmitri et al., 2010, p. 8765):

$$m_i U_i^h = m_i U_i^L + \sum_{j \neq i} F_{ij}, \quad F_{ji} = -F_{ij} \quad (11)$$

junto con la definición de la matriz F_{ij} , dada por (Dmitri et al., 2010, p. 8775):

$$F_{ij} = m_{ij}(U_i^h - U_j^h) \quad (12)$$

en esquemas de diferencias finitas o volúmenes finitos, los coeficientes m_i son definidos como el volumen/área de la i -ésima celda. En FEM, m_i es la i -ésima entrada en la diagonal de la *matriz lumped*, que se forma a partir de la expresión $m_i = \sum_j m_{ij}$, donde m_{ij} es la matriz de masa obtenida al calcular las contribuciones elementales del contorno. Asimismo, la matriz lumped puede utilizarse como un método de proyección de soluciones de bajo orden para obtener U_i^L , debido a sus características difusivas que tienden a suavizar a la solución.

Si se analiza la ecuación (11) con detenimiento, recordando las características principales del método de proyección conservativa, puede arribarse a la conclusión de que la *matriz de flujo* F_{ij} toma valores distintos de cero en zonas de discontinuidades de tipo salto o de altos gradientes ya que en tales regiones U_i^h y U_i^L son significativamente diferentes; mientras que en zonas donde la solución a proyectar es suave, ambas soluciones se comportan de manera muy similar y los valores de F_{ij} tienden a cero. Es decir, por la definición de F_{ij} dada en la ecuación (12), se puede asegurar que ésta matriz mide el flujo del nodo j hacia el nodo i , preservando una naturaleza antidifusiva (hecho que se destaca en la figura 4). En éste mismo sentido, si se incluye tal definición en la ecuación (11) y se divide todo por m_i se observa lo siguiente:

$$\begin{aligned} U_i^h &= U_i^L + \sum_{j \neq i} \frac{m_{ij}}{m_i} (U_i^h - U_j^h) \\ &= U_i^L + \sum_{j \neq i} \frac{m_{ij}}{\sum_j m_{ij}} (U_i^h - U_j^h), \quad \text{donde } \sum_j \frac{m_{ij}}{\sum_k m_{ik}} = 1 \end{aligned} \quad (13)$$

Así, de la ecuación (13) se puede ver que U_i^h se compone de una solución de bajo orden, más la suma ponderada de los flujos de alto orden contenidos en la matriz F_{ij} . En adición, dado que $F_{ij} = -F_{ji}$, todos los flujos se cancelan simultáneamente al ser sumados. Esto físicamente se traduce en que las soluciones U^h y U^L conservan la masa total:

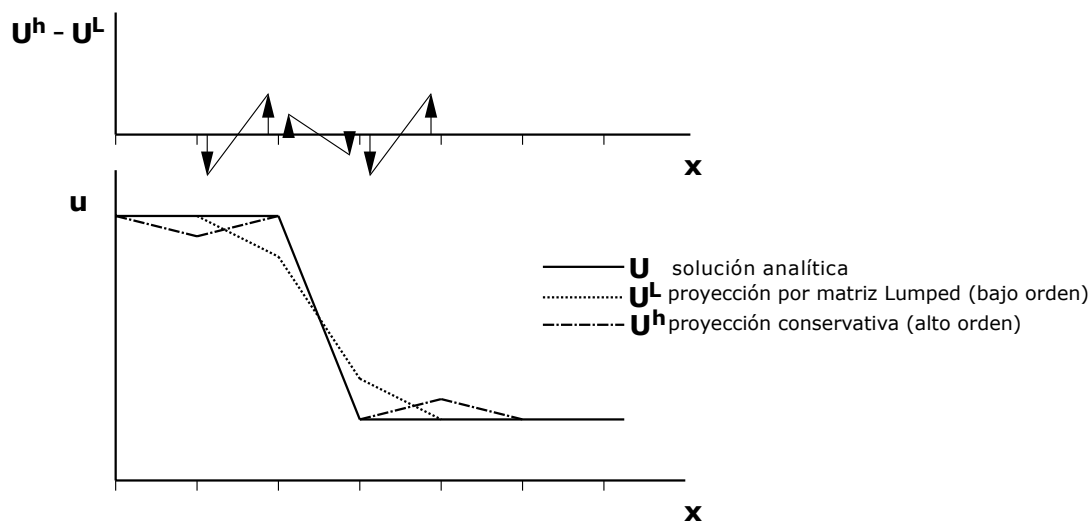


Figura 4: Naturaleza de $\frac{1}{m_i} \sum_{j \neq i} F_{ij}$ en base a las proyecciones de alto y bajo orden.

$$\sum_i m_i U_i^h = \sum_i m_i U_i^L \tag{14}$$

Mas aún, es posible modificar ligeramente la ecuación (11) para ajustar la magnitud de cada flujo sin cambiar el balance de masas. La manera mas sencilla de asegurar la monotonicidad es multiplicar todos los componentes de F_{ij} por un factor de corrección α_{ij} . El resultado, por supuesto, es una interpolación no lineal entre las aproximaciones de alto y bajo orden:

$$m_i U_i^{fct} = m_i U_i^L + \sum_{j \neq i} \alpha_{ij} F_{ij}, \quad \alpha_{ji} = \alpha_{ij} \tag{15}$$

La definición de $\alpha_{ij} \in [0, 1]$ garantiza no solo la conservación de variables sino también que la cantidad física proyectada se mantenga acotada entre el máximo y mínimo local de la solución no oscilatoria de bajo orden. Esta expresión es el corazón del método FCT aplicado a la proyección de soluciones, dado que vincula los 3 componentes principales que en conjunto forman un algoritmo FCT tal como se explicó al inicio de la sección. En la siguiente sección se desarrollará la naturaleza de la *matriz de corrección* α_{ij} .

3.3. Matriz de corrección α_{ij}

Esta matriz juega un rol preponderante en FCT aplicado a la proyección de soluciones en mallas no coincidentes, dado que establece en qué "cantidades" combinar las soluciones de alto y bajo orden en determinados puntos de la malla destino. Para arribar a la definición de cada elemento de la matriz de corrección es necesario, en primer lugar, definir cuáles son los valores máximos y mínimos locales permitidos para cada nodo. Para poder obtener tales valores se utiliza la solución de bajo orden U_i^l y luego, por cada nodo, se lleva a cabo la siguiente búsqueda (Löhner, Rainald, 2008, p.177–178):

$$U_i^{min} = \left\{ \begin{matrix} max \\ min \end{matrix} \right\} (U_{i-1}^l, U_i^l, U_{i+1}^l) \tag{16}$$

Una vez aproximados los mínimos y máximos para cada nodo de la malla, se realiza el siguiente proceso (Dmitri et al., 2010, p. 8779):

1. Utilizando los incrementos numéricos de la matriz de flujos F , se calculan todas las contribuciones positivas y negativas sobre cada nodo de la siguiente manera.

$$P_i^+ = \sum_{i \neq j} \max\{0, F_{ij}\}, \quad P_i^- = \sum_{i \neq j} \min\{0, F_{ij}\} \quad (17)$$

2. Con los mínimos y máximos locales obtenidos mediante la ecuación (16), calcular las diferencias que existen entre la solución de bajo orden y tales extremos locales.

$$Q_i^+ = U_i^{max} - U_i^l, \quad Q_i^- = U_i^{min} - U_i^l \quad (18)$$

3. Calcular las tasas entre las contribuciones positivas y negativas sobre el nodo i .

$$R_i^\pm = \begin{cases} \min\{1, m_i \frac{Q_i^\pm}{P_i^\pm}\} & \text{si } P_i^- < 0 < P_i^+ \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (19)$$

4. Finalmente, con los parámetros P, Q, R y U_{min}^{max} obtenidos para cada nodo es posible calcular α_{ij} como sigue.

$$\alpha_{ij} = \min\{R_{ij}, R_{ji}\}, \quad R_{ij} = \begin{cases} R_i^+, & \text{si } F_{ij} \geq 0 \\ R_i^-, & \text{si } F_{ij} < 0 \end{cases} \quad (20)$$

Cuando el estado almacenado en cada nodo es un vector o tensor, se puede optar calcular una matriz α_{ij} para cada variable. Por ejemplo, si se calculan presión (ρ), densidad (d), velocidad en la dirección x (v_x) y velocidad en la dirección y (v_y), entonces tendremos el siguiente conjunto de matrices de corrección de flujos:

$$\alpha_{ij} = \{\alpha_{ij}^\rho, \alpha_{ij}^d, \alpha_{ij}^{v_x}, \alpha_{ij}^{v_y}\} \quad (21)$$

Finalmente, utilizando la expresión de α_{ij} se corrigen los flujos F y aplicándolos sobre la solución de bajo orden U^l (a partir de la ecuación (15)) se obtiene la solución U^{fct} , la cuál es monótona y conservativa.

4. VALIDACIONES NUMÉRICAS

De esta forma, se analizará un caso de prueba en el que no hay funciones que definan la solución a proyectar, sino que ésta ha sido obtenida mediante mediciones simulaciones numéricas generas por el método FEM. Se trata de una simulación donde la superficie de interacción está conformada por la tobera de un cohete en contacto con el flujo de aire que se produce en el momento del despegue, donde se desean transferir: presión, densidad y campo de velocidad hacia las paredes de la tobera. Por último, se modificará ligeramente este caso de prueba, manteniendo la interfaz pero transfiriendo como solución una onda cuadrada que se desplaza axialmente a lo largo de la tobera.

4.1. Estudio de las proyecciones en la tobera de un cohete en el inicio del despegue

El presente caso de estudio, analizado en (Garelli et al., 2010), es de particular interés desde el punto de vista computacional, ya que debe utilizar solvers de fluidos y estructuras preexistentes de manera separada para poder calcular cantidades físicas de interés (presión, densidad y velocidades, en este caso) y proyectarlas de una malla hacia la otra. En particular, los pasos propuestos en (Garelli et al., 2010) para calcular y proyectar los estados en la simulación son los siguientes

1. Transferir el movimiento de la pared mojada del sólido hacia el fluido.
2. Actualizar la posición del contorno del fluido y la malla del mismo apropiadamente.
3. Avanzar el sistema del fluido calculando un nuevo campo de presiones.
4. Convertir el nuevo campo de presiones del fluido en una carga estructural.
5. Avanzar el sistema del sólido calculando los efectos de la carga del fluido.

Particularmente, en el presente trabajo se estudiará el paso intermedio existente entre el paso 4 y el 5, ya que para ejecutar el solver del sólido es necesario previamente transferir la solución desde el contorno del fluido hacia el del sólido. El resto de los pasos no serán analizados.

4.1.1. Geometría del problema

La tobera bajo análisis tiene una forma geométrica de campana, que es generada rotando una curva analítica que está por encima del eje x , dando como resultado una superficie de revolución 3D que puede observarse en la figura 5.

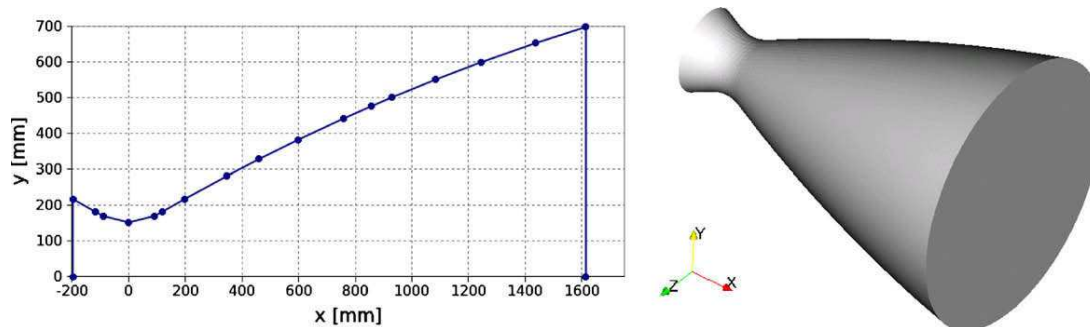


Figura 5: Línea de contorno y superficie de revolución.

A partir del modelo tridimensional, se generan dos mallas independientes, una para la discretización del fluido y otra para la estructura. Una malla con 334700 elementos de tetraedros es generada para el fluido con una interpolación lineal de las variables. Por otra parte, la malla de la estructura está formada por 59600 triángulos de base prismática como elementos. El resultado de ambas discretizaciones puede observarse en la figura 6.

Los datos relevantes respecto a la geometría de la misma son:

- Largo total: 1810 (mm).
- Diámetro de la garganta: 304 (mm).

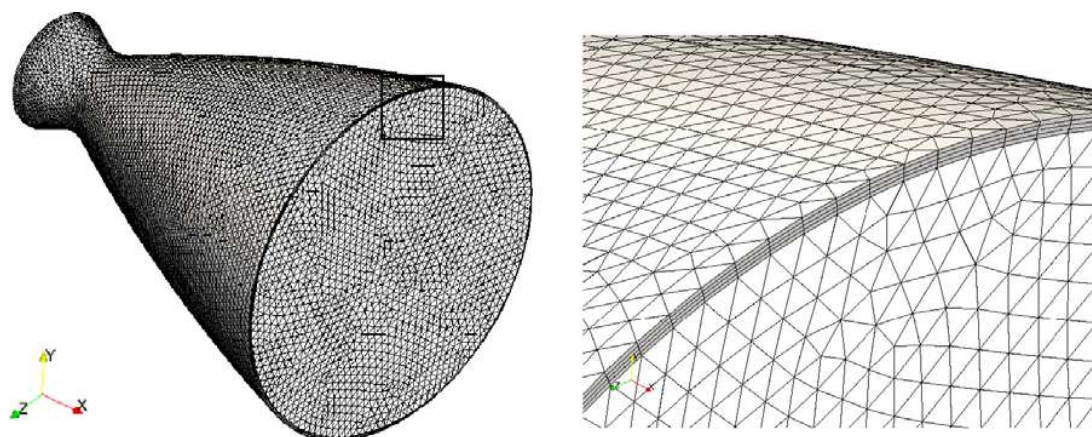


Figura 6: Discretización espacial del dominio.

- Diámetro de la salida: 1396 (mm).
- Tasa de área: $\epsilon = 21,1$.

Por último, es importante destacar que la interfaz sobre la que se calculará la interacción fluido-estructura estará conformada por: la última curva de puntos de discretización del fluido contenida en un corte axial sobre el plano xy del modelo 3D; tal curva está mas alejada del eje x y consiste en una sucesión de segmentos conectados consecutivamente y, por otro lado, la malla de interfaz de la estructura (que no está definida) por lo que se generará a partir de la del fluido de la siguiente manera:

1. A partir de la sucesión de puntos que conforma la malla de interfaz del fluido, se calcula un spline cúbico que pasa por dichos puntos.
2. Se elige un porcentaje de discretización para la estructura. Para este caso en particular, la estructura contendrá un dado porcentaje $P \in (0, 1)$ de la cantidad de nodos que posee la malla de interfaz del fluido. Matemáticamente esto quiere decir que $N_s \approx P \cdot N_f$.
3. Se discretiza el eje x en el intervalo $0 \leq x \leq 1,810$ tomando N_s puntos equiespaciados, almacenando estos puntos en un vector \mathbf{x}_s .
4. Se evalúa el spline cúbico del primer paso en los puntos del vector \mathbf{x}_s , obteniendo los valores de la ordenada \mathbf{y}_s .
5. Por último, a partir de los vectores \mathbf{x}_s e \mathbf{y}_s se construyen las matrices XNODE e ICONE.

De esta manera se garantiza que la malla de la estructura no posea una coincidencia nodal con su malla vecina y que la forma de campana original de la tobera sea respetada. Dicho esto, es posible proceder al cálculo de las proyecciones de las cantidades físicas. Las mallas de interfaz fluido-estructura definitivas pueden observarse en la figura 7, donde la del fluido se dibujó en línea sólida.

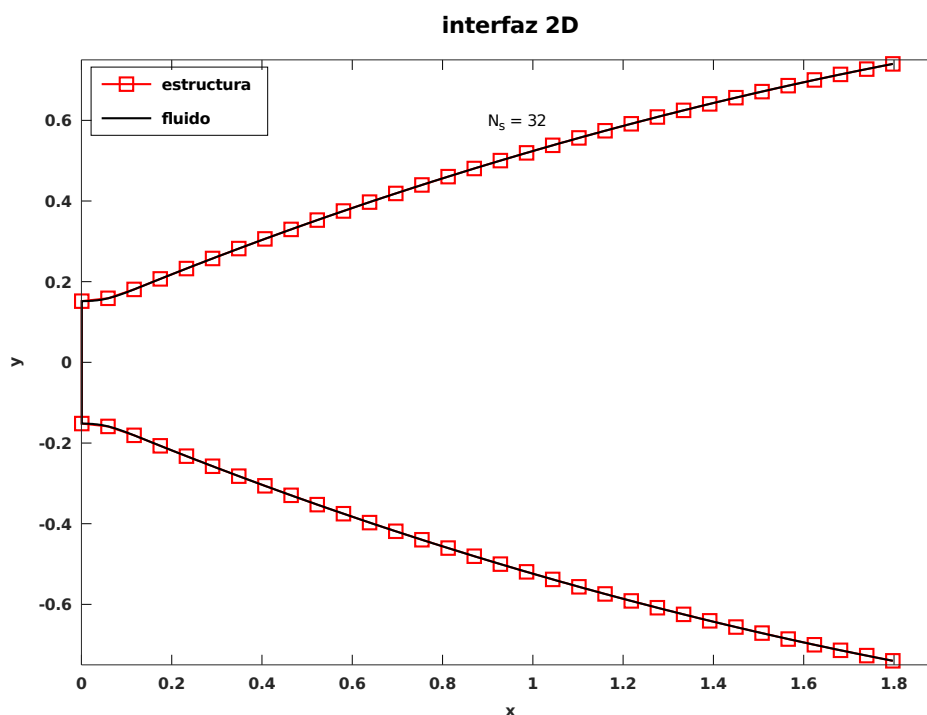


Figura 7: Mallas de interfaz fluido-estructura para el test de la tobera.

4.1.2. Análisis numérico de los resultados obtenidos

Con los detalles geométricos del dominio del problema ya conocidos, es posible comenzar con la descripción de los resultados obtenidos una vez aplicadas las diferentes técnicas de proyección de soluciones. Para estudiar la convergencia de los métodos se han establecido tres niveles de refinamiento diferentes para la malla de la estructura. De esta manera, la malla de la estructura se conforma tomando un porcentaje P de la cantidad de nodos del fluido, se tomarán los siguientes valores de P : $\{0,05; 0,1; 0,2\}$. El principal objetivo de ello es analizar la convergencia del método bajo diferentes escenarios, duplicando la densidad de nodos en la malla sobre la que se desconocen los estados.

Los estados conocidos, dados por $\{p, v, \rho\}$ y las respectivas proyecciones en distintos instantes de tiempo son los que se observan en las figuras (8, 9 y 10). En tales figuras, la malla de la estructura se conformó utilizando el 10 % de la cantidad de nodos de la malla del fluido.

Como puede observarse en las figuras, las variables a proyectar poseen características suaves en ausencia del frente de onda de choque y altos gradientes en las cercanías de la onda de choque. La razón por la cual se incluye la proyección del campo de velocidad es para analizar el comportamiento de los métodos ante la presencia de soluciones con grandes variaciones a lo largo del tiempo; esta aclaración es realizada porque generalmente, a la hora de proyectar soluciones en problemas de interacción fluido-estructura, sólo se desea proyectar el campo de presiones sobre el contorno de la estructura y luego calcular las cargas (fuerzas) que afectan a cada nodo de la misma.

Utilizando la ecuación (22) se calcula el error integral para cada nivel de refinamiento de la malla de la estructura. En la misma, las variables intervinientes son: $\hat{f}(x)$ es la función aproximante (es decir, la obtenida con el método de proyección), $f(x)$ es la solución analítica y Γ es

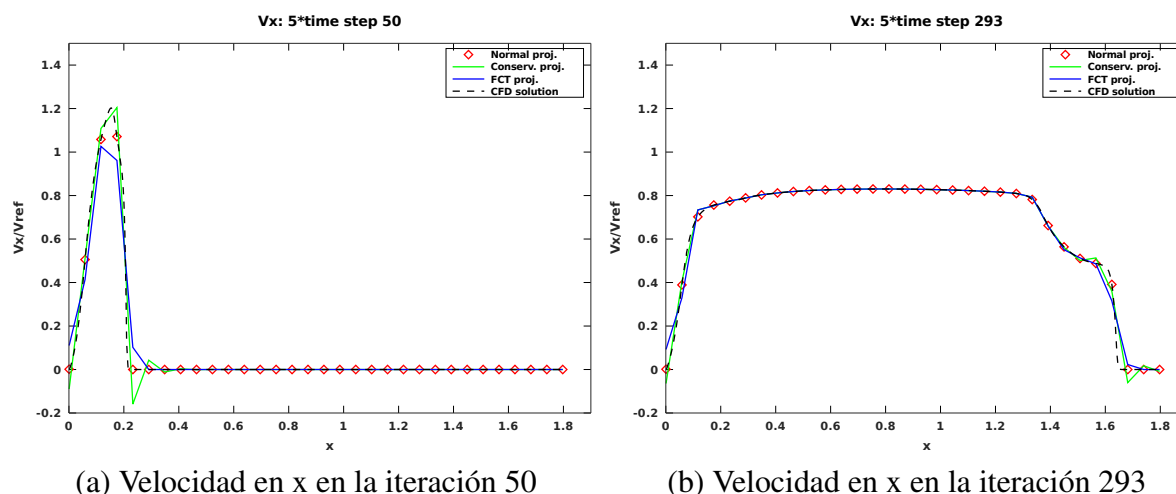


Figura 8: Curvas de solución y proyección de v_x sobre la interfaz de la figura 7.

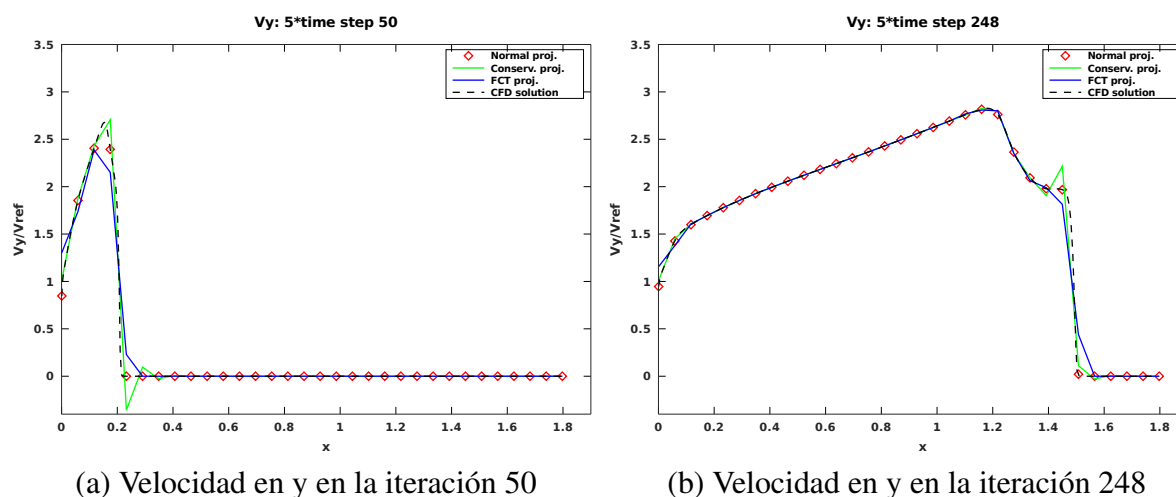


Figura 9: Curvas de solución y proyección de v_y sobre la interfaz de la figura 7.

la malla de la frontera sobre la cual se encuentran definidas \hat{f} y f .

$$EI = \left| \int_{\Gamma} \hat{f}(\mathbf{x}) d\Gamma - \int_{\Gamma} f(\mathbf{x}) d\Gamma \right| \quad (22)$$

Puede observarse que los resultados expuestos en la imagen 11 muestran una mejora del error integral cuando se duplica la densidad de nodos sobre la malla de la estructura. De hecho, la tendencia general es que, al aumentar la cantidad de nodos en la interfaz de la estructura, los errores presentan una menor variabilidad al rededor de una magnitud de error cada vez menor. Por lo tanto, el ajuste de las curvas de proyección tiende a ser más preciso.

En este mismo contexto, también es posible destacar que la proyección FCT posee características de conservación similares al método conservativo, pero con dos ventajas adicionales: la proyección FCT no presenta oscilaciones espurias y, por lo tanto, tampoco crea valores negativos sin significado físico. Este hecho puede confirmarse en la figura 12.

En la siguiente sección se analizará el mismo caso de prueba en lo que concierne a la interfaz, pero proyectando una solución numérica analítica como es el caso de una onda cuadrada.

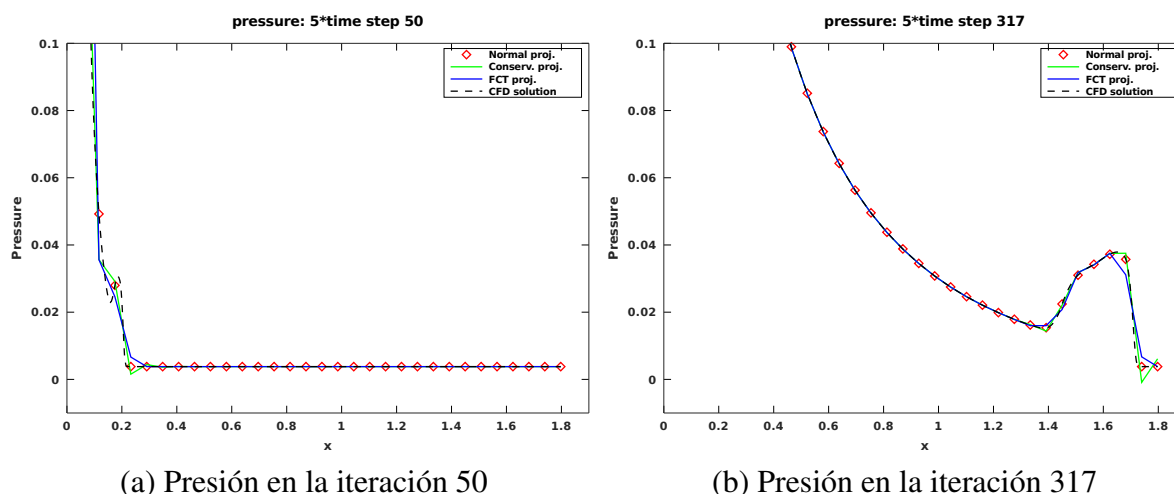


Figura 10: Curvas de solución y proyección de p sobre la interfaz de la figura 7. En este caso, se ha graficado un acercamiento de la solución para destacar el salto de presión que viaja sobre el contorno del dominio del problema.

4.2. Test alternativo: propagando una onda cuadrada

Utilizando la misma geometría para las interfaces del fluido y la estructura, se puede extender el estudio del comportamiento de las técnicas sobre una onda cuadrada, la cual simula un salto de presión repentino en el dominio del fluido desplazándose desde el inicio de la tobera hasta la sección de escape de la misma.

4.2.1. Características de la solución

Básicamente el test es puramente analítico, ya que se estudiará la proyección de una onda cuadrada que se desplaza sobre las paredes de la tobera. La ecuación de la onda que se desplaza está dada por

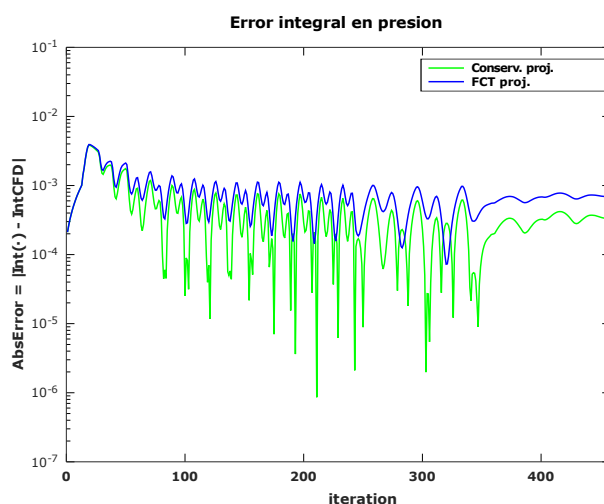
$$\delta(x) = \begin{cases} 1 & 0 \leq x \leq \Delta \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (23)$$

donde Δ es el ancho del escalón de la onda cuadrada. Para incluir la traslación de la misma en función del número de iteración actual, utilizamos la siguiente ecuación para la velocidad de la misma:

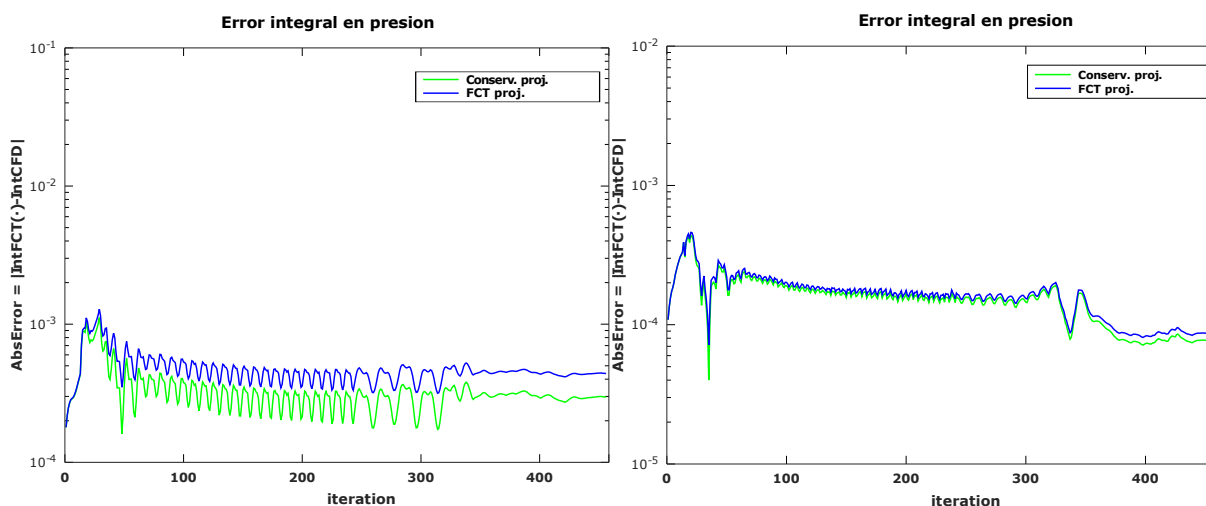
$$v = \frac{L - \Delta}{it_total} \quad (24)$$

donde L es la longitud total de la tobera y it_total representa el número máximo de iteraciones en las que se desea que la onda cuadrada llegue al extremo final de la tobera. Con estas ecuaciones, la onda trasladada en la iteración it es: $\delta(x - it \cdot v)$. En particular, para el presente trabajo los valores de Δ y it_total son:

- $\Delta = 0,35$.
- $it_total = 2279$.
- $L = 1,7975$.



(a) 5 % de refinamiento



(b) 10 % de refinamiento

(c) 20 % de refinamiento

Figura 11: Curvas de error integral para cada porcentaje de refinamiento P .

■ $v = 6,35 \cdot 10^{-4}$.

A continuación se presentarán los resultados de utilizar cada uno de los métodos de proyección de soluciones.

4.2.2. Análisis numérico de los resultados obtenidos

Al igual que como se explicó en la sección 4.1.2, se estudiará la convergencia de los métodos de proyección para los mismos valores de P , es decir, $P: \{0,05; 0,1; 0,2\}$. En este caso, se ha proyectado la presión p cuya distribución se ve representada por la ecuación (23), y se ha escogido el mismo valor de P para discretizar la estructura, es decir $P = 0,1$. El resultado obtenido puede observarse en la figura 13.

Por su parte, a medida que se refina sucesivamente la malla de la estructura con los valores de P , se obtienen las medidas estadísticas del error integral de la figura 14.

Finalmente puede concluirse que el resultado obtenido es muy similar al test de la sección 4.1.2, donde la proyección FCT posee resultados superiores en términos de conservación y

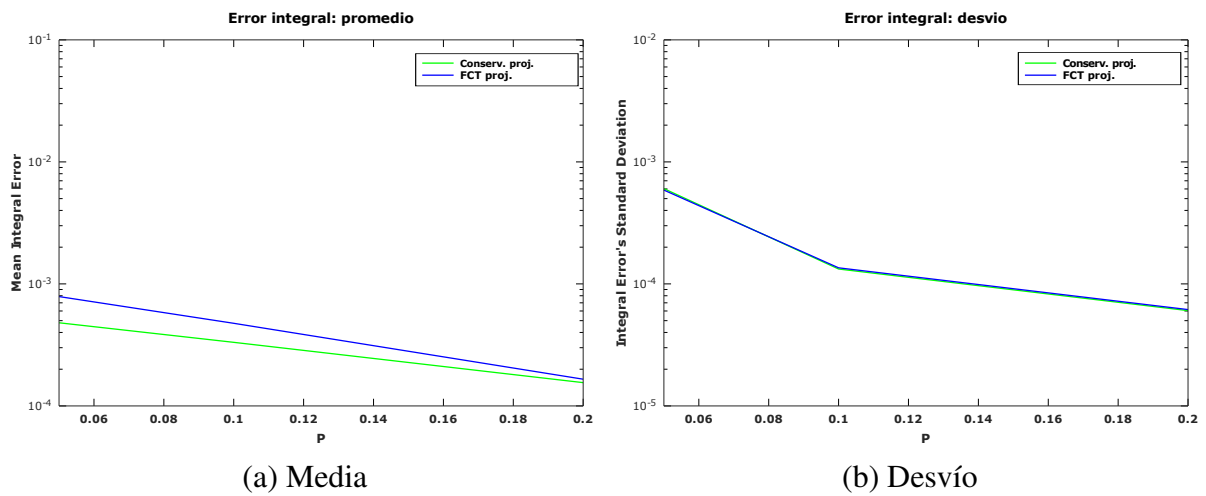


Figura 12: Media y desvío para cada porcentaje de refinamiento P .

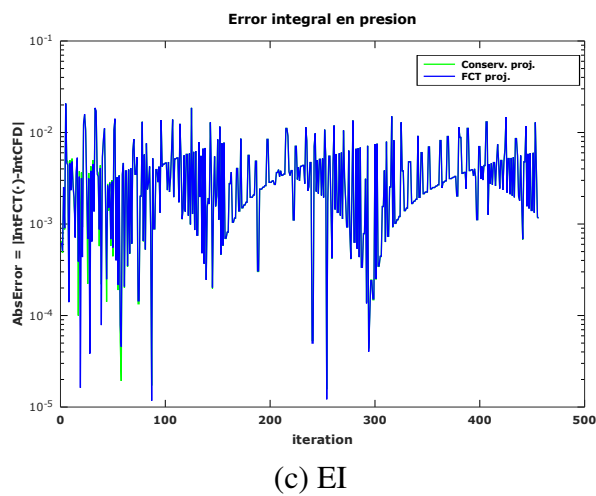
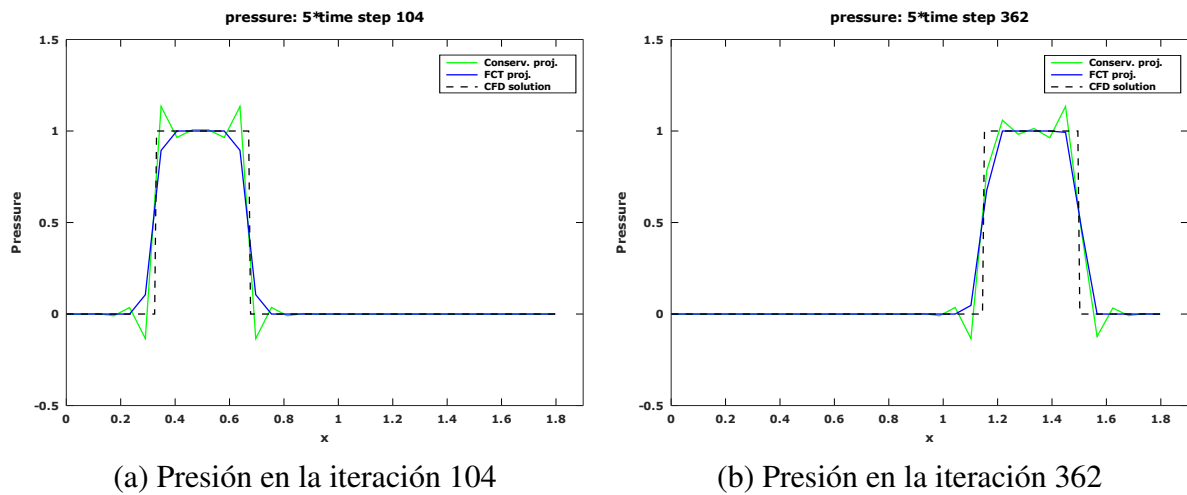


Figura 13: Curvas de proyección y error integral sobre la interfaz de la figura 7.

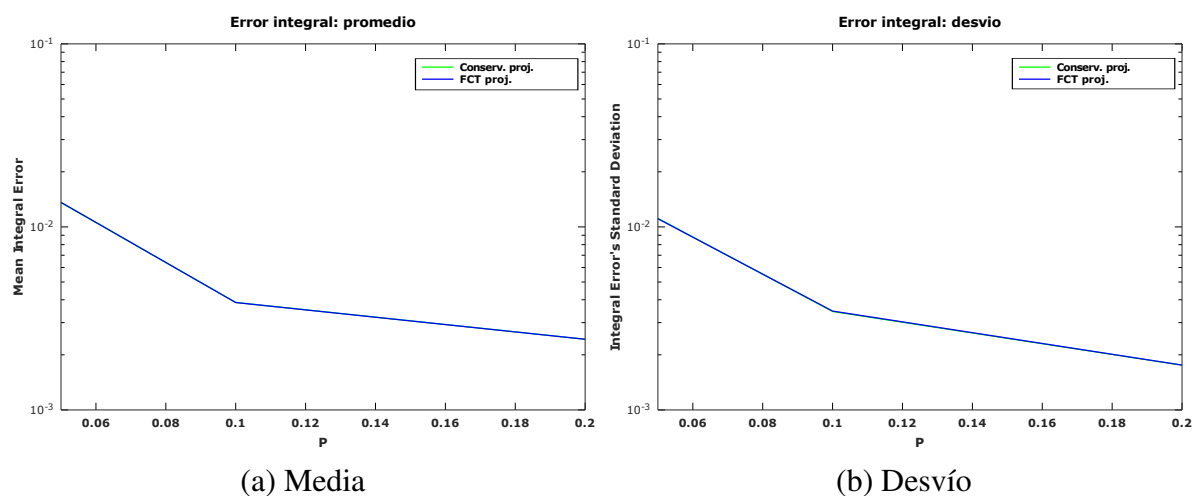


Figura 14: Media y desvío para cada porcentaje de refinamiento P del test escalón.

monotonicidad (como puede verse en las curvas de las soluciones).

5. CONCLUSIONES

El entorno de ejecución de un sistema de acoplamiento particionado involucra dos o más solvers, cada uno ejecutándose sobre diferentes dominios y resolviendo las ecuaciones que modelan el comportamiento de cada entidad física. Generalmente los datos que se transfieren entre cada dominio deben respetar algunas restricciones, por ejemplo en el caso de la presión se sabe que ésta no puede ser negativa y, por lo tanto, si erróneamente se transfiere al menos un valor de presión negativo alguno de los solvers no podrá continuar con su proceso de cálculo, frenando abruptamente la simulación.

Sin embargo, en muchas ocasiones se requiere que exista una conservación de las cantidades proyectadas, lo cual significa que la cantidad total (de presión, densidad, etc.) que se encuentra en la malla conocida, sea la misma en la malla desconocida luego de calcular los nuevos estados. En este sentido, el método de proyección conservativa mantiene la conservación global de las cantidades en todos los casos estudiados; esto puede comprobarse observando las curvas de la media y varianza para el EI de los tests aplicados sobre la geometría de la tobera (figuras 14 y 12). Adicionalmente, otra característica importante de las soluciones obtenidas con éste método es que poseen gradientes (o *saltos*) semejantes a los presentes en la solución original. Sin embargo, su principal desventaja es que las soluciones presentan oscilaciones que introducen nuevos máximos y mínimos artificiales. Por esta razón, es posible utilizar alternativamente la técnica de diagonalización de la matriz de masa M_c , condensándola en la matriz lumped M_L como se explicó en la sección 3; una característica importante de esta transformación de M_c es que arroja soluciones que, si bien siguen siendo conservativas, poseen menos oscilaciones.

Las soluciones que se obtienen mediante la proyección matriz diagonal M_L pueden ser catalogadas como soluciones de bajo orden, como se mencionó en la sección 3, ya que no poseen *over/undershoots* y son suaves. Existe una deficiencia: ante distribuciones con altos gradientes, ninguna llega a representar correctamente los *saltos* de la solución proyectada, como sí sucede con la proyección conservativa. Para *corregir* esta problemática se utiliza el método de corrección de flujos numéricos FCT, explicado en la sección 3.3.

Una conclusión importante es que mediante el método FCT, las características deseables de los métodos de bajo y alto orden se combinan de tal manera que las soluciones obtenidas son

conservativas, monótonas y positivas cuando tal restricción es necesaria. Además de ello, se pueden inferir las siguientes cuestiones:

1. Cuando el campo de estados conocidos sobre algunas de las interfaces es suave, puede utilizarse el método de proyección mediante la matriz lumped como una primer alternativa para transferir tales estados hacia la malla desconocida.
2. No es recomendable utilizar únicamente el método de proyección conservativa, ya que podrían obtenerse errores de ejecución por la creación de valores negativos en la proyección resultante.

REFERENCIAS

- De Boer A. *Computational fluid-structure interaction*. Tesis de Doctorado, Delft University of Technology, Netherlands, 2008.
- Dmitri K., Mathias M., John S., y Mikhail S. Failsafe flux limiting and constrained data projections for equations of gas dynamics. *Journal of Computational Physics*, 229:8766–8779, 2010.
- Garelli L. *Fluid Structure Interaction using an Arbitrary Lagrangian Eulerian Formulation*. Tesis de Doctorado, Universidad Nacional del Litoral, 2011.
- Garelli L., Paz R.R., y Storti M. Fluid-structure interaction study of the start-up of a rocket engine nozzle. *Computers and fluids*, 39:1208–1218, 2010.
- Gatzhammer B. *Efficient and Flexible Partitioned Simulation of Fluid-Structure Interactions*. Tesis de Doctorado, Technische Universität München, 2014.
- Hirsch C. *Numerical Computation of Internal and External Flows*, volumen 1. John Wiley and Sons, 2 edición, 2007.
- Hron J. y Turek S. A monolithic fem/multigrid solver for an ale formulation of fluid-structure interaction with applications in biomechanics. *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, 53:146–170, 2006.
- Kuzmin D., Rainald L., y Stefan T. *Flux-Corrected Transport: Principles, Algorithms and Applications*, volumen 1. Springer, 2 edición, 2012.
- Löhner, Rainald. *Applied Computational Fluid Dynamics Techniques*. John Wiley and Sons, 2 edición, 2008.