ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL

FACULTAD DE CIENCIAS

UN MÉTODO COMBINADO DE NEWTON SEMI-SMOOTH Y CONJUNTOS DE NIVEL PARA LA SIMULACIÓN NUMÉRICA DE FLUIDOS TIPO BINGHAM CON FRONTERA LIBRE.

TRABAJO PREVIO A LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO DE MAGISTER EN OPTIMIZACIÓN MATEMÁTICA.

TESIS

CRISTHIAN ALEXANDER NÚÑEZ RAMOS cristhian.nunez@epn.edu.ec

Director: Pedro Martín Merino Rosero. Ph.D. pedro.merino@epn.edu.ec

Quito. Abril 2018

Declaración de autoría.

Yo, **Cristhian Alexander Núñez Ramos**, declaro que soy el único autor de la tesis, previa a la obtención del título de Magister en Optimización Matemática, denominado: "Un método combinado de Newton-Semismooth y conjuntos de nivel para la simulación numérica de fluidos tipo Bingham con frontera libre", y autorizo a la Escuela Politécnica Nacional para que hagan el uso que estimen pertinente con el mismo.

Para que así conste, firmo la presente a los 15 días del mes de Abril del 2018.

Cristhian Alexander Núñez Ramos

Certificación

Certifico que la presente tesis fue realizada y desarrollado por **Cristhian Alexander Núñez Ramos**, bajo mi supervisión.

Pedro Merino. Ph.D. DIRECTOR

DEDICATORIA

A la Matemática Aplicada.

Agradecimientos

Desde el fondo de mi corazón, expreso mi profundo agradecimiento a mis amados padres por no abandonarme estos 27 años, a mi querido hermano Chunnynuni, por se mi Pepito Grillo; a mi primo Andrés, por su empatía existencial y su acolite.

A mis queridos amigos: Chris, Iván, José y Brenda por compartir un poco de sus vidas conmigo. A Ana Gabriela, gracias por el cariño y el conocimiento.

A mi director de tesis, su gran ayuda permitió la realización de la misma.

Finalmente, agradezco a todas las personas que hicieron posible que realize este trabajo, en especial a mis compañeros y profesores de la maestría.

Resumen

En esta tesis consideramos una formulación cuasiestática de un problema de fluido tipo Bingham con frontera libre, donde el subproblema cuasiestático es resuelto usando el método de conjuntos de nivel para la solución de la frontera libre (dominio móvil). Luego, planteamos el problema de Bingham en el dominio determinado por dicha frontera libre con las condiciones de frontera adecuadas. Así, podemos formular este problema como un sistema de optimalidad primal-dual de una versión regularizada del modelo de Bingham original. Proponemos un esquema numérico para su simulación, el cual combina el método de Newton-Semismooth para resolver el subproblema de Bingham (ver [1]), junto con el método de conjuntos de nivel (level-set method, ver [4]), que describe el movimiento de la frontera libre del fluido. Analizamos el subproblema cuasiestático y presentamos algunas simulaciones numéricas de la metodología propuesta. Con el propósito de validar nuestra metodología, la comparamos con resultados numéricos conocidos para el caso de un fluido newtoniano estudiado en [24, 25].

[**Palabras clave:** Fluido de Bingham. Conjuntos de nivel. Level-set method. Frontera libre. Newton-Semismooth. Simulación numérica]

Abstract

In this thesis we consider a quasi-static formulation of a time-dependent free boundary Bingham flow, where the static subproblem is formulated as a primal-dual optimality system of a regularized version of the original Bingham model. We propose a numerical scheme for its numerical simulation that combines a Semismooth-Newton method for solving the associated Bingham static subproblem (see [1]), together with the level-set method (see [4]) which describes the motion of the free boundary of the Bingham fluid. We analyze the static subproblem and present numerical simulations of the proposed methodology. In order to validate our methodology, we will compare this one with known numerical results for the Newtonian case in [24, 25].

[Keywords: Bingham fluid. Level-set method. Free boundary. Newton-Semismooth. Numerical simulation]

Índice general

\mathbf{Li}	Lista de figuras.					
\mathbf{Li}	sta d	e tablas.	10			
1.	Análisis del problema de Bingham con frontera libre					
	1.1.	Formulación del problema de frontera libre	14			
	1.2.	Formulación del subproblema cuasiestático	17			
	1.3.	Análisis del subproblema estático	18			
		1.3.1. Regularización del subproblema estático	24			
	1.4.	Sistema de optimalidad del subproblema estático de Bingham	26			
2 .	Apr	oximación por el método de elementos finitos	31			
	2.1.	Método de elementos finitos	31			
		2.1.1. Elementos finitos de Taylor-Hood	33			
	2.2.	Método de Newton-Semismooth	37			
	2.3.	Experimentos numéricos de un problema estático de Bingham $\ .\ .\ .\ .$	38			
3.	Fori	Formulación de la evolución de la frontera libre a través del método de				
	conj	juntos de nivel	45			
	3.1.	Método de conjuntos de nivel (level set method)	46			
	3.2.	Advección de la función de conjuntos de nivel (ecuación de transporte)	48			
	3.3.	Estabilización de la ecuación de transporte	51			
		3.3.1. Aproximación de la ecuación de transporte estabilizada	53			
	3.4.	Reinicialización de la ecuación de transporte	57			
		3.4.1. Aproximación de la reinicialización de la ecuación de transporte	58			
	3.5.	Experimentos numéricos	61			
		3.5.1. Experimento de conjuntos de nivel con velocidad constante sin re-				
		inicialización	61			
		3.5.2. Experimento de conjuntos de nivel con velocidad constante y reini-				
		cialización	65			
4.	Mét	codo combinado Newton-Semismooth con conjuntos de nivel (SSN-				
	LS)		72			
	4.1.	Método combinado (SSN-LS)	73			
		4.1.1. Consideraciones numéricas	77			
	4.2.	Experimentos numéricos para el caso Bingham.	78			
		4.2.1. Fluido de Bingham en un plano inclinado	78			
		4.2.2. Fluido de Bingham en una tubería	87			
	43	Validación de la metodología para el caso newtoniano	96			

	4.3.1.	Modelo de N	lavier-Stoke	s de front	era libre		 . 96
	4.3.2.	Experimento	de validaci	ón "colla	psing water	column".	 . 101
5.	Conclusio	nes y Recon	nendacione	es.			109
	Nomenclat	ura					 . 111
	Acrónimos						 . 114
	Bibliografía	ı					 . 115

Índice de figuras

1.1.	Gráfico ilustrativo. Ubicación de fronteras	14
1.2.	Curvatura \mathcal{K}	16
1.3.	Curvatura \mathcal{K} (vista 3D)	16
1.4.	Tensión superficial.	17
2.1.	Triangulación para la presión. Elementos finitos de Taylor Hood	34
2.2.	Función base lineal para la presión. Elementos finitos de Taylor Hood	35
2.3. 2.4.	Triangulación para la velocidad. Elementos finitos de Taylor-Hood Función base cuadrática de punto intermedio sobre dos triángulos. Elemen-	35
05	tos finitos de Taylor-Hood	36
2.5.	Funcion base cuadratica para la velocidad sobre seis triangulos. Elementos	90
0.0	finitos de Taylor-Hood	36
2.6.	Plano inclinado: subdominio Ω_k	39
2.1.	Magnitud de la velocidad. Experimento de Bingham estatico	40
2.8.	Campo vectorial de la velocidad. Experimento de Bingham estatico	41
2.9.	Campo escalar de la presion. Experimento de Bingham estatico	41
2.10.	Componentes de la velocidad. Experimento de Bingnam estatico	42
2.11.	Conjuntos activos (gris) a inactivos (anaraniado). Experimento de Bingham estatico	42
2.12.	ostático	12
2.13.	Norma $\left\ \left(\delta \mathbf{y}_{h}^{k}, \delta \mathbf{q}_{h}^{k}, \delta p_{h}^{k} \right) \right\ _{L^{2}(\Omega_{k})^{2} \times L^{2}(\Omega_{k})^{2 \times 2} \times L^{2}(\Omega_{k})}$ para $\gamma = 10^{4}$. Método de	40
	Newton-Semismooth	44
3.1.	Método de conjuntos de nivel	46
3.2.	Dominio computacional Θ . Partes de la frontera \neg	46
3.3.	Función característica regularizada con centro $(0.5, 0.5)^T$ y radio $r = 0.2$.	47
3.4.	Contorno de tres niveles $M = 0.05, 0.5, 0.95$ de la función característica	
	regularizada	48
3.5.	Grosor de la frontera ϵ	48
3.6.	Relación entre y y $\eta_{\partial\Theta}$	49
3.7.	Elemento triangular con vértices 1, 2, 3 con cordenadas $(x_{11}, x_{21}), (x_{12}, x_{22}),$	-
	$\mathbf{y} (x_{13}, x_{23}), \dots \dots$	53
3.8.	Función N_1 para el nodo 1 del triángulo 7 (izquierda) y función base η_l en	.
	su soporte de cuatro elementos finitos.	54
3.9.	Dominio computacional de la ecuación de transporte	61
3.10.	Función de transporte	63
3.11.	Transporte del subdominio $\Omega(t)$ de la masa aislada con velocidad constante	64
3.12.	Función de transporte de la masa aislada sin reinicialización.	68
3.13.	Subdominio $\Omega(t)$ de la masa aislada sin reinicialización	69

3.14. 3.15.	Función de transporte de la masa aislada con reinicialización	. 70 . 71
4.1.	Dominio computacional Θ . Ubicación de fronteras	. 74
4.2.	Subdominio Ω_k (rojo) transportándose en el dominio computacional Θ .	. 75
4.3.	Triangulación del subdominio Ω_k	. 76
4.4.	Extrapolación de la velocidad	. 77
4.5.	Ubicación de las fronteras del subdominio Ω_k	. 78
4.6.	Ubicación de las fronteras del dominio computacional Θ	. 79
4.7.	Subdominio del fluido. Experimento de Bingham en un plano inclinado	. 81
4.8.	Velocidad del fluido. Experimento de Bingham en un plano inclinado	. 82
4.9.	Presión del fluido. Experimento de Bingham en un plano inclinado	. 83
4.10.	Trayectoria de una partícula de fluido. Experimento de Bingham en un	
	plano inclinado	. 84
4.11.	Conjuntos activos $\mathcal{A}_{\gamma}(t)$ (negro) e inactivos $\mathcal{I}_{\gamma}(t)$ (gris). Experimento de	
	Bingham en un plano inclinado	. 85
4.12.	Norma de $\left\ \left(\delta \mathbf{y}_h^k, \delta \mathbf{q}_h^k, \delta p_h^k \right\ \right) \right\ _{L^2(\Omega_h)^2 \times L^2(\Omega_h)^{2 \times 2} \times L^2(\Omega_h)}$ para $t = 7.2$. Método	
	de Newton Semismooth. Experimento de Bingham en un plano inclinado.	. 86
4.13.	Desplazamiento del fluido de Bingham respecto al tiempo. Experimento de	
	Bingham en un plano inclinado	. 87
4.14.	Sección transversal de una tubería	. 88
4.15.	Ubicación de las fronteras del subdominio Ω_k	. 89
4.16.	Ubicación de las fronteras del dominio computacional Θ	. 89
4.17.	Dominio del fluido. Experimento de Bingham en una tubería	. 90
4.18.	Velocidad del fluido. Experimento de Bingham en una tubería	. 91
4.19.	Presión del fluido. Experimento de Bingham en una tubería	. 92
4.20.	Trayectoria de una partícula de fluido. Experimento de Bingham en una	
	tubería	. 93
4.21.	Conjuntos activos $\mathcal{A}_{\gamma}(t)$ (negro) e inactivos $\mathcal{I}_{\gamma}(t)$ (gris). Experimento de	
	Bingham en tubería.	. 94
4.22.	Norma de $\left\ \left(\delta \mathbf{y}_h^k, \delta \mathbf{q}_h^k, \delta \mathbf{p}_h^k \right) \right\ _{L^2(\Omega_k)^2 \times L^2(\Omega_k)^{2 \times 2} \times L^2(\Omega_k)}$ para $t = 6.4$. Método	
	de Newton-Semismooth. Experimento de Bingham en una tubería	. 95
4.23.	Desplazamiento horizontal respecto al tiempo del fluido de Bingham en una	
	tubería.	. 96
4.24.	Sección transversal del reservorio	. 101
4.25.	Ubicación de las fronteras del dominio computacional Θ . Experimento "co-	
	llapsing water column"	. 102
4.26.	Ubicación de las fronteras de subdominio Ω_k . Experimento "collapsing wa-	
	ter column"	. 102
4.27.	Subdominio del fluido. Experimento "collapsing water column"	. 104
4.28.	Reimpresión de la simulación realizada por R. Groce et al, c.f. [25]. Expe-	
	rimento "collapsing water column"	. 105
4.29.	Velocidad del fluido. Experimento "collapsing water column"	. 106
4.30.	Resultados numéricos (línea roja) comparados con simulación de [25] (línea	
	negra) y datos experimentales de $[27]$ (puntos \circ).	. 108

Índice de cuadros

2.1. 2.2.	Parámetros adimensionales para el experimento de Bingham estático Iteraciones y residuos del método de Newton-Semismooth. Experimento de	39
	Bingham estático	43
2.3.	Para cada valor γ : número de iteraciones del método de Newton-Semismooth	44
3.1. 3 2	Espacios de elementos finitos para la ecuación de transporte	56
0.2.	basado en que $\phi \in \mathcal{W}_c^1(\Theta)$	60
3.3.	Espacios de elementos para las funciones del método de conjuntos de nivel	
	basado en que $\phi \in \mathcal{W}^2_c(\Theta)$	60
3.4.	Area del subdominio $\Omega(t)$ de la masa aislada descrita por el nivel $\phi(x, t) = 0.5$	65
3.5.	Area del subdominio $\Omega(t)$	67
4.1.	Parámetros adimensionales para el experimento de Bingham en un plano	
	inclinado.	80
4.2.	Posición, velocidad y presión de una partícula de fluido cerca de la frontera	
	libre. Experimento de Bingham en un plano inclinado	84
4.3.	Iteraciones y residuos del método de Newton-Semismooth en $t = 7.2$. Ex-	
	perimento de Bingham en un plano inclinado	86
4.4.	Cantidades para el experimento de Bingham en tubería	88
4.5.	Posición, velocidad y presión de una partícula de fluido cerca de la frontera	
	libre. Experimento de Bingham en una tubería.	93
4.6.	Iteraciones y residuos del método de Newton-Semismooth en $t = 6.4$. Ex-	
	perimento de Bingham en una tubería.	95
4.7.	Parámetros adimensionales del experimento "collapsing water column" 1	103
4.8.	Área del subdominio Ω_k . Experimento "collapsing water column" 1	107

Introducción

La simulación numérica de fluidos viscoplásticos es un campo muy activo de investigación en la dinámica computacional de fluidos por su gran cantidad de aplicaciones en diferentes áreas. Ésta ha sido aplicada en la modelización de fenómenos naturales, como por ejemplo en la aproximación de flujos de lava volcánica o en la dinámica de avalanchas (ver [18]). Además, el campo de utilidad se extiende a aplicaciones dentro de la industria petrolera y de gas, alimenticia, entre otras (ver [30]).

En el campo de la dinámica de fluidos es muy conocido que los fluidos tipo Bingham son materiales viscoplásticos que tienen un comportamiento dual determinado por un límite elástico (yield stress threshold) que determina las partes del material que se comportan como un fluido (sobre el límite elástico), o como un sólido (bajo el límite elástico). Debido a que la diferenciación exacta de estas zonas líquidas-sólidas es desconocida, su formulación usualmente toma la forma de una desigualdad variacional, en la que varias metodologías han sido propuestas en su estudio analítico y numérico (ver [3, 16]). En particular, el autor de [1] propone un método de Newton-Semismooth que prueba ser muy eficiente en resolver una caracterización primal-dual de la solución de una regularización de Tikhonov del problema original de Bingham.

Por otro lado, aplicaciones más realistas requieren la simulación de una masa aislada de fluido viscoplástico que se mueve en el tiempo, por lo que dicho planteamiento corresponde a un problema característico de frontera libre. Los problemas de frontera libre son aquellos donde el material cambia su forma a lo largo del tiempo.

Al menos hay dos enfoques para tratar los problemas con dominio móvil: el primero es el enfoque geométrico que analiza el cambio del dominio del material mediante la estructura del mallado. Una de la técnicas más conocidas siguiendo esta metodología son los métodos ALE (Arbitrary Lagrangian-Eulerian Methods, ver [29]). El otro enfoque tiene una naturaleza funcional donde se estudia una función de transporte que describe el cambio del dominio en el tiempo. Uno de los métodos que destaca en esta línea de investigación es el método de conjuntos de nivel (level-set method, ver [17]).

El método de conjuntos de nivel aborda problemas que involucran un cambio de interfaz o identificación de dominio. Problemas de frontera libre asociadas a fluidos de Bingham han sido estudiados en [20] para la simulación numérica de avalanchas.

En la presente tesis, consideramos una formulación cuasiestática de un fluido de Bingham, la cual se obtiene de una discretización temporal del problema dinámico. El aporte de este trabajo consiste en la combinación de la metodología de Newton-Semismooth para resolver el subproblema cuasiestático de Bingham y el método de conjuntos de nivel que determina el dominio donde se resuelve este subproblema. El subproblema estático de Bingham para cada paso temporal es analizado usando la teoría de multiplicadores de Lagrange, análogo al trabajo realizado en [1]. Para dicho propósito, consideramos una regularización de Tikhonov del subproblema estático y su formulación primal-dual, la misma que implica la existencia de multiplicadores que caracterizan y distinguen las zonas líquidas-sólidas del fluido. Esta formulación primal-dual es conveniente para la aplicación del método de Newton-Semismooth en su resolución.

Adicionalmente, presentamos algunas simulaciones numéricas de un fluido de Bingham con frontera libre, en los que podremos evidenciar el desempeño numérico de la metodología que proponemos para su resolución. Además, analizamos la velocidad, presión, distinción de zonas líquidas-sólidas, tiempo de desplazamiento y comportamiento del fluido.

Finalmente, validamos cualitativamente la metodología que proponemos, usando un experimento muy conocido llamado "collapsing water column" presentado en [24], el cual trata sobre el desplazamiento de una cantidad de agua contenida en un reservorio. Así, comparamos los resultados numéricos de nuestra metodología con las medidas experimentales realizadas para dicho experimento en [27]. Mas aún, los comparamos con los resultados obtenidos en [25], el cual simula numéricamente el mismo experimento con otro tipo de metodología.

Capítulo 1

Análisis del problema de Bingham con frontera libre

La predisposición de un fluido no newtoniano a resistir la deformación por el tensor de stress o fuerzas internas de deformación depende de la tasa de deformación gradual del material. Esta deformación posee una memoria temporal, es decir, la deformación del fluido en un cierto tiempo depende de la deformación de tiempos anteriores. El modelo de Bingham utiliza un límite elástico, el cual es una suerte de penalización y distinción de zonas sólidas-líquidas.

1.1. Formulación del problema de frontera libre

Consideramos un fluido de Bingham bidimensional (o tridimensional) con densidad $\rho > 0$ y viscosidad $\mu > 0$ constantes, que evoluciona en un espacio de tiempo [0, T], con T > 0 ocupando el dominio móvil $\Omega(t)$. Asumimos además que la frontera del fluido se divide en tres partes disjuntas: $\Gamma_0(t)$, donde la velocidad tiene condición antideslizante (non-slip condition), $\Gamma_D(t)$ en la cual la velocidad de ingreso de fluido tiene tasa constante y la frontera libre $\Gamma_F(t)$ donde el fluido interacciona con la tensión superficial asociada al medio donde el fluido está transportándose.

En la figura 1.1 ilustramos la ubicación de las fronteras, antes descritas.



Figura 1.1: Gráfico ilustrativo. Ubicación de fronteras.

Proponemos un modelo de un fluido tipo Bingham con frontera libre, basado en [1],

como sigue:

$$(\mathbf{B}) \begin{cases} \operatorname{div} \mathbf{y}(t) = 0, \\ \sigma_{Tot} = -p(t) \cdot I + \sigma(t), \\ \sigma(t) = 2\mu\varepsilon(\mathbf{y}(t)) + \sqrt{2}g\frac{\varepsilon(\mathbf{y}(t))}{\|\varepsilon(\mathbf{y}(t))\|}, & \operatorname{si} \varepsilon(\mathbf{y}(t)) \neq 0, \\ \|\sigma(t)\| \leq g, & \operatorname{si} \varepsilon(\mathbf{y}(t)) = 0, \\ \partial_t \mathbf{y} = \operatorname{Div} \sigma(t) - \nabla p(t) + \mathbf{f}(t), & \operatorname{en} \Omega(t) \times [0, T], \\ \sigma_{Tot} \cdot \mathbf{n} = \varsigma \mathcal{K} \mathbf{n}, & \operatorname{en} \Gamma_F(t) \times [0, T] \\ \mathbf{y} = \mathbf{y}_D, & \operatorname{en} \Gamma_D(t) \times [0, T], \\ \mathbf{y} = 0, & \operatorname{en} \Gamma_0(t) \times [0, T], \\ \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0, & \operatorname{en} \Omega(0), \end{cases}$$

con $t \in [0, T]$, donde **y** es el campo de velocidad y p denota la presión asociada al fluido. Además, g > 0 corresponde a la plasticidad o límite elástico (yield stress) y ς el coeficiente de tensión superficial. La cantidad $\sigma(t)$ representa la componente del tensor de deformación de Cauchy (deviatoric part) y Div denota el operador divergencia. En la parte derecha de la ecuación que describe la dinámica del fluido consideramos una fuerza externa $\mathbf{f}(t)$, que interactúa en el comportamiento y deformación del fluido. Además, ε representa el tensor de deformación de velocidades, con componentes dadas de la siguiente manera:

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{y}(t)) := \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mathbf{y}_i(t)}{\partial x_j} + \frac{\partial \mathbf{y}_j(t)}{\partial x_i} \right),$$

para $\mathbf{y}(t) = (y_1(t), y_2(t))^T$. La frontera del dominio se escribe como $\partial \Omega(t) = \Gamma_F(t) \uplus \Gamma_D(t) \uplus \Gamma_0(t) y \parallel \cdot \parallel$ representa la norma de Frobenius, definida de la siguiente manera:

$$||A|| := \sqrt{\operatorname{tr}(AA^T)}$$
, para todo $A \in \mathbb{R}^{d \times d}$,

para d = 2, 3, donde tr(·) representa la traza de la matriz.

Adicionalmente $\Gamma_F(t)$ representa la frontera libre en la que se impone una condición de frontera en el tensor de stress, con el fin de balancear la tensión superficial y las fuerzas de deformación del fluido (ver [25]). En esta condición de frontera, \mathcal{K} es la suma de la curvatura principal, es decir

$$\mathcal{K} := \frac{1}{R_s} + \frac{1}{R_t},$$

donde R_s and R_t son los radios de curvatura a lo largo de las coordenadas s y t, como se muestran en las Figuras 1.2 y 1.3.



Figura 1.2: Curvatura \mathcal{K} .



Figura 1.3: Curvatura \mathcal{K} (vista 3D)

En la literatura usual de frontera libre, e.g. [17, 42, 5], se presenta la siguiente fórmula para la curvatura \mathcal{K} en \mathbb{R}^3 :

$$\mathcal{K} := \nabla \cdot \mathbf{n} = \frac{\partial n_1}{\partial x_1} + \frac{\partial n_2}{\partial x_2} + \frac{\partial n_3}{\partial x_3},\tag{1.1}$$

donde $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$ es el vector normal exterior a la frotera libre $\Gamma_F(t)$. Por lo tanto, la curvatura se escribe como la divergencia del vector normal. A menudo, se toma la expresión (1.1) como la definición de la curvatura de una superficie implícita. En todo este trabajo, consideramos la identidad (1.1) para describir a la curvatura principal.

La condición de frontera $\sigma_{Tot} \cdot \mathbf{n} = \varsigma \mathcal{K} \mathbf{n}$ en la frontera libre $\Gamma_F(t)$, es una condición de balance que controla las fuerzas de deformación del fluido mediante la fuerza de tensión superficial, inherente al medio de transporte. La tensión superficial es la fuerza que actúa por unidad de área en la frontera libre y que contrae dicha superficie en dirección a la normal. En la Figura 1.4 ilustramos la tensión superficial dada en términos de la curvatura.



Figura 1.4: Tensión superficial.

1.2. Formulación del subproblema cuasiestático

Como el dominio del modelo de Bingham $\Omega(t)$ depende del tiempo, consideramos el caso cuasiestático, donde el término $\partial_t \mathbf{y}$ es aproximado por un esquema de diferencias $\partial_t \mathbf{y} \approx \frac{\mathbf{y}_{k+1}-\mathbf{y}_k}{\tau}$ luego de una discretización uniforme del espacio temporal [0,T], donde $\mathbf{y}_{k+1} := \mathbf{y}(t_{k+1}), \mathbf{y}_k := \mathbf{y}(t_k) \text{ y } \tau > 0$ es el paso temporal.

Por lo tanto, a partir del problema (**B**), la formulación cuasiestática consiste en una sucesión de problemas que dependen de la solución previa \mathbf{y}_k donde el dominio Ω_k está determinado en el paso anterior. Analizaremos la existencia de la solución de cada subproblema estático, en virtud de [1], donde se obtiene una caracterización primal-dual de la solución. En nuestro caso, el subproblema estático es formulado como sigue: en el tiempo t_{k+1} , para Ω_k fijo, buscamos $\mathbf{y}_{k+1} : \Omega_k \to \mathbb{R}^2$ y $p_{k+1} : \Omega_k \to \mathbb{R}$ tales que:

$$(\mathbf{B})_{k+1} \begin{cases} \operatorname{div} \mathbf{y}_{k+1} = 0, \\ \sigma_{Tot} = -p_{k+1} \cdot I + \sigma_{k+1}, \\ \sigma_{k+1} = 2\mu\varepsilon(\mathbf{y}_{k+1}) + \sqrt{2}g\frac{\varepsilon(\mathbf{y}_{k+1})}{\|\varepsilon(\mathbf{y}_{k+1})\|}, & \operatorname{si} \varepsilon(\mathbf{y}_{k+1}) \neq 0, \\ \|\sigma(t)\| \leq g, & \operatorname{si} \varepsilon(\mathbf{y}_{k+1}) = 0, \\ \mathbf{y}_{k+1} - \mathbf{y}_k = \tau \operatorname{Div} \sigma_{k+1} - \tau \nabla p_{k+1} + \tau \mathbf{f}_{k+1}, & \operatorname{en} \Omega_k, \\ \sigma_{Tot} \cdot \mathbf{n} = \varsigma \mathcal{K}_k \mathbf{n}_k, & \operatorname{en} \Gamma_F^k, \\ \mathbf{y}_{k+1} = \mathbf{y}_D, & \operatorname{on} \Gamma_D^k, \\ \mathbf{y}_{k+1} = \mathbf{0}, & \operatorname{en} \Gamma_0^k, \\ \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0, & \operatorname{en} \Omega_0. \end{cases}$$

donde las fronteras Γ_F^k , Γ_D^k , Γ_0^k están prefijadas y determinadas en el paso previo. Además, estas fronteras satisfacen que $\partial \Omega_k = \Gamma_F^k \uplus \Gamma_D^k \uplus \Gamma_0^k$.

Asumimos que Ω_0 es el dominio que ocupa inicialmente el fluido.

Observación: Para plantear el problema cuasiestático se puede considerar un esquema de Crank-Nicolson puesto que en la ecuación de movimiento del fluido no consideramos el término convectivo de la velocidad. En [9] se menciona que cuando se utiliza un esquema θ (Euler o Crank-Nicolson) para la resolución de ecuaciones del tipo Navier-Stokes, en donde

existe una no linealidad y una parte convectiva, resulta muy costoso computacionalmente debido a que en cada tiempo, el sistema de ecuaciones a resolver cambia. Ésto puede evitarse considerando un método semi-implícito que no cambie en cada iteración, el cual puede construirse de varias formas. Específicamente el autor de [9] sugiere el método BDF (backward differentiation formula) debido a que en éste método, el sistema de ecuaciones a resolver está asociado a un matriz del tipo Stokes, que no cambia en cada iteración, ahorrándonos mucho costo computacional. En este trabajo consideramos el esquema de Euler implícito debido a que en la ecuación de movimiento no consideramos el término convectivo de velocidad y por la facilidad en el planteamiento del problema cuasiestático.

1.3. Análisis del subproblema estático

En esta sección nos enfocaremos en analizar el subproblema estático $(\mathbf{B})_{k+1}$. La idea principal de esta sección es caracterizar la solución del problema de Bingham mediante la teoría de la dualidad de Fenchel, análogamente a [1]. La formulación cuasiestática genera una sucesión de subproblemas estáticos que dependen de la solución anterior. Nos enfocamos en la formulación variacional del subproblema estático fijando un tiempo t_k .

De la forma como planteamos el problema cuasiestático, la función \mathbf{y}_k se encuentra definido en Ω_{k-1} . Asumimos que la velocidad actual \mathbf{y}_{k+1} no varía en exceso con respecto a \mathbf{y}_k del paso previo. Esta consideración es razonable si tomamos el paso temporal τ suficientemente pequeño. Así, podemos suponer que $\mathbf{y}_k \in L^2(\Omega_k)$; ésto puede ser alcanzado mediante la extensión de \mathbf{y}_k al dominio actual Ω_k mediante un procedimiento de extrapolación sobre el nuevo dominio. En [43], sección 5.4, se menciona que para realizar procesos de extrapolación es necesario que $\partial \Omega_k$ sea C^1 .

A la vez podemos considerar que Ω_k es un dominio tipo C^1 para todo $k \in \mathbb{N}$. Esta suposición es necesaria para asegurar que \mathcal{K} esté bien definido en la frontera como se propone en [10] y [25]. Con el fin de caracterizar la solución del problema de Bingham, a continuación introducimos las siguientes familias de espacios funcionales:

$$X^{k} := \{ \mathbf{v} \in \mathbf{H}^{1}(\Omega_{k}) : \mathbf{v} = 0 \text{ en } \Gamma_{0}^{k} \},$$

$$X_{0,D}^{k} := \{ \mathbf{v} \in \mathbf{H}^{1}(\Omega_{k}) : \mathbf{v} = 0 \text{ en } \Gamma_{0}^{k} \cup \Gamma_{D}^{k} \},$$

$$Y^{k} := \{ \mathbf{v} \in \mathbf{H}^{1}(\Omega_{k}) : \operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \mathbf{v} = 0 \text{ en } \Gamma_{0}^{k} \},$$

$$Y_{0,D}^{k} := \{ \mathbf{y} \in \mathbf{H}^{1}(\Omega_{k}) : \operatorname{div} \mathbf{y} = 0 \text{ y } \mathbf{y} = 0 \text{ en } \Gamma_{0}^{k} \cup \Gamma_{D}^{k} \},$$

$$\mathbf{Z} := \{ \mathbf{p} \in \mathbf{L}^{2 \times 2}(\Omega_{k}) : \mathbf{p}_{ij} = \mathbf{p}_{ji} \text{ para todo } i, j = 1, 2 \}$$

y el conjunto:

$$Y_D^k := \{ \mathbf{v} \in \mathbf{H}^1(\Omega_k) : \operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \mathbf{v} = 0 \text{ en } \Gamma_0^k \text{ y } \mathbf{v} = \mathbf{y}_D \text{ en } \Gamma_D^k \}$$

Los espacios Y^k y $Y_{0,D}^k$ son conocidos como espacios solenoidales. Para mayor información respecto a los espacios antes descritos se puede consultar [1, 13]. Por otro lado, definimos la forma bilineal a y el funcional j sobre un dominio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} a(\mathbf{y}, \mathbf{v}; \Omega) &:= \tau 2\mu \int_{\Omega} \varepsilon(\mathbf{y}) : \varepsilon(\mathbf{v}) dx + \int_{\Omega} \mathbf{y} \mathbf{v} dx, \\ j(\mathbf{v}; \Omega) &:= \tau \sqrt{2}g \int_{\Omega} \|\varepsilon(\mathbf{v})\| dx. \end{aligned}$$

Notación. Con el propósito de mejorar la presentación del subproblema estático omitiremos la escritura de Ω . Ésto es, usaremos $a(\cdot, \cdot) = a(\cdot, \cdot; \Omega), j(\cdot) = j(\cdot; \Omega)$ y el producto L^2 : $(\cdot, \cdot)_{L^2(\Omega)} = (\cdot, \cdot)$.

En el siguiente lema introducimos la formulación variacional del problema $(\mathbf{B})_{k+1}$

Lema 1. Sea Ω_k un dominio de clase C^1 , y sea \mathbf{y}_{k+1} una solución de $(\mathbf{B})_{k+1}$. Luego, $\mathbf{y}_{k+1} \in Y_D^k$ y satisface la siguiente desigualdad variacional:

$$a(\mathbf{y}_{k+1}, \mathbf{v} - \mathbf{y}_{k+1}) + j(\mathbf{v}) - j(\mathbf{y}_{k+1})$$

$$\geq (\tau \mathbf{f} + \mathbf{y}_k, \mathbf{v} - \mathbf{y}_{k+1}) + \tau \varsigma \int_{\Gamma_F^k} \langle \mathcal{K}_k \mathbf{n}_k, \mathbf{v} - \mathbf{y}_k \rangle ds, \qquad (1.2)$$

para todo $\mathbf{v} \in Y_D^k \ y \ k \in \mathbb{N}$.

Demostración. Notación. Por conveniencia en la escritura, omitiremos el subíndice k + 1 de las cantidades que dependen del mismo, es decir notaremos $\mathbf{y} = \mathbf{y}_{k+1}$, $\sigma = \sigma_{k+1}$, $p = p_{k+1}$, $\mathbf{n} = \mathbf{n}_k$ y $\mathcal{K} = \mathcal{K}_k$ y renombraremos $\tilde{\mathbf{y}} := \mathbf{y}_k$.

Sea $\mathbf{v} \in Y_D^k$, multiplicando la quinta ecuación de $(\mathbf{B})_{k+1}$ escrita como:

$$\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}} = \tau \operatorname{Div} \sigma - \tau \nabla p + \tau \mathbf{f},$$

por el término $(\mathbf{v} - \mathbf{y})$ e integrando sobre Ω_k obtenemos:

$$\int_{\Omega_k} \mathbf{y}(\mathbf{v} - \mathbf{y}) dx - \tau \int_{\Omega_k} \operatorname{Div} \sigma_{Tot}(\mathbf{v} - \mathbf{y}) dx$$
$$= \int_{\Omega_k} \tilde{\mathbf{y}}(\mathbf{v} - \mathbf{y}) dx + \tau \int_{\Omega_k} \mathbf{f}(\mathbf{v} - \mathbf{y}) dx.$$
(1.3)

Integrando por partes y considerando las condiciones de frontera, se sigue que:

$$-\int_{\Omega_k} \operatorname{Div} \sigma_{Tot}(\mathbf{v} - \mathbf{y}) dx = \int_{\Omega_k} \sigma : \varepsilon(\mathbf{v} - \mathbf{y}) dx - \int_{\Omega_k} p \operatorname{div}(\mathbf{v} - \mathbf{y}) dx - \int_{\Gamma_F^k} \langle \varsigma \mathcal{K} \mathbf{n}, \mathbf{v} - \mathbf{y} \rangle ds - \int_{\Gamma_0^k} \langle \sigma_{Tot} \cdot \mathbf{n}, \mathbf{v} - \mathbf{y} \rangle ds - \int_{\Gamma_D^k} \langle \sigma_{Tot} \cdot \mathbf{n}, \mathbf{v} - \mathbf{y} \rangle ds.$$

Como $(\mathbf{v} - \mathbf{y}) \in Y^k$ entonces div $(\mathbf{v} - \mathbf{y}) = 0$ y consecuentemente, $\int_{\Omega_k} p \operatorname{div}(\mathbf{v} - \mathbf{y}) dx = 0$. Además, debido a que $\mathbf{v}, \mathbf{y} \in Y_D^k$, $(\mathbf{v} - \mathbf{y}) = 0$ en Γ_D^k y $(\mathbf{v} - \mathbf{y}) = 0$ en Γ_0^k , obtenemos lo siguiente:

$$-\int_{\Omega_k} \operatorname{Div} \sigma_{Tot}(\mathbf{v} - \mathbf{y}) dx = \int_{\Omega_k} \sigma : \varepsilon(\mathbf{v} - \mathbf{y}) dx - \int_{\Gamma_F^k} \langle \varsigma \mathcal{K} \mathbf{n}, \mathbf{v} - \mathbf{y} \rangle ds.$$
(1.4)

Remplazando (1.4) en (1.3), llegamos a la siguiente ecuación:

$$\int_{\Omega_k} \mathbf{y}(\mathbf{v} - \mathbf{y}) dx + \tau \int_{\Omega_k} \sigma : \varepsilon(\mathbf{v} - \mathbf{y}) dx = \tau \int_{\Omega_k} \mathbf{f}(\mathbf{v} - \mathbf{y}) dx + \int_{\Omega_k} \tilde{\mathbf{y}}(\mathbf{v} - \mathbf{y}) dx + \tau \zeta \int_{\Gamma_{F_k}} \langle \mathcal{K} \mathbf{n}, \mathbf{v} - \mathbf{y} \rangle ds.$$
(1.5)

Considerando la tercera ecuación de $(\mathbf{B})_{k+1}$ escrita como:

$$\sigma_{k+1} = 2\mu\varepsilon(\mathbf{y}_{k+1}) + \sqrt{2}g\frac{\varepsilon(\mathbf{y}_{k+1})}{\|\varepsilon(\mathbf{y}_{k+1})\|},$$

obtenemos que la parte izquierda de la identidad (1.5) se escribe en términos de $a \ge j$, de la siguiente forma:

$$\int_{\Omega_{k}} \mathbf{y}(\mathbf{v} - \mathbf{y}) dx + \tau \int_{\Omega_{k}} \sigma : \varepsilon(\mathbf{v} - \mathbf{y}) dx$$

$$= \int_{\Omega_{k}} \mathbf{y}(\mathbf{v} - \mathbf{y}) dx + \tau \int_{\Omega_{k}} \left(2\mu\varepsilon(\mathbf{y}) + \sqrt{2}g \frac{\varepsilon(\mathbf{y})}{\|\varepsilon(\mathbf{y})\|} \right) : \varepsilon(\mathbf{v} - \mathbf{y}) dx,$$

$$= a(\mathbf{y}, \mathbf{v} - \mathbf{y}) + \sqrt{2}\tau g \int_{\Omega_{k}} \frac{\varepsilon(\mathbf{y}) : \varepsilon(\mathbf{v} - \mathbf{y})}{\|\varepsilon(\mathbf{y})\|} dx.$$
(1.6)

Luego, aplicando la desigualdad de Cauchy-Schwarz para el producto escalar de Frobenius se tiene que:

$$\sqrt{2}\tau g \int_{\Omega_{k}} \frac{\varepsilon(\mathbf{y}) : \varepsilon(\mathbf{v} - \mathbf{y})}{\|\varepsilon(\mathbf{y})\|} dx$$

$$= \sqrt{2}\tau g \int_{\Omega_{k}} \frac{\varepsilon(\mathbf{y}) : \varepsilon(\mathbf{v})}{\|\varepsilon(\mathbf{y})\|} dx - \sqrt{2}\tau g \int_{\Omega_{k}} \frac{\varepsilon(\mathbf{y}) : \varepsilon(\mathbf{y})}{\|\varepsilon(\mathbf{y})\|} dx$$

$$\leq \sqrt{2}\tau g \int_{\Omega_{k}} \|\varepsilon(\mathbf{v})\| dx - \sqrt{2}\tau g \int_{\Omega_{k}} \|\varepsilon(\mathbf{y})\| dx$$

$$= j(\mathbf{v}) - j(\mathbf{y}).$$
(1.7)

Por lo tanto, combinando (1.5), (1.6) y (1.7) obtenemos lo siguiente:

$$\tau \int_{\Omega_k} \mathbf{f}(\mathbf{v} - \mathbf{y}) dx + \int_{\Omega_k} \tilde{\mathbf{y}}(\mathbf{v} - \mathbf{y}) dx + \tau \varsigma \int_{\Gamma_{F_k}} \langle \mathcal{K} \mathbf{n}, \mathbf{v} - \mathbf{y} \rangle ds \leq a(\mathbf{y}, \mathbf{v} - \mathbf{y}) + j(\mathbf{v}) - j(\mathbf{y}) dx$$

El lema anterior nos permite enunciar la siguiente formulación débil del problema.

Desigualdad variacional

Una formulación variacional del problema $(\mathbf{B})_{k+1}$ es dada como sigue: encontrar $\mathbf{y} \in Y_D^k$ tal que:

$$a(\mathbf{y}, \mathbf{v} - \mathbf{y}) + j(\mathbf{v}) - j(\mathbf{y}) \geq (\tau \mathbf{f} + \tilde{\mathbf{y}}, \mathbf{v} - \mathbf{y}) + \tau \varsigma \int_{\Gamma_F^k} \langle \mathcal{K} \mathbf{n}, \mathbf{v} - \mathbf{y} \rangle ds, \qquad (1.8)$$
$$\mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0,$$

para todo $\mathbf{v} \in Y_D^k$.

Observación. A diferencia del problema tratado en [1], nuestro problema contiene el término de frontera $\int_{\Gamma_F^k} \langle \mathcal{K} \mathbf{n}, \cdot \rangle ds$, correspondiente a la condición de frontera libre.

Introducimos a continuación la desigualdad de Korn.

Desigualdad de Korn. Sea Ω un dominio abierto, conexo, subconjunto de \mathbb{R}^n , con $n \geq 2$. Existe una constante C > 0, conocida como constante de Korn, tal que para todo $\mathbf{v} \in \mathbf{H}^1(\Omega)$:

$$\|\mathbf{v}\|_{\mathbf{H}^{1}(\Omega)}^{2} \leq C \int_{\Omega} \sum_{i,j=1}^{n} \left(|\mathbf{v}^{i}(x)|^{2} + |\varepsilon_{ij}(\mathbf{v})(x)|^{2} \right) dx, \qquad (1.9)$$

donde

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{y}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mathbf{y}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \mathbf{y}_j}{\partial x_i} \right).$$

Para la demostración de la desigualdad de Korn se puede revisar [39].

A continuación, presentamos un resultado sobre la existencia de la solución para la formulación variacional (1.8), análogo a lo realizado en [1].

Teorema 1. Sea $y_0 \in L^2(\Omega_k)$. Existe una única solución $\bar{y} \in Y_D^k$ de (1.8).

Demostración. Usando la desigualdad de Korn (1.9), aseguramos la existencia de una constante $\alpha_0 > 0$, tal que:

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{u}) \geq \alpha_0 \|\mathbf{u}\|_{\mathbf{H}^1(\Omega_k)}^2$$
, para todo $\mathbf{u} \in X^k$,

en particular para todo $\mathbf{u} \in Y_D^k$. Además, por un resultado de traza para el espacio selenoidal Y_D^k (ampliamente estudiado en [13]), podemos acotar el término de frontera $\int_{\Gamma_F^k} \langle \mathcal{K} \mathbf{n}, \mathbf{v} - \mathbf{y} \rangle ds$.

De las desigualdades de Cauchy-Schwarz y la de Hölder, tenemos que:

$$a(\mathbf{y}, \mathbf{v}) \le \|\mathbf{y}\|_{Y_D^k} \|\mathbf{v}\|_{Y_D^k} + 2\tau \mu \|\varepsilon(\mathbf{y})\|_{\mathbf{L}^{2\times 2}(\Omega_k)} \|\varepsilon(\mathbf{v})\|_{\mathbf{L}^{2\times 2}(\Omega_k)},$$

para todo $\mathbf{y}, \mathbf{v} \in Y_D^k$. Por lo tanto, $a(\cdot, \cdot)$ es una forma bilineal, coerciva y simétrica en el espacio Y_D^k . Además, $\varepsilon(\cdot)$ es lineal y continua, por lo tanto $j(\cdot)$ es convexa y continua por composición.

El operador $\int_{\Gamma_F^k} \langle \mathcal{K}\mathbf{n}, \cdot \rangle ds$ es lineal y consecuentemente, la parte derecha de (1.8) es lineal y continua en Y_D^k . De los resultados de ([12], Chap 3. Thm 3.1), podemos asegurar la existencia de una única solución $\bar{\mathbf{y}}$ de la desigualdad variacional (1.8).

De acuerdo con el estudio realizado en ([1], p.g. 110), la condición (1.8) es una condición necesaria y suficiente de optimalidad para el siguiente problema de minimización:

$$\left(\mathbf{P}^{k+1}\right) \begin{cases} \inf_{\mathbf{y} \in Y_D^k} \mathbf{J}(\mathbf{y}) := & \frac{1}{2}a(\mathbf{y}, \mathbf{y}) + j(\mathbf{y}) - (\bar{\mathbf{f}}, \mathbf{y}) - \tau\varsigma \int_{\Gamma_F^k} \langle \mathcal{K} \mathbf{n}, \mathbf{y} \rangle ds, \end{cases}$$

donde $\mathbf{f} = \tau \mathbf{f} + \mathbf{\tilde{y}}$. Como $j(\cdot)$ es un funcional continuo y convexo, el problema de minimización anterior tiene una única solución (ver [1], p.g. 110).

Estamos interesados en una caracterización de la solución de (\mathbf{P}^{k+1}) . Usando la teoría de la dualidad de Fenchel (ver [1], sección 5.3), vamos a obtener el problema dual de (\mathbf{P}^{k+1}) .

Introducimos el operador $\Lambda \in \mathcal{L}(Y^k, \mathbb{Z})$, definido por: $\Lambda \mathbf{v} := \varepsilon(\mathbf{v})$. Sea $\mathcal{F} : Y^k \to \mathbb{R}$, dado de la siguiente manera:

$$\mathcal{F}(\mathbf{y}) := \begin{cases} \frac{1}{2}a(\mathbf{y}, \mathbf{y}) - (\bar{\mathbf{f}}, \mathbf{y}) - \tau \zeta \int_{\Gamma_F^k} \langle \mathcal{K} \mathbf{n}, \mathbf{y} \rangle ds, & \text{si } \mathbf{y} \in Y_D^k, \\ +\infty, & \text{caso contrario,} \end{cases}$$

y $\mathcal{G} : \mathbf{Z} \to \mathbb{R}$ definido por $\mathcal{G}(\mathbf{q}) := \sqrt{2\tau} \mu \int_{\Omega_{k+1}} \|\mathbf{q}\| dx.$

Usando las funciones anteriores, el problema (\mathbf{P}^{k+1}) se escribe como:

$$\inf_{\mathbf{y}\in Y^k} \left\{ \mathcal{F}(\mathbf{y}) + \mathcal{G}(\Lambda \mathbf{y}) \right\}.$$
(1.10)

Tomando en consideración los resultados previos de [1], p.g. 111, el problema dual está dado como:

$$\sup_{\mathbf{q}\in\mathbf{Z}^*}\left\{-\mathcal{F}^*(-\Lambda^*\mathbf{q})-\mathcal{G}^*(\mathbf{q})\right\},\tag{1.11}$$

donde $\mathcal{F}^* : Y^{k*} \to \mathbb{R} \text{ y } \mathcal{G}^* : \mathbb{Z}^* \to \mathbb{R}$ son funcionales conjugados y convexos de $\mathcal{F} \text{ y } \mathcal{G}$, respectivamente y $\Lambda^* \in \mathcal{L}(\mathbb{Z}^*, Y^{k*})$ es el funcional adjunto de Λ .

El cálculo del funcional conjugado \mathcal{F}^* es análogo al exhibido en [1]. Sea $\mathbf{q} \in \mathbf{Z}^*$ e identificamos \mathbf{Z} con su dual \mathbf{Z}^* . Luego, tenemos que:

$$\mathcal{F}^{*}(-\Lambda^{*}\mathbf{q}) = \sup_{\mathbf{y}\in Y^{k}} \left\{ \langle -\Lambda^{*}\mathbf{q}, \mathbf{y} \rangle_{Y^{k*}, Y^{k}} - \mathcal{F}(\mathbf{y}) \right\},$$

$$= \sup_{\mathbf{y}\in Y^{k}} \left\{ -(\mathbf{q}, \varepsilon(\mathbf{y}))_{\mathbf{L}^{2\times 2}(\Omega_{k})} - \frac{1}{2}a(\mathbf{y}, \mathbf{y}) + (\bar{\mathbf{f}}, \mathbf{y}) + \tau_{\zeta} \int_{\Gamma_{F}^{k}} \langle \mathcal{K}\mathbf{n}, \mathbf{y} \rangle ds \right\}.$$
 (1.12)

Por consiguiente podemos deducir que la solución $\mathbf{y}_{\mathbf{q}} \in Y_D^k$ de (1.12) satisface la siguiente desigualdad variacional:

$$\begin{split} a(\mathbf{y}_{\mathbf{q}}, \mathbf{v} - \mathbf{y}_{\mathbf{q}}) + (\mathbf{q}, \varepsilon(\mathbf{v} - \mathbf{y}_{\mathbf{q}}))_{\mathbf{L}^{2 \times 2}(\Omega_{k})} &\geq (\bar{\mathbf{f}}, \mathbf{v} - \mathbf{y}_{\mathbf{q}}) \\ &+ \tau \varsigma \int_{\Gamma_{F}^{k}} \langle \mathcal{K} \mathbf{n}, \mathbf{v} - \mathbf{y}_{\mathbf{q}} \rangle ds \end{split}$$

para todo $\mathbf{v} \in Y_D^k$, la cual es equivalente a:

$$a(\mathbf{y}_{\mathbf{q}}, \mathbf{z}) + (\mathbf{q}, \varepsilon(\mathbf{z}))_{\mathbf{L}^{2 \times 2}(\Omega_{k})} - (\bar{\mathbf{f}}, \mathbf{z}) - \tau \varsigma \int_{\Gamma_{F}^{k}} \langle \mathcal{K} \mathbf{n}, \mathbf{z} \rangle ds = 0,$$

para todo $\mathbf{z} \in Y_{0,D}^k$. Luego, se sigue que:

$$\mathcal{F}^{*}(-\Lambda^{*}\mathbf{q}) = -\frac{1}{2}a(\mathbf{y}_{\mathbf{q}}, \mathbf{y}_{\mathbf{q}}) - (\mathbf{q}, \varepsilon(\mathbf{y}_{\mathbf{q}}))_{\mathbf{L}^{2\times2}(\Omega_{k})} + (\bar{\mathbf{f}}, \mathbf{y}_{\mathbf{q}})_{\mathbf{L}^{2}(\Omega_{k})} + \tau\varsigma \int_{\Gamma_{F}^{k}} \langle \mathcal{K}\mathbf{n}, \mathbf{y}_{\mathbf{q}} \rangle ds, \qquad (1.13)$$

,

23

donde $\mathbf{y}_{\mathbf{q}}$ depende de \mathbf{q} . Por otro lado, según [1], p.g. 113, el funcional \mathcal{G}^* es dado de la siguiente manera:

$$\mathcal{G}^*(\mathbf{q}) = \sup_{\mathbf{p} \in \mathbf{Z}} \left\{ (\mathbf{q}, \mathbf{p})_{\mathbf{L}^{2 \times 2}(\Omega_k)} - \bar{g} \int_{\Omega_{k+1}} \|\mathbf{p}\| dx \right\},\$$

donde $\bar{g} = \sqrt{2}\tau\mu$.

Definimos el siguiente conjunto:

$$\mathbf{Z}_{\bar{g}} = \left\{ \mathbf{q} \in \mathbf{Z} : (\mathbf{q}, \mathbf{p})_{\mathbf{L}^{2 \times 2}(\Omega_k)} \le \bar{g} \int_{\Omega_k} \|\mathbf{p}\| dx, \text{ para todo } \mathbf{p} \in \mathbf{L}^{2 \times 2}(\Omega_k) \right\},\$$

y así, tenemos que:

$$\mathcal{G}^*(\mathbf{q}) = \begin{cases} 0, & \text{si } \mathbf{q} \in \mathbf{Z}_{\bar{g}}, \\ +\infty, & \text{caso contrario.} \end{cases}$$
(1.14)

Finalmente, reemplazando (1.13) y (1.14) en (1.11) podemos escribir el problema dual de la siguiente manera:

$$(\mathbf{P}^{k+1*}) \begin{cases} \sup_{\mathbf{q}\in\mathbf{Z}_{\bar{g}}} J^*(\mathbf{q}) := \frac{1}{2}a(\mathbf{y}_{\mathbf{q}},\mathbf{y}_{\mathbf{q}}) + (\mathbf{q},\varepsilon(\mathbf{y}_{\mathbf{q}}))_{\mathbf{L}^{2\times 2}(\Omega_k)} - (\bar{\mathbf{f}},\mathbf{y}_{\mathbf{q}}) \\ -\tau\varsigma\int_{\Gamma_F^k}\langle\mathcal{K}\mathbf{n},\mathbf{y}_{\mathbf{q}}\rangle ds \\ \text{donde } \mathbf{y}_{\mathbf{q}} \text{ satisface:} \\ a(\mathbf{y}_{\mathbf{q}},\mathbf{z}) + (\mathbf{q},\varepsilon(\mathbf{z}))_{\mathbf{L}^{2\times 2}(\Omega_k)} = (\bar{\mathbf{f}},\mathbf{z}) + \tau\varsigma\int_{\Gamma_F^k}\langle\mathcal{K}\mathbf{n},\mathbf{z}\rangle ds, \\ \text{para todo } \mathbf{z}\in Y_{0,D}^k. \end{cases}$$

Mediante la teoría de la dualidad de Fenchel y el estudio realizado en [1], sección 5.3.1, el sistema de optimalidad de (\mathbf{P}^{k+1}) y (\mathbf{P}^{k+1*}) , está dado como sigue:

$$\left(\mathcal{S}^{k+1} \right) \begin{cases} a(\mathbf{y}, \mathbf{z}) + (\mathbf{q}, \varepsilon(\mathbf{z}))_{\mathbf{L}^{2 \times 2}(\Omega_{k})} - \langle \bar{\mathbf{f}}, \mathbf{z} \rangle - \tau \varsigma \int_{\Gamma_{F}^{k}} \langle \mathcal{K} \mathbf{n}, \mathbf{z} \rangle ds = 0, & \forall \mathbf{z} \in Y_{0,D}^{k}, \\ (\mathbf{q}, \mathbf{p})_{\mathbf{L}^{2 \times 2}(\Omega_{k})} \leq \bar{g} \int_{\Omega_{k}} \|\mathbf{p}\| dx, & \forall \mathbf{p} \in \mathbf{L}^{2 \times 2}(\Omega_{k}), \\ \bar{g} \int_{\Omega_{k}} \|\varepsilon(\mathbf{y})\| dx = (\mathbf{q}, \varepsilon(\mathbf{y}))_{\mathbf{L}^{2 \times 2}(\Omega_{k})}. \end{cases}$$

Gracias a un resultado demostrado en ([1], Lema 5.2, p.g. 113), se verifica que la siguiente relación:

$$(\mathbf{q}, \mathbf{p})_{\mathbf{L}^{2 \times 2}(\Omega_k)} \leq \bar{g} \int_{\Omega} \|\mathbf{p}\| dx$$
, para todo $\mathbf{p} \in \mathbf{L}^{2 \times 2}(\Omega_k)$,

es equivalente a:

 $\|\mathbf{q}\| \le \bar{g}, \qquad \text{c.t.p. en } \Omega_k.$ (1.15)

Además, según ([1], Lema 5.3, p.g. 114), tenemos que la siguiente identidad:

$$\bar{g} \int_{\omega} \|\varepsilon(\mathbf{y})\| dx = (\mathbf{q}, \varepsilon(\mathbf{y}))_{\mathbf{L}^{2 \times 2}(\Omega_k)},$$

es equivalente a:

$$\begin{cases} \varepsilon(\mathbf{y})(x) = 0 & \text{o}, \\ \varepsilon(\mathbf{y})(x) \neq 0 & \text{y } \mathbf{q}(x) = \bar{g} \frac{\varepsilon(\mathbf{y})(x)}{\|\varepsilon(\mathbf{y})(x)\|}. \end{cases}$$
(1.16)

Según [1], las expresiones (1.15) y (1.16) pueden ser escritas de la siguiente forma:

$$\max(\sigma \bar{g}, \|\sigma \mathbf{q} + \varepsilon(\mathbf{y})(x)\|) \mathbf{q}(x) = \bar{g}(\sigma \mathbf{q} + \varepsilon(\mathbf{y}))(x), \quad \text{ c.t.p. en } \Omega_k \text{ y } \sigma > 0.$$
(1.17)

Finalmente, utilizando la identidad (1.17), podemos rescribir el sistema de optimalidad (\mathcal{S}^{k+1}) de la siguiente manera:

$$\left(\mathcal{S}^{k+1} \right) \begin{cases} \mathbf{y} \in Y_D^k \\ a(\mathbf{y}, \mathbf{z}) + (\mathbf{q}, \varepsilon(\mathbf{z}))_{\mathbf{L}^{2 \times 2}(\Omega_k)} - (\bar{\mathbf{f}}, \mathbf{z}) - \tau \varsigma \int_{\Gamma_F^k} \langle \mathcal{K} \mathbf{n}, \mathbf{z} \rangle ds = 0, & \text{ para todo } \mathbf{z} \in Y_{0,D}^k, \\ \mathbf{q}(x) = \bar{g} \frac{(\sigma \mathbf{q} + \varepsilon(\mathbf{y}))(x)}{\max(\sigma \bar{g}, \|\sigma \mathbf{q}(x) + \varepsilon(\mathbf{y})(x)\|)}, & \text{ c.t.p. en } \Omega_k \neq \sigma > 0. \end{cases}$$

Definimos los conjuntos activos \mathcal{A} e inactivos \mathcal{I} para el sistema (\mathcal{S}^{k+1}), de la siguiente forma:

$$\mathcal{A} = \left\{ x \in \Omega_k : \|\sigma \mathbf{q} + \varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})(x)\| \ge \sigma \bar{g} \right\},$$

$$\mathcal{I} = \Omega_k \smallsetminus \mathcal{A}.$$

Observación. Los conjuntos activos \mathcal{A} representan las zonas del dominio donde el tensor de stress supera el límite elástico, y consecuentemente, el fluido se comporta como líquido. En contraste con los conjuntos inactivos \mathcal{I} , los cuales representan las zonas donde el tensor de stress no supera el límite elástico y por lo tanto, el fluido se comporta como sólido.

1.3.1. Regularización del subproblema estático

Como el operador divergencia asociado al funcional $J^*(\mathbf{q})$ en el problema dual (\mathbf{P}^{k+1*}) tiene un kernel no trivial, no es posible garantizar la unicidad de la solución. Siguiendo el procedimiento de [1], p.g. 112, regularizamos el problema dual incorporando un término de Tikhonov. Denotemos por γ al parámetro de regularización. Por lo tanto, el problema dual regularizado asociado al subproblema estático de Bingham es el siguiente:

$$(\mathbf{P}_{\gamma}^{k+1*}) \begin{cases} \sup_{\mathbf{q}\in\mathbf{K}_{\bar{g}}} J^{*}(\mathbf{q}) := \frac{1}{2}a(\mathbf{y}_{\mathbf{q}},\mathbf{y}_{\mathbf{q}}) + (\mathbf{q},\varepsilon(\mathbf{y}_{\mathbf{q}}))_{\mathbf{L}^{2\times2}(\Omega_{k})} - (\bar{\mathbf{f}},\mathbf{y}_{\mathbf{q}}) \\ -\tau\varsigma\int_{\Gamma_{F}^{k}}\langle\mathcal{K}\mathbf{n},\mathbf{y}_{\mathbf{q}}\rangle ds, -\frac{1}{2\gamma}\|\mathbf{q}\|_{\mathbf{L}^{2\times2}(\Omega_{k})}^{2} \\ \text{donde } \mathbf{y}_{\mathbf{q}} \text{ satisface:} \\ a(\mathbf{y}_{\mathbf{q}},\mathbf{z}) + (\mathbf{q},\varepsilon(\mathbf{z}))_{\mathbf{L}^{2\times2}(\Omega_{k})} = (\bar{\mathbf{f}},\mathbf{z}) + \tau\varsigma\int_{\Gamma_{F}^{k}}\langle\mathcal{K}\mathbf{n},\mathbf{z}\rangle ds, \\ \text{para todo } \mathbf{z}\in Y_{0,D}^{k}. \end{cases}$$

Definimos el operador de regularización $\Psi : \mathbb{R}^{d \times d} \to \mathbb{R}$, (d = 2, 3) de la siguiente forma:

$$\Psi(\mathbf{M}) := \begin{cases} \bar{g} \|\mathbf{M}\| - \frac{\bar{g}^2}{2\gamma}, & \text{si } \|\mathbf{M}\| \ge \frac{\bar{g}}{\gamma}, \\ \frac{\gamma}{2} \|\mathbf{M}\|^2, & \text{si } \|\mathbf{M}\| < \frac{\bar{g}}{\gamma}, \end{cases}$$
(1.18)

así, podemos regularizar la norma de Frobenius usando la función continuamente diferenciable Ψ . Usando esta función, el problema primal regularizado de (\mathbf{P}^{k+1}) es:

$$\left(\mathbf{P}_{\gamma}^{k}\right) \begin{cases} \min_{\mathbf{y} \in Y_{D}^{k}} \mathbf{J}_{\gamma}(\mathbf{y}) := & \frac{1}{2}a(\mathbf{y}, \mathbf{y}) + \int_{\Omega_{k}} \Psi(\varepsilon(\mathbf{y})) dx - (\bar{\mathbf{f}}, \mathbf{y}) - \tau\varsigma \int_{\Gamma_{F}^{k}} \langle \mathcal{K}\mathbf{n}, \mathbf{y} \rangle ds, \end{cases}$$

Luego, podemos establecer la conexión entre los problemas dual y primal regularizados. Esta relación queda expresada en la siguiente proposición: **Proposición 2.** El problema $(\mathbf{P}_{\gamma}^{k+1*})$ es el problema dual de $(\mathbf{P}_{\gamma}^{k+1})$ y

$$J_{\gamma}^{*}(\boldsymbol{q}_{\gamma}) = J_{\gamma}(\boldsymbol{y}_{\gamma}),$$

donde \boldsymbol{q}_{γ} y \boldsymbol{y}_{γ} son las soluciones de $(\boldsymbol{P}_{\gamma}^{k+1*})$ y $(\boldsymbol{P}_{\gamma}^{k+1})$, respectivamente. Demostración. Reemplazamos el funcional \mathcal{G} en (1.10) por

$$\mathcal{G}_{\gamma}^{k*}(\mathbf{p}) = \int_{\Omega_k} \Psi(\mathbf{p}) dx,$$

donde Ψ es dado por (1.18). Luego, para $\mathbf{q} \in \mathbf{Z}$, tenemos que:

$$\mathcal{G}_{\gamma}^{k*}(\mathbf{q}) = \sup_{\mathbf{p}\in\mathbf{K}} \left\{ \int_{H_{\gamma}^{k}} \left[\mathbf{q}:\mathbf{p} - \bar{g} \|\mathbf{p}\| + \frac{\bar{g}^{2}}{2\gamma} \right] dx + \int_{\Omega_{k}\smallsetminus H_{\gamma}^{k}} \left[(\mathbf{q}:\mathbf{p}) - \frac{\gamma}{2} \|\mathbf{p}\|^{2} \right] dx \right\},$$
(1.19)

donde $H^k_{\gamma} := \{ x \in \Omega_k : \|\mathbf{p}\| \ge \frac{\bar{g}}{\gamma}, \text{ c.t.p. } \}.$

De (1.14) y (1.19) concluimos que $\mathcal{G}_{\gamma}^{k}(\mathbf{q}) = \infty$ si y solo si $\mathbf{q} \in \mathbf{Z}_{\bar{g}}$. Por este motivo, podemos asumir que $\mathbf{q} \in \mathbf{Z}_{\bar{g}}$, es decir $\|\mathbf{q}(x)\| \leq \bar{g}$ c.t.p. en Ω_{k} .

Por otro lado, definimos el siguiente funcional $\Upsilon : \mathbb{Z} \to \mathbb{R}$ dado por:

$$\Upsilon(\mathbf{p}) := \int_{H_{\gamma}^{k}} \left[\mathbf{q} : \mathbf{p} - \bar{g} \| \mathbf{p} \| + \frac{\bar{g}^{2}}{2\gamma} \right] dx
+ \int_{\Omega_{k} \smallsetminus H_{\gamma}^{k}} \left[(\mathbf{q} : \mathbf{p}) - \frac{\gamma}{2} \| \mathbf{p} \|^{2} \right] dx,$$
(1.20)

e introducimos la función $\tilde{\mathbf{p}}_0 \in \mathbf{Z}$ definida de la siguiente forma:

$$\tilde{\mathbf{p}}_0(x) := \begin{cases} \mathbf{p}_0(x), & \text{si } \|\mathbf{p}_0(x)\| \ge \frac{\bar{g}}{\gamma} \\ 0 & \text{si } \|\mathbf{p}_0(x)\| < \frac{\bar{g}}{\gamma}, \end{cases}$$

para $\mathbf{p}_0 \in \mathbf{Z}$. Es posible mostrar que $\Upsilon(\mathbf{p}_0) \leq \Upsilon(\tilde{\mathbf{p}}_0)$, lo cual implica que:

$$\sup_{\mathbf{p}\in\mathbf{Z}}\Upsilon(\mathbf{p}) = \sup\left\{\Upsilon(\mathbf{p}): \mathbf{p}\in\mathbf{Z} \text{ y } \|\mathbf{p}(x)\| \leq \frac{\bar{g}}{\gamma} \text{ c.t.p. en } \Omega_k\right\}.$$

El supremo de (1.20) es calculado considerando solamente el segundo término, el cual es un funcional cuadrático cóncavo. El maximizador de (1.20) está dado por $\bar{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{q}}{\gamma}$, lo cual muestra que:

$$\mathcal{G}_{\gamma}^{k*}(\mathbf{q}) = \begin{cases} \frac{1}{2\gamma} \|\mathbf{q}\|_{\mathbf{L}^{2\times 2}(\Omega_k)}, & \text{si } q \in \mathbf{Z}_g, \\ +\infty, & \text{caso contrario.} \end{cases}$$

Debido al procedimiento de regularización, el funcional objetivo de $(\mathbf{P}_{\gamma}^{k+1*})$ es K - uniformemente cóncavo (ver [1]) y tiene una única solución $\mathbf{q}_{\gamma} \in \mathbf{Z}$, para cada $\gamma > 0$. De la convexidad estricta del funcional objetivo J_{γ} , podemos asegurar la existencia de una única solución para $(\mathbf{P}_{\gamma}^{k+1})$.

1.4. Sistema de optimalidad del subproblema estático de Bingham

En esta sección caracterizaremos las soluciones de $(\mathbf{P}_{\gamma}^{k+1})$ y $(\mathbf{P}_{\gamma}^{k+1*})$ mediante la teoría de la dualidad como en [1]. De acuerdo a la teoría de la dualidad de Fenchel, estas soluciones satisfacen que:

$$-\Lambda^* \mathbf{q}_{\gamma} \in \partial \mathcal{F}(\mathbf{y}_{\gamma}), \tag{1.21}$$

$$\mathbf{q}_{\gamma} \in \partial \mathcal{G}_{\gamma}(\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})). \tag{1.22}$$

Además, de la regularización (1.18), obtenemos que \mathcal{F} y \mathcal{G}_{γ} son diferenciables en \mathbf{y}_{γ} y $\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})$, respectivamente. Según el resultado dado en [1], p.g. 118, concluimos que (1.21) implica que:

$$a(\mathbf{y}_{\gamma}, \mathbf{z}) + (\mathbf{q}_{\gamma}, \varepsilon(\mathbf{z}))_{\mathbf{L}^{2 \times 2}(\Omega_{k})} - (\bar{\mathbf{f}}, \mathbf{z}) - \tau \zeta \int_{\Gamma_{F}^{k}} \langle \mathcal{K} \mathbf{n}, \mathbf{z} \rangle ds = 0, \qquad (1.23)$$

para todo $\mathbf{z} \in Y_{0,D}^k$.

Gracias a la diferenciabilidad de \mathcal{G}_{γ} , la relación (1.22) puede escribirse como:

$$(\mathbf{q}_{\gamma}, \mathbf{p})_{\mathbf{L}^{2 \times 2}(\Omega_{k})} = \bar{g} \int_{\mathcal{A}_{\gamma}^{k}} \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})}{\|\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})\|} : \mathbf{p} \right) dx + \gamma \int_{\Omega_{k} \smallsetminus \mathcal{A}_{\gamma}^{k}} \left(\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma}) : \mathbf{p} \right) dx$$
(1.24)

para $\mathbf{p} \in \mathbf{Z}$, o equivalentemente, puede ser escrita por casos de la siguiente manera:

$$\mathbf{q}_{\gamma}(x) = \begin{cases} \gamma \varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})(x), & \text{c. t. p. en } \Omega_k \smallsetminus \mathcal{A}_{\gamma}^k, \\ \bar{g} \frac{\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})(x)}{\|\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})(x)\|}, & \text{c. t. p. en } \mathcal{A}_{\gamma}^k, \end{cases}$$
donde $\mathcal{A}_{\gamma}^k = \Big\{ x \in \Omega_k : \|\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})(x)\| \ge \frac{\bar{g}}{\gamma} \text{ c. t. p.} \Big\}.$

De la última caracterización deducimos que las soluciones \mathbf{y}_{γ} y \mathbf{q}_{γ} de los problemas regularizados $(\mathbf{P}_{\gamma}^{k+1})$ y $(\mathbf{P}_{\gamma}^{k+1*})$ respectivamente, verifican el siguiente sistema:

$$(\mathbf{S}_{\gamma}^{k+1}) \begin{cases} \mathbf{y}_{\gamma} \in Y_{D}^{k}, \\ a(\mathbf{y}_{\gamma}, \mathbf{z}) + (\mathbf{q}_{\gamma}, \varepsilon(\mathbf{z}))_{\mathbf{L}^{2 \times 2}(\Omega_{k})} = (\bar{\mathbf{f}}, \mathbf{z})_{\mathbf{L}^{2}(\Omega_{k})} + \tau \varsigma \int_{\Gamma_{F}^{k}} \langle \mathcal{K} \mathbf{n}, \mathbf{z} \rangle ds, \\ \text{para todo } \mathbf{z} \in Y_{0,D}^{k}. \\ \mathbf{q}_{\gamma}(x) = \bar{g} \gamma \frac{\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})(x)}{\max(\bar{g}, \gamma \| \varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})(x) \|)}, \\ \text{c.t.p. en } \Omega_{k}, \text{ para todo } \gamma > 0. \end{cases}$$

En lo que sigue, usaremos las notaciones \mathcal{A}_{γ} y \mathcal{I}_{γ} para referirnos a los conjuntos activos e inactivos de $(\mathbf{S}_{\gamma}^{k+1})$, respectivamente. Estos conjuntos están definidos de la siguiente manera:

$$\mathcal{A}_{\gamma} = \left\{ x \in \Omega_k : \|\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})(x)\| \ge \frac{\bar{g}}{\gamma}, \text{ c. t. p.} \right\},$$

$$\mathcal{I}_{\gamma} = \Omega_k \smallsetminus A_{\gamma}.$$

A continuación, presentamos un resultado que muestra la convergencia de una sucesión de soluciones regularizadas hacia la solución original, análogo al estudio realizado en [1].

Teorema 3. Las soluciones \boldsymbol{y}_{γ} de $(\boldsymbol{P}_{\gamma}^{k+1})$ convergen a la solución $\bar{\boldsymbol{y}}$ de (\boldsymbol{P}^{k+1}) fuertemente en $\boldsymbol{H}^{1}(\Omega_{k})$ y la solución \boldsymbol{q}_{γ} de $(\boldsymbol{P}_{\gamma}^{k+1*})$ converge hacia la solución $\bar{\boldsymbol{q}}$ de (\boldsymbol{P}^{k+1*}) débilmente en $\boldsymbol{L}^{2\times 2}(\Omega_{k})$, cuando $\gamma \to \infty$.

Demostración. Sean $(\mathbf{y}_{\gamma}, \mathbf{q}_{\gamma})$ tales que satisfacen:

$$a(\mathbf{y}_{\gamma}, \mathbf{z}) + (\mathbf{q}_{\gamma}, \varepsilon(\mathbf{z}))_{\mathbf{L}^{2 \times 2}(\Omega_{k})} - (\bar{\mathbf{f}}, \mathbf{z}) - \tau \varsigma \int_{\Gamma_{F}^{k}} \langle \mathcal{K} \mathbf{n}, \mathbf{z} \rangle ds = 0, \qquad (1.25)$$

para todo $\mathbf{z} \in Y_{0,D}^k$. Por otro lado, sean $(\bar{\mathbf{y}}, \bar{\mathbf{q}})$ tales que verifican:

$$a(\bar{\mathbf{y}}, \mathbf{z}) + (\bar{\mathbf{q}}, \varepsilon(\mathbf{z}))_{\mathbf{L}^{2 \times 2}(\Omega_k)} - (\bar{\mathbf{f}}, \mathbf{z}) - \tau \varsigma \int_{\Gamma_F^k} \langle \mathcal{K} \mathbf{n}, \mathbf{z} \rangle ds = 0, \qquad (1.26)$$

para todo $\mathbf{z} \in Y_{0,D}^k$.

Por esta razón, restando (1.25) de (1.26) obtenemos que:

$$a(\bar{\mathbf{y}} - \mathbf{y}_{\gamma}, \mathbf{z}) = (\mathbf{q}_{\gamma} - \bar{\mathbf{q}}, \varepsilon(\mathbf{z}))_{\mathbf{L}^{2 \times 2}(\Omega_k)},$$

y utilizando la definición de a, tenemos que:

$$\tau 2\mu \int_{\Omega} \left(\varepsilon \left(\bar{\mathbf{y}} - \mathbf{y}_{\gamma} \right) : \varepsilon(\mathbf{z}) \right) \, dx + \int_{\Omega} \left(\bar{\mathbf{y}} - \mathbf{y}_{\gamma} \right) \mathbf{z} \, dx = \int_{\Omega} \left(\mathbf{q}_{\gamma} - \bar{\mathbf{q}} : \varepsilon(\mathbf{z}) \right) \, dx, (1.27)$$

todo $\mathbf{z} \in Y_{0,D}^{k}$.

para todo $\mathbf{z} \in Y_{0,D}^{\kappa}$.

Tomando $\mathbf{z} = \bar{\mathbf{y}} - \mathbf{y}_{\gamma}$ en (1.27), obtenemos que:

$$\tau 2\mu \int_{\Omega} \left(\varepsilon \left(\bar{\mathbf{y}} - \mathbf{y}_{\gamma} \right) : \varepsilon (\bar{\mathbf{y}} - \mathbf{y}_{\gamma}) \right) dx + \int_{\Omega} \left(\bar{\mathbf{y}} - \mathbf{y}_{\gamma} \right) (\bar{\mathbf{y}} - \mathbf{y}_{\gamma}) dx = \int_{\Omega} \left(\mathbf{q}_{\gamma} - \bar{\mathbf{q}} : \varepsilon (\bar{\mathbf{y}} - \mathbf{y}_{\gamma}) \right) dx. \quad (1.28)$$

Análogamente al estudio realizado en [1], vamos a calcular cotas para el término $(\mathbf{q}_{\gamma} - \bar{\mathbf{q}} : \varepsilon(\bar{\mathbf{y}} - \mathbf{y}_{\gamma})(x))$ en los siguientes conjuntos disjuntos: $\mathcal{A} \cap \mathcal{A}_{\gamma}, \ \mathcal{A} \cap \mathcal{I}_{\gamma}, \ \mathcal{A}_{\gamma} \cap \mathcal{I},$ y $\mathcal{I}_{\gamma} \cap \mathcal{I}$, Los conjuntos activos e inactivos están dados de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{\gamma} &= \left\{ x \in \Omega_{k} : \|\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})(x)\| \geq \frac{\bar{g}}{\gamma}, \text{ c. t. p.} \right\}, \\ \mathcal{I}_{\gamma} &= \Omega_{k} \smallsetminus A_{\gamma}, \\ \mathcal{A} &= \left\{ x \in \Omega_{k} : \|\sigma \mathbf{q} + \varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})(x)\| \geq \sigma \bar{g}, \text{ c. t. p.} \right\}, \\ \mathcal{I} &= \Omega_{k} \smallsetminus \mathcal{A}. \end{aligned}$$

Analicemos por casos:

• En $\mathcal{A} \cap \mathcal{A}_{\gamma}$: $\|\bar{\mathbf{q}}(x)\| = \|\mathbf{q}_{\gamma}(x)\| = \bar{g}, \ \bar{\mathbf{q}} = \bar{g} \frac{\varepsilon(\bar{\mathbf{y}})(x)}{|\varepsilon(\bar{\mathbf{y}})(x)|}$ y $\mathbf{q}_{\gamma} = g \frac{\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})(x)}{|\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})(x)|}$. Luego, tenemos la siguiente acotación punto a punto:

$$\begin{pmatrix} (\mathbf{q}_{\gamma} - \bar{\mathbf{q}})(x) : \varepsilon(\bar{\mathbf{y}} - \mathbf{y}_{\gamma})(x) \end{pmatrix} \leq \|\mathbf{q}_{\gamma}\| \|\varepsilon(\bar{\mathbf{y}})(x)\| - \bar{g}\frac{\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})(x)}{|\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})(x)|} : \varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})(x) \\ - \bar{g}\frac{\varepsilon(\bar{\mathbf{y}})(x)}{\|\varepsilon(\bar{\mathbf{y}})(x)\|} : \varepsilon(\bar{\mathbf{y}})(x) + \|\bar{\mathbf{q}}(x)\| \|\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})(x)\|, \\ \leq \bar{g}\|\varepsilon(\bar{\mathbf{y}})(x)\| - \bar{g}\|\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})(x)\| - \bar{g}\|\varepsilon(\bar{\mathbf{y}})(x)\| \\ + \bar{g}\|\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})(x)\| = 0. \tag{1.29}$$

• En $\mathcal{A} \cap \mathcal{I}_{\gamma}$: Sabemos que $\varepsilon(\mathbf{y})(x) = \gamma^{-1}\mathbf{q}_{\gamma}(x), |\mathbf{q}_{\gamma}(x)| \leq \bar{g}, |\bar{\mathbf{q}}(x)| = \bar{g} \text{ y } \bar{\mathbf{q}} = \bar{g} \frac{\varepsilon(\bar{\mathbf{y}})(x)}{|\varepsilon(\bar{\mathbf{y}})(x)|}.$ Luego tenemos que:

$$\begin{pmatrix} (\mathbf{q}_{\gamma} - \bar{\mathbf{q}})(x) : \varepsilon(\bar{\mathbf{y}} - \mathbf{y}_{\gamma})(x) \end{pmatrix} \leq \bar{g} \|\varepsilon(\bar{\mathbf{y}})(x)\| - \gamma^{-1} \|\mathbf{q}_{\gamma}(x)\| - \bar{g} \|\varepsilon(\bar{\mathbf{y}})(x)\| \\ + \bar{g} \|\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})(x)\|, \\ = -\gamma^{-1} \|\mathbf{q}_{\gamma}(x)\|^{2} + \bar{g}\gamma^{-1} \|\mathbf{q}_{\gamma}(x)\|, \quad (1.30) \\ < \gamma^{-1} \left(\bar{g}^{2} - \|\mathbf{q}_{\gamma}(x)\|^{2}\right) < \frac{\bar{g}^{2}}{\gamma}.$$

• En $\mathcal{A}_{\gamma} \cap \mathcal{I}$: Para este caso, tenemos que $\varepsilon(\bar{\mathbf{y}})(x) = 0$ y $\mathbf{q}_{\gamma}(x) = \bar{g} \frac{\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma}(x))}{|\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma}(x)|)}$. Entonces:

$$\begin{aligned} \left(\mathbf{q}_{\gamma} - \bar{\mathbf{q}} : \varepsilon(\bar{\mathbf{y}} - \mathbf{y}_{\gamma})(x) \right) &= \left(\left(\bar{\mathbf{q}} - \mathbf{q}_{\gamma} \right) : \varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})(x) \right), \\ &\leq \| \bar{\mathbf{q}}(x) \| \| \varepsilon \left(\mathbf{y}_{\gamma} \right)(x) \| - \bar{g} \| \varepsilon \left(\mathbf{y}_{\gamma} \right)(x) \|, \\ &\leq \| \bar{\mathbf{q}}(x) \| \| \varepsilon \left(\mathbf{y}_{\gamma} \right)(x) \| - \| \bar{\mathbf{q}}(x) \| \| \varepsilon \left(\mathbf{y}_{\gamma} \right)(x) \| = 0. \end{aligned}$$

$$(1.31)$$

• En $\mathcal{I}_{\gamma} \cap \mathcal{I}$: Aquí, se verifica que $\varepsilon(\mathbf{y})(x) = 0$, $\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})(x) = \gamma^{-1}\mathbf{q}_{\gamma}(x)$, $\|\bar{\mathbf{q}}(x)\| \leq \bar{g}$ y $\|\mathbf{q}_{\gamma}(x)\| < \bar{g}$, de manera que:

$$\begin{aligned} \left(\mathbf{q}_{\gamma} - \bar{\mathbf{q}} : \varepsilon(\bar{\mathbf{y}} - \mathbf{y}_{\gamma})(x) \right) &= \left(\left(\bar{\mathbf{q}} - \mathbf{q}_{\gamma} \right) : \varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})(x) \right), \\ &\leq \| \bar{\mathbf{q}}(x) \| \| \varepsilon \left(\mathbf{y}_{\gamma} \right)(x) \| - \gamma^{-1} \| \mathbf{q}_{\gamma}(x) \|^{2}, \\ &\leq \gamma^{-1} g \| \mathbf{q}_{\gamma}(x) \| - \gamma^{-1} \| \mathbf{q}_{\gamma}(x) \|^{2}, \\ &< \gamma^{-1} \left(\bar{g}^{2} - \| \mathbf{q}_{\gamma}(x) \|^{2} \right) \leq \frac{\bar{g}^{2}}{\gamma}. \end{aligned}$$
(1.32)

De (1.28) y (1.29)-(1.32), obtenemos que:

$$a\left(\bar{\mathbf{y}} - \mathbf{y}_{\gamma}, \bar{\mathbf{y}} - \mathbf{y}_{\gamma}\right) < \int_{\Omega} \frac{\bar{g}^2}{\gamma} dx.$$
 (1.33)

Ahora, como $(\bar{\mathbf{y}} - \mathbf{y}_{\gamma}) \in Y^k \subset X^k$, donde

$$X^k := \{ \mathbf{y} \in \mathbf{H}^1(\Omega_k) \ \mathbf{y} = 0 \ \mathrm{en} \ \Gamma_0^k \},\$$

y $a(\cdot,\cdot)$ es coerciva en X^k (ver [1], Teorema 5.6, p.g. 119), es decir existe un $\alpha>0$ tal que:

$$a\left(\bar{\mathbf{y}} - \mathbf{y}_{\gamma}, \bar{\mathbf{y}} - \mathbf{y}_{\gamma}\right) \ge \alpha \|\bar{\mathbf{y}} - \mathbf{y}_{\gamma}\|_{\mathbf{H}^{1}(\Omega_{k})}^{2}, \qquad (1.34)$$

de (1.33) se tiene que $\mathbf{y}_{\gamma} \to \bar{\mathbf{y}}$ fuertemente en $\mathbf{H}^{1}(\Omega)$, cuando $\gamma \to \infty$.

Por otro lado, como $\mathbf{y}_{\gamma} \to \bar{\mathbf{y}}$ luego (1.27) implica que:

$$\lim_{\gamma \to \infty} \left(\mathbf{q}_{\gamma} - \bar{\mathbf{q}}, \varepsilon(\mathbf{z}) \right)_{L^{2 \times 2}} = 0,$$

para todo $\mathbf{z} \in Y_{0,D}^k$. Lo cual implica que $\mathbf{q}_{\gamma} \rightharpoonup \bar{\mathbf{q}}$, débilmente en el subespacio $Y_{\varepsilon} \subset \mathbf{Z}$, definido por:

 $Y_{\varepsilon} := \{ \mathbf{p} \in \mathbf{Z} : \text{ existe } \mathbf{v} \in Y_{0,D} \text{ tal que } \mathbf{p} = \varepsilon(\mathbf{v}) \}.$

28

A continuación vamos a recuperar la presión p en el sistema $(\mathbf{S}_{\gamma}^{k+1})$ y probar que ésta pertenece a $L^2(\Omega_k)$ como en [1]. Además veremos que si $p \in L^2_0(\Omega_{k+1})$, entonces ésta es única. El espacio $L^2_0(\Omega_k)$ está dado de la siguiente manera:

$$L_0^2(\Omega_k) = \left\{ p \in L^2(\Omega_k) : \int_{\Omega_k} p(x) \, dx = 0 \right\},$$

Teorema 4. Existe una única función $p \in L^2(\Omega_k)$ tal que:

$$(\boldsymbol{y}_{\gamma} - 2\tau\mu\Delta\boldsymbol{y}_{\gamma} - Div \; \boldsymbol{q}_{\gamma} + \nabla p, \boldsymbol{z}) = (\bar{\boldsymbol{f}}, \boldsymbol{z})_{\boldsymbol{L}^{2}(\Omega_{k+1})} + \tau\varsigma \int_{\Gamma_{F}^{k}} \langle \mathcal{K}\boldsymbol{n}, \boldsymbol{z} \rangle ds,$$

para todo $\boldsymbol{z} \in Y^k$.

Demostración. Como $(\mathbf{y}_{\gamma}, \mathbf{q}_{\gamma}) \in Y_D^k \times \mathbf{Z}$ satisface la ecuación (1.23), tenemos que:

$$a(\mathbf{y}_{\gamma}, \mathbf{z}) + (\mathbf{q}_{\gamma}, \varepsilon(\mathbf{z}))_{\mathbf{L}^{2 \times 2}(\Omega_{k})} = (\bar{\mathbf{f}}, \mathbf{z}) + \tau\varsigma \int_{\Gamma_{F}^{k}} \langle \mathcal{K} \mathbf{n}, \mathbf{z} \rangle ds.$$
(1.35)

para todo $\mathbf{z} \in Y_{0,D}^k$.

Por otro lado, como div $\mathbf{y}_{\gamma} = 0$ y div $\mathbf{z} = 0$ se tiene que (1.35) implica que:

$$(\mathbf{y}_{\gamma} + 2\tau\mu\Delta\mathbf{y}_{\gamma} + \operatorname{Div}\mathbf{q}_{\gamma} - \bar{\mathbf{f}}, \mathbf{z}) - \tau\varsigma \int_{\Gamma_{F}^{k}} \langle \mathcal{K}\mathbf{n}, \mathbf{z} \rangle ds = 0,$$

para todo $\mathbf{z} \in Y_{0,D}^k$. Si $\mathbf{z} \in \mathbf{H}_0^1(\Omega_k)$:

$$\langle \mathbf{y}_{\gamma} - 2\tau\mu\Delta\mathbf{y}_{\gamma} - \operatorname{Div}\mathbf{q}_{\gamma} - \overline{\mathbf{f}}, \mathbf{z} \rangle_{\mathbf{H}^{-1}(\Omega_k), \mathbf{H}_0^1(\Omega_k)} = 0,$$

con lo cual, por el teorema de Rham (ver [1], p.g. 121) existe un $p \in L^2(\Omega_k)$ tal que:

$$-2\tau\mu\Delta\mathbf{y}_{\gamma} - \operatorname{Div}\mathbf{q}_{\gamma} + \nabla p = \bar{\mathbf{f}} - \mathbf{y}_{\gamma}, \qquad \text{en } \mathbf{H}^{-1}(\Omega_k), \qquad (1.36)$$

el cual es único si $p \in L^2_0(\Omega_k)$ (ver [1]).

Por otro lado como $(\bar{\mathbf{f}} - \mathbf{y}_{\gamma}) \in L^2(\Omega_k)$ luego $(-2\tau\mu\Delta\mathbf{y}_{\gamma} - \text{Div }\mathbf{q}_{\gamma} + \nabla p) \in L^2(\Omega_k)$. Además, como div $\mathbf{y}_{\gamma} = 0$ entonces:

$$2\tau\mu\Delta\mathbf{y}_{\gamma} + \operatorname{Div}\mathbf{q}_{\gamma} - \nabla p = \operatorname{Div}\left(2\tau\mu\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma}) + \mathbf{q}_{\gamma} - p\cdot I\right) \in L^{2}(\Omega_{k}).$$
(1.37)

Adicionalmente, multiplicando (1.36) por $\mathbf{z} \in Y_{0,D}^k$ e integrando por partes tenemos que:

$$\int_{\Omega_{k}} \mathbf{y}_{\gamma} \mathbf{z} dx + 2\tau \mu \int_{\Omega_{k+1}} \varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma}) : \varepsilon(\mathbf{z}) dx + \int_{\Omega_{k}} \mathbf{q}_{\gamma} : \varepsilon(\mathbf{z}) dx - \int_{\Omega_{k}} p \cdot I : \varepsilon(\mathbf{z}) dx - \int_{\Omega_{k}} \langle \bar{\mathbf{f}}, \mathbf{z} \rangle dx - \int_{\Gamma_{F}^{k}} \langle (2\tau \mu \varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma}) + \mathbf{q}_{\gamma} - p \ I) \cdot \mathbf{n}, \mathbf{z} \rangle ds = 0, \quad (1.38)$$

y como $p \cdot I : \varepsilon(\mathbf{z}) = p$ div $\mathbf{z} = 0$, entonces la expresión (1.38) nos queda:

$$\int_{\Omega_k} \mathbf{y}_{\gamma} \mathbf{z} dx + 2\tau \mu \int_{\Omega_{k+1}} \varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma}) : \varepsilon(\mathbf{z}) dx + \int_{\Omega_k} \mathbf{q}_{\gamma} : \varepsilon(\mathbf{z}) dx$$
$$- \int_{\Omega_k} \langle \mathbf{\bar{f}}, \mathbf{z} \rangle dx - \int_{\Gamma_F^k} \langle (2\tau \mu \varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma}) + \mathbf{q}_{\gamma} - p \ I) \cdot \mathbf{n}, \mathbf{z} \rangle ds = 0.$$
(1.39)

Tomando en cuenta que $(\mathbf{y}_{\gamma}, \mathbf{q}_{\gamma})$ satisface la siguiente ecuación:

$$a(\mathbf{y}_{\gamma}, \mathbf{z}) + (\mathbf{q}_{\gamma}, \varepsilon(\mathbf{z}))_{\mathbf{L}^{2 \times 2}(\Omega_{k})} - (\bar{\mathbf{f}}, \mathbf{z}) - \tau \varsigma \int_{\Gamma_{F}^{k}} \langle \mathcal{K} \mathbf{n}, \mathbf{z} \rangle ds = 0, \qquad (1.40)$$

y comparando las ecuaciones (1.39)-(1.40), deducimos que:

$$(2\tau\mu\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma}) + \mathbf{q}_{\gamma} - p \cdot I) \cdot \mathbf{n} = \tau\varsigma\mathcal{K}\mathbf{n}, \qquad \text{en } \Gamma_F^k$$

Ahora demostremos que la presión p es única. Supogamos que existe $\tilde{p} \in L^2(\Omega_k), \tilde{p} \neq p$, que satisface (1.36). Si $p_1 \in L^2_0(\Omega_{k+1})$ satisface únicamente (1.36) podemos concluir que existe $C_1, C_2 \in \mathbb{R}$ tal que $p = p_1 + C_1$ y $\tilde{p} = p_1 + C_2$. Por tanto, la única posibilidad es que se diferencien por una constante. De este modo, tenemos que:

$$(2\tau\mu\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma}) + \mathbf{q}_{\gamma} - p \cdot I) \cdot \mathbf{n} = \tau\varsigma\mathcal{K}\mathbf{n}, \qquad \text{en } \Gamma_{F}^{k}, \qquad (1.41)$$

$$(2\tau\mu\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma}) + \mathbf{q}_{\gamma} - \tilde{p} \cdot I) \cdot \mathbf{n} = \tau\varsigma \mathcal{K}\mathbf{n}, \qquad \text{en } \Gamma_{F}^{k}, \qquad (1.42)$$

y restando (1.41) de (1.42) obtenemos que $(C_1 - C_2)\mathbf{n} = 0$ en Γ_F^k . Como $\mathbf{n} \neq 0$ luego tenemos que $C_1 = C_2$ y $\tilde{p} = p$. Hemos demostrado que la presión es única si $p \in L^2_0(\Omega_k)$.

Análogamente a lo deducido en [1] y gracias al último teorema, podemos escribir el siguiente sistema variacional que incluye el término de la presión:

Encontrar $(\mathbf{y}_{\gamma}, \mathbf{q}_{\gamma}, p) \in Y_{0,D}^k \times \mathbf{Z} \times L^2(\Omega_k)$ tales que:

$$(\mathbf{S}_{\gamma,p}^{k+1}) \begin{cases} a(\mathbf{y}_{\gamma}, \mathbf{v}) + (\mathbf{q}_{\gamma}, \varepsilon(\mathbf{v}))_{L^{2\times 2}} - (p, \operatorname{div} \mathbf{v}) \\ = (\overline{\mathbf{f}}, \mathbf{v}) + \tau_{\varsigma} \int_{\Gamma_{F}^{k}} \langle \mathcal{K} \mathbf{n}, \mathbf{v} \rangle ds, & \text{para todo } \mathbf{v} \in Y_{0,D}^{k}, \\ (\operatorname{div} \mathbf{y}_{\gamma}, r) = 0, & \text{para todo } r \in L^{2}(\Omega_{k}), \\ \mathbf{q}_{\gamma}(x) = \bar{g} \frac{\gamma(\varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma}))(x)}{\max(\bar{g}, \gamma \| \varepsilon(\mathbf{y}_{\gamma})(x) \|)}, & \text{c.t.p. en } \Omega_{k}, \end{cases}$$

para todo $\mathbf{v} \in X_{0,D}^k$, donde:

$$X_{0,D}^{k} = \{ \mathbf{v} \in \mathbf{H}^{1}(\Omega_{k}) : \mathbf{v} = 0 \text{ en } \Gamma_{0}^{k} \cup \Gamma_{D}^{k} \},\$$

 $y \ \bar{\mathbf{f}} = \tau \mathbf{f} + \mathbf{y}_k.$

Podemos notar que si $(\mathbf{y}_{\gamma}, \mathbf{q}_{\gamma}, p) \in Y_{D}^{k} \times \mathbf{Z} \times L^{2}(\Omega_{k})$ resuelve el problema $(\mathbf{S}_{\gamma,p}^{k+1})$, luego es solución del sistema optimalidad $(\mathbf{S}_{\gamma}^{k+1})$.

En resumen, hemos deducido el sistema primal-dual regularizado $(\mathbf{S}_{\gamma,p}^{k+1})$ de (\mathbf{S}^{k+1}) que depende del parámetro γ y se ha recuperado el término de la presión. Adicionalmente, se ha demostrado que si el parámetro γ tiende al infinito, su solución tiende a la solución del sistema original.

En el siguiente capítulo, discretizaremos espacialmente el sistema regularizado $(\mathbf{S}_{\gamma,p}^{k+1})$ para obtener aproximaciones numéricas de la solución.

Capítulo 2

Aproximación por el método de elementos finitos

El sistema de optimalidad obtenido al final del capítulo anterior es no lineal y representa un análisis mas complejo en su resolución. Teniendo en cuenta este precedente, en este capítulo discretizamos espacialmente el sistema de optimalidad mediante el método de elementos finitos para obtener un sistema no lineal en dimensión finita.

Motivados en los métodos de resolución de dinámica de fluidos, realizamos un análisis sobre las funciones base para el método de elementos finitos. Según [4, 31], no podemos tomar arbitrariamente las funciones base en el método de elementos finitos, debido a la interacción entre la ecuaciones de momento y continuidad. Esta interacción puede causar problemas de inestabilidad, el cual está relacionado con el problema del "inf-sup" o la condición de "Ladyzhenskaya-Babuska-Brezzi" (condición LBB, ver [31]).

Por cuestiones de estabilidad en el método de elementos finitos para dinámica de fluidos, usamos una clase especial de funciones base, denominadas elementos de Taylor-Hood, (revisar [10]). Cada una de estas funciones base es una dupleta que está conformada por una componente usada para el esquema variacional de la presión y la restante, usada para el esquema de la velocidad. En un esquema de Taylor-Hood, el grado polinomial de las funciones base para la presión es menor que el grado usado para la velocidad.

Por otro lado, en el sistema de optimalidad que caracteriza la solución de Bingham podemos notar que interviene las funciones norma y máximo que no son diferenciables en el sentido usual, pero si admiten derivadas generalizadas en el sentido de Newton. Por lo que, el sistema no lineal en dimensión finita será resuelto mediante el método de Newton semisuave como en [1]. Al final, presentamos algunos experimentos numéricos para el caso estático que muestran el desempeño numérico de este método.

2.1. Método de elementos finitos

Recordemos que la solución del sistema de optimalidad caracteriza a la del problema de Bingham. En esta sección, discretizaremos espacialmente el sistema de optimalidad obtenido al final del capítulo anterior mediante el método de elementos finitos. La discretización realizada en esta sección permite posteriormente utilizar derivadas generalizadas en el sentido de Newton de las funciones norma y máximo que intervienen en el sistema de optimalidad.

Para nuestros fines, identificamos el espacio $L^{2\times 2}(\Omega_k)$ con el espacio $(L^2(\Omega_k))^{d\times d}$ y definimos el operador $\vartheta: L^{2\times 2}(\Omega_k) \to (L^2(\Omega_k))^{d\times d}$ mediante:

$$\vartheta(\mathbf{q}) = (q_{11}, q_{12}, \dots, q_{1d}, q_{21}, q_{22}, \dots, q_{2d}, \dots, q_{d1}, q_{d2}, \dots, q_{dd})^T,$$

 con

$$\mathbf{q} = \begin{bmatrix} q_{11} & q_{12} & \cdots & q_{1d} \\ q_{21} & q_{22} & \cdots & q_{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{d1} & q_{d2} & \cdots & q_{dd} \end{bmatrix}$$

Notemos que el operador anterior ϑ es un isomorfismo entre $L^{2\times 2}(\Omega_k)$ y $(L^2(\Omega_k))^{d\times d}$. En este sentido, el espacio $(L^2(\Omega_k))^{d\times d}$ es dotado con el siguiente producto escalar:

$$(\mathbf{q}, \mathbf{p})_{d \times d} := \int_{\Omega_k} \langle \mathbf{q}(x), \mathbf{p}(x) \rangle dx$$

donde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ es el producto escalar de Frobenius, dado de la siguiente manera:

 $\langle \mathbf{q}, \mathbf{p} \rangle := \operatorname{tr}(\mathbf{q}\mathbf{p}^T), \text{ para todo } \mathbf{q}, \ \mathbf{p} \in \mathbb{R}^{d \times d}.$

Notación. Usamos la notación con superíndice h para referirnos a espacios discretizados en el espacio, donde h representa el tamaño de la discretización espacial.

Así, introducimos espacios finito-dimensionales $\mathbf{V}^h \subset \mathbf{H}^1(\Omega_k)$, $\mathbf{W}^h \subset (L^2(\Omega_k))^{d \times d}$ y $Q^h \subset L^2(\Omega_k)$ y definimos los siguientes subespacios:

$$X_{0,D}^{k,h} := \{ \mathbf{v}^h \in \mathbf{V}^h : \mathbf{v}^h = 0 \text{ en } \Gamma_0^{k+1} \cup \Gamma_D^k \}, Y_{0,D}^{k,h} := \{ \mathbf{v}^h \in X_{0,D}^{k,h} : (r^h, \operatorname{div} \mathbf{v}^h)_2 = 0, \text{ para todo } r^h \in Q^h \}$$

y el conjunto:

$$Y_D^{k,h} := \{ \mathbf{v}^h \in \mathbf{V}^h : (r^h, \operatorname{div} \mathbf{v}^h)_2 = 0, \text{ para } r^h \in Q^h, \ \mathbf{v}^h = 0 \text{ en } \Gamma_0^k \text{ y } \mathbf{v}^h = \mathbf{y}_D \\ \text{ en } \Gamma_D^k \}.$$

Usando el análisis realizado en el capítulo anterior, podemos plantear el problema discretizado de $(\mathbf{S}_{\gamma,p}^{k+1})$ como la búsqueda de $\mathbf{y}^h \in Y_D^{k,h}$, $\mathbf{q}^h \in \mathbf{W}^h$ y $p^h \in Q^h$ tales que:

$$a(\mathbf{y}^{h}, \mathbf{v}^{h}) + (\mathbf{q}^{h}, \varepsilon(\mathbf{v}^{h}))_{L^{2\times 2}} - (p^{h}, \operatorname{div} \mathbf{v}^{h}) = (\mathbf{\bar{f}}^{h}, \mathbf{v}^{h}) + \tau \varsigma \int_{\Gamma_{F}^{k}} \langle \mathcal{K} \mathbf{n}, \mathbf{v}^{h} \rangle, \quad \text{ para todo } \mathbf{v}^{h} \in X_{0, D}^{k, h}, \quad (2.1)$$

$$(\operatorname{div} \mathbf{v}^h, r^h) = 0, \quad \text{para todo } r^h \in Q^h, \quad (2.2)$$

$$\max(\bar{g}, \gamma \| \varepsilon(\mathbf{y}^h)(x) \|) \mathbf{q}^h(x) - \bar{g}\gamma(\varepsilon(\mathbf{y}^h))(x) = 0, \quad \text{c.t.p. en } \Omega_k.$$
(2.3)

Además, en virtud de [1], para ayudar a fortalecer la estabilidad de los espacios discretos $X_{0,D}^{k,h}$ y Q^h , penalizamos la ecuación (2.2) relajando esta restricción de la siguiente forma: para $\rho > 0$ suficientemente pequeño,

$$(\operatorname{div} \mathbf{v}^h, r^h) + \varrho(p^h, r^h) = 0, \quad \text{para todo } r^h \in Q^h.$$
 (2.4)

Tomando en cuenta la última consideración, es posible mostrar que la discretización es estable para algunos espacios escogidos $X_{0,D}^h$ y Q^h de manera adecuada (ver [4], p.g. 60).

2.1.1. Elementos finitos de Taylor-Hood

En esta sección introducimos una clase especial de funciones base, las cuales garantizan la estabilidad de la discretización en el método de elementos finitos para simular fenómenos físicos que involucran fluidos. El estudio realizado en [31] analiza las ecuaciones de Navier-Stokes y sugiere el uso de elementos finitos de Taylor-Hood para superar la inestabilidad resultante de la interacción entre las ecuaciones del momento y de la continuidad. Motivados en aquello, utilizamos este tipo de elementos. Al final de esta sección, ilustramos el esquema de construcción de las funciones base de Taylor-Hood.

Consideramos Ω_k un dominio acotado en \mathbb{R}^d (d = 2, 3) y $\mathcal{T}_h = \{\mathcal{T}\}$ una triangulación de Ω_k , cuyos elementos verifican las siguientes propiedades:

1.
$$\cup_{\mathcal{T}\in\mathcal{T}_h}\mathcal{T}=\Omega_k.$$

- 2. $\operatorname{int} \mathcal{T}_1 \cap \operatorname{int} \mathcal{T}_2 = \emptyset$ para todo $\mathcal{T}_1, \mathcal{T}_2 \in \mathcal{T}_h$, ó $\mathcal{T}_1 = \mathcal{T}_2$.
- 3. Cada arista de la triangulación pertenece a $\partial \Omega_k$ o es una arista de algún $\mathcal{T} \in \mathcal{T}_h$.

El espacio de polinomios en \mathbb{R}^N de grado menor o igual a $N \ge 0$ es denotado por \mathcal{P}_N . Es decir, si $p \in \mathcal{P}_N$ entonces es de la forma:

$$p(x) = \sum_{|\alpha| \le N} C_{\alpha} x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2} \dots x_N^{\alpha_N},$$

con $C_{\alpha} \in \mathbb{R}$ y α un vector de índices. El espacio de elementos finitos, que denominamos simpliciales, están dados por:

$$\mathbb{X}_{0}^{h} := \{ \mathbf{v} \in L^{2}(\Omega_{k}) : \mathbf{v}|_{\mathcal{T}} \in \mathcal{P}_{0} \text{ para todo } \mathcal{T} \in \mathcal{T}_{h} \}, \\ \mathbb{X}_{N}^{h} := \{ \mathbf{v} \in C(\bar{\Omega}_{k}) : \mathbf{v}|_{\mathcal{T}} \in \mathcal{P}_{N} \text{ para todo } \mathcal{T} \in \mathcal{T}_{h} \},$$

para $N \ge 1$. Estos espacios consisten de polinomios a trozos que, para $N \ge 1$, son continuos en Ω_k .

Según [10], seguimos que $\mathbb{X}_0^h \subset \mathbf{H}^1(\Omega_k)$ para $N \ge 1$. Así, consideramos la siguiente pareja:

$$(\mathbf{V}^h, Q^h) = ((\mathbb{X}^h_N)^2, \mathbb{X}^h_{N-1} \cap L^2_0(\Omega_k)),$$

que se denomina dupleta de Taylor-Hood (ver [4]).

A continuación, definimos la LBB-estabilidad, la cual es una condición suficiente para que el sistema (2.1)-(2.3) tenga única solución.

Definición 1. La pareja (V^h , Q^h) se llama LBB-estable si existe una constante $\beta > 0$ tal que:

$$\sup_{\boldsymbol{v}^h \in \boldsymbol{V}^h} \frac{(r^h, \operatorname{div} \boldsymbol{v}^h)}{\|\boldsymbol{v}^h\|_{\boldsymbol{H}^1(\Omega_k)}} \ge \beta \|r^h\|_{L^2(\Omega_k)},$$

para todo $r^h \in Q^h$.

Adicionalmente en virtud de [10], la pareja (\mathbf{V}^h, Q^h) es LBB-estable para $N \ge 2$.

En nuestro caso, utilizamos los elementos de Taylor-Hood con N = 2, es decir:

$$(\mathbf{V}^{h}, Q^{h}) = ((\mathbb{X}_{2}^{h})^{2}, \mathbb{X}_{1}^{h} \cap L_{0}^{2}(\Omega_{k})).$$
(2.5)

Por lo estudiado en [1], p.g. 124, se sigue que si la LBB-estabilidad se verifica para las funciones del método de elementos finitos, luego el sistema discretizado (2.1)-(2.3) tiene una única solución. Es decir, los espacios seleccionados (2.5) son adecuados para garantizar unicidad de la solución.

Observación. La existencia y unicidad de la solución de (2.1)-(2.3) se prueba usando argumentos análogos de la teoría de la dualidad de Fenchel, realizada en el capítulo anterior, con los espacios funcionales discretos.

A continuación, vamos a ilustrar la construcción de las funciones base de elementos finitos de Taylor-Hood para la presión y la velocidad, presentadas en [31] y [38]. Así, consideremos el dominio $\Omega_k = [0, 4] \times [0, 3]$ y una primera triangulación, con tamaño de paso h = 1 como en la Figura 2.1.



Figura 2.1: Triangulación para la presión. Elementos finitos de Taylor Hood.

Cada tripleta de nodos de la triangulación de la Figura 2.1 define un triángulo o elemento. Llamaremos *pnodos* al conjunto de todos los nodos de esta triangulación. Como es natural, para construir funciones base lineales ϖ_i , consideramos que éstas toman el valor de 1 en el nodo *i*, 0 en los otros nodos y son lineales sobre cada triángulo. Podemos observar la forma de estas funciones base en la Figura 2.2. Así, representamos la variable de la presión como combinación lineal de funciones lineales a trozos ϖ_i , como sigue:

$$p(x_1, x_2) = \sum_{i=1}^{pnodos} p_i \varpi_i(x_1, x_2),$$

donde la *i*-ésima función base está asociada con el *i*-ésimo pnodo.



Figura 2.2: Función base lineal para la presión. Elementos finitos de Taylor Hood.

Ahora, construimos una segunda triangulación asociada a la velocidad, que es un refinamiento de la primera. El conjunto de nodos de esta triangulación los llamaremos *vnodos*. Empezamos incluyendo todos los *pnodos*, luego creamos un nuevo nodo en el punto medio de cada arista y los añadimos a la triangulación. Esta segunda triangulación la ilustramos en la Figura 2.3.



Figura 2.3: Triangulación para la velocidad. Elementos finitos de Taylor-Hood.

Notamos que este procedimiento involucra dos triangulaciones anidadas, una para la presión y otra para la velocidad. Las velocidades estarán definidas en un mallado de triángulos de seis nodos. Estos triángulos comparten sus vértices con los triángulos de tres nodos de la presión.

Usamos los triángulos de seis nodos para definir funciones base v_i , las cuales son 1 en el nodo i, 0 en todos los demás nodos y polinomios cuadráticos sobre cada triángulo o elemento. De esta manera, la variable de la velocidad es representada mediante la combinación lineal de las funciones v_i cuadráticas. Debido a que la velocidad es un vector, ésta tiene componentes (v_1, v_2) ; por lo tanto, la combinación lineal se escribe de la siguiente manera:
$$v_1(x_1, x_2) = \sum_{i=1}^{v nodos} v_{1i} v_i(x_1, x_2),$$
$$v_2(x_1, x_2) = \sum_{i=1}^{v nodos} v_{2i} v_i(x_1, x_2),$$

En la Figura 2.4 observamos una función base cuadrática de punto intermedio sobre dos elementos o triángulos, mientras que en la Figura 2.5, podemos observar una función base usual (asociada a la velocidad) sobre seis triángulos.



Figura 2.4: Función base cuadrática de punto intermedio sobre dos triángulos. Elementos finitos de Taylor-Hood.



Figura 2.5: Función base cuadrática para la velocidad sobre seis triángulos. Elementos finitos de Taylor-Hood.

2.2. Método de Newton-Semismooth

En esta sección, aplicamos el método propuesto en [1], para resolver el sistema no lineal de ecuaciones $(\mathbf{S}_{\gamma,p}^{k+1})$. Es bien conocido que las funciones norma y máximo, que aparecen en el sistema $(\mathbf{S}_{\gamma,p}^{k+1})$, no son diferenciables en el sentido usual pero si admiten derivadas generalizadas en el sentido de Newton (ver [15]). Además, estás funciones son semisuaves y por composición, el sistema $(\mathbf{S}_{\gamma,p}^{k+1})$ también lo es. Esto motiva la utilización del método de Newton pues podemos aprovechar esta propiedad en el desempeño numérico.

Notación. Nuevamente, por conveniencia en la escritura omitimos los subíndices asociados a la discretización espacial y temporal.

En virtud de la sección anterior, consideramos $\mathbf{v} \in \mathbf{V}^h$, $\mathbf{w} \in \mathbf{W}^h$ y $r \in Q^h$ funciones fijas, luego el sistema de ecuaciones (2.1)-(2.3) con la relajación incorporada de presión (2.4) puede ser escrito mediante el siguiente operador **F**:

$$\mathbf{F}(\mathbf{y},\mathbf{q},p) := \begin{bmatrix} a(\mathbf{y},\mathbf{v}) + (\mathbf{q},\varepsilon(\mathbf{v}))_{2\times 2} - (p,\operatorname{div}(\mathbf{v})) - (\bar{\mathbf{f}},\mathbf{v}) - \tau\varsigma \int_{\Gamma_F^k} \langle \mathcal{K}\mathbf{n},\mathbf{v} \rangle ds \\ (\operatorname{div}\mathbf{y},r) + \varrho(p,r) \\ (\operatorname{máx}(0,\gamma \|\varepsilon(\mathbf{y})\| - \bar{g})\mathbf{q},\mathbf{w})_{2\times 2} - (\bar{g}\gamma\varepsilon(\mathbf{y}),\mathbf{w})_{2\times 2} \end{bmatrix} = 0. \quad (2.6)$$

Definición 2. Sea $D \subset \mathbb{R}^n$ abierto. La aplicación $F : D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ se llama Newtondiferenciable, en un conjunto abierto $V \subset D$, si existe una derivada generalizada $G : V \to \mathbb{R}^{n \times m}$ tal que:

$$\lim_{h \to 0} \frac{1}{\|h\|_{\mathbb{R}^n}} \|F(x+h) - F(x) - G(x+h)h\|_{\mathbb{R}^m} = 0,$$
(2.7)

para todo $x \in V$.

Las funciones norma y máximo son Newton-diferenciables. Así, la derivada generalizada en el sentido de Newton del máx $(0, \cdot)$: $\mathbb{R} \to \mathbb{R}$ es la función $G_{\text{máx}}$, definida de la siguiente manera:

$$G_{\max}(v) := \begin{cases} 1, & \text{si } v \ge 0\\ 0, & \text{si } v < 0 \end{cases}$$

y la derivada de Newton de la función norma es la función $\nu_{\parallel,\parallel}$, dada de la siguiente forma:

$$\nu_{\parallel \cdot \parallel}(y) := \begin{cases} \frac{y}{||y||}, & \text{si } y \neq 0, \\ 0, & \text{si } y = 0. \end{cases}$$

Denotamos la matriz jacobiana de (2.6) mediante $\mathbf{J}_{\mathbf{F}} = \mathbf{J}_{\mathbf{F}}(\mathbf{y}, \mathbf{q}, p)$ y las entradas de ésta

por $\mathbf{J}_{\mathbf{F}}(i, j)$ para i, j = 1, 2, 3, dadas de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{\mathbf{F}}(1,1) &= a(\cdot,\mathbf{v}), \\ \mathbf{J}_{\mathbf{F}}(1,2) &= (\cdot,\varepsilon(\mathbf{v}))_{2\times 2}, \\ \mathbf{J}_{\mathbf{F}}(1,3) &= -(\cdot,\operatorname{div}(\mathbf{v})), \\ \mathbf{J}_{\mathbf{F}}(2,1) &= (\operatorname{div}(\cdot),r), \\ \mathbf{J}_{\mathbf{F}}(2,2) &= 0, \\ \mathbf{J}_{\mathbf{F}}(2,3) &= \varrho(\cdot,r), \\ \mathbf{J}_{\mathbf{F}}(3,1) &= \left(G_{\max}(\gamma \|\varepsilon(\mathbf{y})\| - \bar{g})\frac{\varepsilon(\cdot)}{\|\varepsilon(\cdot)\|}\mathbf{q}, \mathbf{w}\right)_{2\times 2} - (\bar{g}\gamma\varepsilon(\cdot), \mathbf{w})_{2\times 2}, \\ \mathbf{J}_{\mathbf{F}}(3,2) &= (\operatorname{máx}(0,\gamma \|\varepsilon(\mathbf{y})\| - \bar{g})(\cdot), \mathbf{w})_{2\times 2}, \\ \mathbf{J}_{\mathbf{F}}(3,3) &= 0. \end{aligned}$$

Consecuentemente, dado un punto inicial adecuado $(\mathbf{y}^0, \mathbf{q}^0, p^0) \in \mathbf{V}^h \times \mathbf{W}^h \times Q^h$, el paso de Newton para el sistema (2.6) está dado por:

i) La resolución del sistema:

$$\mathbf{J}_{\mathbf{F}} \cdot \begin{bmatrix} \delta \mathbf{y} \\ \delta \mathbf{q} \\ \delta p \end{bmatrix} = -\mathbf{F}, \qquad (2.8)$$

donde $\delta \mathbf{y} \in \mathbf{V}^h$, $\delta \mathbf{q} \in \mathbf{W}^h$, $\delta p \in Q^h$ y $\mathbf{F} = \mathbf{F}(\mathbf{y}, \mathbf{q}, p)$, y

ii) La actualización de las variables:

$$\mathbf{y}^{new} = \mathbf{y} + \delta \mathbf{y}, \tag{2.9}$$

$$\mathbf{q}^{new} = \mathbf{q} + \delta \mathbf{q}, \qquad (2.10)$$

$$p^{new} = p + \delta p. \tag{2.11}$$

Más adelante en la implementación numérica, usaremos el problema de Stokes para inicializar las funciones (\mathbf{y}^0, p^0) puesto que el método de Newton demanda un punto de inicialización adecuado.

El sistema de ecuaciones (2.8)-(2.11) es la linealización del sistema de optimalidad regularizado ($\mathbf{S}_{\gamma,p}^{k+1}$) para el problema de Bingham.

2.3. Experimentos numéricos de un problema estático de Bingham

Consideramos el experimento numérico de un fluido de Bingham estático en un subdominio Ω_k , el cual es resuelto mediante la caracterización de la solución por el sistema de optimalidad, vista al final del capítulo anterior. Como dijimos antes, este sistema no lineal será resuelto mediante el método de Newton-Semismooth desarrollado en la sección anterior. Al final, mostramos que este método evidencia una convergencia superlineal (local), lo cual es muy conveniente para nuestros fines posteriores.

En todo este trabajo, los experimentos numéricos son resueltos usando la plataforma de cálculo de ecuaciones diferenciales parciales FEniCS (ver [36]), debido a la facilidad de ésta en simular dinámica de fluidos, utilizando el método de elementos finitos.

En este experimento, tomamos una masa aislada estática en un plano inclinado, sobre la que actúa el efecto de una fuerza externa que simula ser la gravedad. Las cantidades y especificaciones del experimento se muestran en el Cuadro 2.1. La modelización considera varios aspectos como la tensión superficial en la frontera libre Γ_F , condición de ingreso de fluido en Γ_D y condición antideslizante en Γ_0 . En la Figura 2.6 observamos la localización de las fronteras antes mencionadas.

Significado	Notación	Cantidad
Paso espacial	h	5.98×10^{-2}
Tensión superficial	ς	5×10^{-3}
Viscocidad	μ	1
Fuerza externa	f	$(0, -9.8)^T$
Límite elástico	g	25
Parámetro de regularización	γ	1000
Parámetro de relajación de presión	Q	10^{-5}

Cuadro 2.1: Parámetros adimensionales para el experimento de Bingham estático



Figura 2.6: Plano inclinado: subdominio Ω_k

El método de Newton-Semismooth ha demostrado tener un buen desempeño numérico para resolver este tipo de problemas.

Por requerimientos numéricos posteriores, usamos un dominio computacional Θ que contenga a Ω_k , suficientemente grande. Esto lo podemos observar en la Figura 2.6. Como se mencionó en el capítulo anterior, la frontera de Ω_k se divide en tres partes: antideslizante Γ_0 , ingreso Γ_D y frontera libre Γ_F . Es así que, en Γ_D y Γ_0 imponemos las siguientes condidiciones de frontera:

$$\mathbf{y}_{D} = \begin{pmatrix} y_{D,1} \\ y_{D,2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x_{1}(x_{1}-2) \\ 0 \end{pmatrix},$$
$$\mathbf{y}_{0} = \begin{pmatrix} y_{0,1} \\ y_{0,2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

respectivamente. Para el caso de la frontera libre Γ_F , imponemos una condición de stress del tipo $\sigma_{Tot} \cdot \mathbf{n} = \varsigma \mathcal{K} \mathbf{n}$, donde σ_{Tot} es el tensor total de stress y \mathbf{n} representa el vector normal al subdominio en la frontera libre. También suponemos que existe una fuerza externa \mathbf{f} que afecta a la masa del fluido y simula ser la fuerza de gravedad:

$$\mathbf{f} = \left(\begin{array}{c} 0\\ -9.8 \end{array}\right).$$

Se espera que el material fluya bajo los efectos de la fuerza de ingres
o \mathbf{y}_D y la fuerza $\mathbf{f}.$

El método de Newton-Semismooth requiere una inicialización (\mathbf{y}^0, p^0) como fue descrito en la sección precedente. Para esto, tomamos la resolución del problema de Stokes como se sugiere en [1] y $\mathbf{q}^0 = \mathbf{0}$. El criterio de parada en el método de Newton es dado de la siguiente manera:

$$\left\| \left(\delta \mathbf{y}_h^k, \delta \mathbf{q}_h^k, \delta p_h^k \right\| \right) \right\|_{L^2(\Omega_k)^2 \times L^2(\Omega_k)^{2 \times 2} \times L^2(\Omega_k)} < tol,$$

donde $tol = 10^{-5}$ representa una tolerancia adecuada.

En la Figuras 2.7 y 2.8 mostramos la magnitud y el campo vectorial de la velocidad respectivamente, que corresponden a un comportamiento usual de fluidos de Bingham.



Figura 2.7: Magnitud de la velocidad. Experimento de Bingham estático



Figura 2.8: Campo vectorial de la velocidad. Experimento de Bingham estático

Adicionalmente en la Figura 2.9 mostramos la presión del fluido, donde observamos que es positiva en la parte superior del subdominio Ω_k , contrastando con la negatividad en la parte inferior.



Figura 2.9: Campo escalar de la presión. Experimento de Bingham estático

Para un mejor análisis mecánico de la velocidad, presentamos sus componentes horizontal y vertical en las Figuras 2.10 y 2.11. En particular, en la Figura 2.11 (izquierda) observamos que el fluido describe un comportamiento sólido cerca a la frontera de ingreso Γ_D . En la Figura 2.10 (derecha), observamos que la fuerza externa **f** influencia al fluido a desplazarse por el plano inclinado. En particular, la velocidad decrece en dirección vertical cerca de la frontera libre. (a) Componente horizontal de la velocidad.(b) Componente vertical de la velocidad.Figura 2.10: Componentes de la velocidad. Experimento de Bingham estático



(a) Componente horizontal de la velocidad(b) Componente vertical de la velocidadFigura 2.11: Componentes de la velocidad (vista 3D). Experimento de Bingham estático

En la Figura 2.12 mostramos los conjuntos activos (gris) e inactivos (anaranjado) respresentados por la norma de Frobenius del multiplicador \mathbf{q} . Observamos que los puntos activos son la mayoría del subdominio. La parte del fluido que tiene un comportamiento sólido es la zona anaranjada, en contraste con la zona gris donde el fluido se comporta como un líquido.

También podemos notar en la Figura 2.12 que la masa aislada actúa como un líquido cerca de la frontera antideslizante (en el centro del subdominio), mientras que tiene un comportamiento sólido cerca de la frontera de ingreso.



Figura 2.12: Conjuntos activos (gris) e inactivos (anaranjado). Experimento de Bingham estático

El método de Newton-Semismooth usa iteraciones que violan la condición de factibilidad impuesta en la variable dual $\|\mathbf{q}\| \leq g$, pero cuando éste termina, las componentes que violan esta condición tienden a cero.

En el Cuadro 2.2 y en la Figura 2.13 observamos el rápido decrecimiento de los residuos $\| (\delta \mathbf{y}_h^k, \delta \mathbf{q}_h^k, \delta p_h^k \|) \|_{L^2(\Omega_k)^2 \times L^2(\Omega_k)^4 \times L^2(\Omega_k)}$, que confirma la convergencia superlineal (local) del método. Según [1], las propiedades cualitativas de convergencia del método son independientes de los datos de condición de frontera.

Iteraciones	$\ \delta \mathbf{y}_h^k\ _{L^2(\Omega_k)^2}$	$\ \delta \mathbf{q}_h^k\ _{L^2(\Omega_k)^{2 imes 2}}$	$\ \delta p_h^k\ _{L^2(\Omega_k)}$
1	7.177×10^{-2}	4.545×10^1	4.662×10^{1}
2	7.246×10^{-2}	2.783×10^{0}	4.800×10^{0}
3	1.195×10^{-2}	1.183×10^{0}	2.318×10^0
4	1.689×10^{-3}	4.497×10^{-1}	1.221×10^{0}
5	9.690×10^{-4}	4.493×10^{-1}	1.288×10^0
6	4.273×10^{-4}	2.531×10^{-1}	5.617×10^{-1}
7	1.997×10^{-4}	1.172×10^{-1}	5.689×10^{-1}
8	1.178×10^{-4}	4.453×10^{-2}	1.742×10^{-1}
9	1.759×10^{-4}	6.423×10^{-2}	1.922×10^{-1}
10	3.853×10^{-5}	1.294×10^{-2}	6.945×10^{-2}
11	7.960×10^{-6}	3.122×10^{-3}	1.073×10^{-2}
12	2.116×10^{-7}	5.975×10^{-5}	2.060×10^{-4}
13	1.949×10^{-9}	1.216×10^{-6}	3.662×10^{-6}

Cuadro 2.2: Iteraciones y residuos del método de Newton-Semismooth. Experimento de Bingham estático



Figura 2.13: Norma $\| (\delta \mathbf{y}_h^k, \delta \mathbf{q}_h^k, \delta p_h^k \|) \|_{L^2(\Omega_k)^2 \times L^2(\Omega_k)^{2 \times 2} \times L^2(\Omega_k)}$ para $\gamma = 10^4$. Método de Newton-Semismooth

Finalmente, en el Cuadro 2.3 comparamos el comportamiento del método para diferentes valores del parámetro de regularización γ . Notamos en este experimento que el número de iteraciones aumentan, pero el método sigue mostrando una tasa de convergencia superlineal.

γ	Iteraciones
1	10
10^{2}	11
10^{3}	11
10^{4}	13

Cuadro 2.3: Para cada valor γ : número de iteraciones del método de Newton-Semismooth

Por el resultado de convergencia de la solución del problema regularizado, vista en el capítulo anterior (Teorema 3, p.g. 27), si tomamos γ suficientemente grande entonces la solución del problema regularizado se aproxima a la del problema original de Bingham.

Capítulo 3

Formulación de la evolución de la frontera libre a través del método de conjuntos de nivel

En los problemas de fluidos con frontera libre distinguimos dos clases de modelización: el primero se trata de la modelización de dos fluidos interactuando entre ellos, conocido como problemas de frontera libre de dos fases (ver [4]), donde el método de conjuntos de nivel es el que distingue que cada fluido ocupe un determinado lugar en el espacio. En la metodología de dos fases, se requiere que los dos fluidos estén modelados por una misma dinámica. Por ejemplo: el agua y el aire son fluidos newtonianos y la dinámica que describe a ambos corresponde a las ecuaciones de Navier-Stokes. Por lo tanto, para este caso, la modelización de dos fases es una elección adecuada.

El segundo tipo de modelización se lo conoce como frontera libre de una sola fase donde se analiza la dinámica de un solo fluido (ver [28]). Elegimos este tipo de modelización ya que nos interesa exclusivamente el comportamiento del fluido de Bingham que interactúa con una geometría dada y no su interacción con otro fluido. La interacción de un fluido de Bingham (no newtoniano) con el aire (newtoniano) corresponde a la modelización de dos fases, el cual no está considerado en este trabajo. Además, en muchas aplicaciones es razonable despreciar el aire debido a la gran diferencia de los parámetros que caracterizan a ambos fluidos.

Los métodos de conjuntos de nivel se basan en la resolución de una ecuación de transporte llamada ecuación de "level-set" o ecuación de distancia, la cual transporta un subdominio por el efecto de un campo de velocidad. Un cierto nivel de la solución de la ecuación de transporte es el que describe el dominio que ocupa el fluido en un instante. El método de conjuntos de nivel involucra una ecuación de transporte, la cual presenta problemas en su resolución numérica debido a la naturaleza convectiva del transporte y a la no preservación de las propiedades conservativas del sistema. Para aplicar satisfactoriamente este método, primero se deben superar algunas dificultades que explicamos más adelante.

En este capítulo, discutimos la resolución de la ecuación de transporte junto con los problemas que se presentan en la obtención de su solución numérica. También establecemos las herramientas que usamos para superar tales inconvenientes numéricos, especialmente nos enfocamos en la regularización y reinicialización del método de conjuntos de nivel (ver [6, 14]). Discutimos adicionalmente sobre el tipo de funciones de elementos finitos adecuadas para la resolución de la ecuación de transporte. Finalmente, presentamos algunos experimentos numéricos en los que mostramos su tratamiento numérico.

3.1. Método de conjuntos de nivel (level set method)

En esta sección, introducimos el método de conjuntos de nivel para describir dominios móviles. La idea de este método es definir una función de transporte, la cual describirá el dominio mediante sus conjuntos de nivel (ver Figura 3.1). Como mencionamos antes, en este trabajo se usa la modelización de frontera libre de una sola fase.



Figura 3.1: Método de conjuntos de nivel

Así, consideramos un dominio Θ cerrado y acotado, subconjunto de \mathbb{R}^d (d = 2, 3), el cual constituye el espacio geométrico suficientemente grande por donde el fluido se desplaza en un intervalo de tiempo [0, T].

Además, denotamos a \neg como la frontera de Θ , es decir $\neg = \partial \Theta$ y dividimos a la frontera en tres partes disjuntas: la parte de ingreso de fluido Γ_D y la parte por donde el fluido puede desplazarse Γ_0 , de esta manera, $\neg = \neg_D \uplus \neg_0$.

Observación. De ahora en adelante, nos referimos a Θ como dominio computacional.

En la Figura 3.2 ilustramos un dominio computacional y la ubicación de sus fronteras.



Figura 3.2: Dominio computacional Θ . Partes de la frontera \neg

Adicionalmente, fijamos un subdominio $\Omega_k \subset \Theta$ que representa el espacio geométrico que ocupa el fluido en el tiempo t_k , mientras que $\Omega_k^{\phi} = \Theta \setminus \Omega_k$ corresponde la ausencia de fluido, y $\partial \Omega_k$ la frontera o interfaz del fluido.

Consideramos M > 0 una constante positiva e introducimos la función de conjuntos de nivel $\phi : \Theta \mapsto \mathbb{R}$ para describir la frontera libre como sigue:

$$\partial \Omega_k = \{ x : \phi(x) = M \}, \Omega_k = \{ x : \phi(x) > M \}.$$

El subdominio Ω_k es representado con el nivel M > 0 de sección transversal plana de alguna hipersuperficie en \mathbb{R}^2 o \mathbb{R}^3 (ver Figuras 3.1 y 3.4). Es común escribir la función de conjuntos de nivel como la función de distancia, dada a continuación:

$$\phi_d(x) := \min_{\tilde{x} \in \partial \Omega_k} |x - \tilde{x}|, \tag{3.1}$$

donde $\phi(x) > M$ en un lado de la frontera mientras que $\phi(x) < M$ en el otro lado. En virtud de [14], una frontera está asociada a la función característica de conjuntos de nivel, reformulada de la siguiente manera:

$$\phi(x) = 1 \Leftrightarrow (x \in \Omega_k), \tag{3.2}$$

$$\phi(x) = 0 \Leftrightarrow (x \in \Omega_k^{\phi}). \tag{3.3}$$

Según recomienda el estudio realizado en [14], por cuestiones de estabilidad numérica, podemos regularizar la función característica de conjuntos de nivel (3.2)-(3.3), usando la siguiente función suave:

$$\phi_c(x,0) := \frac{1}{1 + e^{(\phi(x)/\epsilon)}},\tag{3.4}$$

donde $\epsilon > 0$ es un parámetro que se lo conoce como el "grosor" de la frontera. Por ejemplo, si consideramos M = 0.5, y $\phi = 0$ luego $\phi_c = 0.5$. En la Figura 3.3 ilustramos la regularización (3.4).



Figura 3.3: Función característica regularizada con centro $(0.5, 0.5)^T$ y radior=0.2



Figura 3.4: Contorno de tres niveles M = 0.05, 0.5, 0.95 de la función característica regularizada

En la Figura 3.5 mostramos el parámetro ϵ (grosor de la frontera), que aparece en la regularización (3.4). Éste juega un rol muy importante en la regularización y el proceso de reinicialización del método de conjuntos de nivel, que explicamos en las secciones posteriores.



Figura 3.5: Grosor de la frontera ϵ

3.2. Advección de la función de conjuntos de nivel (ecuación de transporte)

En esta sección, estudiamos el proceso de advección de la función de transporte que describe la frontera libre a través de sus curvas de nivel, y la cual está caracterizada por ser solución de una ecuación de transporte asociada al campo de velocidades del fluido en cuestión. La advección o transporte del fluido, en los problemas de frontera libre, requieren tratar ciertos problemas de inestabilidad numérica y problemas en la descripción del dominio.

Supongamos que el campo de velocidad $\mathbf{y} : \Theta \times [0, T] \mapsto \mathbb{R}^d$ (con d = 2, 3) está dado, y que la frontera está descrita por la función de conjuntos de nivel ϕ . Entonces, para transportar la frontera libre en el tiempo, la siguiente ecuación de transporte debe ser resuelta:

$$\partial_t \phi(x,t) + \mathbf{y}(x,t) \nabla \phi(x,t) = 0, \qquad \text{en } \Theta \times [0,T], \qquad (3.5)$$

$$\mathbf{y}(x,t) \cdot \eta_{\partial \Theta} < 0, \quad \text{en } \exists_D \times [0,T], \quad (3.6)$$

$$\phi(x,t) = 1, \qquad \text{en } \exists_D \times [0,T], \qquad (3.7)$$

$$\phi(x,t)\mathbf{y}(x,t)\cdot\eta_{\partial\Theta} = 0, \qquad \text{en } \exists_0 \times [0,T], \qquad (3.8)$$

$$\phi(x,0) = \phi_0(x), \quad \text{en } \Theta, \tag{3.9}$$

donde $\eta_{\partial\Theta}$ es el vector normal unitario a la frontera \exists .

La ecuación anterior se la conoce como ecuación de la continuidad o transporte. En (3.5), el campo de la velocidad **y** influencia el transporte de la masa de fluido inicial $\phi_0(x)$. La condición de frontera (3.6) representa el flujo de ingreso en la frontera \exists_D . Geométricamente, en \exists_D , el ángulo que forma la velocidad de ingreso **y** con la normal exterior $\eta_{\partial\Theta}$ puede variar entre $\left]\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}\right[$. Por ejemplo, si el flujo ingresara de manera perpendicular a \exists_D , entonces los vectores **y** y $\eta_{\partial\Theta}$ serían colineales con direcciones opuestas.

La condición (3.7) significa que en todo momento existe una cantidad de fluido en la frontera de ingreso \exists_D . Por otro lado, la condición de frontera (3.8) significa que no existe flujo en la frontera \exists_0 . El fluido es libre para deslizarse en las paredes pero no puede pasar a través de ellas, es decir, una velocidad \mathbf{y} es distinta de cero si y solo si es perpendicular al vector normal $\eta_{\partial\Theta}$ en \exists_0 . En nuestro problema, la frontera \exists_0 está asociada a la condición antideslizante del fluido, donde la velocidad es $\mathbf{y} = \mathbf{0}$. En [25], p.g. 9, se estudia el modelo de Navier-Stokes de frontera libre y la condición (3.8) se denomina condición de compatibilidad.

En la Figura 3.6, ilustramos las condiciones de frontera (3.6) y (3.8).



Figura 3.6: Relación entre y y $\eta_{\partial \Theta}$

Observaciones.

- La frontera libre del fluido adquiere sentido cuando $\Omega_k \cap \Theta \neq \emptyset$, es decir cuando el subdominio Ω_k , el cual representa el espacio geométrico que ocupa el fluido, se interseca con el dominio computacional Θ . Mientras que, cuando $\Gamma_k \cap \exists \neq \emptyset$, las condiciones de frontera del fluido se establecen de acuerdo a los parámetros de modelización descritos en la sección 1.2.
- El sistema (3.5)-(3.9) se resuelve en el dominio computacional Θ y no solamente en el subdominio Ω_k . Por este motivo, en el método de conjuntos de nivel, es necesario

que la velocidad también esté definida en Θ . Por tanto, para nuestro problema, se deberá extender **y** a Θ . Este procedimiento se describirá en la sección 4.4.1.

A continuación, consideramos los siguientes espacios funcionales:

$$W_t(0,T) = \{ \phi \in L^2(0,T,H^1(\Theta)) \mid \partial_t \phi \in L^2(0,T,L^2(\Theta)) \}, W_{cd}(0,T) = \{ \phi \in L^2(0,T,H^3(\Theta)) \mid \partial_t \phi \in L^2(0,T,H^1(\Theta)) \}.$$

Para analizar a mayor profundidad los espacios $W_t(0,T)$ y $W_{cd}(0,T)$ se puede revisar [43].

De acuerdo a [43], Teorema 2, p.g. 302. tenemos que el sistema (3.5)-(3.9) tiene solución $\phi \in C(0, T, L^2(\Theta))$ y por lo tanto la condición inicial (3.9) cobra sentido físico.

Notación. Sin riesgo de confusión y por facilidad en la notación, obviamos la escritura de la variable espacial y temporal en algunos cálculos, así $\mathbf{y} = \mathbf{y}(x,t)$ y $\phi = \phi(x,t)$.

Estamos interesados en fenómenos de la naturaleza que involucran fluidos incompresibles, es decir que su densidad permanezca constante. Éstos deben satisfacer la conservación de volumen. La restricción de incompresibilidad es gobernada por la propiedad de divergencia libre del campo de velocidad y viene dada por la siguiente ecuación:

$$\nabla \cdot \mathbf{y} = 0, \quad \text{en } \Theta.$$

Por este motivo, la ecuación de transporte puede escribirse como:

$$\partial_t \phi + \nabla \cdot (\phi \mathbf{y}) = 0, \qquad (3.10)$$

es decir, las ecuaciones (3.10) y (3.5) son equivalentes.

Según [43], sección 7.3.2, podemos realizar la formulación variacional en $H^1(\Theta)$ presuponiendo condiciones razonables sobre la solución. Así, tomamos una función test $s \in H^1(\Theta)$, multiplicamos por la ecuación (3.10) e integramos sobre Θ de la siguiente manera:

$$\int_{\Theta} \left(\partial_t \phi\right) s \, dx + \int_{\Theta} \nabla \cdot \left(\phi \mathbf{y}\right) s \, dx = 0,$$

del teorema de la divergencia de Gauss, podemos concluir que:

$$\int_{\Theta} (\partial_t \phi) s \, dx + \int_{\partial \Theta} \phi s(\mathbf{y} \cdot \eta_{\partial \Theta}) \, dS - \int_{\Theta} (\phi \mathbf{y}) \nabla s \, dx = 0,$$
$$\Leftrightarrow \int_{\Theta} (\partial_t \phi) s \, dx + \int_{\neg_D} \phi s(\mathbf{y} \cdot \eta_{\partial \Theta}) \, dS + \int_{\neg_0} \phi s(\mathbf{y} \cdot \eta_{\partial \Theta}) \, dS - \int_{\Theta} (\phi \mathbf{y}) \nabla s = 0,$$

Por las condiciones de frontera (3.6)-(3.8), la ecuación anterior se transforma en:

$$\int_{\Theta} (\partial_t \phi) s \, dx - \int_{\Theta} \phi(\mathbf{y} \nabla s) \, dx = - \int_{\neg_D} s \left(\mathbf{y} \cdot \eta_{\partial \Theta}\right) \, dS, \tag{3.11}$$

para todo $s \in H^1(\Theta)$.

Definición 3. Decimos que $\phi \in W_t(0,T)$ es una solución de la ecuación (3.5)-(3.9) si se verifica que:

$$\int_{\Theta} (\partial_t \phi) s \, dx - \int_{\Theta} \phi(\mathbf{y} \nabla s) \, dx = - \int_{\neg_D} s \left(\mathbf{y} \cdot \eta_{\partial \Theta} \right) \, dS, \tag{3.12}$$

 $\phi(0) = \phi_0. \tag{3.13}$

para todo $s \in H^1(\Theta)$ y c.t.p. $t \in [0,T]$.

Con respecto a la existencia y unicidad de la solución de la ecuación (3.5)-(3.9) en espacios de Sóbolev se utiliza el método de la difusión desvanecida que se explica detalladamente en [43], sección 7.3.2. El método de la difusión desvanecida considera una sucesión de problemas de transporte regularizados que convergen al problema de transporte original. Estos problemas regularizados tienen una solución débil que explicamos más adelante y para justificar la solución de la ecuación de transporte original, se estudia el caso límite. Así se asegura que existe una única solución en $W_t(0,T)$ de la ecuación (3.5)-(3.9). Para revisar los detalles en como se construye la solución se puede revisar [43], p.g. 425-429.

La ecuación de transporte (3.5)-(3.9) mueve el nivel inicial $\phi(x, 0)$ por el efecto del campo de velocidad. Desafortunadamente, no es posible resolver numéricamente esta ecuación y preservar el contorno como esperamos. Existen varios problemas como inestabilidad, disipación, dispersión, etc. Por requerimientos numéricos, nos enfocamos alternativamente en una ecuación de transporte regularizada que discutimos en la siguiente sección.

3.3. Estabilización de la ecuación de transporte

Es bien conocido que la ecuación de transporte, introducida en la sección anterior, es inestable numéricamente debido a que es una ecuación convectiva. Por lo tanto, para poder describir la frontera libre del fluido de Bingham requerimos superar este inconveniente. En esta sección, proponemos incorporar un término controlado de difusión en la ecuación de transporte y considerar un flujo difusivo adicional en las condiciones de frontera, como se sugiere en [6], p.g. 7. Puesto que los niveles de la ecuación de transporte describen el dominio móvil, esta ecuación debe comportarse bien numéricamente, y así, podremos establecer y formular una metología de frontera libre que sea estable. El término difusivo que incorporamos debe ser controlado cuidadosamente, tomando en cuenta que la difusión debe ser la adecuada para no alejarse de la descripción de la frontera libre o en su defecto, desaprovechar la propiedad de suavidad en la solución dada por la incorporación del término difusivo. Es así que, la difusión que consideramos está relacionada directamente con el grosor de la frontera libre (ver Figura 3.5).

Consideramos la siguiente ecuación de transporte estabilizada:

$$\partial_t \phi(x,t) + \mathbf{y}(x,t) \cdot \nabla \phi(x,t) - \epsilon \Delta \phi(x,t) = 0, \quad \text{en } \Theta \times [0,T], \quad (3.14)$$

$$[\mathbf{y}(x,t) - \epsilon \nabla \phi(x,t)] \cdot \eta_{\partial \Theta} < 0, \qquad \text{en } \exists_D \times [0,T], \qquad (3.15)$$

$$\phi(x,t) = 1,$$
 en $\exists_D \times [0,T],$ (3.16)

$$[\phi(x,t)\mathbf{y}(x,t) - \epsilon \nabla \phi(x,t)] \cdot \eta_{\partial \Theta} = 0, \quad \text{en } \exists_0 \times [0,T], \quad (3.17)$$

$$\phi(x,0) = \phi_0(x), \quad \text{en } \Theta, \tag{3.18}$$

donde $\epsilon > 0$ representa el grosor de la frontera.

Notamos que, si $\epsilon = 0$ entonces la ecuación de transporte regularizada (3.14)-(3.18) se convierte en la ecuación de transporte original (3.5)-(3.9).

La ecuación anterior es una ecuación de convección-difusión. Si las condiciones de frontera e inicial son las adecuadas, la solución en el sentido clásico existe y pertenece al espacio de funciones continuas con derivadas parciales de primer y segundo orden también continuas $(C^2(\Omega))$, es decir esta solución es suave. En este trabajo, con el fin de ampliar el conjunto de soluciones admisibles, vale la pena considerar una forma integral o débil de la ecuación de transporte regularizada.

El término $\mathbf{y}(x,t) \cdot \nabla \phi(x,t)$ de (3.14) se puede escribir como $\nabla \cdot (\phi(x,t)\mathbf{y}(x,t))$ debido a la propiedad de divergencia libre $\nabla \cdot \mathbf{y}(x,t) = 0$.

Notación. Por facilidad en la notación obviamos la escritura de la variable espacial y temporal, así $\mathbf{y} = \mathbf{y}(x,t)$ y $\phi = \phi(x,t)$.

Consideramos una función test $s \in H^1(\Theta)$ y multiplicamos por la ecuación (3.14) e integramos sobre Θ , así tenemos que:

$$\int_{\Theta} (\partial_t \phi) s \, dx + \int_{\Theta} [\nabla \cdot (\phi \mathbf{y}) - \epsilon \Delta \phi] s \, dx = 0,$$

Por el teorema de la divergencia de Gauss, tenemos que:

$$\begin{split} &\int_{\Theta} (\partial_t \phi) \, s \, dx + \int_{\partial \Theta} \phi s(\mathbf{y} \cdot \eta_{\partial \Theta}) \, dS - \int_{\Theta} (\phi \mathbf{y}) \cdot \nabla s \, dx \\ &\quad - \int_{\partial \Theta} \epsilon s(\nabla \phi \cdot \eta_{\partial \Theta}) \, dS + \int_{\Theta} \epsilon \nabla \phi \cdot \nabla s \, dx \ = \ 0, \\ \Leftrightarrow &\int_{\Theta} (\partial_t \phi) \, s \, dx + \int_{\neg D} \phi s(\mathbf{y} \cdot \eta_{\partial \Theta}) \, dS + \int_{\neg 0} \phi s(\mathbf{y} \cdot \eta_{\partial \Theta}) \, dS \\ &\quad - \int_{\Theta} (\phi \mathbf{y}) \nabla s - \int_{\neg D} \epsilon s(\nabla \phi \cdot \eta_{\partial \Theta}) \, dS - \int_{\neg 0} \epsilon s(\nabla \phi \cdot \eta_{\partial \Theta}) \, dS + \int_{\Theta} \epsilon \nabla \phi \cdot \nabla s \, dx \ = \ 0, \\ \Leftrightarrow &\int_{\Theta} (\partial_t \phi) \, s \, dx + \int_{\neg D} s(\phi \mathbf{y} - \epsilon \nabla \phi) \cdot \eta_{\partial \Theta} \, dS + \int_{\neg 0} s(\phi \mathbf{y} - \epsilon \nabla \phi) \cdot \eta_{\partial \Theta} \, dS \\ &\quad - \int_{\Theta} (\phi \mathbf{y}) \cdot \nabla s \, dx + \int_{\Theta} \epsilon \nabla \phi \cdot \nabla s \, dx \ = \ 0, \end{split}$$

Por las condiciones de frontera (3.15)-(3.17), la ecuación anterior se transforma en:

$$\int_{\Theta} (\partial_t \phi) s \, dx - \int_{\Theta} (\phi \mathbf{y}) \cdot \nabla s \, dx + \int_{\Theta} \epsilon \nabla \phi \cdot \nabla s \, dx - \int_{\neg_D} \epsilon s \left(\nabla \phi \cdot \eta_{\partial \Theta} \right) \, dS$$
$$= -\int_{\neg_D} s \left(\mathbf{y} \cdot \eta_{\partial \Theta} \right) \, dS,$$

para todo $s \in H^1(\Theta)$.

Definición 4. Decimos que $\phi \in W_{cd}(0,T)$ es una solución de la ecuación (3.14)-(3.18) si se verifica que:

$$\begin{split} \int_{\Theta} (\partial_t \phi) \, s \, \, dx - \int_{\Theta} (\phi \, \boldsymbol{y}) \cdot \nabla s \, \, dx + \int_{\Theta} \epsilon \nabla \phi \cdot \nabla s \, \, dx - \int_{\neg_D} \epsilon s \, (\nabla \phi \cdot \eta_{\partial \Theta}) \, \, dS \\ &= - \int_{\neg_D} s \, (\boldsymbol{y} \cdot \eta_{\partial \Theta}) \, \, dS, \end{split}$$

para todo $s \in H^1(\Theta)$ y c.t.p. $t \in [0, T]$.

Observaciones. En lo que concierne a la existencia y unicidad de la solución de la ecuación de transporte, vamos a suponer que las componentes del campo vectorial de la velocidad y, pertenecen a $C(\Theta \times [0,T];\mathbb{R})$ y además que $\phi_0 \in H^1(\Theta)$. De esta manera, podemos decir lo siguiente:

- Según [43], p.g. 425, la ecuación de transporte regularizada (3.14)- (3.18) tiene única solución en $W_{cd}(0,T)$.
- Estudiando el caso límite de las ecuaciones regularizadas, es decir cuando $\epsilon \to 0$ (método de la difusión desvanecida, ver [43], sección 7.3.2) se demuestra que existe única solución en $W_t(0,T)$ de la ecuación de transporte original (3.5)-(3.9).

3.3.1. Aproximación de la ecuación de transporte estabilizada

Utilizamos el método de elementos finitos para la discretización espacial de la ecuación de transporte regularizada. La elección adecuada de la base de elementos finitos en la resolución de la ecuación de transporte es muy importante. En este sentido, esta base debe considerar tres aspectos fundamentales:

- Precisión: Los elementos finitos de orden superior darán mayor exactitud a medida de que la regularidad de la solución lo permita. Según [17], podría ser ventajoso tener mayor orden de precisión en el espacio que en el tiempo dado que calculamos las derivadas espaciales de φ.
- Complejidad: Los métodos de elementos finitos de orden superior resultan costosos de resolver por la complejidad al ensamblar los sistemas.
- Proyecciones: Al momento de proyectar funciones salto (discontinuas) en una base de funciones lineales y continuas a trozos, podría ocurrir oscilaciones inadecuadas en la solución c.f.[17].



Figura 3.7: Elemento triangular con vértices 1, 2, 3 con cordenadas $(x_{11}, x_{21}), (x_{12}, x_{22}), y (x_{13}, x_{23}),$

Elementos finitos tipo Lagrange

A continuación, ilustramos los elementos finitos continuos tipo Lagrange en 2D.

Consideramos un triángulo o elemento \mathcal{T} con sus vértices indexados como 1, 2, y 3, con coordenadas $(x_{1j}, x_{2j}), j = 1, 2, 3$ (ver Figura 3.7). El polinomio de orden 1, $N_j(x_k, y_k)$, asociado con los vértices j satisface:

$$N_j(x_k, x_k) = \delta_{j,k}, \qquad j, k = 1, 2, 3,$$
(3.19)

donde δ es la función delta de Kronecker. Consideremos N_j de la siguiente forma afín:

$$N_j(x_1, x_2) = a + bx_1 + cx_2, \qquad (x_1, x_2) \in \Theta_{\mathcal{T}}, \tag{3.20}$$

donde $\Theta_{\mathcal{T}}$ es el dominio ocupado por el triángulo \mathcal{T} . Si imponemos la condición (3.19) en (3.20), entonces tenemos que:

$$\begin{bmatrix} 1\\0\\0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_{1j} & x_{2j}\\1 & x_{1k} & x_{2k}\\1 & x_{1l} & x_{2l} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a\\b\\c \end{bmatrix} \qquad k \neq l \neq j, \qquad j, k, j = 1, 2, 3.$$

Resolviendo este sistema por la regla de Crammer, tenemos que:

$$N_j(x_1, x_2) = \frac{D_{k,l}(x_1, x_2)}{C_{j,k,l}}, \qquad k \neq l \neq j, \qquad j, k, j = 1, 2, 3,$$

donde

$$D_{k,l} = \det \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_2 \\ 1 & x_{1k} & x_{2k} \\ 1 & x_{1l} & x_{2l} \end{bmatrix},$$
$$C_{j,k,l} = \det \begin{bmatrix} 1 & x_{1j} & x_{2j} \\ 1 & x_{1k} & x_{2k} \\ 1 & x_{1l} & x_{2l} \end{bmatrix}.$$



Figura 3.8: Función N_1 para el nodo 1 del triángulo \mathcal{T} (izquierda) y función base η_l en su soporte de cuatro elementos finitos.

Las funciones base se construyen combinando las funciones N_j en triángulos colindantes; por ejemplo, en la Figura 3.8 se muestra una función base η_l , formada por cuatro elementos o triángulos. La construcción de la base en términos de las funciones N_j elimina la necesidad de conocer detalladamente la información de la geometría tales como el número de triángulos compartiendo un nodo.

Colocar los tres nodos en los vértices de los triángulos garantiza una base continua. Si alternativamente, la interpolación se realiza en tres puntos no-colineales (respecto a las aristas de los triángulos) entonces el polinomio será único, más no determinará una aproximación continua (elementos finitos discontinuos tipo Lagrange, ver [46] p.g. 190). Con nuestra ubicación de los vértices, la función N_j es continua a lo largo de las aristas del triángulo. Esta función lineal es determinada por los valores nodales en dos vértices sobre la arista (por ejemplo j y k), como se muestra en la Figura 3.8, por lo tanto la base es continua.

Adicionalmente, si $\{\eta_1, ..., \eta_N\}$ representa la base de elementos finitos lineales que construimos, y ϕ se puede escribir como combinación lineal de los elementos de la base, es decir,

$$\phi(x_1, x_2, t) = \sum_{j=1}^{N} c_j(t) \eta_j(x_1, x_2),$$

entonces la restricción de $\phi(x_1, x_2, t)$ al triángulo \mathcal{T} , tiene la forma:

$$\phi(x_1, x_2, t) = c_1(t)\eta_1(x_1, x_2) + c_2(t)\eta_2(x_1, x_2) + c_3(t)\eta_3(x_1, x_2), \quad \text{con } (x_1, x_2) \in \Theta_{\mathcal{T}}$$

Para la construcción de funciones continuas tipo Lagrange de orden superior se procede de manera análoga al que acabamos de explicar. Para mayor información sobre elementos finitos tipo Lagrange se puede consultar [46], p.g. 189.

A continuación, consideramos el siguiente espacio de dimensión finita:

$$\mathcal{W}_{c}^{1}(\Theta) := \left\{ \eta \in C(\overline{\Theta}) : \eta |_{T} \in \Pi_{1} \text{ para todo } T \in T_{h} \right\},$$
(3.21)

donde Π_1 representa el espacio de polinomios tipo Lagrange de grado uno (revisar [46], p.g. 189), definidos en \mathbb{R}^d con d = 2, 3 y T_h es una triangulación que verifica las propiedades de una triangulación admisible que se introdujo en la sección 2.1.1.

El esquema de elementos finitos de la ecuación de transporte estabilizada lo escribimos de la siguiente manera:

$$\left(\partial_t \phi^h(t), s\right)_{\Theta} - \left(\phi^h(t), \mathbf{y}^h(t) \nabla s\right)_{\Theta} + \left(\epsilon \nabla \phi^h(t), \nabla s\right)_{\Theta} - \left(\epsilon \nabla \phi^h \cdot \eta_{\partial\Theta}, s\right)_{\neg_D}$$

$$= -\left(\mathbf{y}^h \cdot \eta_{\partial\Theta}, s\right)_{\neg_D}, \qquad (3.22)$$

$$\phi(0)^h = \phi_0, \qquad (3.23)$$

para todo $s \in \mathcal{W}_c^1(\Theta)$ y *c.t.p.* $t \in [0, T]$, donde $(\cdot, \cdot)_{\Theta}$ y $(\cdot, \cdot)_{\neg_D}$ representan el producto en $L^2(\Theta)$ y $L^2(\neg_D)$, respectivamente.

En el cuadro 3.1, listamos algunos espacios que podrían ser utilizados para la aproximación de la ecuación de transporte. Todos estos elementos son del tipo Lagrange.

Notación	Orden	Tipo	
$\mathcal{W}_c^1(\Theta)$	Lineal	Continua	
$\mathcal{W}^2_c(\Theta)$	Cuadrática	Continua	
$\mathcal{W}^0_d(\Theta)$	Constante	Discontinua	
$\mathcal{W}^1_d(\Theta)$	Lineal	Discontinua	
$\mathcal{W}^1_{vc}(\Theta)$	Lineal	Vectorial, continua	$\mathcal{W}_c^1(\Theta) \times \mathcal{W}_c^1(\Theta)$
$\mathcal{W}^2_{vc}(\Theta)$	Cuadrática	Vectorial, continua	$\mathcal{W}^2_c(\Theta) imes \mathcal{W}^1_c(\Theta)$
$\mathcal{W}^0_{vd}(\Theta)$	Constante	Vectorial, discontinua	$\mathcal{W}^0_d(\Theta) imes \mathcal{W}^0_d(\Theta)$
$\mathcal{W}^1_{vd}(\Theta)$	Lineal	Vectorial, discontinua	$\mathcal{W}^1_d(\Theta) imes \mathcal{W}^1_d(\Theta)$

Cuadro 3.1: Espacios de elementos finitos para la ecuación de transporte.

La elección más natural de las funciones base del método de elementos finitos es la que permita que ϕ sea continua, ya que sus conjuntos de nivel se utilizarán para describir el subdominio Ω_k . En este trabajo usamos las funciones base lineales y continuas a trozos $\mathcal{W}_c^1(\Theta)$ para aproximar la ecuación de transporte.

Discretización temporal

Discutimos a continuación, la discretización temporal para la ecuación de transporte regularizada. Estamos buscando una solución de la formulación débil de la ecuación de advección-difusión (3.22)-(3.23), para todo $t \in [0, T]$. Por lo tanto el intervalo temporal [0, T] es uniformente dividido en N subintervalos de igual longitud $\tau > 0$, donde $t_k :=$ $t_{k-1} + \tau$. Así, escribimos:

$$\begin{split} \phi_k^h &= \phi^h(t_k), \\ \mathbf{y}_k^h &= \mathbf{y}^h(t_k), \end{split}$$

para todo k = 1, ..., N.

A continuación, formulamos un esquema de Crank-Nicolson de la ecuación (3.22)-(3.23). Según [4], el esquema de Crank-Nicolson tiene un mejor comportamiento respecto a la convergencia y estabilidad que el método de Euler implícito en la discretización temporal de este tipo de problemas. Por esta razón, elegimos el esquema de discretización temporal de Crank-Nicolson, el cual viene dado por la siguiente relación:

$$\frac{1}{\tau}(\phi_{k}^{h}-\phi_{k-1}^{h},s)_{\Theta}-\frac{1}{2}\left(\phi_{k}^{h}\mathbf{y}_{k}^{h}+\phi_{k-1}^{h}\mathbf{y}_{k}^{h},\nabla s\right)_{\Theta}+\frac{\epsilon}{2}\left(\nabla\phi_{k}^{h}+\nabla\phi_{k-1}^{h},\nabla s\right)_{\Theta} -\frac{\epsilon}{2}\left(\left[\nabla\phi_{k}^{h}+\nabla\phi_{k-1}^{h}\right]\cdot\eta_{\partial\Theta},s\right)_{\mathsf{T}_{D}}=-\left(\mathbf{y}_{k}^{h}\cdot\eta_{\partial\Theta},s\right)_{\mathsf{T}_{D}},\qquad(3.24)$$

$$\phi_0^h = \phi_0, \qquad (3.25)$$

para todo $s \in \mathcal{W}^1_c(\Theta)$.

Según [6], hemos obtenido un esquema estable de aproximación que preservará el contorno de la función de transporte. La fidelidad de conservación de contorno como el área del mismo es la que describirá de manera adecuada el subdominio del fluido Ω_k .

3.4. Reinicialización de la ecuación de transporte

La estabilización presentada en la sección anterior, nos permite tratar una función de transporte suavizada. Sin embargo, se puede producir un efecto de aplanamiento (atachamiento) debido a la incorporación del término de difusión. El efecto de aplanamiento podría degenerar los contornos de la función de transporte y por lo tanto, causar una descripción errónea del subdominio.

Otro problema que puede presentarse es la pérdida de volumen de la función de transporte debido a las zonas donde esta función varía fuertemente, como se menciona en [4]. La pérdida de volúmen significa que existe un efecto de disipación en la función de transporte. Según [5], se puede superar estos problemas y mejorar la descripción del subdominio mediante un proceso llamado reinicialización (ver [17, 14]). Este proceso consiste en reinicializar o corregir la función de transporte en cada paso temporal o en un intervalo adecuado de tiempo. Para este fin se resuelve una ecuación, llamada de reinicialización.

En los problemas de fluidos con frontera libre, la velocidad del fluido no es constante y en aplicaciones prácticas, la masa del fluido se debe desplazar por las paredes del dominio computacional, donde se produce un efecto de disipación en la función de transporte. Por tal motivo, el proceso de reinicialización es importante en la metodología que proponemos en el siguiente capítulo.

El proceso de reinicialización puede describirse de la siguiente manera: para cada tiempo $t \in [0, T]$, habiendo calculado la solución ϕ de la ecuación de transporte, obtenemos su reinicialización φ , resolviendo la siguiente ecuación de reinicialización [4] en el sub-tiempo \hat{t} :

$$\partial_{\hat{t}}\varphi + \nabla \cdot [\varphi(1-\varphi)\eta] = \epsilon \nabla \cdot [\eta(\nabla \varphi \cdot \eta)], \quad \text{en } \Theta \times [0,\hat{T}], \quad (3.26)$$

$$\nabla \varphi \cdot \eta_{\partial \Theta} = 0, \qquad \text{en } \forall \times [0, \hat{T}], \qquad (3.27)$$

$$\varphi(x,0) = \phi(x,t),$$
 en $\Theta,$ (3.28)

donde \hat{T} es el tiempo final de reinicialización, $\epsilon > 0$ es el grosor de la frontera y η es el vector normal unitario en el sentido del método de conjuntos de nivel (ver [17]), el cual viene dado de la siguiente manera:

$$\eta(x,t) = \frac{\nabla\phi(x,t)}{\|\nabla\phi(x,t)\|},\tag{3.29}$$

e indica la dirección de mayor variación de la función ϕ en cada punto del dominio Θ .

La ecuación de reinicialización (3.26) considera un término de segundo orden $\epsilon \nabla \cdot [\eta(\nabla \varphi \cdot \eta)]$, el cual incorpora un término de difusión en dirección de η (gradiente de la función de transporte). La condición del tipo Newman homogénea, dada en (3.27) significa que durante la reinicialización, no hay transporte de masa hacia o desde el sistema (flujo en dirección de la normal).

La ecuación de reinicialización se resuelve hasta un $\hat{T} > 0$ suficientemente grande, tal que el siguiente criterio de estacionariedad se satisfaga (ver [14]):

$$\|\nabla\varphi(x,\hat{t})\| = 1, \tag{3.30}$$

es decir, que la función de reinicialización no varíe en el tiempo. La ecuación (3.30) se denomina ecuación Eikonal y es una propiedad que verifica la solución de la ecuación de reinicialización (3.26)-(3.28) cuando $\hat{t} \to \infty$ (ver [4]).

Cuando el proceso de reinicialización haya concluido, redefinimos $\phi(x,t) := \varphi(x,T)$. El proceso de reinicialización recupera la propiedad de la función de transporte para describir subdominios mediante sus conjuntos de nivel.

3.4.1. Aproximación de la reinicialización de la ecuación de transporte

Ahora describimos la aproximación de la ecuación de reinicialización dada en (3.26)-(3.28) mediante el método de elementos finitos y proponemos un esquema de discretización temporal. Además, detallamos el tratamiento de la ecuación no lineal de reinicialización.

Asumiendo regularidad de la solución, multiplicamos (3.26) por $s \in \mathcal{W}_c^1(\Theta)$ e integramos sobre Θ , así tenemos que:

$$\int_{\Theta} (\partial_{\hat{t}} \varphi) s \, dx + \int_{\Theta} \nabla \cdot [\varphi(1-\varphi)\eta] s \, dx = \epsilon \int_{\Theta} \nabla \cdot [\eta(\nabla \varphi \cdot \eta)] s \, dx.$$
(3.31)

Usando nuevamente el teorema de Gauss, obtenemos:

$$\int_{\Theta} (\partial_{i}\varphi) s \, dx + \int_{\Theta} \nabla \cdot [\varphi(1-\varphi)\eta s] dx - \int_{\Theta} \varphi(1-\varphi)\eta \cdot \nabla s \, dx =$$

$$\epsilon \int_{\Theta} \nabla \cdot [\eta(\nabla\varphi \cdot \eta)s] \, dx - \epsilon \int_{\Theta} (\nabla\varphi \cdot \eta)\eta \cdot \nabla s \, dx. \Rightarrow$$

$$\int_{\Theta} (\partial_{i}\varphi) s \, dx + \int_{\partial\Theta} s\varphi(1-\varphi)(\eta \cdot \eta_{\partial\Theta}) \, dS - \int_{\Theta} \varphi(1-\varphi)\eta \cdot \nabla s \, dx =$$

$$\epsilon \int_{\partial\Theta} s(\nabla\varphi \cdot \eta)(\eta \cdot \eta_{\partial\Theta}) \, dS - \epsilon \int_{\Theta} (\nabla\varphi \cdot \eta)\eta \cdot \nabla s \, dx. \qquad (3.32)$$

Si consideramos la condición de frontera (3.27) en la ecuación de reinicialización, la definición de η en (3.29) y suponemos que la función de reinicialización preserva los contornos de la función de transporte a lo largo del tiempo como en [14], entonces tenemos que:

$$\eta \cdot \eta_{\partial \Theta} = 0. \tag{3.33}$$

Notemos que $\eta_{\partial\Theta}$ es el vector normal exterior a la frontera del dominio computacional Θ y η es la dirección de mayor crecimiento de la función de transporte.

Considerando (3.33) en (3.32), obtenemos la siguiente formulación variacional:

$$(\partial_t \varphi, s)_{\Theta} - (\varphi(1 - \varphi), \eta \cdot \nabla s)_{\Theta} = -\epsilon (\eta \cdot \nabla \varphi, \eta \cdot \nabla s)_{\Theta}, \qquad (3.34)$$

$$\varphi(x,0) = \phi(x,t), \qquad (3.35)$$

para todo $s \in \mathcal{W}_c^1(\Theta)$, donde $(\cdot, \cdot)_{\Theta}$ denota el producto en $L^2(\Theta)$.

De esta manera, obtenemos el siguiente esquema de elementos finitos:

$$(\partial_{\hat{t}}\varphi^h, s)_{\Theta} - (\varphi^h(1 - \varphi^h), \eta \cdot \nabla s)_{\Theta} = -\epsilon(\eta \cdot \nabla \varphi^h, \eta \cdot \nabla s)_{\Theta}, \qquad (3.36)$$

$$\varphi^h(0) = \phi^h(t) \tag{3.37}$$

para todo $s \in \mathcal{W}_c^1(\Theta)$.

Discretizamos el subtiempo mediante el esquema de Crank-Nicolson. Utilizamos los superíndices $n \ge n-1$ para referirnos a la discretización del subtiempo \hat{t} . El intervalo subtemporal $[0, \hat{T}]$ es uniformente dividido en \hat{N} subintervalos de igual longitud $\hat{\tau} > 0$, donde $\hat{t}_k := \hat{t}_{k-1} + \hat{\tau} > 0$. Así, escribimos:

$$\varphi_n^h = \varphi^h(\hat{t}_n), \quad \text{para todo } n = 1, ..., \hat{N}.$$

El esquema de Crank-Nicolson para la formulación débil (3.36)-(3.37) de la ecuación de reinicialización, está dado por:

$$\frac{1}{\hat{\tau}}(\varphi_n^h - \varphi_{n-1}^h, s)_{\Theta} = \left(\frac{\varphi_n^h + \varphi_{n-1}^h}{2} \left[1 - \frac{\varphi_n^h + \varphi_{n-1}^h}{2}\right], \eta \cdot \nabla s\right)_{\Theta} -\epsilon \left(\eta \cdot \nabla \left(\frac{\varphi_n^h + \varphi_{n-1}^h}{2}\right), \eta \cdot \nabla s\right)_{\Theta},$$
(3.38)

$$\varphi_0^h = \phi_k^h \tag{3.39}$$

para todo $s \in \mathcal{W}_c^1(\Theta)$.

Observación. El paso de discretización subtemporal de la ecuación de reinicialización $\hat{\tau}$, en general es más pequeño que el de la ecuación de transporte τ . En la sección 4.4.1 se explicará como tomar el paso de discretización subtemporal $\hat{\tau}$.

El sistema de ecuaciones (3.38) es no lineal con respecto a φ_n . No obstante, podemos realizar una linealización, como se propone en [17]. Así, aproximamos el término:

$$\left(\frac{\varphi_n^h + \varphi_{n-1}^h}{2} \left[1 - \frac{\varphi_n^h + \varphi_{n-1}^h}{2}\right], \eta \cdot \nabla s\right)_{\Theta} \approx \left(\frac{\varphi_n^h + \varphi_{n-1}^h}{2} - \varphi_n^h \varphi_{n-1}^h, \nabla s \cdot \eta\right)_{\Theta} (3.40)$$

Reemplazando la aproximación (3.40) en (3.38), obtenemos:

$$\frac{1}{\hat{\tau}} \left(\varphi_n^h - \varphi_{n-1}^h, s \right)_{\Theta} = \left(\frac{\varphi_n^h + \varphi_{n-1}^h}{2} \left(1 - \frac{\varphi_n^h + \varphi_{n-1}^h}{2} \right), \nabla s \cdot \eta \right)_{\Theta} - \frac{\epsilon}{2} \left(\nabla \left(\varphi_n^h + \varphi_{n-1}^h \right) \cdot \eta, \nabla s \cdot \eta \right)_{\Theta},$$

y reorganizando términos, tenemos que:

$$(\varphi_n^h, s)_{\Theta} - \frac{\hat{\tau}}{2} (\varphi_n^h, \nabla s \cdot \eta)_{\Theta} + \frac{\epsilon \hat{\tau}}{2} (\nabla \varphi_n^h \cdot \eta, \nabla s \cdot \eta)_{\Theta} + \epsilon \hat{\tau} (\varphi_n^h \varphi_{n-1}^h, \nabla s \cdot \eta)_{\Theta}$$

$$= (\varphi_{n-1}^h, s)_{\Theta} + \frac{\hat{\tau}}{2} (\varphi_{n-1}^h, \nabla s \cdot \eta)_{\Theta} - \frac{\epsilon \hat{\tau}}{2} (\nabla \varphi_{n-1}^h \cdot \eta, \nabla s \cdot \eta)_{\Theta}, \quad (3.41)$$

para todo $s \in \mathcal{W}_c^1(\Theta)$.

La ecuación anterior no es tan complicada de resolver como parece ya que es un sistema de EDO's de primer orden; sin embargo, es importante la elección adecuada de funciones base del método de elementos finitos. A continuación, realizamos un análisis de la elección de las funciones base de elementos finitos para las ecuaciones de transporte estabilizada y reinicialización como en [17].

El estudio realizado en [17], p.g. 24, sugiere que como en la reinicialización se debe calcular el gradiente de las ecuaciones de conjuntos de nivel, podríamos tomar $\nabla \phi \in \mathcal{W}_{vd}^0(\Theta)$ (ver Cuadro 3.1) debido que el gradiente de $\phi \in \mathcal{W}_c^1(\Theta)$ podría ser discontinuo y tener grado polinomial 0. Una alternativa podría ser usar elementos del mismo orden, elementos del tipo Lagrange continuo de orden 1 para el cálculo de η y de ϕ ; aunque correríamos el riesgo de obtener proyecciones anómalas, sin embargo, mejoraríamos la precisión en el método de elementos finitos. En el Cuadro 3.2 presentamos las alternativas que se podrían escoger, según [17]:

Función	Elemento (opción 1)	Elemento (opción 2)
ϕ, φ	$\mathcal{W}_c^1(\Theta)$	$\mathcal{W}_c^1(\Theta)$
У	$\mathcal{W}^1_{vc}(\Theta)$	$\mathcal{W}^1_{vc}(\Theta)$
η	$\mathcal{W}^{0}_{vd}(\Theta)$	$\mathcal{W}^1_{vc}(\Theta)$

Cuadro 3.2: Espacios de elementos para las funciones del método de conjuntos de nivel basado en que $\phi \in \mathcal{W}_c^1(\Theta)$.

Alternativamente, para obtener una mayor precisión en el método de elementos finitos se podría tomar $\phi \in \mathcal{W}_c^2(\Theta)$. La elección de los elementos para las otras funciones de conjuntos de nivel, es análoga al caso $\mathcal{W}_c^1(\Theta)$. En el Cuadro 3.3, presentamos dos posibles opciones que se podrían escoger de acuerdo a [17].

Función	Elemento (opción 1)	Elemento (opción 2)
ϕ, φ	$\mathcal{W}^2_c(\Theta)$	$\mathcal{W}^2_c(\Theta)$
У	$\mathcal{W}^2_{vc}(\Theta)$	$\mathcal{W}^2_{vc}(\Theta)$
η	$\mathcal{W}^1_{vd}(\Theta)$	$\mathcal{W}^2_{vc}(\Theta)$

Cuadro 3.3: Espacios de elementos para las funciones del método de conjuntos de nivel basado en que $\phi \in \mathcal{W}^2_c(\Theta)$.

Observaciones.

- En los experimentos que presentamos en la siguiente sección, utilizamos la plataforma de cálculo FEniCS, que tiene gran capacidad y adaptabilidad para resolver ecuaciones diferenciales, (para mayor información consultar [36]). Por este motivo, en este capítulo escribimos los esquemas de elementos finitos en forma funcional puesto que es más coherente con el entorno de FEniCS.
- En la resolución de la ecuación de transporte, escogemos el tipo de elementos finitos dados por la opción 1 (ver Cuadro 3.2). Ésta es la elección más natural para que ϕ sea continua y haya una equilibrada relación entre precisión y costo computacional,

evitando el problema de "proyecciones" anómalas que mencionamos en la sección 3.3.1.

3.5. Experimentos numéricos

En esta sección presentamos dos experimentos que muestran como se comporta el método de conjuntos de nivel en la descripción de dominios móviles usando los contornos de la función de transporte. Ambos experimentos consideran velocidades constantes en el tiempo. El primer experimento trata sobre una masa aislada, influenciada por una velocidad constante. El método de conjuntos de nivel transporta esta "masa" en un dominio computacional. Para esto, resolvemos la ecuación de transporte regularizada, vista en la sección anterior. Adicionalmente, el segundo experimento que presentamos, ilustra como funciona el proceso de reinicialización y su contribución en la metodología para simular fluidos de frontera libre, que proponemos en el siguiente capítulo.

3.5.1. Experimento de conjuntos de nivel con velocidad constante sin reinicialización

En este experimento, consideramos una masa circular aislada, de centro $\bar{c} = \begin{pmatrix} 0.2 \\ 0.2 \end{pmatrix}$ y radio r = 0.15, que viene descrita por la siguiente función característica:

$$\phi_0(x) = \begin{cases} 0, & \text{si } x \in \mathcal{B}(\bar{c}, r), \\ 1, & \text{caso contrario,} \end{cases}$$
(3.42)

donde $\mathcal{B}(\bar{c}, r)$ representa la bola de centro en \bar{c} y radio r.

Denotamos el subdominio de la masa como Ω_k . Esta masa se transporta por el efecto de un campo de velocidad, representado por \mathbf{y} , a través de un dominio computacional $\Theta = [0, 1]^2$, durante un intervalo de tiempo [0, 6]. Además, denotamos a \neg como la frontera de Θ , es decir, $\neg = \partial \Theta$. Consideramos condiciones de frontera del tipo Dirichlet homogéneas en \neg , lo cual significa que la masa no puede atravesar las paredes del dominio computacional Θ . En la Figura 3.9, mostramos el dominio computacional y sus fronteras.



Figura 3.9: Dominio computacional de la ecuación de transporte

Dado el nivel inicial ϕ_0 y considerando que se trata de una función discontinua, la regularizamos mediante (3.4), de la siguiente forma:

$$\phi_0 := \frac{2}{1 + e^{(\phi_0/\epsilon)}},$$

y posteriormente, resolvemos la ecuación de transporte regularizada:

$$\frac{1}{\tau}(\phi_{k}^{h}-\phi_{k-1}^{h},s)_{\Theta}-\frac{1}{2}\left(\phi_{k}^{h}\mathbf{y}_{k}^{h}+\phi_{k-1}^{h}\mathbf{y}_{k}^{h},\nabla s\right)_{\Theta}+\frac{\epsilon}{2}\left(\nabla\phi_{k}^{h}+\nabla\phi_{k-1}^{h},\nabla s\right)_{\Theta}-\frac{\epsilon}{2}\left(\left[\nabla\phi_{k}^{h}+\nabla\phi_{k-1}^{h}\right]\cdot\eta_{\partial\Theta},s\right)_{\neg_{D}}=-\left(\mathbf{y}_{k}^{h}\cdot\eta_{\partial\Theta},s\right)_{\neg_{D}},\qquad(3.43)$$

 $\phi_0^h = \phi_0, \qquad (3.44)$

para todo $s \in \mathcal{W}_c^1(\Theta)$.

Consideramos en este experimento que la velocidad es constante a lo largo del tiempo y es igual a:

$$\mathbf{y} = \left(\begin{array}{c} 0.1\\ 0.1 \end{array}\right).$$

Resolvemos la ecuación de transporte regularizada (3.43), discretizando el espacio y el tiempo mediante los métodos de elementos finitos y Crank-Nicolson, respectivamente. Así, tomamos el paso de discretización espacial $h = 10^{-2}$, y el tamaño de paso temporal $\tau = 10^{-2}$.

En la Figura 3.10 podemos apreciar la ecuación de transporte, asociada a la masa aislada. En estas capturas podemos observar que la regularización actúa mediante la difusión incorporada en la frontera, mientras que en la Figura 3.11, podemos observar capturas para diferentes tiempos, que representan el subdominio Ω_k de la masa en movimiento.

El subdominio $\Omega(t)$ de la masa aislada está representado por el nivel $\phi(x, t) = 0.5$. Utilizamos el nivel $\phi(x, t) = 0.5$ debido a que la masa inicialmente está descrita por la función característica dada en (3.42) y éste es el nivel intermedio entre $\phi(x, t) = 0$ (ausencia de fluido) y $\phi(x, t) = 1$ (presencia de fluido). Notamos que la masa no muestra una deformación mayor en el tiempo, debido a que la velocidad es constante en cada punto del espacio.

En la Figura 3.11, la zona negra corresponde a los puntos $x \in \Theta$, asociados al nivel $\phi(x,t) = 0.5$, el cual corresponde al subdominio $\Omega(t)$ de la masa aislada.





Figura 3.10: Función de transporte



(b) Subdominio $\Omega(t)$ para t=1



(d) Subdominio $\Omega(t)$ para t=3



(f) Subdominio $\Omega(t)$ para t=5



(a) Subdominio $\Omega(t)$ para t = 0



(c) Subdominio $\Omega(t)$ para t=2



(e) Subdominio $\Omega(t)$ para t = 4



(g) Subdominio $\Omega(t)$ para t = 6

Figura 3.11: Transporte del subdominio $\Omega(t)$ de la masa aislada con velocidad constante

El área del nivel inicial $\phi(x, 0) = 0.5$ de la ecuación de transporte debe mantenerse constante. Proponemos utilizar un indicador de área δ_{ϕ} , el cual nos permite calcular el área del subdominio descrito por el método de conjuntos de nivel. Definimos para $\phi(x, t) \ge 0$ c.t.p en Θ , el siguiente indicador:

$$\delta_{\phi}(t) := \int_{\Theta} \delta_A(\phi(x,t)) dx, \qquad (3.45)$$

donde:

$$\delta_A(\phi(x,t)) = \begin{cases} 1, & \text{si } \phi(x,t) \ge 0.5, \\ 0 & \text{caso contrario,} \end{cases}$$

el cual define una medida de área del subdominio $\Omega(t)$ de la masa, descrito por el nivel $\phi(x,t) = 0, 5.$

En el Cuadro 3.4 mostramos el área del subdominio de la masa $\Omega(t)$, para diferentes tiempos. Notamos que el área del subdominio cambia con respecto al área inicial (70.40 × 10⁻³) en cada iteración.

Tiempo	Área del subdominio $\Omega(t)$
t = 0.0	$\delta_{\phi}(0.0) = 70.40 \times \mathbf{10^{-3}}$
t = 1.0	$\delta_{\phi}(1.0) = 68.85 \times 10^{-3}$
t = 2.0	$\delta_{\phi}(2.0) = 67.80 \times 10^{-3}$
t = 3.0	$\delta_{\phi}(3.0) = 66.85 \times 10^{-3}$
t = 4.0	$\delta_{\phi}(4.0) = 65.65 \times 10^{-3}$
t = 5.0	$\delta_{\phi}(5.0) = 65.10 \times 10^{-3}$
t = 6.0	$\delta_{\phi}(6.0) = 66.62 \times 10^{-3}$

Cuadro 3.4: Área del subdominio $\Omega(t)$ de la masa aislada descrita por el nivel $\phi(x,t) = 0.5$

A pesar de que el nivel $\phi(x,t) = 0.5$ tenga un buen comportamiento al describir el subdominio de la masa, éste no preserva el área inicial 70.40×10^{-3} (ver Cuadro 3.4). Ésto se debe a efectos de disipación, dispersión, difusión, etc, (ver [17]). Esta razón motiva el uso del proceso de reinicialización, introducido en la sección anterior, como herramienta que permita preservar el contorno del nivel de la ecuación de transporte y consecuentemente, preservar el área del subdominio.

3.5.2. Experimento de conjuntos de nivel con velocidad constante y reinicialización

En este experimento queremos mostrar la importancia del proceso de reinicialización de la ecuación de transporte mediante un ejemplo mal condicionado. Como se observó en el experimento anterior, incluso considerando una velocidad constante en la ecuación de transporte, se producen problemas numéricos en la descripción de dominios. En este experimento, constatamos la necesidad del proceso de reinicialización de la ecuación de transporte.

Nuevamente, consideramos una masa circular aislada de centro $\bar{c} = \begin{pmatrix} 0.2 \\ 0.2 \end{pmatrix}$ y radio r = 0.2. A diferencia del experimento anterior, en este experimento imponemos condiciones susceptibles a que el método de conjuntos de nivel falle en la descripción del subdominio de la masa. Así, usamos un paso de discretización temporal mayor al utilizado en el experimento anterior, lo que causa inestabilidad numérica. Además, consideramos que la masa se desplaza cerca de una pared del dominio computacional, en donde se impone una condición de frontera del tipo Dirichlet homogéneo en la ecuación de transporte, lo

cual causa pérdida de volumen en el método de conjuntos de nivel.

Análogo al experimento anterior, supongamos que la masa aislada se desplaza por el efecto de un campo de velocidad, en un dominio computacional $\Theta = [0, 1]^2$, durante un intervalo de tiempo [0, 5.6].

La velocidad para este experimento la consideramos constante a lo largo del tiempo:

$$\mathbf{y} = \left(\begin{array}{c} 0.1\\ 0.0 \end{array}\right).$$

El proceso de reinicialización consiste en que para cada tiempo t_k y una solución aproximada ϕ_k^h de la ecuación de transporte regularizada (3.43), queremos recuperar las propiedades del nivel inicial. La idea de la reinicialización es recuperar o corregir los problemas de disipación, pérdida de volumen y dispersión. La reinicialización actúa entre la iteración temporal k y la iteración k + 1. Así, dada una función de transporte ϕ_k^h en el tiempo t_k , resolvemos la siguiente ecuación lineal de reinicialización:

$$(\varphi_n^h, s)_{\Theta} - \frac{\hat{\tau}}{2} (\varphi_n^h, \nabla s \cdot \eta)_{\Theta} + \frac{\epsilon \hat{\tau}}{2} (\nabla \varphi_n^h \cdot \eta, \nabla s \cdot \eta)_{\Theta} + \epsilon \hat{\tau} (\varphi_n^h \varphi_{n-1}^h, \nabla s \cdot \eta)_{\Theta}$$

$$= (\varphi_{n-1}^h, s)_{\Theta} + \frac{\hat{\tau}}{2} (\varphi_{n-1}^h, \nabla s \cdot \eta)_{\Theta} - \frac{\epsilon \hat{\tau}}{2} (\nabla \varphi_{n-1}^h \cdot \eta, \nabla s \cdot \eta)_{\Theta}, \qquad (3.46)$$

$$\varphi_0^h = \phi_k^h, \qquad (3.47)$$

para todo $s \in \mathcal{W}_c^1(\Theta)$.

La ecuación anterior es resuelta mediante el método de elementos finitos y Crank-Nicolson. Nuevamente, consideramos a $W_c^1(\Theta)$ como el espacio de funciones base para el método de elementos finitos y tomamos pasos de discretización espacial y temporal $h = 10^{-2}$ y $\tau = 0.7$ respectivamente. El paso de discretización subtemporal es $\hat{\tau} = 0.07$ y el tiempo final de reinicialización es $\hat{T} = 2.0$, en el cual esperamos que la función de transporte haya recuperado o se aproxime a su contorno inicial, según el proceso de reinicialización.

Para el subdominio inicial $\Omega(0)$, registramos un área de $\delta_{\phi}(0) = 0.1256$, la cual tomamos como área real de la masa. En el Cuadro 3.5 mostramos el tiempo de transporte junto con el área del subdominio $\Omega(t)$ sin utilizar el proceso de reinicialización y usando reinicialización. Notamos que al usar el proceso de reinicialización, el área se acerca más al dato inicial.

	Sin reinicialización	Con reinicialización
Tiempo	Área de $Ω(t)$	Área de $Ω(t)$
t = 0.0	$\delta_{\phi}(0.0) = 12.56 \times \mathbf{10^{-3}}$	$\delta_{arphi}(0.0) = 12.56 imes \mathbf{10^{-3}}$
t = 0.7	$\delta_{\phi}(0.7) = 13.31 \times 10^{-3}$	$\delta_{\varphi}(0.7) = 13.24 \times 10^{-3}$
t = 1.4	$\delta_{\phi}(1.4) = 13.45 \times 10^{-3}$	$\delta_{\varphi}(1.4) = 13.34 \times 10^{-3}$
t = 2.1	$\delta_{\phi}(2.1) = 13.48 \times 10^{-3}$	$\delta_{\varphi}(2.1) = 13.18 \times 10^{-3}$
t = 2.8	$\delta_{\phi}(2.8) = 13.49 \times 10^{-3}$	$\delta_{\varphi}(2.8) = 13.14 \times 10^{-3}$
t = 3.5	$\delta_{\phi}(3.5) = 13.54 \times 10^{-3}$	$\delta_{\varphi}(3.5) = 13.05 \times 10^{-3}$
t = 4.2	$\delta_{\phi}(4.2) = 13.56 \times 10^{-3}$	$\delta_{\varphi}(4.2) = 12.91 \times 10^{-3}$
t = 4.9	$\delta_{\phi}(4.9) = 13.58 \times 10^{-3}$	$\delta_{\varphi}(4.9) = 12.74 \times 10^{-3}$
t = 5.6	$\delta_{\phi}(5.6) = 13.72 \times 10^{-3}$	$\delta_{\varphi}(5.6) = 12.69 \times 10^{-3}$

Cuadro 3.5: Área del subdominio $\Omega(t)$

En las Figuras 3.12 y 3.13 podemos observar la resolución de la ecuación de transporte y el subdominio que representa, sin utilizar el proceso de reinicialización. En estas capturas observamos que el nivel $\phi(x,t) = 0.5$ pierde la conservación del contorno inicial, debido a un problema de disipación.

Finalmente, en las Figuras 3.14 y 3.15 observamos como funciona el proceso de reinicialización. En estas capturas podemos notar que la reinicialización corrige el contorno en el nivel $\phi(x,t) = 0.5$ preservando así la descripción del subdominio inicial $\Omega(0)$ y consecuentemente su área. Por tal motivo, podemos concluir que el proceso de reinicialización ayuda al método de conjuntos de nivel para poder conservar las propiedades del nivel inicial.

Observación. La recuperación del área del subdominio no es como la esperaríamos, (ver Cuadro 3.5). Además, numéricamente es muy costoso resolver la ecuación de reinicialización en todo el dominio computacional. Reinicializar correctamente la ecuación de transporte es un tema que aún se sigue estudiando en la actualidad.

Alternativamente al proceso de reinicialización que vimos anteriormente, para futuras investigaciones se podría proponer un proceso eurístico de reinicialización. Éste consiste en que para cada subintervalo adecuado de tiempo, antes de que la función de transporte pierda la propiedad de describir correctamente el subdominio del fluido, redefinamos la condición inicial a través de una función indicatriz. Por ejemplo, supongamos que ϕ_k^h representa la función de transporte en un tiempo t_k (resuelta por la ecuación de transporte regularizada, p.g. 49) entonces reinicializamos la ecuación de transporte, redefiniendo la condición inicial de la siguiente manera:

$$\phi_0^h := \begin{cases} 1, & \text{si } \phi_k^h \ge M, \\ 0 & \text{caso contrario,} \end{cases}$$

donde M representa el nivel que describe el subdominio. Así replanteamos la ecuación de transporte regularizada en el intervalo $[0, T - t_k]$. Este procedimiento nos evitaría realizar el proceso de reinicialización de la sección 3.4 y consecuentemente, tener menor gasto computacional y una metodología más eficiente.



Figura 3.12: Función de transporte de la masa aislada sin reinicialización.



(b) Subdominio $\Omega(t)$ para t=0.7



(d) Subdominio $\Omega(t)$ para t=2.1



(f) Subdominio $\Omega(t)$ para t=3.5



(h) Subdominio $\Omega(t)$ para t=5.6



(a) Subdominio $\Omega(t)$ para t=0.0



(c) Subdominio $\Omega(t)$ para t=1.4



(e) Subdominio $\Omega(t)$ para t = 2.8





Figura 3.13: Subdominio $\Omega(t)$ de la masa aislada sin reinicialización.



Figura 3.14: Función de transporte de la masa aislada con reinicialización.



(b) Subdominio $\Omega(t)$ para t=0.7



(d) Subdominio $\Omega(t)$ para t=2.1



(f) Subdominio $\Omega(t)$ para t=3.5



(h) Subdominio $\Omega(t)$ para t=5.6



(a) Subdominio $\Omega(t)$ para t=0



(c) Subdominio $\Omega(t)$ para t=1.4



(e) Subdominio $\Omega(t)$ para t = 2.8





Figura 3.15: Subdominio de la masa aislada con reinicialización.
Capítulo 4

Método combinado Newton-Semismooth con conjuntos de nivel (SSN-LS)

Los flujos de fluido tipo Bingham de frontera libre tienen un amplio campo de aplicación en la ingeniería petrolífera (ver [30]), en la ingeniería de alimentos, (ver [34]), en el campo de la geología modelando la caída de avalanchas (ver [18]) o flujos de lava volcánica como en [7], entre otras. Con el fin de simular la dinámica de este tipo de fluido, requerimos métodos numéricos eficientes, que describan con precisión la forma de la frontera libre.

Esta sección corresponde al mayor aporte de este trabajo. Proponemos un método para simular este tipo de fluidos viscoplásticos, el cual combina la técnica de conjuntos de nivel, que describe el dominio móvil, y el método de Newton-Semismooth, que calcula eficientemente la velocidad y presión del fluido de Bingham.

Este trabajo es nuevo en combinar la técnica de conjuntos de nivel y el método de Newton-Semismooth para el estudio de simulaciones de flujos de fluidos tipo Bingham. Ampliamos los campos de aplicación del método de Newton-Semismooth para resolver la caracterización primal-dual del problema de Bingham, desarrollado en [1], junto con el método de conjuntos de nivel (para la descripción de dominios móviles) según lo explicado en el capítulo 3.

La principal contribución de este trabajo se resume de la siguiente manera:

- Adaptamos el uso de los métodos de conjuntos de nivel y Newton-Semismooth para simular flujos de fluido tipo Bingham en el tiempo. Superamos el obstáculo de estabilizar numéricamente el método de conjuntos de nivel y el de establecer condiciones de contorno adecuadas de la frontera libre. La metodología propuesta se puede aplicar al caso de fluidos newtonianos, como veremos más adelante.
- Implementamos numéricamente la simulación del método combinado en el paquete computacional FEniCS (revisar [36]), validamos el método combinado desarrollando una metodología análoga para el caso de las ecuaciones incompresibles de Navier-Stokes (ver [25]) y comparamos nuestros resultados numéricos con los de la bibliografía estudiada (ver [24, 25, 27]). Además, analizamos los resultados de nuestras simulaciones numéricas, para el caso de Bingham, basándonos en los experimentos

estudiados en [1]. Finalmente, sacamos conclusiones de la dinámica y el comportamiento del fluido de Bingham.

4.1. Método combinado (SSN-LS)

En los capítulos anteriores, hemos constatado el buen desempeño numérico de los métodos de Newton-Semismooth y conjuntos de nivel, por separado. Esto nos motiva a considerarlos como herramientas adecuadas para proponer un método que combine ambas técnicas, y simule eficientemente un fluido de Bingham con frontera libre, descrito por el problema cuasiestático $(\mathbf{B})_{k+1}$ de la sección 1.2.

En esta sección, presentamos un método combinado de Newton-Semismooth con conjuntos de nivel para simular un fluido tipo Bingham con frontera libre (SSN-LS).

Escribimos el método en dos partes. La primera parte trata sobre el cálculo del dominio en el tiempo, mientras que la segunda aborda la dinámica del fluido, es decir, el cálculo de la velocidad y presión.

Observación. El método combinado está descrito mediante pasos que seguimos y leemos de manera ordenada. Escribimos las ecuaciones de dinámica de fluidos en formulación variacional, que como se vió en los capítulos anteriores, son resueltas mediante el método de elementos finitos.

Notación: El superíndice *h* representa la discretización espacial, mientras que los subíndices $k \neq k + 1$ corresponden a la discretización temporal con tamaño de paso τ , mientras que $n \neq n - 1$ corresponden a la iteración subtemporal del proceso de reinicialización, con tamaño de paso $\hat{\tau}$.

Suponemos que el fluido se desplaza en un intervalo temporal [0, T]. Este intervalo es uniformente dividido en N subintervalos de igual longitud $\tau > 0$, donde $t_k = t_{k-1} + \tau$. Así, escribimos:

$$\begin{split} \phi^h_k &= \phi^h(t_k), \\ \mathbf{y}^h_k &= \mathbf{y}^h(t_k), \\ p^h_k &= p^h(t_k), \end{split}$$

para denotar las funciones de transporte, velocidad y presión en el tiempo t_k , respectivamente. Así, los conjuntos de nivel de la función de transporte son los que describen el subdominio del fluido, mientras el campo de velocidad influencia el transporte y deformación del subdominio.

De esta manera, consideramos un dominio computacional $\Theta \subset \mathbb{R}^d$ con d = 2, 3, que es invariante en el tiempo. Este dominio computacional representa el espacio geométrico por donde se desplaza el fluido. Además denotamos a \neg como la frontera de Θ y dividimos esta frontera en tres partes disjuntas: la parte por donde ingresa el fluido \neg_D y la parte por donde el fluido se desplaza \neg_0 . En la figura 4.1 ilustramos un ejemplo de dominio computacional y la ubicación de cada tipo de frontera.



Figura 4.1: Dominio computacional Θ . Ubicación de fronteras.

Sea un subdominio inicial Ω_0 , el cual está descrito por la función indicatriz ϕ_0 y representa el subdominio del fluido en el tiempo inicial t = 0, es decir, $\phi_0(x) = 0 \Leftrightarrow x \in \Omega_0$ y $\phi_0(x) = 1 \Leftrightarrow x \notin \Omega_0$.

Denotamos a Ω_{k-1} , como el subdominio que representa la masa del fluido, a \mathbf{y}_k^h y p_k^h , como la velocidad y presión en el tiempo t_k , definidas en el subdominio Ω_{k-1} .

Observación. La diferencia del subíndice temporal entre el subdominio Ω_{k-1} y las funciones \mathbf{y}_k^h y p_k^h indica que el subdominio del fluido está calculado en un paso temporal anterior. Por esta razón, seguimos la misma notación de la formulación cuasiestática introducida en el Capítulo 1.

A continuación, calculamos el nuevo subdominio Ω_k y posteriormente, la nueva velocidad \mathbf{y}_{k+1}^h y presión p_{k+1}^h .

Cálculo del subdominio

1. Inicialmente, regularizamos la función indicatriz del tiempo inicial, con la cual resolvemos la ecuación de transporte.

$$\phi_0 = \frac{2}{1 + e^{(\phi_0/\epsilon)}},$$

donde $\epsilon > 0$ es el grosor de la frontera.

2. Una vez calculadas ϕ_{k-1}^h y \mathbf{y}_k^h , calculamos ϕ_k^h , resolviendo la siguiente ecuación de transporte estabilizada, según lo indicado en la sección 3.3.

$$\frac{1}{\tau}(\phi_{k}^{h}-\phi_{k-1}^{h},s)_{\Theta}-\frac{1}{2}\left(\phi_{k}^{h}\mathbf{y}_{k}^{h}+\phi_{k-1}^{h}\mathbf{y}_{k}^{h},\nabla s\right)_{\Theta}+\frac{\epsilon}{2}\left(\nabla\phi_{k}^{h}+\nabla\phi_{k-1}^{h},\nabla s\right)_{\Theta} \\
-\frac{\epsilon}{2}\left(\left[\nabla\phi_{k}^{h}+\nabla\phi_{k-1}^{h}\right]\cdot\eta_{\partial\Theta},s\right)_{\neg_{D}}=-\left(\mathbf{y}_{k}^{h}\cdot\eta_{\partial\Theta},s\right)_{\neg_{D}}, \\
\phi_{0}^{h}=\phi_{0},$$

para todo $s \in \mathcal{W}_c^1(\Theta)$.

3. Cuando hayamos calculado ϕ_k^h , procedemos con la reinicialización, calculando φ_n^h mediante la resolución de la siguiente ecuación, según lo descrito en la sección 3.4.

$$\begin{split} \left(\varphi_{n}^{h},s\right)_{\Theta} &-\frac{\hat{\tau}}{2}\left(\varphi_{n}^{h},\nabla s\cdot\eta\right)_{\Theta} + \frac{\epsilon\hat{\tau}}{2}\left(\nabla\varphi_{n}^{h}\cdot\eta,\nabla s\cdot\eta\right)_{\Theta} + \varepsilon\hat{\tau}\left(\varphi_{n}^{h}\varphi_{n-1}^{h},\nabla s\cdot\eta\right)_{\Theta} \\ &= \left(\varphi_{n-1}^{h},s\right)_{\Theta} + \frac{\hat{\tau}}{2}\left(\varphi_{n-1}^{h},\nabla s\cdot\eta\right)_{\Theta} - \frac{\varepsilon\hat{\tau}}{2}\left(\nabla\varphi_{n-1}^{h}\cdot\eta,\nabla s\cdot\eta\right)_{\Theta}, \\ &\varphi_{0}^{h} = \phi_{k}^{h}, \end{split}$$

para todo $s \in \mathcal{W}_c^1(\Theta)$.

Repetimos este paso hasta que el siguiente criterio de estacionariedad se satisfaga:

$$\|\nabla \varphi_n^h\| \approx 1,$$

así redefinimos:

$$\phi_k^h := \varphi_n^h.$$

4. Con la función de transporte ϕ_k^h y el nivel M = 0.5; definimos el **nuevo subdominio** y su frontera de la siguiente manera:

$$\Omega_k := \left\{ x \in \Theta : \phi_k^h(x) > M \right\}, \\ \partial \Omega_k := \left\{ x \in \Theta : \phi_k^h(x) = M \right\}.$$

5. Utilizando el dominio computacional Θ y su fronteras \exists_0 y \exists_D , definimos las fronteras del subdominio:

$$\Gamma_0^k := \partial \Omega_k \cap \exists_0,
 \Gamma_D^k := \partial \Omega_k \cap \exists_D,
 \Gamma_F^k := \partial \Omega_k \cap \operatorname{int}(\Theta)$$

que representan la frontera antideslizante, frontera de ingreso y frontera libre del fluido, respectivamente. Nótese que Γ_0^k y Γ_D^k adoptan la forma de las fronteras de \neg , mientras que la frontera libre del fluido Γ_F^k interseca el interior del dominio computacional Θ (ver Figuras 4.1 y 4.2).

Cuando hayamos llegado a esta parte del método, ya tendremos descrito el subdominio Ω_k y sus fronteras: antideslizante Γ_0^k , de ingreso de fluido Γ_D^k y frontera libre Γ_F^k . En la Figura 4.2, ilustramos la ubicación de las fronteras del subdominio Ω_k



Figura 4.2: Subdominio Ω_k (rojo) transportándose en el dominio computacional Θ

La segunda parte del método trata sobre el cálculo de la velocidad y presión del fluido en el subdominio Ω_k , determinado en la primera parte del método.

Cálculo de la velocidad y presión

1. Suponemos que la velocidad \mathbf{y}_k^h (definida en Ω_{k-1}) fue calculada en el paso anterior. Extrapolamos \mathbf{y}_k^h en el nuevo subdominio Ω_k :

$$|\mathbf{y}_k^h|_{\Omega_{k-1}} o \mathbf{y}_k^h|_{\Omega_k}$$

- **2.** Actualizamos los espacios $\mathbf{V}^h = \mathbf{V}^h(\Omega_k)$, $\mathbf{W}^h = \mathbf{W}^h(\Omega_k)$ y $Q^h = Q^h(\Omega_k)$.
- **3.** Calculamos \mathbf{y}_{k+1}^h y p_{k+1}^h , mediante el método de Newton (2.8) p.g. 37-38, resolviendo el siguiente sistema:

$$\begin{array}{c} a(\mathbf{y}_{k+1}^{h}, \mathbf{v}) + (\mathbf{q}_{k+1}^{h}, \varepsilon(\mathbf{v}))_{2 \times 2} - (p_{k+1}^{h}, \operatorname{div}(\mathbf{v})) - (\overline{\mathbf{f}}_{k+1}^{h}, \mathbf{v}) - \tau_{\varsigma} \int_{\Gamma_{F}^{k}} \langle \mathcal{K} \mathbf{n}, \mathbf{v} \rangle ds \\ (\operatorname{div} \mathbf{y}_{k+1}^{h}, r) + \rho(p_{k+1}^{h}, r) \\ (\operatorname{max}(0, \gamma \| \varepsilon(\mathbf{y}_{k+1}^{h}) \| - \overline{g}) \mathbf{q}_{k+1}^{h}, \mathbf{w})_{2 \times 2} - (\overline{g} \gamma \varepsilon(\mathbf{y}_{k+1}^{h}), \mathbf{w})_{2 \times 2} \end{array} \right] = \mathbf{0},$$

donde $\overline{\mathbf{f}}_{k+1}^h = \tau \mathbf{f}_{k+1}^h + \mathbf{y}_k^h, \, \mathbf{v} \in \mathbf{V}^h, \, \mathbf{w} \in \mathbf{W}^h \, \mathrm{y} \, r \in Q^h.$

4. Cuando hayamos calculado las funciones \mathbf{y}_{k+1}^h y p_{k+1}^h en el subdominio Ω_k , extendemos por 0 estas funciones hacia el dominio computacional Θ , es decir:

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_{k+1}^{h}|_{\Omega_{k}} &\to \mathbf{y}_{k+1}^{h}|_{\Theta}, \\ p_{k+1}^{h}|_{\Omega_{k}} &\to p_{k+1}^{h}|_{\Theta}, \end{aligned}$$

y volvemos al paso 2 del Cálculo del subdominio.

Observación. La triangulación del subdominio Ω_k , asociada a la dicretización espacial, es subconjunto de la triangulación del dominio computacional Θ . En la Figura 4.3, mostramos la triangulación del subdominio, contenida en la del dominio computacional. En el momento que calculamos un subdominio $\Omega_k \subset \Theta$, en el paso 4 del **Cálculo del subdominio**, diferenciamos la triangulación del subdominio con la del dominio computacional.



Figura 4.3: Triangulación del subdominio Ω_k

4.1.1. Consideraciones numéricas

En esta sección presentamos algunas consideraciones numéricas para la implementación del método combinado.

Criterio de Newton. En la resolución del sistema (4.1) mediante en método de Newton (2.8) p.g. 37-38, el criterio de parada en la implementación numérica está dado por:

$$\left\| \left(\delta \mathbf{y}_{k+1}^h, \delta \mathbf{q}_{k+1}^h, \delta p_{k+1}^h \right) \right\|_{L^2(\Omega_k)^2 \times L^2(\Omega_k)^{2 \times 2} \times L^2(\Omega_k)} \le \text{tol}.$$

donde tol > 0, representa una tolerancia adecuada.

• Paso subtemporal de reinicialización y grosor de la frontera. Según [14], el paso de discretización subtemporal de reinicialización y grosor de la frontera se pueden tomar de la siguiente manera:

$$\hat{\tau} = \frac{(h^{\frac{11}{10}})}{2},$$

 $\epsilon = \frac{(h^{\frac{9}{10}})}{2},$

donde h es el paso de discretización espacial, $\hat{\tau}$ el paso de discretización subtemporal de reinicialización y ε el grosor de la frontera.

- Tiempo final de reinicialización. Según [17], alternativamente al criterio de estacionariedad del paso **3** del **Cálculo del subdominio**, se puede considerar un tiempo final de reinicialización \hat{T} suficientemente grande hasta que el proceso de reinicialización haya recuperado la propiedad del contorno inicial de la función de transporte. Un indicador para verificar que esta propiedad se verifique es δ_{ϕ} , definido en (3.45) p.g. 59.
- Extrapolación. La velocidad \mathbf{y}_k^h del paso 1 del Cálculo de la velocidad y presión, está calculada en el subdominio Ω_{k-1} . Esta función se extrapola adecuadamente para propagar con precisión la dirección del campo de velocidad en el nuevo subdominio Ω_k . Según [41], para los puntos del nuevo subdominio Ω_k , donde los puntos de la velocidad \mathbf{y}_k tienen valores desconocidos, se toma un promedio de las velocidades de los puntos circundantes (ver Figura 4.4).



Figura 4.4: Extrapolación de la velocidad

• Extensión por 0. En el paso 4 del Cálculo de la velocidad y presión, las funciones \mathbf{y}_{k+1}^h y p_{k+1}^h se extienden por 0 hacia Θ , es decir, las funciones \mathbf{y}_{k+1}^h y p_{k+1}^h toman el valor de 0 en $\Theta \setminus \Omega_k$.

4.2. Experimentos numéricos para el caso Bingham.

Aquí, presentamos dos experimentos numéricos usando el método combinado de Newton-Semismooth y conjuntos de nivel para la simulación de un fluido tipo Bingham de frontera libre, presentado en la sección anterior. Con estos experimentos, analizamos el desempeño numérico del método propuesto.

El primer experimento trata sobre el desplazamiento de un flujo de fluido de Bingham en un plano inclinado con tasa constante de ingreso de fluido, mientras que el segundo experimento tiene el propósito de analizar el desplazamiento del fluido en una tubería que cambia de grosor. De esta forma, analizamos la deformación y comportamiento del fluido, junto con su velocidad, la distinción de zonas sólidas-líquidas y el tiempo de desplazamiento.

4.2.1. Fluido de Bingham en un plano inclinado.

La configuración del experimento que presentamos en esta sección, es la misma que la del experimento visto al final del Capítulo 2. El objetivo es analizar la conducta del fluido de Bingham en un plano inclinado durante un intervalo de tiempo.

La frontera de subdominio es dividida en tres partes disjuntas: antideslizante Γ_0 , ingreso Γ_D y frontera libre Γ_F . En la Figura 4.5, observamos la localización de las fronteras del subdominio.



Figura 4.5: Ubicación de las fronteras del subdominio Ω_k

En este experimento, se inyecta fluido de manera constante por la frontera de ingreso Γ_D^k y éste cae paulatinamente por efecto de una fuerza vertical que simula la gravedad.

En Γ_D^k y Γ_0^k , imponemos las siguientes condidiciones de frontera:

$$\mathbf{y}_D = \begin{pmatrix} -x_1(x_1-2) \\ 0 \end{pmatrix},$$
$$\mathbf{y}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

respectivamente.

Consideramos una condición de tensión superficial en Γ_F^k , esto es una condición de stress en la frontera libre del tipo $\sigma_{Tot} \cdot \mathbf{n} = \varsigma \mathcal{K} \mathbf{n}$, donde σ_{Tot} es el tensor total de stress, **n** representa el vector normal al subdominio en la frontera libre y ς es el coeficiente de tensión superficial.

En la Figura 4.6, presentamos la ubicación de las fronteras del dominio computacional.



Figura 4.6: Ubicación de las fronteras del dominio computacional Θ

En el Cuadro 4.1, mostramos los parámetros adimensionales asociados al experimento de esta sección.

Significado	Notación	Cantidad
Tamaño de paso espacial	h	10^{-2}
Tamaño de paso temporal	au	10^{-2}
Tiempo final de simulación	T	7.2
Tamaño de paso subtemporal	$\hat{ au}$	10^{-3}
Tiempo final de reinicialización	\hat{T}	10^{-2}
Tensión superficial	ς	0.5
Viscocidad	μ	1
Fuerza externa	f	$(0, -9.8)^T$
Límite elástico	g	5
Parámetro de regularización de Tikhonov	γ	10^{3}
Tolerancia de Newton-Semismooth	tol	10^{-5}
Parámetro de regularización de presión	ϱ	10^{-5}
Grosor de la frontera	ϵ	5×10^{-5}

Cuadro 4.1: Parámetros adimensionales para el experimento de Bingham en un plano inclinado.

Debido a que la fuerza externa **f** simula ser la gravedad, esperamos que el material fluya bajo los efectos de esta fuerza y la condición de ingreso \mathbf{y}_D .

En la Figura (4.7) observamos las capturas del nivel $\phi(x,t) = 0.5$ de la ecuación de transporte. Estas capturas representan el subdominio del fluido de Bingham en diferentes tiempos. Notamos que el fluido se desplaza sobre el plano inclinado, hacia la dirección $(0, -1)^T$ por los efectos de la fuerza externa **f**. El subdominio del fluido adopta una curvatura de t = 2.4 a t = 3.6, es decir, el fluido se está conteniendo antes de t = 2.4 y luego cede en t = 3.6. Este comportamiento es diferente a lo que esperaríamos de un fluido newtoniano, como veremos más adelante en la sección 4.3, para el caso del desplazamiento del agua.



Figura 4.7: Subdominio del fluido. Experimento de Bingham en un plano inclinado

Por otro lado, en la Figura (4.8) podemos observar las capturas de la magnitud de la velocidad del fluido de Bingham en diferentes tiempos. La velocidad toma los valores más altos cerca de la frontera libre, mientras que decrece cerca del plano inclinado por la condición antideslizante en Γ_0^k . En la frontera de ingreso Γ_D^k , notamos que existe una tasa de ingreso constante, impuesta por la condición de frontera en Γ_F^k . Observamos que la velocidad disminuye en t = 2.4 y luego aumenta en t = 3.6.



Figura 4.8: Velocidad del fluido. Experimento de Bingham en un plano inclinado.

En las capturas de la Figura 4.9 presentamos la presión del fluido en diferentes tiempos. Notamos que los valores de la presión decrecen a medida que el fluido se desplaza en el plano inclinado. Observamos que la presión toma valores positivos en la parte superior del fluido, en contraste con la parte inferior donde la presión es negativa.



Figura 4.9: Presión del fluido. Experimento de Bingham en un plano inclinado

Con el fin de analizar la dinámica del fluido, tomamos una partícula cerca de la frontera libre y el plano inclinado (ver Figura 4.10). Seguimos la trayectoria de dicha partícula durante el tiempo. Así, en el Cuadro 4.2 presentamos la velocidad y presión de esta partícula de fluido. Notamos que la componente horizontal de la velocidad aumenta en el tiempo, mientras que la componente vertical oscila (aumenta y disminuye) en el tiempo. Notamos que como la partícula se encuentra cerca de la frontera libre, la presión decrece a lo largo de tiempo (ver Cuadro 4.2).



Figura 4.10: Trayectoria de una partícula de fluido. Experimento de Bingham en un plano inclinado

Tiempo	Posición	Velocidad	Presión
t = 1.2	x = (0.50, 0.70)	$\mathbf{y}(x,t) = (0.82, -1.31)$	p(x,t) = -14.54
t = 2.4	x = (1.10, 0.27)	$\mathbf{y}(x,t) = (1.43, -1.31)$	p(x,t) = -41.20
t = 3.6	x = (1.70, -0.26)	$\mathbf{y}(x,t) = (1.41, -1.71)$	p(x,t) = -48.12
t = 4.8	x = (2.45, -0.28)	$\mathbf{y}(x,t) = (1.71, -1.01)$	p(x,t) = -62.20
t = 6.0	x = (3.15, -0.61)	$\mathbf{y}(x,t) = (1.76, -1.67)$	p(x,t) = -82.41
t = 7.2	x = (3.80, -0.71)	$\mathbf{y}(x,t) = (1.73, -1.21)$	p(x,t) = -102.93

Cuadro 4.2: Posición, velocidad y presión de una partícula de fluido cerca de la frontera libre. Experimento de Bingham en un plano inclinado.

En las capturas de la Figura (4.11), presentamos los conjuntos activos e inactivos en diferentes tiempos. Las zonas negras corresponden a la parte del fluido donde éste se comporta como líquido, mientras que las zonas grises pertenecen a las zonas que muestran comportamiento sólido. En estas capturas notamos la distinción de las zonas sólidaslíquidas. El fluido tiene un comportamiento sólido cerca de la frontera de ingreso y empieza a remarcarse a medida que pasa el tiempo, mientras que en la mayor parte de la masa del fluido se observa un comportamiento líquido.



Figura 4.11: Conjuntos activos $\mathcal{A}_{\gamma}(t)$ (negro) e inactivos $\mathcal{I}_{\gamma}(t)$ (gris). Experimento de Bingham en un plano inclinado

En lo que se refiere al desempeño numérico del método combinado, el tiempo de ejecución del experimento de Bingham en un plano inclinado fué de 1h:13min:7s. El número promedio de iteraciones del método Newton-Semismooth para este experimento fue de 15 iteraciones. En el Cuadro 4.3 presentamos las iteraciones y los residuos asociados al método de Newton-Semismooth para el tiempo final t = 7.2. En la Figura 4.12 observamos el decrecimiento de los residuos del método de Newton-Semismooth, correspondiente al tiempo t = 7.2.

Iteraciones	$\ \delta \mathbf{y}_h^k\ _{L^2(\Omega_k)^2}$	$\left\ \delta \mathbf{q}_{h}^{k} \right\ _{L^{2}(\Omega_{k})^{2 \times 2}}$	$\ \delta p_h^k\ _{L^2(\Omega_k)}$
1	1.288×10^{-1}	7.065×10^1	1.201×10^{1}
2	5.073×10^{-1}	4.433×10^1	9.560×10^1
3	2.293×10^{-1}	2.112×10^1	4.713×10^1
4	1.294×10^{-1}	1.156×10^1	2.548×10^{1}
5	6.344×10^{-2}	6.011×10^{0}	1.315×10^0
6	3.459×10^{-2}	3.510×10^{0}	7.390×10^{0}
7	3.086×10^{-2}	2.137×10^{0}	5.380×10^{0}
8	1.663×10^{-2}	2.754×10^{0}	3.410×10^{0}
9	1.024×10^{-2}	1.275×10^{0}	2.223×10^0
10	5.139×10^{-3}	5.735×10^{-1}	1.098×10^{0}
11	2.835×10^{-3}	3.040×10^{0}	2.473×10^{0}
12	6.408×10^{-3}	8.759×10^{0}	7.059×10^0
13	2.946×10^{-3}	4.341×10^{0}	3.498×10^0
14	1.411×10^{-3}	2.124×10^{0}	1.725×10^{0}
15	5.767×10^{-4}	9.211×10^{-1}	7.434×10^{-1}
16	1.603×10^{-4}	2.840×10^{-1}	2.283×10^{-1}
17	1.554×10^{-5}	3.309×10^{-2}	2.656×10^{-2}
18	1.759×10^{-7}	4.488×10^{-4}	3.602×10^{-4}
19	3.136×10^{-12}	7.822×10^{-8}	6.249×10^{-8}

Cuadro 4.3: Iteraciones y residuos del método de Newton-Semismooth en t = 7.2. Experimento de Bingham en un plano inclinado



Figura 4.12: Norma de $\| (\delta \mathbf{y}_h^k, \delta \mathbf{q}_h^k, \delta p_h^k \|) \|_{L^2(\Omega_k)^2 \times L^2(\Omega_k)^{2 \times 2} \times L^2(\Omega_k)}$ para t = 7.2. Método de Newton Semismooth. Experimento de Bingham en un plano inclinado.

Consideramos importante analizar la relación del desplazamiento del fluido con respecto al tiempo, debido a que un fluido de Bingham puede modelar fenómenos naturales como desplazamientos de lava volcánica (ver [7]) o caída de avalanchas (ver [18]), donde podemos estimar el tiempo de evacuación de una población aledaña. Consideramos la partícula descrita en la Figura (4.10) y Cuadro (4.2) y analizamos su desplazamiento en el plano inclinado con respecto al tiempo. En la Figura 4.13 presentamos el desplazamiento de esta partícula con respecto al tiempo, cuya relación permitiría estimar la velocidad media del avance del fluido.



Figura 4.13: Desplazamiento del fluido de Bingham respecto al tiempo. Experimento de Bingham en un plano inclinado

4.2.2. Fluido de Bingham en una tubería.

En la industria petrolífera, alimentaria y energética, los fluidos no newtonianos son ampliamente utilizados y su transporte en tuberías puede ser muy costoso (e.g. [30, 34]). Por este motivo, el experimento de esta sección tiene el objetivo de analizar como actúa el límite elástico en un fluido de Bingham al momento de distinguir las zonas sólidas-líquidas. Un fluido de Bingham se comporta como un líquido cuando supera el límite elástico, caso contrario tiene un comportamiento sólido.

En esta sección, analizamos la velocidad, presión, distinción de zonas sólidas-líquidas y tiempo de desplazamiento de un fluido de Bingham en una tubería.

A continuación, explicamos la configuración del experimento de esta sección. Consideramos una sección transversal de una tubería como se ilustra en Figura 4.14. Así, podremos simplificar un problema tridimensional en uno bidimensional. Proponemos esta simplificación por el costo computacional en simular este tipo de problemas que involucran sistemas a gran escala.



Figura 4.14: Sección transversal de una tubería

A lo largo del tiempo y de manera constante, se va inyectando fluido en una tubería que cambia de grosor. La configuración de este expermiento es similar al experimento realizado en [1], p.g. 144, el cual trata un problema estacionario y supone que el fluido ocupa totalmente el espacio de la tubería. El experimento de esta sección es diferente pues corresponde a un problema de frontera libre donde el fluido va ocupando el espacio dentro de la tubería.

	1	0 1	4 4	1		/ /	1 1	• ,	1		• /
En	еL	Cilladro 4	14	mostramos I	OS.	parametros	del	experimento	de	esta	seccion
	O1	Cuaaro .	т . т,	inostranios i	00	paramotros	aor	onportitionto	ao	0000	00001011

Significado	Notación	Cantidad
Tamaño de paso espacial	h	15×10^{-2}
Tamaño de paso temporal	au	10^{-2}
Tiempo final de simulación	T	6.4
Tamaño de paso subtemporal	$\hat{ au}$	10^{-3}
Tiempo final de reinicialización	\hat{T}	10^{-2}
Tensión superficial	ς	0.5
Viscocidad	μ	1
Fuerza externa	\mathbf{f}	$(0, 0)^T$
Límite elástico	g	5
Parámetro de regularización de Tikhonov	γ	10^{3}
Tolerancia de Newton-Semismooth	tol	10^{-5}
Parámetro de regularización de presión	Q	10^{-5}
Grosor de la frontera	ϵ	5×10^{-5}

Cuadro 4.4: Cantidades para el experimento de Bingham en tubería.

Como antes, consideramos una condición de tensión superficial en la frontera libre Γ_F^k , condición de ingreso constante en Γ_D^k y condición antideslizante en Γ_0^k . En la Figura 4.15 podemos localizar las fronteras del subdominio del fluido Ω_k .



Figura 4.15: Ubicación de las fronteras del subdominio Ω_k

En la Figura 4.16 podemos observar la localización de las fronteras del dominio computacional Θ .



Figura 4.16: Ubicación de las fronteras del dominio computacional Θ

Imponemos las siguientes condiciones de frontera:

$$\mathbf{y}_{D} = \begin{pmatrix} y_{D,1} \\ y_{D,2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(4/9) x_{2}^{2} + (4/3) x_{2} \\ 0 \end{pmatrix},$$
$$\mathbf{y}_{0} = \begin{pmatrix} y_{0,1} \\ y_{0,2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

en Γ_D^k y Γ_0^k respectivamente.

Suponemos que la fuerza de gravedad es perpendicular a la sección de tubería (ver Figura 4.14), por esta razón podemos considerar:

$$\mathbf{f} = \left(\begin{array}{c} 0\\ 0 \end{array}\right).$$

Esperamos que el material se llene debido a la condición de ingreso \mathbf{y}_D en Γ_D^k .

Las capturas de la Figura (4.17) corresponden al nivel $\phi(x, y) = 0.5$ de la función de transporte, que representa el subdominio del fluido de Bingham en diferentes tiempos. Observamos que el fluido va ocupando paulatinamente el espacio dentro de la tubería

debido a la condición de ingreso y_D en la frontera Γ_D^k . El transporte del fluido se acelera cuando éste empieza a llenar la parte estrecha de la tubería. Este comportamiento se debe a dos factores: el aumento de la velocidad y el cambio de presión en el subdominio del fluido entre las partes angosta y estrecha de la tubería.



Figura 4.17: Dominio del fluido. Experimento de Bingham en una tubería

En la Figura (4.18) podemos apreciar las capturas de la magnitud de la velocidad del fluido de Bingham para diferentes tiempos.

La velocidad toma los valores más altos en la frontera libre del subdominio del fluido, mientras que decrece cerca de las paredes de la tubería, debido a la condición antideslizante. Cuando el fluido llena la parte ancha de la tubería y empieza a desplazarse a la parte estrecha, notamos un aumento en la magnitud de la velocidad. Esto se debe a la diferencia de presión en el subdominio entre la parte ancha y angosta de la tubería. Es decir, la presión toma valores mayores (positivos) cuando el fluido está desplazándose en la parte ancha, y menores (negativos) cuando se encuentra en la parte angosta, causando un aumento de la velocidad en el subdominio del fluido. Este comportamiento de la presión lo mostramos en las capturas de la Figura 4.19



Figura 4.18: Velocidad del fluido. Experimento de Bingham en una tubería



Figura 4.19: Presión del fluido. Experimento de Bingham en una tubería

Nuevamente, seguimos la trayectoria de una partícula de fluido que se encuentra cerca de la parte central de la frontera libre (ver Figura 4.20). En el Cuadro 4.5 presentamos la velocidad y presión de esta partícula de fluido. La componente horizontal de la velocidad aumenta en el tiempo, mientras que la componente vertical permanece constante igual a cero. La componente horizontal de la velocidad tiene un incremento mas notorio entre los tiempos t = 4.8 y t = 6.0 debido a la diferencia de presión entre la parte estrecha y angosta de la tubería. Notamos que, como la partícula se encuestra cerca de la frontera libre, la presión decrece a lo largo de tiempo (ver Cuadro 4.5).



Figura 4.20: Trayectoria de una partícula de fluido. Experimento de Bingham en una tubería

Tiempo	Posición	Velocidad	Presión
t = 1.2	x = (0.4, 1.5)	$\mathbf{y}(x,t) = (1.12,0)$	p(x,t) = -5.710
t = 2.4	x = (1.1, 1.5)	$\mathbf{y}(x,t) = (0.85,0)$	p(x,t) = -9.831
t = 3.6	x = (1.7, 1.5)	$\mathbf{y}(x,t) = (0.70,0)$	p(x,t) = -15.32
t = 4.8	x = (2.2, 1.5)	$\mathbf{y}(x,t) = (1.14,0)$	p(x,t) = -27.90
t = 6.0	x = (3.2, 1.5)	$\mathbf{y}(x,t) = (1.25,0)$	p(x,t) = -146.21
t = 6.4	x = (3.6, 1.5)	$\mathbf{y}(x,t) = (1.29,0)$	p(x,t) = -173.17

Cuadro 4.5: Posición, velocidad y presión de una partícula de fluido cerca de la frontera libre. Experimento de Bingham en una tubería.

En la Figura 4.21 presentamos los conjuntos activos e inactivos en diferentes tiempos. Las zonas negras representan la parte del fluido donde éste se comporta como líquido y las zonas grises son donde el fluído se comporta como sólido. En estas capturas notamos la distinción de las zonas sólidas-líquidas. Al momento en el que se llena totalmente la parte ancha de la tubería, el fluido rompe el límite elástico y aumenta la velocidad en dirección de la parte angosta de la tubería. Notamos que el fluido se comporta como sólido en la zona de ingreso de fluido, en las paredes de la parte ancha y en la parte central de la parte angosta de la tubería. Observamos que, una vez que el fluido ocupa el dominio computacional Θ , su comportamiento es similar al experimento "Flow in a bounded channel" realizado en [1], sección 5.7.6, p.g. 144.



(a)
$$\mathcal{A}_{\gamma}(t)$$
 y $\mathcal{I}_{\gamma}(t)$ en $t = 1.2$



(c) $\mathcal{A}_{\gamma}(t)$ y $\mathcal{I}_{\gamma}(t)$ en t = 3.6



(b)
$$\mathcal{A}_{\gamma}(t)$$
 y $\mathcal{I}_{\gamma}(t)$ en $t = 2.4$



(d)
$$\mathcal{A}_{\gamma}(t)$$
 y $\mathcal{I}_{\gamma}(t)$ en $t = 4.8$



Figura 4.21: Conjuntos activos $\mathcal{A}_{\gamma}(t)$ (negro) e inactivos $\mathcal{I}_{\gamma}(t)$ (gris). Experimento de Bingham en tubería.

Con respecto al desempeño numérico del método combinado, el tiempo de ejecución del experimento de Bingham en un tubería fué de 44min:21s. El número promedio de iteraciones del método de Newton-Semismooth fué de 14 iteraciones. En el Cuadro 4.6 presentamos las iteraciones y los residuos asociados al método de Newton-Semismooth para el tiempo final t = 6.4. En la Figura 4.6 mostramos el decrecimiento de los residuos del método de Newton-Semismooth, en el cual podemos observar el órden de convergencia del método, similar al experimento realizado en [1], sección 5.7.3, p.g. 145.

Iteraciones	$\ \delta \mathbf{y}_h^k\ _{L^2(\Omega_k)^2}$	$\left\ \delta \mathbf{q}_{h}^{k} \right\ _{L^{2}(\Omega_{k})^{2 imes 2}}$	$\ \delta p_h^k\ _{L^2(\Omega_k)}$
1	2.760×10^{-1}	1.060×10^2	1.292×10^1
2	1.063×10^{0}	5.548×10^1	1.492×10^2
3	5.825×10^{-1}	$2.766 imes 10^1$	$7.510 imes 10^1$
4	3.059×10^{-1}	1.410×10^1	3.751×10^1
5	1.415×10^{-1}	7.798×10^{0}	2.028×10^1
6	6.518×10^{-2}	4.109×10^{0}	1.051×10^1
7	7.033×10^{-2}	3.074×10^0	7.481×10^{0}
8	3.528×10^{-2}	1.497×10^{0}	3.735×10^{0}
9	1.949×10^{-2}	8.263×10^{-1}	2.068×10^0
10	1.163×10^{-2}	1.550×10^{0}	7.175×10^{0}
11	4.875×10^{-3}	7.604×10^{-1}	3.533×10^0
12	3.184×10^{-3}	4.170×10^{-1}	1.726×10^{0}
13	1.673×10^{-3}	2.060×10^{-1}	9.526×10^{-1}
14	9.885×10^{-4}	1.008×10^{-1}	4.897×10^{-1}
15	4.071×10^{-4}	4.312×10^{-2}	2.043×10^{-1}
16	8.942×10^{-5}	1.169×10^{-2}	5.613×10^{-2}
17	1.902×10^{-5}	1.867×10^{-3}	9.025×10^{-3}
18	1.133×10^{-6}	1.670×10^{-4}	4.202×10^{-4}
19	2.413×10^{-8}	2.248×10^{-6}	1.072×10^{-5}

Cuadro 4.6: Iteraciones y residuos del método de Newton-Semismooth en t = 6.4. Experimento de Bingham en una tubería.



Figura 4.22: Norma de $\left\| \left(\delta \mathbf{y}_h^k, \delta \mathbf{q}_h^k, \delta p_h^k \| \right) \right\|_{L^2(\Omega_k)^2 \times L^2(\Omega_k)^{2 \times 2} \times L^2(\Omega_k)}$ para t = 6.4. Método de Newton-Semismooth. Experimento de Bingham en una tubería.

En el Cuadro 4.23 presentamos la relación del desplazamiento horizontal respecto al tiempo de la partícula de fluido descrita en la Figura (4.20) y Cuadro (4.5). Notamos que el desplazamiento es mayor cuando la partícula llega a la zona angosta de la tubería (a partir del tiempo t = 4.8).



Figura 4.23: Desplazamiento horizontal respecto al tiempo del fluido de Bingham en una tubería.

4.3. Validación de la metodología para el caso newtoniano

En esta sección, validamos nuestra metodología para simular fluidos de frontera libre mediante un experimento de una masa de agua desplazándose en un plano horizontal por el efecto de la gravedad, llamado "collapsing water column" (ver [25]). El desplazamiento de agua es modelado mediante las ecuaciones de Navier-Stokes de frontera libre como en [25] p.g. 26. El experimento numérico considerado en [25] p.g. 26, utiliza una modelización de conjuntos de nivel de dos fases. Reproducimos el mismo experimento, usando el modelización de conjuntos de nivel de una sola fase, cuyo desarrollo y tratamiento son análogos a la sección 4.1.

Al igual que el caso de Bingham, el modelo de Navier-Stokes de frontera libre considera una condición de tensión superficial en la frontera libre. Con respecto al tratamiento numérico de las ecuaciones de Navier-Stokes, consideramos un esquema de resolución mediante la técnica de desacoplamiento de paso intermedio de Chorin (ver [25]), pues consideramos que esta técnica acelera el cálculo de la velocidad y presión del fluido.

En lo que respecta al cálculo del dominio móvil, usamos las mismas técnicas de estabilización y reinicialización que fueron explicadas en el capítulo anterior.

4.3.1. Modelo de Navier-Stokes de frontera libre

En esta sección describimos el tratamiento de las ecuaciones de Navier-Stokes de frontera libre. Consideramos $\Omega(t) \subset \mathbb{R}^2$ con frontera tipo Lipschitz $\Gamma(t) := \partial \Omega(t)$. Suponemos que la densidad y la viscocidad del fluido son constantes a lo largo del tiempo y que la frontera del dominio Γ se divide en dos partes disjuntas: $\Gamma_0(t)$ que es la parte de frontera por donde se desplaza el fluido (condición antideslizante) y $\Gamma_F(t)$ que representa la frontera libre del fluido. Por lo tanto, $\Gamma = \Gamma_0 \uplus \Gamma_F$. Las ecuaciones incompresibles de Navier Stokes de frontera libre c.f.[25], están dadas de la siguiente manera:

$$(\mathbf{NS}) \begin{cases} \rho \partial_t \mathbf{y}(t) = -\nabla p(t) + \operatorname{Div}(\mu \sigma(t)) + \rho \mathbf{f}(t), & \text{en } \Omega(t) \times [0, T], \\ \nabla \cdot \mathbf{y}(t) = 0, & \text{en } \Omega(t) \times [0, T], \\ \mathbf{y}(t) = 0, & \text{en } \Gamma_0(t) \times [0, T], \\ \sigma_{Tot} \cdot \mathbf{n} = \varsigma \mathcal{K} \mathbf{n}, & \text{en } \Gamma_F(t) \times [0, T], \\ \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0, & \text{en } \Omega(0), \end{cases}$$

donde **y** denota el campo de velocidad, *p* la presión, μ la viscocidad, ρ la densidad y **f** la fuerza externa. El tensor de stress es dado por $\sigma(t) := \nabla \mathbf{y}(t) + \{\nabla \mathbf{y}(t)\}^T$ y

$$\partial_t \mathbf{y}(t) = \partial_t (\mathbf{y}(t)) + (\mathbf{y}(t) \cdot \nabla) \mathbf{y}(t).$$
(4.1)

Observación. En el caso del modelo de Bingham, estudiado en el capítulo 1, no consideramos el término convectivo $(\mathbf{y}(t) \cdot \nabla)\mathbf{y}(t)$.

Adicionalmente, la condición de tensión superficial en la frontera libre Γ_F es dada por el tensor de stress $\sigma_{Tot} = -p\mathbf{I} + \mu\sigma$, donde ς es el coeficiente de tensión superficial y **n** representa el vector normal exterior a $\Gamma_F(t)$.

Análogo al capítulo 1, proponemos una formulación cuasiestática del problema (**NS**). Así, el término $\partial_t \mathbf{y}$ es aproximado por un esquema de diferencias $\partial_t \mathbf{y} \approx \frac{\mathbf{y}_{k+1} - \mathbf{y}_k}{\tau}$ luego de una discretización uniforme del espacio temporal [0, T], donde $\mathbf{y}_{k+1} = \mathbf{y}(t_{k+1})$, $\mathbf{y}_k = \mathbf{y}(t_k)$ y τ es el paso de discretización temporal. A continuación, presentamos la formulación cuasiestática usando el esquema de discretización de Euler explícito:

$$(\mathbf{NS})_{k+1} \begin{cases} \rho\left(\frac{\mathbf{y}_{k+1}-\mathbf{y}_k}{\tau}\right) = -\rho\left(\mathbf{y}_k\cdot\nabla\right)\mathbf{y}_k - \nabla p_k + \operatorname{Div}(\mu\sigma_k) + \rho\mathbf{f}_k, & \text{en } \Omega_k, \\ \nabla\cdot\mathbf{y}_{k+1} = 0, & \text{en } \Omega_k, \\ \mathbf{y}_{k+1} = 0, & \text{en } \Gamma_0^k, \\ \sigma_{Tot}\cdot\mathbf{n} = \varsigma\mathcal{K}\mathbf{n}_k, & \text{en } \Gamma_F^k. \\ \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0, & \text{en } \Omega_k, \end{cases}$$

La razón de utilizar el esquema de Euler explícito en la formulación cuasiestática, es que éste permite desarrollar la búsqueda de paso intermedio del método de Chorin (ver [25]), como lo veremos más adelante.

Consideremos nuevamente los siguientes espacios funcionales:

$$X^{k} := \{ \mathbf{v} \in \mathbf{H}^{1}(\Omega_{k}) : \mathbf{v} = 0 \text{ en } \Gamma_{0}^{k} \},$$

$$Y^{k} := \{ \mathbf{v} \in \mathbf{H}^{1}(\Omega_{k}) : \operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \mathbf{v} = 0 \text{ en } \Gamma_{0}^{k} \}.$$

Sea $\mathbf{v} \in Y^k$, multiplicando la primera ecuación de $(\mathbf{NS})_{k+1}$ por \mathbf{v} e integrando sobre Ω_k , tenemos que:

$$\int_{\Omega_k} \rho\left(\frac{\mathbf{y}_{k+1} - \mathbf{y}_k}{\tau}\right) \mathbf{v} \, dx = -\rho \int_{\Omega_k} \left(\mathbf{y}_k \cdot \nabla\right) \mathbf{y}_k \, \mathbf{v} \, dx + \int_{\Omega_k} \operatorname{Div} \sigma_{Tot} \mathbf{v} \, dx + \int_{\Omega_k} \rho \mathbf{f}_k \, \mathbf{v} \, dx.$$
(4.2)

Por el teorema de integración por partes, se sigue que:

$$\int_{\Omega_k} \operatorname{Div} \sigma_{Tot} \mathbf{v} \, dx = -\int_{\Omega_k} \mu \sigma : \varepsilon(\mathbf{v}) \, dx + \int_{\Omega_k} p \operatorname{div}(\mathbf{v}) \, dx \\ + \int_{\Gamma_F^k} \sigma_{Tot} \cdot \mathbf{n} \, \mathbf{v} \, dS + \int_{\Gamma_0^k} \sigma_{Tot} \cdot \mathbf{n} \, \mathbf{v} \, dS.$$
(4.3)

Como $\mathbf{v} \in Y^k$, entonces div $(\mathbf{v}) = 0$ y $\mathbf{v} = 0$ en Γ_0^k . Por esta razón, los términos $\int_{\Omega_k} p \operatorname{div}(\mathbf{v}) dx$ y $\int_{\Gamma_0^k} \sigma_{Tot} \cdot \mathbf{n} \mathbf{v} dS$ se anulan en la ecuación (4.3). Considerando además la condición de frontera: $\sigma_{Tot} \cdot \mathbf{n} = \varsigma \mathcal{K} \mathbf{n}_k$ en Γ_F^k , y la identidad (4.3), tenemos que la ecuación (4.2) se convierte en:

$$\int_{\Omega_{k}} \rho\left(\frac{\mathbf{y}_{k+1} - \mathbf{y}_{k}}{\tau}\right) \mathbf{v} \, dx = -\rho \int_{\Omega_{k}} \left(\mathbf{y}_{k} \cdot \nabla\right) \mathbf{y}_{k} \mathbf{v} \, dx - \int_{\Omega_{k}} \mu \sigma : \varepsilon(\mathbf{v}) \, dx + \int_{\Gamma_{F}^{k}} \varsigma \mathcal{K} \mathbf{n}_{k} \mathbf{v} \, dS + \int_{\Omega_{k}} \rho \mathbf{f}_{k} \mathbf{v} \, dx, \qquad (4.4)$$

para todo $\mathbf{v} \in Y^k$

Para la resolución numérica de (4.4) usamos el método de proyección de Chorin (ver [25] p.g. 10), el cual es un esquema eficiente y ampliamente usado para la resolución de las ecuaciones incompresibles de Navier-Stokes. Partimos de la formulación cuasiestática, luego calculamos la solución \mathbf{y}_{k+1} en el tiempo t_{k+1} , usando dos pasos intermedios, como describimos a continuación.

Según [25], primero, calculamos una velocidad intermedia \mathbf{y}^* que no tiene la propiedad de divergencia libre. Segundo, obtenemos la corrección ∇p_k de la velocidad intermedia, mediante la resolución de una ecuación de Poisson para la presión, que da lugar a una velocidad con divergencia libre \mathbf{y}_{k+1} . La idea del método de proyección de Chorin es tratar la presión de manera implícita.

Según [25], la velocidad intermedia \mathbf{y}^* está dada como solución de la siguiente ecuación:

$$\int_{\Omega_k} \left(\frac{\mathbf{y}^* - \mathbf{y}_k}{\tau} \right) \, \mathbf{v} \, dx = -\int_{\Omega_k} \left(\mathbf{y}_k \cdot \nabla \right) \mathbf{y}_k \, \mathbf{v} \, dx - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega_k} \mu \sigma : \varepsilon(\mathbf{v}) \, dx \\ + \frac{1}{\rho} \int_{\Gamma_F^k} \varsigma \mathcal{K} \mathbf{n}_k \, \mathbf{v} \, dS + \int_{\Omega_k} \mathbf{f}_k \, \mathbf{v} \, dx.$$
(4.5)

La ecuación (4.5) tiene el término convectivo $\int_{\Omega_k} (\mathbf{y}_k \cdot \nabla) \mathbf{y}_k \mathbf{v} \, dx$, proveniente de la ecuación (4.1). En esta ecuación, la presión desaparece debido a que la tratamos de manera implícita. Así, podemos rescribir las ecuaciones de Navier-Stokes de la siguiente forma integral:

$$\frac{\mathbf{y}_{k+1} - \mathbf{y}^*}{\tau} + \frac{\nabla p_k}{\rho} = 0, \qquad (4.6)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{y}_{k+1} = 0. \tag{4.7}$$

Luego, aplicando el operador divergencia a la ecuación (4.6), multiplicando por (-1) y utilizando la condición (4.7) llegamos a la siguiente ecuación de Poisson:

$$-\nabla \cdot \left(\frac{\tau}{\rho} \nabla p_k\right) = -\nabla \cdot \mathbf{y}^*. \tag{4.8}$$

$$\left. \frac{\partial p_k}{\partial \mathbf{n}} \right|_{\Gamma_k} = \left. \frac{\rho}{\tau} \left(\mathbf{y}^* - \mathbf{y}_{k+1} \right) \cdot \mathbf{n}.$$
(4.9)

Si imponemos que $\mathbf{y}^* = \mathbf{y}_{k+1}$ en Γ_k , luego obtenemos condiciones de frontera tipo Newman homogéneas para la presión:

$$\frac{\partial p_k}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad \text{en } \Gamma_k. \tag{4.10}$$

Si resolvemos la ecuación (4.8) con la condición de frontera (4.10), encontramos una solución que no es única. Sin embargo, si fijamos una condición adicional:

$$\int_{\Omega_k} p_k \, dx = 0, \tag{4.11}$$

entonces aseguramos la unicidad de la solución.

Multiplicando la ecuación (4.8) por $r \in L^2(\Omega_k)$ e integrando sobre Ω_k tenemos que:

$$-\int_{\Omega_{k}} \nabla \cdot \left(\frac{\tau}{\rho} \nabla p_{k}\right) r \, dx = \int_{\Omega_{k}} -\nabla \cdot \mathbf{y}^{*} r \, dx$$

$$\Leftrightarrow \quad \frac{\tau}{\rho} \int_{\Omega_{k}} \nabla p_{k} \, \nabla r \, dx - \frac{\tau}{\rho} \int_{\Gamma_{k}} \frac{\partial p_{k}}{\partial \mathbf{n}} r \, dS = -\int_{\Omega_{k}} \nabla \cdot \mathbf{y}^{*} r \, dx. \tag{4.12}$$

Considerando la condición de frontera (4.10) en la ecuación (4.12), obtenemos lo siguiente:

$$\frac{\tau}{\rho} \int_{\Omega_k} \nabla p_k \,\nabla r \,dx = -\int_{\Omega_k} \nabla \cdot \mathbf{y}^* \,r \,dx, \qquad (4.13)$$

para todo $r \in L^2(\Omega_k)$.

Para obtener unicidad de la presión, proponemos incorporar un término $\rho \int_{\Omega_k} p_k r \, dx$ con $\rho > 0$ suficientemente pequeño (asociado a la condición (4.11)) en la ecuación de Poisson (4.13), de la siguiente forma:

$$\frac{\tau}{\rho} \int_{\Omega_k} \nabla p_k \,\nabla r \, dx + \rho \int_{\Omega_k} p_k r \, dx = -\int_{\Omega_k} \nabla \cdot \mathbf{y}^* \, r \, dx. \tag{4.14}$$

Finalmente, obtenemos la corrección de la velocidad intermedia \mathbf{y}^* y encontramos la velocidad \mathbf{y}_{k+1} (con la propiedad de divergencia libre) de la siguiente manera:

$$\int_{\Omega_k} \mathbf{y}_{k+1} \mathbf{v} \, dx = \int_{\Omega_k} \mathbf{y}_k \mathbf{v} \, dx - \frac{\tau}{\rho} \int_{\Omega_k} \nabla p_k \mathbf{v} \, dx, \tag{4.15}$$

para todo $\mathbf{v} \in Y^k$.

Algoritmo de Chorin y conjuntos de nivel para las ecuaciones de Navier-Stokes (Ch-LS)

A continuación, proponemos un esquema de resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes que combina el método de Chorin y el método de conjuntos de nivel de una sola fase.

Consideramos un dominio computacional $\Theta \subset \mathbb{R}^2$, que representa el espacio geométrico por donde se desplaza el fluido en un intervalo de tiempo [0, T] y denotamos Ω_{k-1} como el subdominio que representa la masa del fluido, \mathbf{y}_k la velocidad y p_k la presión del fluido definidas en el subdominio Ω_{k-1} . Además nos referimos a \mathbf{V}^h y Q^h como espacios de dimensión finita de $\mathbf{H}^1(\Omega_k)$ y $L^2(\Omega_k)$, respectivamente (ver p.g. 30).

Calculamos el nuevo subdominio del fluido Ω_k , posteriormente la velocidad \mathbf{y}_{k+1}^h y presión p_k^h , como sigue:

Cálculo del subdominio

- 1. Hallamos la función de transporte ϕ_k^h , y consecuentemente, el nuevo subdominio Ω_k , la frontera $\partial \Omega_k$, la frontera antideslizante Γ_0^k y la frontera libre Γ_F^k , exactamente igual que para el caso de Bingham, descrito en la sección 4.1, p.g. 74-75.
- Cálculo de la velocidad y presión
 - **1.** En el subdominio Ω_k , extrapolamos \mathbf{y}_k^h en Ω_k :

$$\mathbf{y}_k^h|_{\Omega_{k-1}} \to \mathbf{y}_k^h|_{\Omega_k}.$$

 Encontramos y^{*} resolviendo la siguiente ecuación, mediante el método de elementos finitos:

$$\int_{\Omega_k} \left(\frac{\hat{\mathbf{y}}^* - \mathbf{y}_k^h}{\tau} \right) \mathbf{v} \, dx = -\int_{\Omega_k} \left(\mathbf{y}_k^h \cdot \nabla \right) \mathbf{y}_k^h \mathbf{v} \, dx - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega_k} \mu \sigma : \varepsilon(\mathbf{v}) \, dx \\ + \frac{1}{\rho} \int_{\Gamma_F^k} \varsigma \mathcal{K} \mathbf{n}_k \mathbf{v} \, dx + \int_{\Omega_k} \mathbf{f}_k^h \mathbf{v} \, dx.$$

para todo $\mathbf{v} \in \mathbf{V}^h$.

3. Hallamos p_k^h , resolviendo la siguiente ecuación mediante el método de elementos finitos:

$$\frac{\tau}{\rho} \int_{\Omega_k} \nabla p_k^h \nabla r \ dx + \rho \int_{\Omega_k} p_k^h r \ dx = -\int_{\Omega_k} \nabla \cdot \mathbf{y}^* r \ dx,$$

para todo $r \in Q^h$ y $\rho > 0$ suficientemente pequeño.

4. Habiendo hallado p_k^h , calculamos \mathbf{y}_{k+1} de la siguiente manera:

$$\int_{\Omega_k} \mathbf{y}_{k+1}^h \mathbf{v} \, dx = \int_{\Omega_k} \mathbf{y}_k^h \mathbf{v} \, dx - \frac{\tau}{\rho} \int_{\Omega_k} \nabla p_k^h \mathbf{v} \, dx, \qquad (4.16)$$

para todo $\mathbf{v} \in \mathbf{V}^h$.

5. Calculadas la velocidad \mathbf{y}_{k+1}^h y presión p_{k+1}^h , las extendemos por 0 hacia el dominio computacional Θ , es decir:

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_{k+1}^{h}|_{\Omega_{k}} &\to \mathbf{y}_{k+1}^{h}|_{\Theta}, \\ p_{k+1}^{h}|_{\Omega_{k}} &\to p_{k+1}^{h}|_{\Theta} \end{aligned}$$

y volvemos al Cálculo del subdominio.

Observación. En la aproximación de las ecuaciones de Navier-Stokes mediante el método de Chorin, utilizamos los mismos elementos finitos del Taylor-Hood $(\mathbf{V}^h, Q^h) = ((\mathbb{X}_2^h)^2, \mathbb{X}_1^h \cap L^2_0(\Omega_k))$, descritos en la sección 2.1.1.

4.3.2. Experimento de validación "collapsing water column"

El experimento que presentamos en esta sección es un ejemplo clásico de un problema de frontera libre, estudiado en [27] y denominado "collapsing water column". En este experimento se trata de simular numéricamente la caída de una cantidad de agua contenida en un reservorio. Analizamos el desplazamiento del fluido respecto al tiempo.

En un tiempo inicial, la compuerta de un reservorio se abre de manera instantánea y deja fluir el agua por el efecto de la gravedad. Con la finalidad de simplificar el problema, consideremos una sección transversal del reservorio, como se ilustra en Figura 4.24.



Figura 4.24: Sección transversal del reservorio

Simulamos el experimento "collapsing water column" usando el algoritmo de Chorin y conjuntos de nivel que presentamos en la sección anterior. Este algoritmo combina el esquema de resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes mediante el método de paso intermedio de Chorin y el método de conjuntos de nivel de una sola fase. Posteriormente, comparamos nuestros resultados numéricos con la simulación realizada por R. Groce et

al, c.f. [25], y con las mediciones experimentales del trabajo de R. Martin y J. Moyce [27].

Reconstruimos la configuración del experimento de validación. De esta manera, consideramos un dominio computacional rectangular y dividimos la frontera del dominio computacional en dos partes disjuntas: \neg_0 la parte donde el fluido se desplaza y \neg_N la parte donde no hay flujo de fluido. El dominio computacional y la ubicación de sus fronteras están ilustrados en la Figura 4.25.



Figura 4.25: Ubicación de las fronteras del dominio computacional Θ . Experimento "collapsing water column".

En la frontera Γ_0^k del subdominio Ω_k que tiene contacto con \neg_0 del dominio computacional (ver Figura 4.26), consideramos condiciones de frontera del tipo Dirichlet homogéneas (antideslizantes) para la velocidad.



Figura 4.26: Ubicación de las fronteras de subdominio Ω_k . Experimento "collapsing water column".

En el tiempo inicial, la cantidad de agua contenida en el reservorio tiene una altura y un ancho iguales de 0.05715 y está localizada al lado derecho del reservorio como se puede observar en la Figura 4.26. Notemos que en este experimento no hay ingreso de fluido y se espera que el agua se desplace horizontalmente debido a la fuerza externa **f**.

En el Cuadro 4.7 presentamos los parámetros adimensionales que usamos en este experimento.

Parámetros	Constantes
Tamaño de paso espacial h	10^{-3}
Tamaño de paso temporal τ	10^{-3}
Tiempo final de simulación T	2.5
Tamaño de paso subtemporal $\hat{\tau}$	10^{-4}
Tiempo final de reinicialización \hat{T}	10^{-3}
Viscocidad μ	1.002×10^{-3}
Densidad ρ	9.982×10^2
Tensión superficial σ	0.5
Fuerza externa ${f f}$	$(0; -9.8)^T$
Grosor de la frontera ϵ	5×10^{-5}

Cuadro 4.7: Parámetros adimensionales del experimento "collapsing water column"

Utilizando el **Algoritmo Ch-LS**, introducido en la sección anterior, simulamos el experimento "collapsing water column". Así, en las capturas de la Figura 4.27 observamos el subdominio del fluido y su cambio en el tiempo. En estas capturas observamos la evolución de la frontera libre del agua. Notamos que el comportamiento del agua (fluido newtoniano) es diferente al experimento del fluido de Bingham en un plano inclinado, presentado en la sección 4.2.1.

La simulación realizada por R. Groce et al. (ver [25]) se muestra en las capturas de la Figura 4.28. Debido a que consideramos parámetros adimensionales, realizamos una comparación cualitativa con los experimentos numéricos presentados en [25]. Notamos que la deformación de la masa de agua (ver Figura 4.27) usando nuestra metodología es similar al experimento realizado en [25] (ver Figura 4.28) y corresponde a un comportamiento usual de este fluido.



(a)
$$\Omega(t)$$
 en $t = 0$



(b)
$$\Omega(t)$$
 en $t = 0.1$



(c) $\Omega(t)$ en t = 0.2

Figura 4.27: Subdominio del fluido. Experimento "collapsing water column"



(a)
$$\Omega(t)$$
 en $t = 0$



(b) $\Omega(t)$ en t = 0.1



(c) $\Omega(t)$ en t = 0.2

Figura 4.28: Reimpresión de la simulación realizada por R. Groce et al, c.f. [25]. Experimento "collapsing water column"

En las capturas de la Figura 4.29 presentamos la velocidad del fluido en diferentes tiempos. Notamos que la magnitud de la velocidad aumenta en dirección a la frontera libre y decrece cerca de las paredes de reservorio. Este comportamiento es el esperado debido a la influencia de la fuerza externa **f** (gravedad) y la condición antideslizante en Γ_0^k .



(c) y(x,t) en t = 0.2

Figura 4.29: Velocidad del fluido. Experimento "collapsing water column"

El experimento "collapsing water column" no considera ingreso de fluido y por lo tanto el área del subdominio inicial debe mantenerse constante. En el Cuadro 4.8 presentamos el área del subdominio $\Omega(t)$ para diferentes tiempos. Notamos que el área del subdominio disminuye por un efecto de disipación, no obstante, ésta se mantiene controlada por el proceso de reinicialización.

Tiempo	Área del subdominio $\Omega(t)$
t = 0	$\delta_{\phi}(t) = 3,463 \times 10^{-3}$
$t = 5 \times 10^{-2}$	$\delta_{\phi}(t) = 3,439 \times 10^{-3}$
$t = 10 \times 10^{-2}$	$\delta_{\phi}(t) = 3,269 \times 10^{-3}$
$t=15\times 10^{-2}$	$\delta_{\phi}(t) = 3,154 \times 10^{-3}$
$t = 20 \times 10^{-2}$	$\delta_{\phi}(t) = 3,136 \times 10^{-3}$

Cuadro 4.8: Área del subdominio Ω_k . Experimento "collapsing water column"

En lo que respecta al desempeño numérico del método de Chorin y conjuntos de nivel, el tiempo de ejecución del experimento "collapsing water column" fué de 1:min:38s.

En los gráficos de la Figura 4.30, presentamos los desplazamientos del agua respecto a los ejes horizontal y vertical (línea roja) utilizando el Algoritmo Ch-LS de la página 100. La tendencia del desplazamiento del fluido está en concordancia con la simulación presentada en [25] (línea negra) y los datos experimentales de [27] (puntos \circ); sin embargo, existen diferencias con el experimento real debido a que no tenemos una sincronización exacta de la configuración inicial.


Figura 4.30: Resultados numéricos (línea roja) comparados con simulación de [25] (línea negra) y datos experimentales de [27] (puntos \circ).

El experimento de validación ha permitido constatar que la metodología propuesta es adecuada para simular fluidos de frontera libre. La validación realizada en esta sección es cualitativa mas no cuantitativa por no poder ajustarnos totalmente a la configuración inicial del experimento. Sin embargo, el comportamiento del fluido es el esperado. Motivados en aquello, confiamos que la metodología propuesta en esta tesis es una buena elección para simular fluidos de frontera libre, en particular fluidos tipo Bingham.

Capítulo 5 Conclusiones y Recomendaciones.

El modelo propuesto en esta tesis describe un fluido de Bingham de frontera libre mediante una aproximación cuasiestática. Primero deducimos una desigualdad variacional y un problema de optimización asociado a cada subproblema del problema cuasiestático. Luego, mediante la teoría de la dualidad, pudimos establecer el sistema de optimalidad de un problema regularizado, el cual converge al problema original de Bingham. El aporte de este estudio, a diferencia del desarrollado en [1], es la incorporación de una condición de tensión superficial en la frontera libre. Hemos caracterizado la solución del problema de Bingham como la solución de un sistema de ecuaciones usando un multiplicador de diferenciación de zonas sólidas-líquidas.

Introducimos los elementos finitos de Taylor-Hood para establecer el esquema de aproximación de las ecuaciones de momento y continuidad del fluido de Bingham. La utilización de este tipo de elementos finitos nos permiten verificar la condición de Ladyzhenskaya-Babuska-Brezzi, la cual garantiza la estabilidad de la aproximación (ver [4, 1]).

Aprovechando la "suavidad" del sistema de optimalidad que caracteriza la solución de Bingham, lo resolvemos mediante el método de Newton-Semismooth adaptando la metodología de [1] a nuestro caso. Este método muestra tener un buen desempeño numérico (convergencia superlineal local) en los experimentos realizados.

El método de conjuntos de nivel nos permite describir el dominio móvil . Este método se basa en la resolución de una ecuación de transporte. Hemos analizado y propuesto herramientas para superar los inconvenientes numéricos que se presentan en su resolución. Por tal motivo, se ha estudiado la regularización de la ecuación de transporte y se ha introducido un proceso llamado reinicialización que ayuda a preservar el contorno de la función de transporte. Complementando nuestro estudio, hemos discutido la manera adecuada de elegir las funciones base de elementos finitos para la ecuación de transporte

El método combinado que proponemos, nos permite simular eficientemente un fluido tipo Bingham de frontera libre y trabajar en geometrías más complejas. En esta misma línea de investigación, trabajos futuros podrían enfocarse en el caso tridimensional, el mejoramiento del modelo con el acoplamiento de la ecuación del calor, la utilización de mallas adaptativas y la validación del modelo con datos experimentales.

El uso de mallas adaptativas mejoraría la descripción de la frontera libre y la simula-

ción de la dinámica computacional del fluido de Bingham. Así, se podría usar una malla gruesa en la zonas del fluido que tienen comportamiento sólido y una malla fina en las zonas de comportamiento líquido. De esta manera, mejoraríamos el desempeño numérico del método propuesto. El refinamiento adaptativo de mallas requiere de un estimador de error a posteriori de discretización (ver [40]).

La metodología propuesta se puede extender a simular fluidos newtonianos de frontera libre, como se constata en el experimento de validación. La aplicabilidad del método de conjuntos de nivel de una sola fase puede extenderse fácilmente a muchos otros tipos de fluidos.

El método propuesto reduce significativamente el costo de resolución del problema de Bingham. Además, basado en [36], nuestra implementación numérica de frontera libre podría escalarse a núcleos masivos de procesamiento (en paralelo) para el caso de simulaciones más realistas con geometrías complejas en 3D.

Nomenclatura

Capítulo 1

T	Tiempo final
Ω	Dominio del fluido
Γ_D	Frontera de ingreso
Γ_0	Frontera antideslizante
Γ_F	Frontera libre
\mathbf{y}_D	Condición de ingreso del fluido
\mathbf{y}_0	Velocidad inicial
g	Límite elástico
ς	Coeficiente de tensión superficial
У	Velocidad del fluido
ε	Tensor de stress
p	Presión del fluido
\mathcal{K}	Curvatura
σ	Tensor de deformación
σ_{Tot}	Tensor total de stress
n	Vector normal exterior
\mathbf{f}	Fuerza externa
au	Paso de discretización temporal
Ω_0	Subominio inicial de fluido
a	Forma bilineal, continua y coerciva
j	Functional lineal y continuo
$ar{g}$	Contracción de $\sqrt{2}\tau g$
g	Límite elástico
μ	Viscocidad del fluido
ho	Densidad del fluido
γ	Parámetro de regularización de Tikhonov
Y^k, Y^k_D, Y^k_0	Espacios solenoidales
$ ilde{y}$	y_k
$\overline{\mathbf{f}}$	Contracción de $\tau \mathbf{f} + \mathbf{y}_k$
\mathcal{A}	Conjuntos activos
\mathcal{I}	Conjuntos inactivos
\mathcal{A}_γ	Conjuntos activos del problema regularizado
\mathcal{I}_{γ}	Conjuntos inactivos del problema regularizado

Capítulo 2

ϱ	Parámetro de regularización de la presión
h	Tamaño de paso de la discretización espacial
\mathcal{T}	Triangulación
\mathbf{V}^h	Espacio de elementos finitos para la velocidad
Q^h	Espacio de elementos finitos para la presión
\mathbb{X}_{N}^{h}	Elementos de Taylor-Hood de orden N
$G_{\text{máx}}$	Derivada de Newton de la función máximo
$ u_{\parallel \cdot \parallel}$	Derivada de Newton de la función norma
y^{0}, p^{0}, q^{0}	Puntos de inicialización de Newton-Semismooth

Capítulo 3

- Ω_k Subdominio del fluido
- Ω_k^{ϕ} Ausencia de fluido
- Θ Dominio computacional
- **¬** Frontera del dominio computacional
- \neg_D Frontera de ingreso del dominio computacional
- \neg_0 Frontera antideslizante del dominio computacional
- \neg_N Frontera sin flujo del dominio computacional
- ϕ Función de transporte
- ϕ_d Función de distancia
- ϕ_c Regularización de la función de transporte
- M Nivel de la función de transporte
- η Normal en el sentido de conjuntos de nivel
- $\eta_{\partial \Theta}$ Normal exterior del dominio computacional
- ϵ Grosor de la frontera
- φ Función de reinicialización
- \mathcal{W}_c^1 Espacio de las funciones lineales y continuas a trozos tipo Lagrange
- δ_{ϕ} Medida de área del subdominio Ω_k
- δ_A Función característica de Ω_k
- \hat{t} Variable subtemporal de la ecuación de reinicialización
- \hat{T} Tiempo final de reinicialización

- Ω_k Subdominio del fluido
- Dominio computacional Θ
- \exists_0 Frontera antideslizante del dominio computacional
- Frontera de ingreso de fluido del dominio computacional \exists_D
- Residuo ponderado del método SU/PG
- $r_p \\ \mathcal{W}_c^1$ Espacio de las funciones lineales y continuas a trozos del tipo Lagrange
- Función de reinicialización en el subtiempo \hat{t}_n φ_n
- Función de transporte en el tiempo t_k ϕ_k
- Parámetro de regularización de Tikhonov γ
- Grosor de la frontera ϵ
- hPaso de discretización espacial
- Paso de discretización temporal au
- $\hat{\tau}$ Paso de discretización subtemporal de reinicialización
- f Fuerza externa
- \mathcal{K} Curvatura
- Tensor total de stress σ_{Tot}

Acrónimos

LBB	Ladyzhenskaya-Babuska-Brezzi condition
ALE	Arbitrary Lagrangian-Eulerian methods
SSN-LS	Semismooth Newton-Level Set method
Ch-LS	Chorin-Level Set method
NS	Navier-Stokes model

Bibliografía

- S. González. Semismooth Newton and Path Following Methods for the Numerical Simulation of Bingham Fluids. 2011.
- [2] P. Grisvard. Elliptic Problems in Nonsmooth Domains. 1985.
- [3] G. Duvaut, J.L. Lions. Inequalities in Mechanics and Physics. New York, 1976.
- [4] S. Gross, A. Reusken. Numerical Methods for Two-phase Incompressible Flows . Springer, 2011.
- [5] S. Osher, R. Fedkiw. Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces. Springer, 2003.
- [6] D. Kuzmin. A Guide to Numerical Methods for Transport Equations. 2010.
- [7] N. Bernabeu, P. Saramito, C. Smutek. Modelling lava flow advance using a shallow approximation for 3D cooling viscoplastic flows. 2013.
- [8] M. Fuchs. Variational models for quasi-static non Newtonian fluids. POMI, 1996.
- [9] J.C de los Reyes, S. González. A combined BDF-semismooth Newton approach for time dependent Bingham flow. 2012.
- [10] S. Gross, A. Reusken. Numerical Methods for Two-phase incompressible flows. Springer 2011.
- [11] R. Salvi. On the existence of two phase problem for Bingham Fluids. Elsevier 2001.
- [12] M. Sofonea, A. Matei. Variational inequalities with applications. Springer 2009.
- [13] A. Fursikov, M. Gunzburguer, L. Hou. Trace Theorems for Three-Dimentional, Time-Dependent Solenoidal Vector Fields and their Applications. AMS 2001.
- [14] M. Habera. Numerical simulations of ferrofluids. 2015.
- [15] J. C. de los Reyes. Numerical PDE-contrained optimization. Springer, 2014.
- [16] M. Bostan, P. Hild. Starting flow analysis for Bingham fluids. 2004.
- [17] D. Lindbo. Finite Element Computations for a Conservative Level Set Method Applied to Two-Phase Stokes Flow. Master of Science Thesis. Stockholm, Sweden. 2006.
- [18] E. Bovet, B. Chiaia, L. Preziosi. A new model for snow avalanche dynamics based on Bingham fluids. 2009.

- [19] C. Acary, E. Fernandez-Nieto, G. Narbona-Reina, P. Vigneaux. Viscoplastoc Free-Surface Flows: The Herschel-Burkley Case. 2012.
- [20] Y. Shibata. Free boundary problems for a viscous incompressible fluid. 2000.
- [21] P. Csizmadia, C. Hös. Predicting the friction factor in straight pipes in the case Bingham plastic and the power-law fluids by means of measurements and CFD simulation. 2012.
- [22] S. Osher, R.Fedkiw. Level Set Methods: An Overview and some recent results. 2000.
- [23] H. P. Langtangen Anders Logg: Solving PDEs in Minutes. The FEniCS Tutorial, Volume I. Springer 2016.
- [24] K. Nikitin, A. Olshanskii, K. Terekhov, Y. Vassilevski. A numerical method for the simulation of free surface flows of viscoplastic fluid in 3D. Journal of Computational Mathematics. 2011.
- [25] R. Croce, M. Griebel, M. Schweitzer. A parallel level-set approach for two-phase flow problems with surface tension in three space dimensions. 2004.
- [26] F. Irgens. Rheology and Non-Newtonian Fluids. Springer. 2014.
- [27] J. Martin, W. Moyce. An experimental study of the collapse of liquid columns on a rigid horizontal plane, Philos. Trans. R. Soc. Lond. Ser. A, 244 (1952), pp. 312-324.
- [28] P. M. Carrica, R. V. Wilson, and F. Stern. An unsteady single-phase level set method for viscous free surface. 2005.
- [29] J. Donea, Antonio Huerta, J. Ponthot and A. Rodriguez-Ferran. Arbitrary Lagrangian-Eulerian Methods. 2000.
- [30] Ian A. Frigaard, Kristofer G. Paso, Paulo R de Souza Mendes. Bingham's model in the oil and gas industry. 2017.
- [31] H. Elman, A. Ramage, D. Silvester. Finite Elements and Fast Iterative Solvers with Applications in Incompressible Fluid Dynamics, Oxford, 2005.
- [32] A. Brooks, T. Hughes. Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. 1982.
- [33] C. Urueña, J. Mantilla y D. Garzón. The streamline upwind Petrov-Galerkin stabilising method for the numerical solution of highly advective problems. 2009
- [34] J. Steffe. Rheological methods in food process engineering. 1992
- [35] An introduction to evolution PDEs. Transport equation : characteristics method and DiPerna-Lions renormalization theory. Universite Paris-Dauphine. Academic Master EDPMAD October 2013.
- [36] A. Logg, K. Mardal, G.Wells and others. Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method. 2012

- [37] Y. Cao, X. Ren, X. Guo, M. Wang, Q. Wang, X Hai Xu and X Yang. A New Method to Simulate Free Surface Flows for Viscoelastic Fluid. 2015
- [38] J. Burkardt. Finite Elements for the Navier Stokes Equations. Advanced Graduate Seminar. Department of Scientic Computing. 2011
- [39] C. Doina; Oleinik, O. Arsenievna, T. Gérard. .ºn Korn's inequalities for frame type structures and junctions", Comptes rendus hebdomadaires des séances de lÁcadémie des Sciences. 1989
- [40] V. Fares, E. Martel y R. Lorefice. Instrumentación de refinamiento adaptativo de mallas en modelos para análisis por el método de elementos finitos. 2006.
- [41] C. Yang y R. Lohner. Computation of 3D Flows with Violent Free Surface Motion. 2005.
- [42] A.-K. Tornberg, B. Enhquist, A Finite element based level set method for multiphase fow applications, Comput. Visual. Sci. 3 (2000) 93-101.
- [43] L. Evans. Partial Differential Equations. AMS, USA, 1998.
- [44] F. Tröltzsch. Optimal Control of Partial Differential Equations. AMS, USA 2010.
- [45] R. DiPerna and P. Lions. Ordinary differential equations, transport theory and Sobolev spaces. 1989
- [46] C. Grossmann, H.Ross. Numerical treatment of partial differential equations. 2005.