

MÉTODOS NUMÉRICOS DE PARTÍCULAS PARA LA SIMULACIÓN DE PROBLEMAS EN DINÁMICA DE FLUIDOS

L. Cueto-Felgueroso, I. Colominas, G. Mosqueira, F. Navarrina, M. Casteleiro*

* Grupo de Métodos Numéricos en Ingeniería, GMNI
E.T.S. de Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos
Universidad de La Coruña
Campus de Elviña, 15192 La Coruña, ESPAÑA
e-mail: cueto@iccp.udc.es, web <http://caminos.udc.es/gmni/>

Palabras clave: Mecánica de Fluidos Computacional, flujo en superficie libre, métodos numéricos sin malla, Smoothed Particle Hydrodynamics.

Resumen. *En este artículo se propone una formulación numérica sin malla de tipo Galerkin basada en el método de Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) con aproximación de mínimos cuadrados móviles, y su aplicación a problemas de mecánica de fluidos con superficie libre. El esquema de Galerkin proporciona una metodología general que permite analizar muchos de los métodos propuestos en el ámbito de las formulaciones de tipo SPH y desarrollar algoritmos consistentes. La viabilidad de la metodología que se propone se demuestra con varios ejemplos numéricos.*

1. INTRODUCCIÓN

La voluntad de resolver las ecuaciones de mecánica de medios continuos siguiendo un esquema de *partículas* (como concepto opuesto a los esquemas basados en *celdas* o *elementos*) ha dado origen a lo que conocemos como métodos sin malla o de partículas. Siguiendo una formulación de partículas, las ecuaciones del continuo se resuelven utilizando la información almacenada en una serie de nodos (partículas), sin referencia a ningún tipo de malla subyacente.

Si para la formulación de métodos sin malla se van a emplear esquemas de discretización tipo “residuos ponderados”, entonces es necesario disponer de un marco de aproximación espacial (una especie de *funciones de forma*, al modo del método de elementos finitos) que permita reconstruir una determinada función y sus derivadas sucesivas de forma suficientemente precisa a partir de los valores almacenados en los nodos o partículas. Por motivos de eficiencia del esquema, dicha aproximación debe tener además un carácter *local*; esto es, solamente unas pocas partículas “vecinas” intervendrán en la reconstrucción de una función en un determinado punto.

El origen de los métodos de partículas modernos se remonta a los años 70 con los primeros trabajos en diferencias finitas generalizadas y métodos de vórtices [1],[2]. Sin embargo, la mayor influencia sobre las actuales tendencias es habitualmente atribuida al método *Smoothed Particle Hydrodynamics* (SPH) [3], en el que se plantea una descripción lagrangiana del movimiento de un fluido. Aunque este aspecto es compartido con los métodos de vórtices, SPH incluye un esquema de aproximación espacial característico (a modo de *funciones de forma SPH*), desarrollado a partir del concepto de *estimación tipo kernel*. Esta misma idea ha sido ampliada y mejorada en las distintas formulaciones “sin malla” que han ido apareciendo en los últimos años.

El método SPH fue desarrollado a finales de los años setenta para la simulación de problemas de dinámica de fluidos en astrofísica [5],[6]. La extensión en la mecánica de sólidos de estos métodos fue iniciada por Libersky [7] y Randles [8]. Posteriormente, Johnson y Beissel propusieron el algoritmo NSF (*Normalized Smoothing Functions*) [9], y Bonet et al. [10],[11] y Chen et al. [12] han desarrollado otros métodos basados en el SPH y sus correcciones. En fechas recientes, Dilts ha introducido las funciones de forma de mínimos cuadrados móviles (*MLS*) en sus cálculos basados en el método SPH [13].

Las formulaciones SPH más tempranas incluían un nuevo esquema de aproximación y unas determinadas ecuaciones discretas características (las llamadas “ecuaciones SPH”), que pueden parecer extrañas para aquellos investigadores experimentados en métodos con un mayor grado de formalismo como el de elementos finitos. La formulación que se presenta en este artículo surge de un planteamiento distinto, y las ecuaciones discretas se obtienen a partir de un esquema de residuos ponderados. Esta deducción puede resultar algo desconcertante para aquellos investigadores acostumbrados a la presentación “clásica” de las ecuaciones SPH. Sin embargo, en nuestra opinión las formulaciones de residuos ponderados o de Galerkin proporcionan un marco teórico sólido para desarrollar algoritmos más consistentes.

En el apartado 2 se introduce brevemente la aproximación por mínimos cuadrados móviles

(MLS). A continuación se exponen la formulación numérica propuesta para flujo en superficie libre. Finalmente, el apartado 4 incluye dos ejemplos de aplicación de la metodología.

2. MÍNIMOS CUADRADOS MÓVILES.

Sea una función $u(\mathbf{x})$ definida en un dominio Ω acotado o no acotado. La idea básica de la formulación MLS consiste en aproximar $u(\mathbf{x})$ en un punto dado \mathbf{x} mediante un ajuste de mínimos cuadrados polinómico de la función $u(\mathbf{x})$ en un entorno de \mathbf{x} , de la forma:

$$u(\mathbf{x}) \approx \hat{u}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m p_i(\mathbf{x}) \alpha_i(\mathbf{z}) \Big|_{\mathbf{z}=\mathbf{x}} = \mathbf{p}^T(\mathbf{x}) \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{z}) \Big|_{\mathbf{z}=\mathbf{x}} \quad (1)$$

donde $\mathbf{p}^T(\mathbf{x})$ es una base polinómica m -dimensional y $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{z}) \Big|_{\mathbf{z}=\mathbf{x}}$ es un conjunto de parámetros, tales que minimicen el siguiente funcional de error:

$$J(\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{z}) \Big|_{\mathbf{z}=\mathbf{x}}) = \int_{\mathbf{y} \in \Omega_{\mathbf{x}}} W(\mathbf{z} - \mathbf{y}, h) \Big|_{\mathbf{z}=\mathbf{x}} \left[u(\mathbf{y}) - \mathbf{p}^T(\mathbf{y}) \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{z}) \Big|_{\mathbf{z}=\mathbf{x}} \right]^2 d\Omega_{\mathbf{x}} \quad (2)$$

siendo $W(\mathbf{z} - \mathbf{y}, h) \Big|_{\mathbf{z}=\mathbf{x}}$ un núcleo simétrico con soporte compacto (llamado $\Omega_{\mathbf{x}}$). El parámetro h , usualmente llamado “longitud de suavizado” (*smoothing length*) o “parámetro de dilatación” (*dilation parameter*), es una cierta medida característica del tamaño del soporte de W (por ejemplo, la mitad del radio en funciones de soporte circular). La minimización de J con respecto a $\boldsymbol{\alpha}$ conduce a

$$\int_{\mathbf{y} \in \Omega_{\mathbf{x}}} \mathbf{p}(\mathbf{y}) W(\mathbf{z} - \mathbf{y}, h) \Big|_{\mathbf{z}=\mathbf{x}} u(\mathbf{y}) d\Omega_{\mathbf{x}} = \mathbf{M}(\mathbf{x}) \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{z}) \Big|_{\mathbf{z}=\mathbf{x}} \quad (3)$$

donde la matriz de momentos $\mathbf{M}(\mathbf{x})$ viene dada por

$$\mathbf{M}(\mathbf{x}) = \int_{\mathbf{y} \in \Omega_{\mathbf{x}}} \mathbf{p}(\mathbf{y}) W(\mathbf{z} - \mathbf{y}, h) \Big|_{\mathbf{z}=\mathbf{x}} \mathbf{p}^T(\mathbf{y}) d\Omega_{\mathbf{x}} \quad (4)$$

En las formulaciones “sin malla” se elige un conjunto de n partículas del dominio global Ω , de modo que la evaluación de las integrales en (3) y (4) puede realizarse usando las partículas del interior del dominio $\Omega_{\mathbf{x}}$ como puntos de la cuadratura (esto es, llevar a cabo una integración nodal), lo que conduce a

$$\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{z}) \Big|_{\mathbf{z}=\mathbf{x}} = \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{x}) \mathbf{P}_{\Omega_{\mathbf{x}}} \mathbf{W}_{\mathbf{V}}(\mathbf{x}) \mathbf{u}_{\Omega_{\mathbf{x}}} \quad (5)$$

donde el vector $\mathbf{u}_{\Omega_{\mathbf{x}}}$ contiene los parámetros nodales de las partículas de $\Omega_{\mathbf{x}}$, la versión discreta de \mathbf{M} es $\mathbf{M}(\mathbf{x}) = \mathbf{P}_{\Omega_{\mathbf{x}}} \mathbf{W}_{\mathbf{V}}(\mathbf{x}) \mathbf{P}_{\Omega_{\mathbf{x}}}^T$, y las matrices $\mathbf{P}_{\Omega_{\mathbf{x}}}$ y $\mathbf{W}_{\mathbf{V}}(\mathbf{x})$ vienen dadas por [14]:

$$\mathbf{P}_{\Omega_{\mathbf{x}}} = (\mathbf{p}(\mathbf{x}_1) \quad \mathbf{p}(\mathbf{x}_2) \quad \cdots \quad \mathbf{p}(\mathbf{x}_{n_x})) \quad (6)$$

$$\mathbf{W}_{\mathbf{v}}(\mathbf{x}) = \text{diag} \{W_i(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)V_i\}, \quad i = 1, \dots, n_{\mathbf{x}} \quad (7)$$

En las expresiones anteriores, $n_{\mathbf{x}}$ denota el número total de partículas en el entorno de un punto \mathbf{x} y V_i y \mathbf{x}_i son, respectivamente, el volumen estadístico (empleado como peso de la cuadratura numérica) y las coordenadas asociadas a la partícula i . Obsérvese que los volúmenes estadísticos de las partículas del entorno están incluidas en la matriz $\mathbf{W}_{\mathbf{v}}$, obteniéndose la versión MLS del *Reproducing Kernel Particle Method* [15]. Por otra parte, puede emplearse \mathbf{W} en lugar de $\mathbf{W}_{\mathbf{v}}$,

$$\mathbf{W}(\mathbf{x}) = \text{diag} \{W_i(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)\}, \quad i = 1, \dots, n_{\mathbf{x}} \quad (8)$$

que se corresponde con la aproximación de mínimos cuadrados móviles clásica (en la integración nodal del funcional (2) se asocia el mismo peso de integración a todas las partículas). Si ahora se sustituye (5) en (1), el esquema de interpolación se puede identificar fácilmente y ser escrito en la forma:

$$\hat{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T(\mathbf{x})\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{x})\mathbf{P}_{\Omega_{\mathbf{x}}}\mathbf{W}_{\mathbf{v}}(\mathbf{x})\mathbf{u}_{\Omega_{\mathbf{x}}} = \mathbf{N}^T(\mathbf{x})\mathbf{u}_{\Omega_{\mathbf{x}}} \quad (9)$$

por lo que las funciones de forma de mínimos cuadrados móviles vienen dadas por:

$$\mathbf{N}^T(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T(\mathbf{x})\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{x})\mathbf{P}_{\Omega_{\mathbf{x}}}\mathbf{W}_{\mathbf{v}}(\mathbf{x}) \quad (10)$$

Generalmente se emplean bases polinómicas definidas localmente y escaladas, en lugar de las definidas globalmente $\mathbf{p}(\mathbf{y})$. Así, si una función se evalúa en el punto \mathbf{x} , las funciones de la base serían de la forma $\mathbf{p}\left(\frac{\mathbf{y}-\mathbf{x}}{h}\right)$. Consecuentemente, las funciones de forma son

$$\mathbf{N}^T(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T(\mathbf{0})\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{x})\mathbf{P}_{\Omega_{\mathbf{x}}}\mathbf{W}_{\mathbf{v}}(\mathbf{x}) \quad (11)$$

2.1. Elección del núcleo.

En la bibliografía pueden encontrarse una amplia gama de funciones que se han propuesto como posibles núcleos y que en la mayor parte consisten en funciones exponenciales o *splines*, sin que parezca existir un criterio para la elección óptima de esta función. Uno de los núcleos que más se emplea es el siguiente *spline* cúbico[16]:

$$W_j(\mathbf{x}) = W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) = \frac{\alpha}{h^\nu} \begin{cases} 1 - \frac{3}{2}s^2 + \frac{3}{4}s^3 & s \leq 1 \\ \frac{1}{4}(2 - s)^3 & 1 < s \leq 2 \\ 0 & s > 2 \end{cases} \quad (12)$$

donde $s = \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|}{h}$, ν es la dimensión del problema y α toma los valores $\frac{2}{3}$, $\frac{10}{7\pi}$ o $\frac{1}{\pi}$ en una, dos y tres dimensiones respectivamente. El coeficiente α/h^ν es un factor de escala, necesario solamente si se emplean interpolaciones SPH no corregidas con el fin de garantizar la propiedad de normalidad $\int W dV = 1$. Los ejemplos que presentaremos en este artículo han sido calculados utilizando aproximación MLS y, por tanto, no se ha utilizado dicho factor de escala.

Esta formulación se corresponde con un núcleo de tipo radial, esto es, el soporte del núcleo es un círculo (en 2D) o una esfera (en 3D) de radio $2h$. No obstante, los núcleos para problemas en 2D y 3D pueden construirse también por producto de los núcleos unidimensionales en la forma

$$W_j(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) = \prod_{n=1}^{\nu} W_j^n(x^n - x_j^n, h^n) \quad (13)$$

siendo x^n la n -ésima coordenada de la partícula \mathbf{x} . En esta definición del núcleo, el núcleo unidimensional W_j^n y la longitud de suavizado característica h^n pueden diferir para cada dimensión. Si se emplea el mismo núcleo en todas las dimensiones entonces el soporte es un cuadrado (en 2D) o un cubo (en 3D).

3. UNA FORMULACIÓN LAGRANGIANA DE PARTÍCULAS PARA FLUJO EN SUPERFICIE LIBRE.

3.1. Ecuaciones del continuo.

Asumiremos que el fluido es compresible, newtoniano e isentrópico, comportándose por tanto como si estuviera gobernado por las siguientes ecuaciones:

(a) *Ecuación de continuidad.*

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \operatorname{div}(\mathbf{v}) \quad (14)$$

donde $\frac{d}{dt}$ indica la derivada temporal material y $\operatorname{div}(\mathbf{v})$ se calcula en la configuración actual en términos del tensor \mathbf{l} gradiente de velocidad como:

$$\operatorname{div}(\mathbf{v}) = \operatorname{tr}(\mathbf{l}), \quad \mathbf{l} = \frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}} = \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v} \quad (15)$$

(b) *Momento lineal.*

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} \quad (16)$$

donde ρ es la densidad actual y las tensiones se expresan en función del tensor de tensiones de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{d}' \quad (17)$$

siendo p la presión, μ la viscosidad dinámica y \mathbf{d}' la parte desviadora del tensor velocidad de deformación \mathbf{d} , dado por

$$\mathbf{d}' = \mathbf{d} - \frac{1}{3} \operatorname{tr}(\mathbf{d})\mathbf{I}, \quad \mathbf{d} = \frac{1}{2}(\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v} + \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v}^T) \quad (18)$$

Por otra parte, emplearemos una ecuación de estado de la forma [17]:

$$p = \kappa \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right] \quad (19)$$

siendo $\gamma = 7$ y κ se elige de modo que el fluido sea casi incompresible; en los flujos gravitatorios la densidad inicial de las partículas se ajusta para obtener la presión hidrostática correcta calculada con (19) [17]:

$$\rho = \rho_0 \left(1 + \frac{\rho_0 g (H - z)}{\kappa} \right)^{1/\gamma} \quad (20)$$

donde H es la altura total y $g = 9,81 \text{ m/s}^2$.

- (c) *Conservación del momento angular.* En nuestros estudios no consideraremos ni distribuciones de masa con momentos polares ni medios magnetizables.
- (d) *Conservación de la energía.* La conservación de la energía también puede ser considerada en los procesos que involucren intercambio de calor u otros fenómenos relacionados:

$$\rho \frac{dU}{dt} = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d} - \text{div}(\mathbf{q}) + \rho Q \quad (21)$$

siendo U la energía interna por unidad de masa, \mathbf{q} el flujo de calor, Q las fuentes de calor (por unidad de tiempo y de masa) y \mathbf{d} el tensor gradiente de deformaciones.

3.2. Ecuaciones discretas.

La versión discreta de la forma variacional débil de Galerkin es casi equivalente a la que se obtiene mediante *estimaciones tipo kernel* [18] en las formulaciones clásicas del método SPH. En consecuencia, esta equivalencia sugiere que el método SPH se puede estudiar en el contexto de los métodos variacionales de Galerkin.

El punto de partida lo constituye la obtención de una forma variacional de la ecuación de momento:

$$\int_{\Omega} \rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} \cdot \delta \mathbf{v} \, d\Omega = - \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \delta \mathbf{l} \, d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \delta \mathbf{v} \, d\Omega + \int_{\Gamma} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \cdot \delta \mathbf{v} \, d\Gamma \quad (22)$$

siendo Ω el dominio del problema, Γ su contorno y \mathbf{n} el versor normal exterior en cada punto del contorno. Si las funciones de test y de prueba $\delta \mathbf{v}$ y \mathbf{v} se aproximan por las funciones $\delta \hat{\mathbf{v}}$ y $\hat{\mathbf{v}}$, se obtiene

$$\int_{\Omega} \rho \frac{d\hat{\mathbf{v}}}{dt} \cdot \delta \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega = - \int_{\Omega} \hat{\boldsymbol{\sigma}} : \delta \hat{\mathbf{l}} \, d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \delta \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega + \int_{\Gamma} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{n} \cdot \delta \hat{\mathbf{v}} \, d\Gamma \quad (23)$$

y las ecuaciones discretas resultan de introducir en esta forma variacional las funciones de test

y de prueba y sus gradientes construidas según una interpolación “sin malla”, esto es

$$\delta\widehat{\mathbf{v}}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \delta\mathbf{v}_i N_i^*(\mathbf{x}), \quad \nabla\delta\widehat{\mathbf{v}}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \delta\mathbf{v}_i \otimes \nabla_{\mathbf{x}} N_i^*(\mathbf{x}) \quad (24)$$

$$\widehat{\mathbf{v}}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^n \mathbf{v}_j N_j(\mathbf{x}), \quad \nabla\widehat{\mathbf{v}}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^n \mathbf{v}_j \otimes \nabla_{\mathbf{x}} N_j(\mathbf{x}) \quad (25)$$

lo que conduce a

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \delta\mathbf{v}_i \cdot \left\{ \sum_{j=1}^n \int_{\Omega} \rho N_i^*(\mathbf{x}) N_j(\mathbf{x}) \frac{d\mathbf{v}_j}{dt} d\Omega + \int_{\Omega} \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \nabla_{\mathbf{x}} N_i^*(\mathbf{x}) d\Omega - \right. \\ \left. - \int_{\Omega} N_i^*(\mathbf{x}) \mathbf{b} d\Omega - \int_{\Gamma} N_i^*(\mathbf{x}) \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{n} d\Gamma \right\} = 0 \end{aligned} \quad (26)$$

Así, para cada partícula i , se debe satisfacer la siguiente identidad:

$$\sum_{j=1}^n \int_{\Omega} \rho N_i^*(\mathbf{x}) N_j(\mathbf{x}) \frac{d\mathbf{v}_j}{dt} d\Omega = - \int_{\Omega} \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \nabla_{\mathbf{x}} N_i^*(\mathbf{x}) d\Omega + \int_{\Omega} N_i^*(\mathbf{x}) \mathbf{b} d\Omega + \int_{\Gamma} N_i^*(\mathbf{x}) \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{n} d\Gamma \quad (27)$$

Dado que en este trabajo consideraremos ponderaciones de tipo Bubnov-Galerkin entonces se cumple que $N_j^* = N_j$. La identidad (27) puede escribirse en una forma compacta más conveniente:

$$\mathbf{M}\mathbf{a} = \mathbf{F}^{int} + \mathbf{F}^{ext} \quad (28)$$

donde $\mathbf{M} = \{m_{ij}\}$ es la matriz de masas, $\mathbf{F}^{int} = \{\mathbf{f}_i^{int}\}$ son las fuerzas internas y $\mathbf{F}^{ext} = \{\mathbf{f}_i^{ext}\}$ son las fuerzas externas, que vienen dadas por:

$$m_{ij} = \int_{\Omega} \rho N_i(\mathbf{x}) N_j(\mathbf{x}) d\Omega \quad (29)$$

$$\mathbf{f}_i^{int} = - \int_{\Omega} \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \nabla_{\mathbf{x}} N_i(\mathbf{x}) d\Omega \quad (30)$$

$$\mathbf{f}_i^{ext} = \int_{\Omega} N_i(\mathbf{x}) \mathbf{b} d\Omega + \int_{\Gamma} N_i(\mathbf{x}) \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{n} d\Gamma \quad (31)$$

Finalmente, si se considera la ecuación (14) de conservación de la masa, y se hace uso de la expresión (25) para $\nabla\widehat{\mathbf{v}}_i$, debe cumplirse para cada partícula

$$\frac{d\rho_i}{dt} = -\rho_i \text{div}(\mathbf{v})_i = -\rho_i \sum_{j=1}^n \mathbf{v}_j \cdot \nabla_{\mathbf{x}} N_j(\mathbf{x}_i) \quad (32)$$

que es equivalente a considerar una forma variacional de la ecuación de conservación con un esquema de ponderación de colocación puntual.

En los ejemplos que se presentarán más abajo se ha empleado integración nodal. Este tipo de integración se ha empleado, al menos implícitamente, en gran parte de las formulaciones SPH desde que se propusieron en los años setenta. Obviamente se trata de la opción más económica y el esquema resultante es completamente “sin malla”, en el sentido de que no precisa de ninguna malla auxiliar con la que llevar a cabo la integración. Así, las partículas se emplean como puntos de integración y se eligen como pesos de la cuadratura numérica los correspondientes volúmenes estadísticos de cada una. En el caso de la forma débil de la ecuación de momento euleriana que se ha presentado en la sección anterior, se tiene que

$$\mathbf{M}\mathbf{a} = \mathbf{F}^{int} + \mathbf{F}^{ext} \quad (33)$$

donde

$$m_{ij} = \sum_{k=1}^n \rho_k N_i(\mathbf{x}_k) N_j(\mathbf{x}_k) V_k \quad (34)$$

$$\mathbf{f}_i^{int} = - \sum_{k=1}^n \hat{\sigma}_k \nabla_{\mathbf{x}} N_i(\mathbf{x}_k) V_k \quad (35)$$

$$\mathbf{f}_i^{ext} = \sum_{k=1}^n N_i(\mathbf{x}_k) \mathbf{b}_k V_k + \sum_{k=1}^n N_i(\mathbf{x}_k) \hat{\sigma}_k \mathbf{n} A_k \quad (36)$$

En las expresiones anteriores, V_k representa el volumen tributario asociado a la partícula k . Las técnicas que se utilizan para determinar dichos volúmenes varían desde las simples particiones del dominio a los diagramas de Voronoi. En las formulaciones SPH más frecuentes, se asocian determinadas densidades y volúmenes iniciales a las partículas, y consiguientemente, masas. Estas masas “físicas” $\{M_k\}$ se mantienen constantes durante la simulación y las densidades son variables que se van actualizando a través de la ecuación de continuidad. Así, los volúmenes de las partículas se obtienen en cada paso de tiempo como $V_k = \frac{M_k}{\rho_k}$. Obsérvese, que en la formulación que se propone en este artículo, las masas “reales” o “físicas” de las partículas M_k son diferentes en general de las masas “numéricas” m_{ij} dadas por (34), y derivadas en el esquema de Galerkin. En la práctica resulta más eficiente emplear una matriz de masas diagonal o, simplemente, las masas reales de las partículas.

Para la integración temporal hemos empleado un método explícito tipo *leap-frog*, de modo que el avance de las variables se logra en dos fases:

- Cálculo de las velocidades intermedias $k + \frac{1}{2}$:

$$\mathbf{v}_i^{k+\frac{1}{2}} = \mathbf{v}_i^{k-\frac{1}{2}} + 0,5(\Delta t^k + \Delta t^{k+1}) \mathbf{a}_i^k \quad (37)$$

- Actualización de las densidades y posiciones:

$$\rho_i^{k+1} = \rho_i^k + \Delta t^{k+1} D_i(\mathbf{v}^{k+\frac{1}{2}}) \quad (38)$$

$$\mathbf{x}_i^{k+1} = \mathbf{x}_i^k + \Delta t^{k+1} \widehat{\mathbf{v}}_i^{k+\frac{1}{2}} \quad (39)$$

En las expresiones anteriores, $\mathbf{a}_i^k = \frac{d\mathbf{v}_i^k}{dt}$ es el parámetro nodal de aceleración de la partícula i (calculado utilizando la ecuación del momento con las variables en el instante k) y $D_i(\mathbf{v}^{k+\frac{1}{2}})$ es la variación de densidad $\frac{d\rho_i}{dt}$, calculada en las posiciones k y con las velocidades intermedias $\mathbf{v}_i^{k+\frac{1}{2}}$. Finalmente, $\widehat{\mathbf{v}}_i$ representa la velocidad interpolada de la partícula i .

Una presentación más detallada de la formulación y aspectos prácticos de la implementación de la metodología propuesta se puede encontrar en [19].

4. EJEMPLOS NUMÉRICOS.

En esta sección se presentan dos ejemplos de aplicación de la formulación propuesta en el apartado anterior. En el primero de ellos se considera una masa de fluido retenida inicialmente por una compuerta (Figura 1), y se ha simulado el flujo del fluido a medida que va ascendiendo la compuerta a una velocidad constante de $0,7 \text{ m/s}^{-1}$. En la Figura 2 se muestran los resultados para distintos instantes de tiempo. El segundo ejemplo corresponde al llenado de un molde circular con un núcleo central como muestra la Figura 3. La velocidad del chorro de fluido a la entrada del molde es de 18 m/s y la viscosidad dinámica es $\mu = 0,01 \text{ kg m}^{-1}\text{s}^{-1}$. El módulo volumétrico del fluido (κ) se ha elegido para que la celeridad de onda sea de 1000 m/s . El número total de partículas es 14314. En la Figura 4 se muestran diferentes instantes de la simulación (se ha adoptado como origen de tiempos el instante en que se produce el choque del chorro de fluido con el núcleo central).

La forma de los dos chorros que se forman tras el choque con el núcleo central del molde parece muy satisfactoria y concuerda con resultados previos de otros autores [20].

A pesar de emplear una formulación consistente de *fuerzas de contorno*, hemos encontrado excesiva distorsión cerca de los contornos, en comparación con el flujo en puntos alejados de su influencia (véase la Figura 5). Este efecto podría estar causado por emplear una formulación para representar el contorno de tipo “particular”, esto es, basado en partículas, y es una línea de mejora que esperamos desarrollar en breve. La figura 6 muestra la comparación de los resultados numéricos con imágenes experimentales obtenidas por Schmid y Klein [21]

5. CONCLUSIONES

En este artículo se ha abordado el estudio de una formulación numérica de Galerkin basada en el método de partículas SPH (*Smoothed Particle Hydrodynamics*) con funciones de forma de mínimos cuadrados móviles para la simulación de problemas de flujo de fluidos con superficie libre. La formulación desarrollada constituye un marco general claro y bien fundamentado para interpretar técnicas propuestas y utilizadas tradicionalmente por los usuarios del método SPH

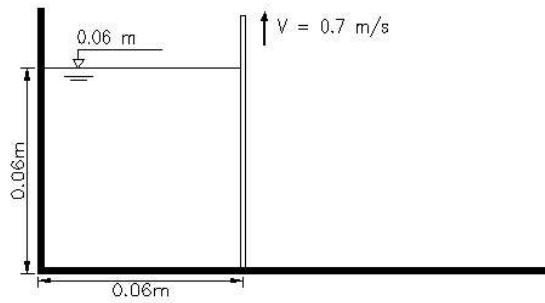


Figura 1. Ejemplo de rotura de presa: Esquema de la configuración inicial.

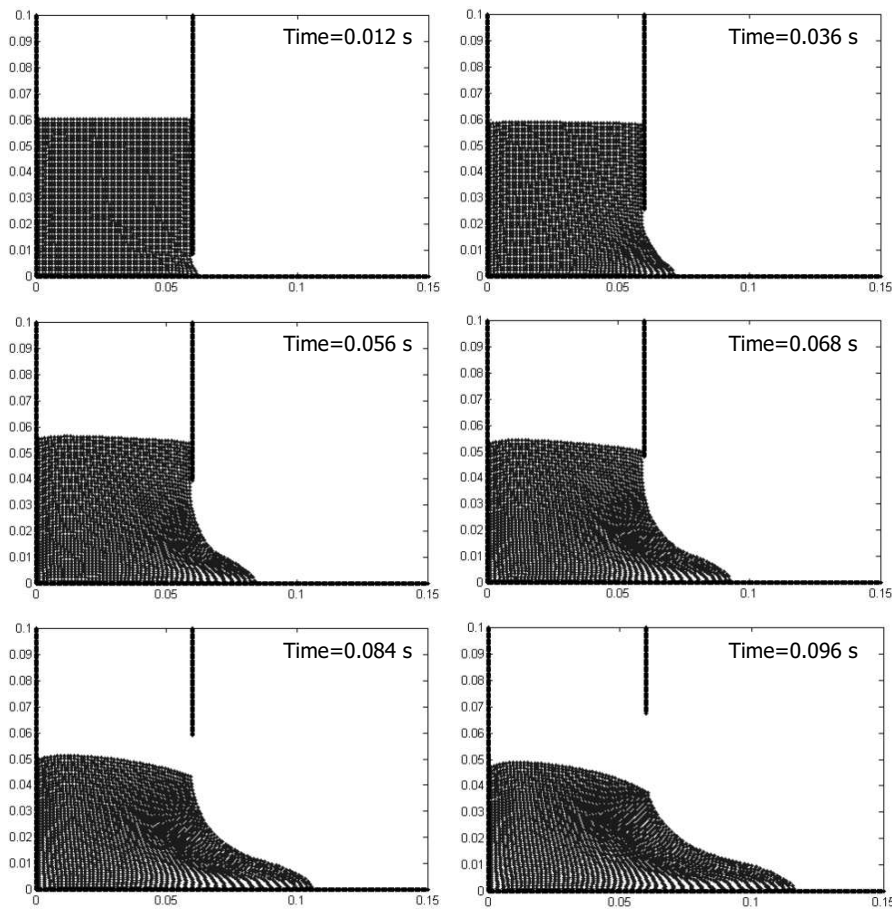


Figura 2. Ejemplo de rotura de presa: Diferentes instantes de la simulación.

tales como los “stress points”, fuerzas de contorno, correcciones y cálculos “especiales” de los gradientes de las funciones, etc. Así mismo, constituye una metodología general a partir de la cual se pueden desarrollar algoritmos consistentes y computacionalmente más eficientes.

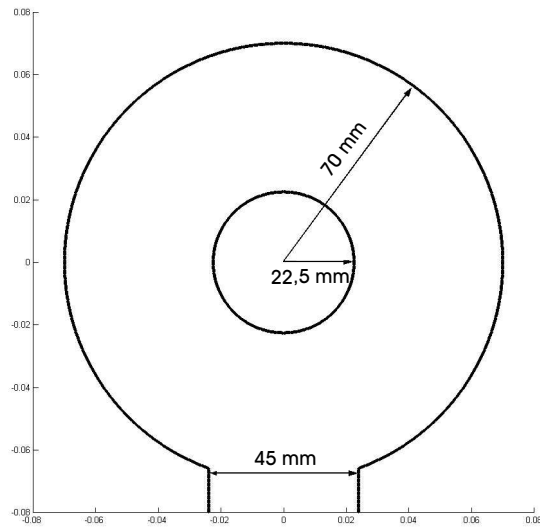


Figura 3. Ejemplo de llenado de un molde: Dimensiones del molde.

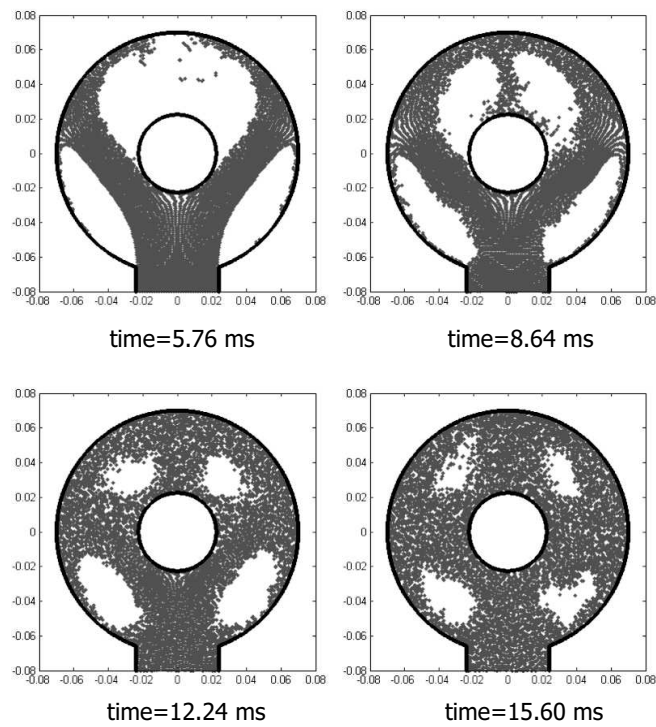


Figura 4. Ejemplo de llenado de un molde: Diferentes instantes de la simulación.

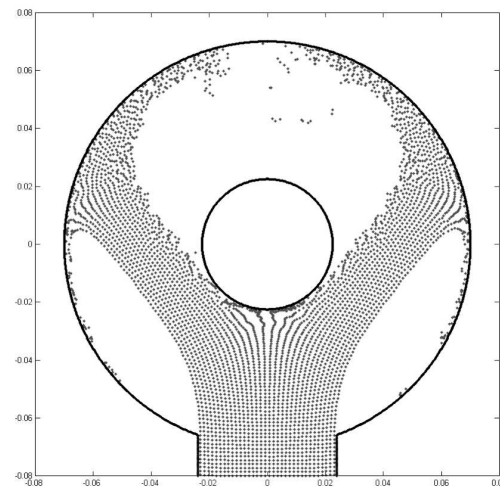


Figura 5. Ejemplo de llenado de un molde: Simulación a $t = 5,76 \text{ ms}$.

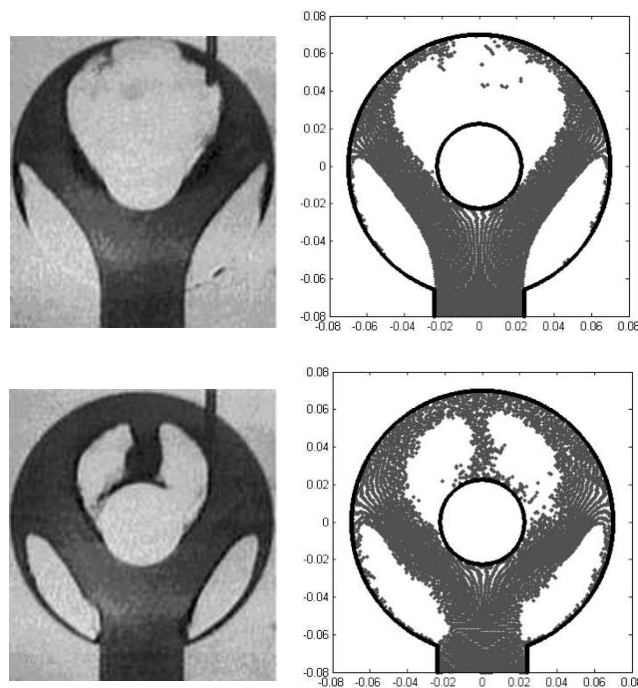


Figura 6. Ejemplo de llenado de un molde: Resultados experimentales (izquierda) y numéricos (derecha).

6. AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por la SGPIC del Ministerio de Ciencia y Tecnología (Proyecto DPI# 2001-0556), por la Xunta de Galicia (Proyectos # PGDIT01PXI11802PR y PGIDIT03PXIC118002PN) y por la Universidad de La Coruña.

El Sr. Cueto-Felgueroso agradece la financiación recibida de la Fundación de la Ingeniería

Civil de Galicia y del Colegio de Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos. Este artículo fue escrito mientras el Sr. Cueto-Felgueroso se encontraba en la Universidad de Gales Swansea durante el primer semestre de 2004, agradeciendo la financiación recibida de Caixanova y la hospitalidad del Prof. Javier Bonet y su grupo de investigación.

REFERENCIAS

- [1] T. Belytschko, Y. Krongauz, D. Organ, M. Fleming, P. Krysl, Meshless methods: An overview and recent developments. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **139**, 3–47 (1996).
- [2] A.J. Chorin. Numerical study of slightly viscous flow. *Journal of Fluid Mechanics*, **57** (1973).
- [3] J.J. Monaghan, An introduction to SPH. *Computer Physics Communications*, **48**, 89–96 (1988).
- [4] T. Belytschko, Y.Y. Lu, L. Gu, Element-Free Galerkin methods. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **37**, 229–256 (1994).
- [5] L.B. Lucy, A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *Astronomical Journal*, **82**, 1013 (1977).
- [6] R.A. Gingold, J.J. Monaghan, Smoothed Particle Hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, **181**, 378 (1977).
- [7] L.D. Libersky, A.G. Petschek, T.C. Carney, J.R. Hipp, F.A. Allahdadi, High strain Lagrangian hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, **109**, 67–75 (1993).
- [8] P.W. Randles, L.D. Libersky, Smoothed Particle Hydrodynamics: Some recent improvements and applications. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **139**, 375–408 (1996).
- [9] G.R. Johnson, S.R. Beissel, Normalized Smoothing Functions for SPH impact computations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **39**, 2725–2741 (1996).
- [10] J. Bonet, T-S.L. Lok, Variational and momentum preserving aspects of smooth particle hydrodynamics (SPH) formulations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **180**, 97–115 (1999).
- [11] J. Bonet, S. Kulasegaram, Correction and stabilization of smoothed particle hydrodynamics methods with applications in metal forming simulations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **47**, 1189–1214 (2000).
- [12] J.K. Chen, J.E. Beraun, A generalized smoothed particle hydrodynamics method for non-linear dynamic problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **190**, 225–239 (2000).
- [13] G.A. Dilts, Moving-Least-Squares-Particle Hydrodynamics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Part I **44**, 1115–1155 (1999), Part II **48**, 1503 (2000).
- [14] W.K. Liu, S. Li, T. Belytschko, Moving least-square reproducing kernel methods: (I) Methodology and Convergence. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **143**, 113–154 (1997).
- [15] L. Cueto-Felgueroso, Una visión general de los métodos numéricos sin malla: formulación

- y aplicaciones. Proyecto Técnico, Universidad de La Coruña, (2002).
- [16] J.P. Morris, An Overview of the Method of Smoothed Particle Hydrodynamics. Universitat Kaiserslautern. Internal Report (1995).
- [17] J.J. Monaghan, Simulating Free Surface flows with SPH. *Journal of Computational Physics*, **110**, 399–406 (1994).
- [18] T. Belytschko, Y. Guo, W.K. Liu, S.P. Xiao. A unified stability analysis of meshless particle methods. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **48**, 1359–1400 (2000).
- [19] L. Cueto-Felgueroso, I. Colominas, G. Mosqueira, F. Navarrina, M. Casteleiro, On the Galerkin formulation of the Smoothed Particle Hydrodynamics method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, [en prensa] (2003).
- [20] P. Cleary, J. Ha, V. Alguine, T. Nguyen, Flow modelling in casting processes. *Applied Mathematics and Modelling*, **26**, 171–190 (2002).
- [21] M. Schmid, F. Klein. Fluid flow in die cavities - experimental and numerical simulation, NADCA 18. *International Die Casting Congress and Exposition*. Indianapolis (1995).