

TESIS DEFENDIDA POR

Juan José Tapia Armenta

Y APROBADA POR EL SIGUIENTE COMITÉ

---

Dr. Pedro Gilberto López Mariscal

*Director del Comité*

---

Dr. Michael J. Miksis

*Miembro del Comité*

---

Dr. Julio Sheinbaum Pardo

*Miembro del Comité*

---

Dr. Hugo Homero Hidalgo Silva

*Miembro del Comité*

---

Dr. Pedro Gilberto López Mariscal

*Coordinador del programa de  
Posgrado en Ciencias de la Computación*

---

Dr. Edgar Gerardo Pavía López

*Director de Estudios  
de Posgrado*

1 de Junio de 2007

CENTRO DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA Y DE EDUCACIÓN  
SUPERIOR DE ENSENADA



---

PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIAS  
EN CIENCIAS DE LA COMPUTACIÓN

---

**Modelo teórico y numérico para la línea de contacto en los  
fluidos de Cahn y Hilliard**

TESIS

que para cubrir parcialmente los requisitos necesarios para obtener el grado de

DOCTOR EN CIENCIAS

Presenta:

**Juan José Tapia Armenta**

Ensenada, Baja California, México, Junio de 2007.

**RESUMEN** de la tesis de **Juan José Tapia Armenta**, presentada como requisito parcial para obtener el grado de DOCTOR EN CIENCIAS en CIENCIAS DE LA COMPUTACIÓN. Ensenada, Baja California, México, Junio de 2007.

## **Modelo teórico y numérico para la línea de contacto en los fluidos de Cahn y Hilliard**

Resumen aprobado por:

---

Dr. Pedro Gilberto López Mariscal

*Director de Tesis*

Se presenta el desarrollo de un modelo de interfase difusa para un fluido multi componente. La formulación variacional considera una energía libre que es función de la densidad y de sus gradientes. En el modelo, todos los términos en la frontera son retenidos y se relacionan a fuerzas de superficie externas, lo cual puede ser de particular interés cuando se considera la región donde se intersecta la interfase con una superficie sólida, es decir la línea de contacto. La solución numérica de este tipo de problemas requiere de métodos numéricos robustos, para capturar capas de transición delgadas. Aquí, se estudia el método pseudoespectral de Chebyshev con adaptación de malla en la solución de este tipo de problemas. Un algoritmo de adaptación de malla basado en el principio de equidistribución siguiendo un proceso de continuación es derivado. Con la finalidad de lograr alta precisión para problemas exhibiendo capas de transición delgadas, se propone una modificación a la función monitor, con la cual se obtiene una transformación de coordenadas suficientemente suave. En cada paso del proceso de continuación, un número fijo de iteraciones de tipo Newton son implementadas. Se resuelve el modelo para una burbuja líquida sobre un sólido, usando el modelo en coordenadas polares con adaptación de malla en la dirección radial.

El algoritmo de equidistribución se generaliza a dos dimensiones, usando el método de elemento finito con elementos triangulares. Como en el caso de una dimensión se implementa un algoritmo iterativo para adaptar la malla, capaz de capturar una interfase muy delgada. Primero, el algoritmo de adaptación es cuidadosamente probado en una función analítica, donde los resultados numéricos muestran alta precisión y eficiencia en la generación de malla adaptativa. Posteriormente, se modela un fluido de dos fases dentro de un tubo, donde las condiciones de frontera en las paredes definen el ángulo de contacto estático.

**Palabras clave:** Interfase difusa, *phase field*, adaptación de malla, equidistribución, métodos de colocación, elemento finito.

**ABSTRACT** of the thesis presented by **Juan José Tapia Armenta**, as a partial requirement to obtain the DOCTOR degree in COMPUTER SCIENCES. Ensenada, Baja California, México, June 2007.

## Theoretical and numerical model for the contact line in the Cahn-Hilliard fluids

Abstract approved by:

---

Dr. Pedro Gilberto López Mariscal

*Thesis director*

A diffuse interface type model, using an energy-based variational formulation with a free energy that is a function of the density and its gradients is presented. All of the boundary terms are retained and related to external surface forces, which can be of particular interest when considering the fluid-fluid-solid region i.e. the contact line. The numerical solution of this type of problems requires robust numerical methods capable of capturing thin transition layers. Here, the Chebyshev pseudospectral method with mesh adaptation for the solution of diffuse interface type problems is studied. A mesh adaptation algorithm based in the equidistribution principle following a continuation process is derived. In order to achieve high precision for problems exhibiting thin transition layers, a modified version of the arc length monitor function is proposed, which yields a sufficiently smooth coordinate transformation. At every step of the continuation process, a fixed number of Newton-type iterations are implemented, so that the equidistribution equations are not solved completely at each step. Numerical results for the static phase field model exhibiting thin transition layers are presented. The model is solved for a liquid bubble on a solid surface, using the model in polar coordinates and grid adaptation in the radial direction.

The equidistribution algorithm is generalized to two dimensions, using the finite element method with triangular elements. As in the one dimensional case an iterative algorithm to adapt the mesh is implemented, capable to capture a very thin interface. First, the adaptation algorithm is carefully tested in an analytical function, where numerical results demonstrate the accuracy and effectiveness in the generation of the adapted grid. Subsequently, the phase field equation is used to model a two-phase fluid inside a tube, where the boundary conditions at the walls define the static contact angle.

**Keywords:** Diffuse interface, phase field, mesh adaption, equidistribution, collocation methods, finite element.

*A mi familia: Mi esposa y mis hijos  
por su cariño y comprensión*

# Agradecimientos

De manera muy especial a mi director de Tesis Dr. Gilberto López Mariscal, por sus enseñanzas, paciencia y apoyo.

A los miembros de mi comité: Dr. Michael J. Miksis, Dr. Julio Sheinbaum Pardo, Dr. Hugo Hidalgo Silva, por sus valiosas observaciones y contribuciones a este trabajo.

A todos los investigadores del departamento de Ciencias de la Computación con quienes tuve el agrado de tomar los cursos.

Al Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada.

Al Instituto Politécnico Nacional.

Al Centro de Investigación y Desarrollo de Tecnología Digital.

Al programa de Superación del Personal Académico (SUPERA) de la Asociación Nacional de Universidades e Instituciones de Educación Superior.

Ensenada, Baja California, México.  
1 de Junio de 2007.

Juan José Tapia Armenta

# Tabla de Contenido

Capítulo	Página
<b>Tabla de Contenido</b>	<b>I</b>
<b>Resumen</b>	<b>II</b>
<b>Abstract</b>	<b>III</b>
<b>Agradecimientos</b>	<b>V</b>
<b>Lista de Figuras</b>	<b>VIII</b>
<b>Lista de Tablas</b>	<b>IX</b>
<b>Tabla de símbolos</b>	<b>X</b>
<b>I. Introducción</b>	<b>1</b>
I.1. Objetivos de la Investigación . . . . .	8
I.1.1. Objetivo General . . . . .	8
I.1.2. Objetivos Específicos . . . . .	8
I.2. Organización de la tesis . . . . .	9
<b>II. Modelo para un fluido de dos fases</b>	<b>10</b>
II.1. Formulación . . . . .	11
II.1.1. Primera variación de la energía cinética . . . . .	15
II.1.2. Primera variación de la energía interna . . . . .	16
II.1.3. Primera variación de conservación de masa . . . . .	20
II.1.4. Primera variación del trabajo externo . . . . .	21
II.1.5. Principio de Hamilton . . . . .	22
II.1.6. Modelo <i>phase-field</i> . . . . .	23
II.1.7. Solución estática . . . . .	25
II.1.8. Modelo adimensional . . . . .	31
II.2. Fluido de dos fases en contacto con una superficie sólida . . . . .	34
<b>III. Adaptación de malla en una dimensión</b>	<b>38</b>
III.1. Método de colocación de Chebyshev . . . . .	41
III.2. Discretización adaptativa de la malla . . . . .	45
III.2.1. Principio de equidistribución . . . . .	49
III.2.2. Algoritmo de adaptación de malla . . . . .	54
III.3. Resultados numéricos . . . . .	57
III.3.1. Problema prueba . . . . .	57
III.3.2. Modelo <i>phase-field</i> en una dimensión . . . . .	67
III.3.3. Burbuja líquida sobre una superficie sólida . . . . .	72
<b>IV. Adaptación de malla en dos dimensiones</b>	<b>75</b>
IV.1. Transformación de coordenadas . . . . .	75
IV.2. Método de Elemento Finito . . . . .	78
IV.2.1. Subdivisión del dominio en elementos . . . . .	78
IV.2.2. Selección de las funciones de interpolación . . . . .	80

# Tabla de Contenido (Continuación)

Capítulo	Página
IV.2.3. Formulación del sistema de ecuaciones . . . . .	81
IV.2.4. Solución del sistema de ecuaciones . . . . .	84
IV.3. Principio de equidistribución en dos dimensiones . . . . .	85
IV.3.1. Algoritmo de equidistribución en dos dimensiones . . . . .	87
IV.4. Resultados numéricos . . . . .	89
IV.4.1. Función analítica . . . . .	89
IV.4.2. Fluido de dos fases en un tubo . . . . .	89
<b>V. Conclusiones y Trabajo Futuro</b>	<b>96</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>99</b>
<b>A. Analisis dimensional</b>	<b>105</b>



# Lista de Figuras

Figura	Página
1. Configuración de referencia, configuración al tiempo $t$ y configuración que resulta del movimiento de comparación al tiempo $t$ . . . . .	12
2. Función doble potencial. . . . .	30
3. Fuerzas que actúan en una línea de contacto estática . . . . .	35
4. Ángulo de contacto igual a $\pi/2$ . . . . .	36
5. Ángulo de contacto menor a $\pi/2$ . . . . .	36
6. Ángulo de contacto mayor a $\pi/2$ . . . . .	37
7. Histéresis en la línea de contacto. . . . .	37
8. Malla en el espacio físico y en el espacio computacional. . . . .	47
9. Solución numérica y analítica para el problema prueba, aplicando el método de colocación de Chebyshev. . . . .	58
10. Error en cada punto de colocación en la solución del problema prueba, usando el método de Chebyshev. . . . .	60
11. Error en la solución del problema prueba usando derivadas analíticas y numéricas de la transformación de coordenadas con $\lambda_1$ fijo. . . . .	64
12. Error en la solución del problema prueba usando derivadas analíticas y numéricas de la transformación de coordenadas, con $N$ fijo. . . . .	65
13. Trayectoria de la malla para el problema de prueba, usando equidistribución. . . . .	66
14. Solución para el problema de prueba con malla adaptada, usando equidistribución. . . . .	67
15. Trayectoria de la malla para el proceso de continuación, usando el método de Bayliss. . . . .	70
16. Solución del modelo phase-field, usando equidistribución mediante el proceso de continuación. (a) Primera iteración. (b) Última iteración. . . . .	71
17. Trayectoria de la malla al resolver el modelo <i>phase-field</i> usando el algoritmo de equidistribución, con seis iteraciones en el proceso de continuación. . . . .	72
18. Burbuja líquida sobre una superficie sólida. . . . .	74
19. Numeración local de nodos para un elemento triangular . . . . .	79
20. Adaptación de malla para una función analítica. . . . .	90
21. Fluido de dos fases en un tubo para un ángulo de contacto $\theta_c = \pi/2$ . . . . .	91
22. Malla adaptada en el dominio completo, para un fluido de dos fases con un ángulo de contacto $\theta_c = \pi/2$ . . . . .	92
23. Malla amplificada en la interfase para un ángulo de contacto estático $\theta_c = \pi/2$ . . . . .	93
24. Fluido de dos fases en un tubo con un ángulo de contacto $\theta_c < \pi/2$ . . . . .	94
25. Fluido de dos fases en un tubo con un ángulo de contacto $\theta_c > \pi/2$ . . . . .	95

# Lista de Tablas

Tabla	Página
I. Pseudocódigo para el algoritmo de equidistribución usando continuación.	56
II. Error en la interface y cerca de la frontera. . . . .	60
III. Error para diferentes valores del parámetro de perturbación. . . . .	61
IV. Error $L_\infty$ con puntos de colocación de Chebyshev . . . . .	62
V. Parámetros para el proceso de continuación en el problema de prueba usando equidistribución. . . . .	66
VI. Parámetros para el proceso de continuación en el modelo <i>phase-field</i> , usando el mapeo de Bayliss. . . . .	69
VII. Parámetros para el proceso de continuación en el modelo <i>phase-field</i> , usando equidistribución. . . . .	70
VIII. Parámetros en el proceso de continuación para modelar una burbuja líquida, usando equidistribución. . . . .	74
IX. Dimensiones de las cantidades físicas que aparecen en la formulación del modelo phase-field. . . . .	105

# Tabla de símbolos

$\delta$	Derivada variacional
$D$	Matriz de diferenciación
$\varepsilon$	Parámetro de perturbación
$K$	Potencial químico
$\rho$	Densidad de masa
$J$	Jacobiano

# Capítulo I

## Introducción

El estudio de fluidos multicomponente es de gran importancia en aplicaciones científicas y tecnológicas, como solidificación, combustión, flujos en medios porosos, por mencionar algunas. En general, todo modelo que describe un sistema que contiene una interfase, presenta problemas inherentes a la región donde las propiedades físicas tienen cambios bruscos.

El enfoque clásico del modelo de un fluido multicomponente, se basa en fuerzas de tensión superficial y se supone que en la interfase existe una discontinuidad en las propiedades físicas, como pueden ser la densidad y la viscosidad. En estos modelos, las ecuaciones de balance de masa, energía y momento se resuelven en cada componente por separado y se aplican condiciones de frontera para conectarlas. En la literatura a este tipo de interfase se le conoce como *sharp interface*, que en español podríamos llamarla "interfase nítida".

La simulación numérica de los modelos que contienen una interfase nítida es un proceso complicado, de gran interés actual y que ha motivado diversas investigaciones en el área. Básicamente, existen dos enfoques para realizar la simulación numérica de este tipo de modelos, conocidos en la literatura como *front tracking* y *front capturing*.

El método *front tracking* (Unverdi y Tryggvason, 1992), para modelos con discontinuidad en la interfase, es una técnica donde la discretización es tal que los puntos de la malla siguen a la interfase, mediante una descripción Lagrangiana. Para esto, es necesario un complicado proceso que permita ajustar los puntos de la malla en la interfase. En diversas aplicaciones, la técnica de *front tracking* presenta problemas asociados

a procesos tales como separación de fase, coalescencia, rompimiento de fluidos y otros donde se involucran cambios topológicos en la interfase.

Por otra parte, cuando se utiliza la técnica *front capturing* es posible superar estos inconvenientes. En el trabajo de Brackbill *et al.* (1992), se muestra el desarrollo de un método conocido como Fuerza de Superficie Continua (CSF, Continuous Surface Force), en el cual la discontinuidad de la interfase, se suaviza al introducir artificialmente una función continua que distingue a las fases y que típicamente se le denomina función color. Esta función de suavizado se usa para determinar la posición y geometría de la interfase, donde ahora las propiedades varían continuamente a través de la interfase, de tal manera que la tensión superficial puede entonces incluirse en la ecuación de movimiento como una fuerza de cuerpo (Verschueren *et al.*, 2001). Como consecuencia, ya no se requiere la aplicación directa de las condiciones de frontera en la interfase, y de esta manera no es necesario el desarrollo de un método numérico donde la malla tenga que seguir a la interfase. En estos métodos, se puede aplicar una malla fija mediante una descripción Euleriana, lo cual resulta conveniente en sistemas con cambios en la topología. Otra estrategia numérica que se ha utilizado en los últimos años y que también le da una estructura numérica a la interfase es conocida como el método *level set* (Sussman *et al.*, 1994). En este método, la interfase se representa con una función auxiliar de suavizado, que computacionalmente funciona como un parámetro de orden para las fases, con un valor de cero en la interfase, un valor positivo de un lado de la interfase y negativo del otro lado. Esta función es similar a la función color en el método CSF. El mayor problema que se presenta al usar los métodos descritos anteriormente, es que la función de suavizado es arbitraria sin un significado físico, lo cual indica que la interfase es discontinua conceptualmente, y regularizada numéricamente para hacerla difusa. Lowengrub y Truskinovsky (1998) muestran que los resultados numéricos son sensitivos a la elección de esta función de suavizado.

Los métodos anteriores, se aplican para resolver problemas de interfase discontinua, que se basan en modelos de fuerzas de tensión superficial. Un enfoque conceptualmente diferente, son los modelos que sustituyen a la región de discontinuidad por una capa de transición delgada, que se basan en modelos de energía libre, de acuerdo a las ideas de van der Waals (1893).

En lugar de modelar a la interfase con fuerzas de tensión superficial, ahora se le dota de una cierta estructura y se trata el dominio como un continuo, a estos modelos se les ha denominado modelos *phase-field*. En este enfoque, se considera a la interfase como una capa delgada físicamente difusa, controlada por parámetros intrínsecos del problema físico. La solución a este tipo de modelos está caracterizada por dos escalas espaciales de diferente orden de magnitud. Una para el grueso de los fluidos y la otra para la región de transición. La interfase tiene ahora un grueso diferente de cero con un sentido físico y no representa tan solo una simple estrategia numérica como son los métodos CSF y *level set*. Obviamente, en el modelo *phase-field* no es necesario seguir la posición de la interfase explícitamente, ya que el método la captura como parte de la solución.

Los modelos *phase-field* son más fáciles de implementar computacionalmente que los modelos de interfase discontinua, especialmente cuando se presentan formas complejas de la interfase. Es importante considerar que los modelos de interfase difusa convergen a sus correspondientes modelos de interfase discontinua, cuando el ancho de la capa de transición tiende a cero. Una revisión de desarrollos recientes en modelado de interfase difusa se puede consultar en el trabajo de Anderson *et al.* (1998).

En este trabajo, se presenta el desarrollo de un modelo *phase-field* para un fluido de dos fases, basado en energía libre que es función de la densidad de masa y sus gradientes. Las ecuaciones de balance se obtienen aplicando el principio de Hamilton, como un resultado de la primera variación del Lagrangiano. Modelos similares incluyen otras

variables de estado en la energía libre como la concentración de masa y sus gradientes, ver por ejemplo Cahn y Hilliard (1958).

En general, cuando la interfase del fluido está en contacto con una superficie sólida, aparecen problemas de modelado importantes. En los modelos de interfase discontinua a esta región se le conoce como línea de contacto, la cual origina una clase de problemas de frontera libre con diversas aplicaciones industriales, tecnológicas y científicas (de Gennes, 1985). Algunos ejemplos son la elevación de una columna líquida en un tubo capilar, recubrimiento de superficies, deposición de un fluido en la producción de películas delgadas, etc. En esta situación, la condición de no deslizamiento, la cual se usa normalmente en la frontera entre un sólido y un líquido, introduce una singularidad no integrable de los esfuerzos, sobre la línea de contacto en movimiento, lo que significa que una fuerza infinita es requerida para mover una línea de contacto (Dussan y Davis, 1974). Diferentes técnicas han sido implementadas para resolver esta divergencia, que además no es de origen físico. Una técnica que se ha utilizado para eliminar esta singularidad, consiste en relajar la condición de frontera de no deslizamiento usando la condición de deslizamiento de Navier a lo largo del sólido. Cerca de la línea de contacto al fluido se le permite deslizarse invocando una relación entre la velocidad de deslizamiento y los esfuerzos locales por medio de la introducción de un parámetro conocido como longitud de desplazamiento. Esta condición de deslizamiento ha sido usada por Greenspan (1978), y por Haley y Miksis (1991), entre otros, para modelar el movimiento de una gota de fluido en una superficie sólida. De la misma manera, López *et al.* (1996) y López *et al.* (1997), usan esta técnica en su investigación de la propagación de un fluido sobre un plano inclinado.

Otra técnica para modelar líneas de contacto en movimiento, consiste en suponer que el substrato nunca está perfectamente seco, lo cual permite aplicar la condición de no deslizamiento. Considerando fenómenos de evaporación y condensación, se puede usar

la noción de una película precursora muy delgada en el frente de la línea de contacto que cubre la superficie, de tal manera que la interfase no toca la superficie (de Gennes, 1985). Una revisión reciente del problema de la línea de contacto para flujos de dos fases se presenta en el trabajo de Qian *et al.* (2006).

Las soluciones previas para la singularidad de esfuerzos viscosos, toman la interfase entre los fluidos como discontinua y se considera una interfase material, es decir no hay flujo a través de ella. Cuando se aplica un modelo *phase-field*, una interfase con un grosor finito remueve la discontinuidad en la densidad de masa como se describe en el trabajo de Seppecher (1996). En este caso, el transporte de masa a través de la interfase juega el papel de un mecanismo de deslizamiento aliviando la singularidad en los esfuerzos viscosos.

El modelo *phase-field* que se desarrolla en este trabajo, muestra las condiciones de frontera como resultado natural de la minimización de la energía libre de Helmholtz, considerándola como función de la densidad y sus gradientes. Es importante destacar que las condiciones de frontera que resultan del desarrollo del sistema, establecen una relación entre las variables de estado, en este caso la densidad y sus gradientes, con la dinámica del problema particular que se está desarrollando. En el caso que parte de la frontera sea una superficie sólida, la interpretación física de estas relaciones refleja la dinámica de un ángulo de contacto microscópico. Al aplicar el modelo a un problema estacionario, la condición de frontera resultante define un ángulo de contacto estático. En este caso, esta condición resulta similar a la que se presenta en el trabajo de Jacqmin (1999).

Las propiedades específicas de los métodos *phase-field*, de modelar una interfase como difusa y resolver la singularidad en la línea de contacto, han despertado el interés y motivado su estudio en diversas investigaciones. Un modelo *phase-field* para la mezcla de dos fluidos incompresibles se presenta en el trabajo de Liu y Shen (2003).



Debido a que la discontinuidad en la interfase se reemplaza por una región de transición, la simulación de los modelos *phase-field* requieren de resolución de capas internas muy delgadas para capturar la física del problema estudiado. Esto demanda métodos numéricos robustos que permitan lograr eficientemente alta resolución y buena precisión. Para poder lograr lo anterior, un camino apropiado es la implementación de algoritmos de adaptación de malla que concentren los nodos en esta región de transición. En los últimos años, se han desarrollado diferentes métodos y estrategias numéricas basados en adaptación de malla para resolver problemas de este tipo.

Una técnica de adaptación de malla en dos dimensiones, basada en el método de elemento finito para modelos de interfase difusa se presenta en el trabajo de Barosan *et al.* (2006). También en el trabajo de Yue *et al.* (2006) se usa el método del elemento finito con adaptación de malla, aplicándolo al modelado de la dinámica superficial de fluidos viscoelásticos. Usando un método espectral de Fourier adaptativo Feng *et al.* (2006), resuelven un modelo *phase-field* en dos y tres dimensiones. El método de elemento finito es usado por Feng (2006), para modelar un flujo de un fluido binario en dos dimensiones, acoplando las ecuaciones de Navier Stokes y la ecuación de Cahn y Hilliard usando un parámetro de perturbación que define una interfase relativamente gruesa.

En este trabajo, se presentan resultados numéricos del modelo *phase-field*, cuando se aplica para modelar una burbuja de un fluido rodeada por otro fluido sobre una superficie sólida y un fluido de dos fases contenido en un tubo, para diferentes ángulos de contacto.

Primero se presenta la solución a un problema en una dimensión, usando la transformación analítica propuesta por Bayliss *et al.* (1995b). Los resultados obtenidos reflejan la necesidad del suavizado en la transformación de coordenadas para recuperar la alta precisión del método de colocación de Chebyshev.

Para resolver eficientemente el modelo *phase-field*, se implementa un algoritmo de equidistribución en una dimensión y se aplica el método pseudoespectral de Chebyshev, mediante una transformación de coordenadas se suaviza la solución en el espacio computacional, de esta manera se logra recuperar la alta precisión para problemas con cambios bruscos en la solución. Se muestran resultados numéricos de la solución del modelo para una burbuja de un fluido rodeada por otro fluido, que descansa sobre una superficie sólida. Se resuelve en coordenadas polares aplicando el método de colocación de Chebyshev en ambas direcciones y usando adaptación de malla en la dirección radial.

En dos o tres dimensiones espaciales, la generación y adaptación de malla se realiza generalmente usando un enfoque variacional, minimizando un funcional de una transformación de coordenadas entre el dominio físico  $\Omega_f$  y el dominio computacional  $\Omega_c$ . En este trabajo, se presenta un algoritmo de adaptación de malla en dos dimensiones, basado en el principio de equidistribución en una dimensión a lo largo de líneas coordenadas en el espacio computacional, siguiendo las ideas de Huang y Sloan (1994). Una función monitor se usa para guiar la redistribución de los puntos de la malla. En la práctica es necesario realizar un suavizado de la función monitor.

La representación del Laplaciano en más de una dimensión espacial en el espacio computacional involucra una gran cantidad de derivadas parciales, que al resolverlas numéricamente reducen significativamente la precisión del método de colocación de Chebyshev mapeado en el espacio físico. Aquí se resuelve el problema en el espacio físico, usando el método de elemento finito. En este caso, la transformación de coordenadas se usa solo para realizar el proceso de adaptación de malla, aplicando el método de adaptación de malla tipo  $r$ , también conocido como método de movimiento de malla, que consiste en relocalizar los nodos de tal manera que se concentren en regiones de rápida variación de la solución.

Se presenta una formulación de residuos pesados de Galerkin del método de elemento

finito, para el modelo *phase-field*, obteniendo la matriz del sistema que representa al flujo de dos fases. Se muestran resultados numéricos para un fluido de dos fases contenido en un tubo utilizando este método, lográndose capturar una interfase muy delgada.

## **I.1. Objetivos de la Investigación**

### **I.1.1. Objetivo General**

Desarrollar un modelo para un fluido de dos fases, caracterizando la región que separa a las fases, como una interfase difusa, usando una formulación variacional de la energía, capaz de describir la interacción con una superficie sólida. Desarrollar e implementar esquemas numéricos eficientes con alta precisión, para la resolución del modelo.

### **I.1.2. Objetivos Específicos**

- Desarrollo de un modelo de interfase difusa para un fluido de dos fases, basado en una formulación variacional de la energía, que incluya la interacción con una superficie sólida.
- El modelo debe ser capaz de solventar los problemas asociados a la región que une la interfase con la superficie sólida, es decir la línea de contacto.
- Desarrollo de un esquema numérico eficiente para la solución del modelo, aplicado a problemas físicos concretos.
- Solución numérica de problemas con diferentes valores del ángulo de contacto estático.
- Desarrollo e implementación de algoritmos de adaptación de malla, que permitan capturar una interfase muy delgada.

- Obtención de alta precisión en la solución del modelo, usando el método de colocación de Chebyshev.
- Solución del modelo aplicado a problemas en dos dimensiones, usando el método de elemento finito con adaptación de malla.

## **I.2. Organización de la tesis**

El resto de este documento está organizado de la siguiente manera. En el capítulo II se hace la formulación teórica de un modelo de interfase difusa, tomando como base el principio de Hamilton. Después de una breve introducción de los conceptos básicos del método de colocación de Chebyshev, la solución numérica del modelo en una dimensión se presenta en el capítulo III, usando adaptación de malla por medio del principio de equidistribución. La solución numérica del modelo usando elemento finito, es extendida a dos dimensiones en el capítulo IV y se presentan los resultados correspondientes. Finalmente, en el capítulo V se presenta una síntesis de los resultados obtenidos, se exponen las conclusiones a las que se llegaron en este trabajo de investigación y se comentan las perspectivas y el trabajo futuro motivadas por las conclusiones obtenidas.

## Capítulo II

# Modelo para un fluido de dos fases

Los modelos *phase-field* para un fluido binario, se basan en una descripción de interface difusa, usando una variable que indica el valor de la fase, la cual es continua a través de la región de separación de las fases. En este modelo la interfase discontinua del modelo clásico se reemplaza por una capa de transición delgada a través de la cual los fluidos se pueden mezclar.

Aquí se presenta la formulación de un modelo *phase-field* para un fluido de dos fases. Se utiliza la densidad como parámetro de orden, similar a como lo hacen Anderson *et al.* (1998). Se realiza una formulación variacional de la energía, mediante el Lagrangiano y aplicando el principio de Hamilton. De esta manera, se obtiene la ecuación de evolución que rige el movimiento del fluido de dos fases. Las condiciones de frontera a su vez se desprenden de la formulación variacional propuesta. El modelo *phase-field* se puede aplicar a un fluido binario, en cuyo caso la interfase separa las dos componentes y la composición toma el rol de variable de fase, de acuerdo con Cahn y Hilliard (1958). Generalmente, se supone que ambas componentes son incompresibles con densidad constante. A los modelos donde ambas componentes se suponen incompresibles, con la característica que sus densidades pueden ser diferentes, se les conoce en la literatura como modelos cuasi-incompresibles (Lowengrub y Truskinovsky, 1998).

El modelo *phase-field* se ha aplicado en varias áreas de hidrodinámica, Pismen y Pomeau (2000) lo aplican a la propagación de una película de fluido en una superficie sólida, basándose en la aproximación de lubricación. Una revisión de varias aplicaciones a fenómenos superficiales tanto para fluidos de una componente con dos fases, como

fluidos binarios es presentada por Anderson *et al.* (1998). Un estudio de flujos de dos fases para fluidos complejos es presentado por Yue *et al.* (2004). Un modelo *phase-field* es usado por Badalassi *et al.* (2003) para modelar fluidos con múltiples fases.

## II.1. Formulación

En el modelo *phase-field* propuesto, un fluido de dos fases con densidad de masa  $\rho$  confinado en un volumen  $\Omega_t$  es modelado como un medio continuo. Además, la densidad es considerada una variable continua en todo el dominio, mientras que en un modelo clásico se considera que la densidad presenta una discontinuidad en la interfase. Para obtener la formulación del modelo *phase-field*, el movimiento de una partícula material, desde un tiempo  $t_0$  hasta un cierto tiempo  $t_1$  se describe por el campo vectorial

$$\mathbf{x} = \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t), \quad (1)$$

que expresa el vector posición al tiempo  $t \in [t_0, t_1]$ , donde  $\mathbf{X}$  es la etiqueta para una partícula material en la configuración inicial, la cual se toma como referencia.

Se define un cierto movimiento de comparación por

$$\mathbf{x}^*(\epsilon) = \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t) + \epsilon \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{X}, t), \quad (2)$$

donde  $\epsilon$  es un parámetro pequeño, y la perturbación  $\boldsymbol{\alpha}$  un campo vectorial tal que  $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{X}, t_0) = \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{X}, t_1) = 0$ .

El movimiento de comparación mapea den la configuración de referencia el volumen material  $\Omega$  contenido en la superficie  $\partial\Omega$ , en un volumen  $\Omega_t$  con superficie  $\partial\Omega_t$  en la configuración al tiempo  $t$ , obteniéndose el volumen  $\Omega_t^*$  con superficie  $\partial\Omega_t^*$  que resulta del movimiento de comparación  $\mathbf{x}^*$ . Esta transformación se ilustra en la Figura 1.

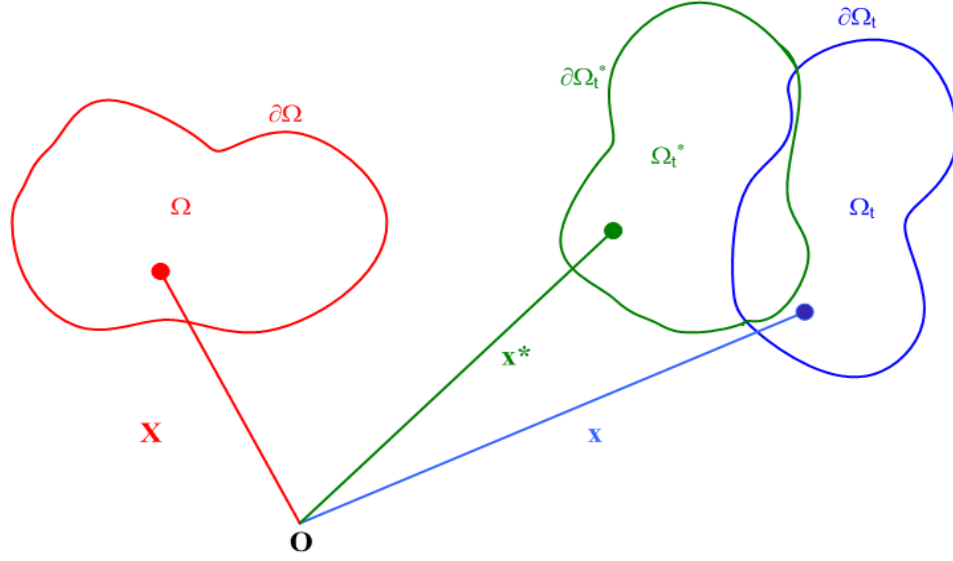


Figura 1: Configuración de referencia, configuración al tiempo  $t$  y configuración que resulta del movimiento de comparación al tiempo  $t$ .

Similarmente, un campo de comparación para la densidad  $\rho$  está definido por

$$\rho^*(\epsilon) = \rho(\mathbf{X}, t) + \epsilon\phi(\mathbf{X}, t). \quad (3)$$

En este caso, la perturbación  $\phi$  es un campo escalar tal que  $\phi(\mathbf{X}, t_0) = \phi(\mathbf{X}, t_1) = 0$ .

Un concepto importante derivado de la deformación en el movimiento del material, es el gradiente de deformación  $\mathbf{F}$ , el cual es un tensor de segundo orden, definido por

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}) = \frac{\partial \boldsymbol{\chi}}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial x_k}{\partial X_m} e_k \otimes e_m, \quad (4)$$

que expresa la relación entre elementos diferenciales de la configuración sin deformar y elementos de la configuración deformada. Si  $d\mathbf{X}$  es un vector diferencial situado en el punto  $\mathbf{X}$  de la configuración de referencia y  $d\mathbf{x}$  es un vector que resulta de la deformación de  $d\mathbf{X}$  se cumple que

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F}(\mathbf{X}) d\mathbf{X}. \quad (5)$$

El Jacobiano de la transformación

$$J = \det \mathbf{F} = \det F_{km}, \quad (6)$$

tiene una primera variación dada por

$$\delta(J) = J \operatorname{div} \boldsymbol{\alpha}, \quad (7)$$

mientras que su derivada material es

$$\dot{J} = J \nabla \cdot \mathbf{v}. \quad (8)$$

El movimiento dado por (1) mapea un elemento de volumen  $dV_{t_0}$  de  $\Omega_{t_0}$  al tiempo  $t_0$  en un elemento de volumen  $dV_t$  de  $\Omega_t$  al tiempo  $t$ , entonces el Jacobiano del movimiento representa el cociente entre el volumen deformado y el volumen sin deformar

$$J = \frac{dV_t}{dV_{t_0}}. \quad (9)$$

La masa de cada elemento de volumen  $dV_t$  de  $\Omega_t$  al tiempo  $t$  está dada por  $\rho dV_t$ , definiendo la densidad de referencia  $\rho_0$  como el valor de la densidad  $\rho$  al tiempo  $t_0$ , entonces conservación de masa se representa de la siguiente manera

$$\rho dV_t = \rho_0 dV_{t_0}. \quad (10)$$

Por lo tanto de (9 – 10) el Jacobiano del gradiente de deformación representa también el cociente entre la densidad de referencia  $\rho_0$ , y la densidad  $\rho$  al tiempo  $t$ ,

$$J = \frac{\rho_0}{\rho}. \quad (11)$$



Tomando la derivada material del Jacobiano  $J$  en (11)

$$\dot{j} = -\frac{\rho_0 \dot{\rho}}{\rho^2} = -J \frac{\dot{\rho}}{\rho}, \quad (12)$$

por lo tanto de las ecuaciones (8 y 11)

$$J \nabla \cdot \mathbf{v} = -J \frac{\dot{\rho}}{\rho}, \quad (13)$$

entonces se obtiene la ecuación de conservación de masa en su forma usual,

$$\dot{\rho} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (14)$$

Siguiendo las ideas de Bedford y Drumheller (1978), se propone un enfoque variacional para encontrar las ecuaciones que gobiernan el sistema, por lo tanto para el estudio de partículas en movimiento, se aplica el principio de mínima acción, que significa que para cada sistema mecánico existe una cierta integral  $S$ , llamada integral de acción, la cual tiene un valor extremo para el movimiento actual, es decir su variación  $\delta S$  es cero.

La integral de acción se representa como una integral con respecto al tiempo de la función de Lagrange  $L$ ,

$$S = \int_{t_0}^{t_1} L dt, \quad (15)$$

De esta manera, para un medio continuo la primera variación del Lagrangiano se expresa por

$$\delta S = \int_{t_0}^{t_1} |\delta(T - U) + \delta W + \delta \Lambda| dt, \quad (16)$$

donde  $T$  es la energía cinética,  $U$  la energía interna,  $W$  el trabajo virtual debido a fuerzas externas y  $\Lambda$  una restricción que expresa conservación de masa para un medio continuo. A continuación se calculan todos los términos que aparecen en (16), que

determinan la primera variación del Lagrangiano..

### II.1.1. Primera variación de la energía cinética

La energía cinética  $dT_t$  para un elemento  $dV_t$  de  $\Omega_t$ , en el tiempo  $t$ , es decir el trabajo necesario para acelerar el elemento  $dV_t$  desde una velocidad nula, hasta una velocidad  $\mathbf{v}$  está dada por

$$dT_t = \frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} dV_t. \quad (17)$$

Por lo tanto, la energía cinética total del fluido que ocupa el volumen  $\Omega_t$  al tiempo  $t$  esta dada por

$$T = \int_{\Omega_t} \frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} dV_t. \quad (18)$$

Además por conservación de masa, esta energía cinética es la misma en la configuración de referencia  $\Omega$ , es decir

$$T = \int_{\Omega} \frac{1}{2} \rho_0 \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} dV. \quad (19)$$

Entonces, la integral  $I$  con respecto al tiempo de la energía cinética, desde el tiempo inicial  $t_0$  hasta un cierto tiempo  $t_1$  es

$$I = \int_{t_0}^{t_1} T dt = \int_{t_0}^{t_1} \int_{\Omega} \frac{1}{2} \rho_0 \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} dV dt. \quad (20)$$

Esta integral  $I$  en términos del movimiento de comparación (2), está dada por

$$I^*(\epsilon) = \int_{t_0}^{t_1} \int_{\Omega} \frac{1}{2} \rho_0 \mathbf{v}^* \cdot \mathbf{v}^* dV dt. \quad (21)$$

donde  $\mathbf{v}^* = \mathbf{v} + \epsilon \dot{\boldsymbol{\alpha}}$  es la velocidad del movimiento de comparación. Tomando la derivada con respecto a  $\epsilon$  y evaluando en  $\epsilon = 0$ , la primera variación de  $I$  está dada por

$$\delta I = \left. \frac{dI^*(\epsilon)}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} = \int_{t_0}^{t_1} \int_{\Omega} \rho_0 \mathbf{v} \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}} dV dt. \quad (22)$$

Para obtener la primera variación de la energía cinética  $\delta T$ , primero se calcula

$$\int_{t_0}^{t_1} \rho_0 \mathbf{v} \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}} dt = [\rho_0 \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\alpha}]_{t_0}^{t_1} - \int_{t_0}^{t_1} \rho_0 \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\alpha} dt, \quad (23)$$

usando integración por partes y la condición (2), como  $\boldsymbol{\alpha}$  se desvanece en  $t_0$  y  $t_1$ , entonces

$$\delta T = - \int_{\Omega} \rho_0 \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\alpha} dV \quad (24)$$

donde  $\mathbf{a}$  es la aceleración de una partícula material,

$$\mathbf{a} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}. \quad (25)$$

Por conservación de energía se tiene

$$\delta T = - \int_{\Omega_t} \rho \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\alpha} dV_t = - \int_{\Omega} \rho_0 \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\alpha} dV \quad (26)$$

### II.1.2. Primera variación de la energía interna

Ahora se calcula la primera variación de la energía interna  $U$ , la cual se considera como la suma de la energía libre  $U_F$  y una contribución no conservativa  $U_s$ . Siguiendo las ideas de van der Waals (1893), para construir el modelo *phase-field*, se considera la energía libre  $U_F$  para un fluido de dos fases separadas por una capa de transición delgada. La densidad toma el rol de un parámetro de orden para el fluido de dos fases, así como lo hacen Anderson *et al.* (1998), para un fluido de una sola componente. De esta manera, ponemos la energía libre específica de Helmholtz  $u_F$ , como una función de la densidad  $\rho$  y sus gradientes  $\nabla \rho$ , de acuerdo a la teoría de van der Waals (1893). Además, se considera que no hay variaciones en la temperatura, entonces la energía

libre se representa por

$$U_F = \int_{\Omega_t} \rho u_F(\rho, \nabla \rho) dV_t = \int_{\Omega} \rho_0 u_F(\rho, \nabla \rho) dV, \quad (27)$$

ya que por conservación de masa, la energía libre en la configuración de referencia  $\Omega$  y la energía libre en la configuración al tiempo  $\Omega_t$  es la misma. De esta manera, la variación de la parte conservativa de la energía interna  $U$  en términos de la densidad de comparación, en la configuración de referencia está dada por

$$U_F^* = \int_{\Omega} \rho_0 u_F^*(\rho^*(\epsilon), \nabla \rho^*(\epsilon)) dV,$$

usando la regla de la cadena, se tiene que

$$\frac{dU_F^*}{d\epsilon} = \int_{\Omega} \rho_0 \left( \frac{\partial u_F^*}{\partial \rho^*} \frac{\partial \rho^*}{\partial \epsilon} + \frac{\partial u_F^*}{\partial \nabla \rho^*} \frac{\partial \nabla \rho^*}{\partial \epsilon} \right) u_F(\rho, \nabla \rho) dV, \quad (28)$$

entonces la variación de la parte conservativa de la energía interna  $U$  en la configuración de referencia es

$$\delta U_F = \left. \frac{dU_F^*}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} = \int_{\Omega} \rho_0 \left( \frac{\partial u_F}{\partial \rho} \phi + \mathbf{h} \cdot \delta(\nabla \rho) \right) dV, \quad (29)$$

ya que  $\phi = \delta(\rho)$ , además el vector  $\mathbf{h}$  que expresa la no homogeneidad del fluido es

$$\mathbf{h} = \frac{\partial u_F}{\partial \nabla \rho}. \quad (30)$$

Esta cantidad representa la diferencia entre los modelos *phase-field* como el desarrollado en este trabajo y los modelos clásicos como el de Bedford (1985), donde la energía libre no es función de los gradientes de la densidad.

$$\delta U_F = \int_{\Omega_t} \rho \left( \frac{\partial u_F}{\partial \rho} \phi + \mathbf{h} \cdot \delta(\nabla \rho) \right) dV_t = \int_{\Omega} \rho_0 \left( \frac{\partial u_F}{\partial \rho} \phi + \mathbf{h} \cdot \delta(\nabla \rho) \right) dV. \quad (31)$$

Se calcula la primera variación del gradiente de la densidad  $\delta(\nabla\rho)$  en (29)

$$\begin{aligned}\delta(\nabla\rho) &= \delta\left(\frac{d\rho}{d\mathbf{x}}\right) = \delta\left(\frac{d\chi^{-1}}{d\mathbf{x}}\frac{d\rho}{d\mathbf{X}}\right) = \delta\left(\frac{1}{\frac{d\chi}{d\mathbf{X}}}\frac{d\rho}{d\mathbf{X}}\right) \\ &= \frac{1}{\frac{d\chi}{d\mathbf{X}}}\delta\left(\frac{d\rho}{d\mathbf{X}}\right) - \frac{d\rho}{d\mathbf{X}}\frac{1}{\left(\frac{d\chi}{d\mathbf{X}}\right)^2}\delta\left(\frac{d\chi}{d\mathbf{X}}\right),\end{aligned}\quad (32)$$

intercambiando el orden de las derivadas y aplicando la regla de la cadena, el primer término está dado por

$$\frac{1}{\frac{d\chi}{d\mathbf{X}}}\delta\left(\frac{d\rho}{d\mathbf{X}}\right) = \frac{1}{\frac{d\chi}{d\mathbf{X}}}\frac{d\phi}{d\mathbf{X}} = \nabla\phi, \quad (33)$$

mientras que el segundo se expresa por

$$-\frac{d\rho}{d\mathbf{X}}\frac{1}{\left(\frac{d\chi}{d\mathbf{X}}\right)^2}\delta\left(\frac{d\chi}{d\mathbf{X}}\right) = -\frac{d\rho}{d\mathbf{x}}\frac{d\alpha}{d\mathbf{x}}, \quad (34)$$

por lo tanto el segundo término en la integral (29)

$$\rho\mathbf{h}\cdot\delta(\nabla\rho) = \rho\mathbf{h}\cdot\left(\nabla\phi - (\nabla\beta)^T\nabla\rho\right). \quad (35)$$

Así, el primer término del lado derecho en la relación (35) está dado por

$$\rho\mathbf{h}\cdot\nabla\phi = \nabla\cdot(\rho\mathbf{h}\phi) - \nabla\cdot(\rho\mathbf{h})\phi, \quad (36)$$

mientras que al desarrollar el segundo se obtiene

$$\begin{aligned}\rho\mathbf{h}\cdot\left[(\nabla\alpha)^T\nabla\rho\right] &= \rho\mathbf{h}\cdot\left((\nabla\alpha)^T\nabla\rho\right) = -\rho\{(\nabla\cdot(\nabla\rho\otimes\mathbf{h}))\cdot\alpha + \nabla\cdot((\mathbf{h}\otimes\nabla\rho)\alpha)\} \\ &= -\rho[\nabla\cdot(\nabla\rho\otimes\mathbf{h})]\cdot\alpha + \rho[\nabla\cdot(\mathbf{h}\otimes\nabla\rho)\alpha] \\ &= -\nabla\cdot(\rho\nabla\rho\otimes\mathbf{h})\cdot\alpha + (\rho(\mathbf{h}\times\nabla\rho)\times\mathbf{n})\cdot\alpha + \rho(\nabla\rho\cdot\mathbf{h})\mathbf{n}\cdot\alpha,\end{aligned}\quad (37)$$

donde  $\mathbf{n}$  es el vector unitario normal a  $\partial\Omega$ . Por lo tanto, el segundo término en la integral (29)

$$\begin{aligned} \rho \mathbf{h} \cdot \delta(\nabla \rho) &= \nabla \cdot (\rho \mathbf{h} \phi) - \nabla \cdot (\rho \mathbf{h}) \phi \\ &+ \nabla \cdot (\rho \nabla \rho \otimes \mathbf{h}) \cdot \boldsymbol{\alpha} - (\rho (\mathbf{h} \times \nabla \rho) \times \mathbf{n}) \cdot \boldsymbol{\alpha} - \rho (\nabla \rho \cdot \mathbf{h}) \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\alpha}. \end{aligned} \quad (38)$$

Finalmente, aplicando el teorema de la divergencia, se tiene que la variación de la parte conservativa de la energía interna es

$$\begin{aligned} \delta U_F &= \int_{\Omega_t} \left[ \rho \frac{\partial u_F}{\partial \rho} \phi + \nabla \cdot (\rho \mathbf{h} \phi) - \nabla \cdot (\rho \mathbf{h}) \phi + \nabla \cdot (\rho \nabla \rho \otimes \mathbf{h}) \cdot \boldsymbol{\alpha} \right] dV_t \\ &\int_{\partial\Omega_t} [-\rho (\mathbf{h} \times \nabla \rho) \times \mathbf{n} - \rho (\nabla \rho \cdot \mathbf{h}) \mathbf{n}] \cdot \boldsymbol{\alpha} dS_t. \end{aligned} \quad (39)$$

Ahora se calcula la variación en la contribución no conservativa de la energía interna  $U_s$ , siguiendo las ideas de Bedford (1985)

$$\delta U_s = \int_{\Omega} \boldsymbol{\Upsilon} \cdot \delta \mathbf{F} dV, \quad (40)$$

donde  $\boldsymbol{\Upsilon}$  es el tensor de esfuerzos viscosos para un fluido Newtoniano (Batchelor, 2000), definido por

$$\boldsymbol{\Upsilon} = 2\mu \left( \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} + \left( \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} \right)^T \right) + \eta (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{1}, \quad (41)$$

en la expresión anterior  $\mu$  y  $\eta$  son los coeficientes de viscosidad y  $\mathbf{1}$  es el tensor unitario.

De la relación (2) se obtiene la deformación del movimiento de comparación

$$\frac{\partial \mathbf{x}^*}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \boldsymbol{\chi}}{\partial \mathbf{X}} + \epsilon \frac{\partial \boldsymbol{\alpha}}{\partial \mathbf{X}}, \quad (42)$$

por lo tanto, un campo de comparación para el gradiente de deformación se expresa por

$$\mathbf{F}^* = \mathbf{F} + \epsilon \frac{\partial \boldsymbol{\alpha}}{\partial \mathbf{X}}, \quad (43)$$

de esta manera se calcula la primera variación del gradiente de deformación

$$\delta \mathbf{F} = \left[ \frac{\partial \mathbf{F}^*}{\partial \epsilon} \right]_{\epsilon=0} = \frac{\partial \boldsymbol{\alpha}}{\partial \mathbf{X}} = \nabla \cdot \boldsymbol{\alpha}. \quad (44)$$

Substituyendo (44) en (40), la primera variación

$$\delta U_s = \int_{\Omega} [\nabla \cdot (\boldsymbol{\Upsilon} \cdot \boldsymbol{\alpha}) - (\nabla \cdot \boldsymbol{\Upsilon}) \cdot \boldsymbol{\alpha}] dV. \quad (45)$$

Aplicando el teorema de la divergencia en el primer término de (45), se obtiene la primera variación en la contribución no conservativa de la energía interna

$$\delta U_s = \int_{\partial \Omega_t} \boldsymbol{\Upsilon} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\alpha} dS_t - \int_{\Omega_t} (\nabla \cdot \boldsymbol{\Upsilon}) \cdot \boldsymbol{\alpha} dV_t. \quad (46)$$

### II.1.3. Primera variación de conservación de masa

El movimiento del fluido y su densidad están relacionados a través de la ecuación de conservación de masa. Por lo tanto la restricción de conservación de masa  $\Lambda$  está dada por

$$\Lambda = \int_{\Omega} \lambda \left( J - \frac{\rho_0}{\rho} \right) dV = \int_{\Omega_t} \lambda \left( 1 - \frac{\rho_0}{\rho J} \right) dV_t, \quad (47)$$

donde  $\lambda(\mathbf{X}, t)$  es un multiplicador de Lagrange. Expresando (47) en términos del movimiento de comparación

$$\Lambda^*(\epsilon) = \int_{\Omega} \lambda \left( J^* - \frac{\rho_0}{\rho^*} \right) dV, \quad (48)$$

Tomando la derivada parcial con respecto a  $\epsilon$

$$\frac{\partial \Lambda^*(\epsilon)}{\partial \epsilon} = \int_{\Omega_t} \lambda \left( \frac{\partial J^*}{\partial \epsilon} + \frac{\rho_0 \phi}{(\rho^*)^2} \right) dV_t = \int_{\Omega_t} \lambda \left( \frac{\partial J^*}{\partial \epsilon} + \frac{\rho J \phi}{(\rho + \epsilon \phi)^2} \right) dV_t, \quad (49)$$

se calcula la derivada variacional

$$\delta(\Lambda) = \left[ \frac{\partial \Lambda^*(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right]_{\epsilon=0} = \int_{\Omega_t} \lambda \left( J \operatorname{div} \boldsymbol{\alpha} + \frac{J \phi}{\rho} \right) dV_t = \int_{\Omega_t} \lambda J \left( \operatorname{div} \boldsymbol{\alpha} + \frac{\phi}{\rho} \right) dV_t, \quad (50)$$

usando el teorema de la divergencia, la variación de la restricción de conservación de masa es

$$\delta \Lambda = \int_{\partial \Omega_t} \lambda \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\alpha} dS_t - \int_{\Omega_t} \nabla \lambda \cdot \boldsymbol{\alpha} dV_t + \int_{\Omega_t} \frac{\lambda}{\rho} \phi dV_t. \quad (51)$$

#### II.1.4. Primera variación del trabajo externo

Las fuerzas que actúan sobre un elemento de materia pueden ser de dos tipos, las primeras surgen en el interior del material y son proporcionales a la masa del material (por ejemplo la gravedad), estas fuerzas se conocen como fuerzas de cuerpo. Las de segundo tipo se conocen como fuerzas de superficie, ya que actúan sobre la frontera del material. Esta fuerza por unidad de superficie se denomina esfuerzo.

La primera variación del trabajo en el volumen  $\Omega_t$ , debido a fuerzas externas ejercidas sobre todo el volumen y su superficie es

$$\delta W_{ext} = \int_{\Omega_t} \rho \mathbf{g} \cdot \boldsymbol{\alpha} dV_t + \int_{\partial \Omega_t} (\mathbf{Pn} \cdot \boldsymbol{\alpha} + \mathbf{r} \cdot \mathbf{n} \phi) dS_t, \quad (52)$$

el primer término se debe a la fuerza de cuerpo  $\mathbf{g}$ , mientras que las contribuciones del trabajo virtual en la frontera están determinadas por el tensor de superficie  $\mathbf{P}$  y por el vector de línea  $\mathbf{r}$ , debido a la energía de superficie externa.



### II.1.5. Principio de Hamilton

Introduciendo las relaciones (24, 29, 46, 51 y 52) en la expresión (16), y agrupando términos, la primera variación en el Lagrangiano toma la forma

$$\begin{aligned}
\delta S = & \int_{t_0}^{t_1} \left\{ \int_{\Omega_t} [-\rho \mathbf{a} - \nabla \lambda - \nabla \cdot (\rho \nabla \rho \otimes \mathbf{h}) + \nabla \cdot \boldsymbol{\Upsilon} + \rho \mathbf{g}] \cdot \boldsymbol{\alpha} dV_t \right. \\
& + \int_{\Omega_t} \left[ \frac{\lambda}{\rho} - \rho \frac{\partial u_F}{\partial \rho} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{h}) \right] \phi dV_t \\
& + \int_{\partial \Omega_t} [((\lambda + \rho \nabla \rho \cdot \mathbf{h}) \mathbf{1} - \boldsymbol{\Upsilon} + \mathbf{P}) \mathbf{n} + \rho (\mathbf{h} \times \nabla \rho) \times \mathbf{n}] \cdot \boldsymbol{\alpha} dS_t \\
& \left. + \int_{\partial \Omega_t} [(\rho \mathbf{h} + \mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}] \phi dS_t \right\} dt. \tag{53}
\end{aligned}$$

Como una consecuencia de aplicar el principio de Hamilton, para variaciones arbitrarias independientes  $\boldsymbol{\alpha}$  y  $\phi$ , la evolución del sistema en el dominio  $\Omega_t$  está dado por

$$\rho \mathbf{a} = \nabla \cdot (-\lambda \mathbf{1} + \boldsymbol{\Upsilon}) - \nabla \cdot (\rho \nabla \rho \otimes \mathbf{h}) + \rho \mathbf{g}, \tag{54}$$

la cual es una representación de conservación de momento. De manera similar, al anularse la segunda integral en (53), se determina el multiplicador de Lagrange

$$\lambda = \rho^2 \frac{\partial u_F}{\partial \rho} - \rho \nabla \cdot (\rho \mathbf{h}), \tag{55}$$

el primer término en (55) es la presión termodinámica en un modelo clásico, mientras que el segundo, resulta de la dependencia de la energía interna específica  $u_F$  con el gradiente de densidad.

Una ventaja de la formulación que se propone, es que las condiciones de frontera del sistema se obtienen como una consecuencia directa del principio de Hamilton, por lo tanto, de las integrales de superficie en la ecuación (53) las condiciones de frontera

están dadas por

$$((\lambda + \rho \nabla \rho \cdot \mathbf{h}) \mathbf{1} - \mathbf{\Upsilon} + \mathbf{P}) \mathbf{n} + \rho (\mathbf{h} \times \nabla \rho) \times \mathbf{n} = \mathbf{0}, \quad (56)$$

$$(\rho \mathbf{h} + \mathbf{r}) \cdot \mathbf{n} = 0. \quad (57)$$

las cuales expresan el balance entre todas las fuerzas del fluido en la superficie. De esta manera, la evolución del sistema está determinada por (54 – 55) sujeta a las condiciones dadas por las relaciones (56 – 57), que están caracterizadas por una presión externa  $\mathbf{P}$  y una energía de superficie externa  $\mathbf{r}$ .

### II.1.6. Modelo *phase-field*

Si suponemos que la densidad de energía libre por unidad de masa  $u_F$  (energía libre de Helmholtz por unidad de masa) tiene la forma de la ecuación para dos fases introducida por van der Waals (1893), y considerando a la densidad de masa  $\rho$  como la variable de fase,

$$u_F = \omega(\rho) + \frac{1}{2} \gamma(\rho) |\nabla \rho|^2, \quad (58)$$

donde  $\omega(\rho)$  representa el grueso de las fases y la función  $\gamma(\rho)$  toma la forma de un coeficiente para el gradiente de energía, proporcional al tamaño de la interfase. Expresiones similares para la energía libre específica han sido usadas por Cahn y Hilliard (1958), para modelar descomposición espinodal. Mas recientemente Jacqmin (2000) utiliza directamente este tipo de expresiones en su estudio de la dinámica de un fluido binario cerca de una pared sólida. Sustituyendo la relación (58) en la ecuación (30), la no homogeneidad del fluido se expresa como,

$$\mathbf{h} = \gamma(\rho) \nabla \rho. \quad (59)$$

De esta manera, la ecuación de evolución toma la forma

$$\rho \mathbf{a} = \nabla \cdot (-\lambda \mathbf{1} + \boldsymbol{\Upsilon}) - \nabla \cdot (\rho \gamma \nabla \rho \otimes \nabla \rho) + \rho \mathbf{g}, \quad (60)$$

donde el multiplicador de Lagrange está dado ahora explícitamente por

$$\lambda = \rho^2 \left( \frac{d\omega}{d\rho} + \frac{1}{2} \frac{d\gamma}{d\rho} |\nabla \rho|^2 \right) - \rho^2 \gamma \nabla^2 \rho. \quad (61)$$

Similarmente, al sustituir el valor de  $\mathbf{h}$  en las condiciones de frontera, la ecuación (56) se representa por

$$((\lambda + \rho \gamma |\nabla \rho|^2) \mathbf{1} - \boldsymbol{\Upsilon} + \mathbf{P}) \mathbf{n} = \mathbf{0}, \quad (62)$$

mientras que la condición de frontera (57), toma la forma

$$(\rho \gamma \nabla \rho + \mathbf{r}) \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (63)$$

y expresa un equilibrio entre la energía de superficie debida a los gradientes de densidad y la fuerza de línea externa  $\mathbf{r}$ , en la dirección normal a la superficie. En el caso de un fluido de dos fases en contacto con una superficie sólida, la relación (63) define el ángulo de contacto estático. Una condición de frontera similar es usada por Jacqmin (2000), usando la energía interfacial entre el sólido y el fluido como una función de la composición del fluido, para modelar el ángulo de contacto en equilibrio.

Es importante resaltar de nuevo que en este modelo las condiciones de frontera resultan de una manera natural al aplicar la formulación variacional.

### II.1.7. Solución estática

Al buscar soluciones estáticas de la ecuación de evolución (60), en ausencia de la gravedad  $\mathbf{g}$ , eliminando la aceleración  $\mathbf{a}$  y el tensor de esfuerzos viscosos  $\mathbf{\Upsilon}$ , se obtiene

$$\nabla\lambda + \nabla \cdot (\rho\gamma\nabla\rho \otimes \nabla\rho) = 0. \quad (64)$$

La relación (64) se simplifica al notar que el gradiente del multiplicador de Lagrange  $\lambda$  está dado por,

$$\nabla\lambda = \nabla(\rho^2\omega'(\rho)) + \nabla\left(\frac{1}{2}\rho^2\gamma'(\rho)|\nabla\rho|^2\right) - \nabla(\rho\nabla \cdot (\rho\gamma(\rho)\nabla\rho)). \quad (65)$$

Desarrollando el primer término en (65),

$$\nabla(\rho^2\omega') = \nabla(\rho(\rho\omega')) = \rho\nabla(\rho\omega') + \rho\omega'\nabla\rho = \rho[(\rho\omega')' + \omega']\nabla\rho, \quad (66)$$

que al simplificarlo obtenemos que,

$$\nabla(\rho^2\omega') = \rho(\rho\omega' + \omega)'\nabla\rho = \rho((\rho\omega)')'\nabla\rho = \rho\nabla((\rho\omega)'). \quad (67)$$

De la misma manera, al desarrollar el tercer término, tenemos que

$$\begin{aligned} -\nabla(\rho\nabla \cdot (\rho\gamma\nabla\rho)) &= -\nabla(\rho^2\gamma\nabla^2\rho + \rho\nabla\rho \cdot \nabla(\rho\gamma)) = -\nabla(\rho^2\gamma\nabla^2\rho + \rho(\rho\gamma)'\nabla\rho \cdot \nabla\rho) \\ &= -\nabla(\rho^2\gamma\nabla^2\rho + \rho(\rho\gamma)'|\nabla\rho|^2) \\ &= -\nabla(\rho^2\gamma\nabla^2\rho + \rho^2\gamma'|\nabla\rho|^2 + \rho\gamma|\nabla\rho|^2), \end{aligned} \quad (68)$$

sustituyendo (67 – 68) en (65) se obtiene el valor para  $\nabla\lambda$

$$\begin{aligned}\nabla\lambda &= \rho\nabla((\rho\omega)') + \frac{1}{2}\nabla(\rho^2\gamma'|\nabla\rho|^2) - \nabla(\rho^2\gamma\nabla^2\rho + \rho^2\gamma'|\nabla\rho|^2 + \rho\gamma|\nabla\rho|^2) \\ &= \rho\nabla((\rho\omega)') - \frac{1}{2}\nabla(\rho^2\gamma'|\nabla\rho|^2) - \nabla(\rho\gamma|\nabla\rho|^2) - \nabla(\rho^2\gamma\nabla^2\rho).\end{aligned}\quad (69)$$

Las componentes del tensor generado en (64), están dadas por

$$[\rho\gamma\nabla\rho \otimes \nabla\rho]_{ij} = \rho\gamma\frac{\partial\rho}{\partial x_i}\frac{\partial\rho}{\partial x_j},\quad (70)$$

por lo tanto el segundo término de la ecuación estática (64) se expresa por

$$\begin{aligned}[\nabla \cdot (\rho\gamma\nabla\rho \otimes \nabla\rho)]_i &= \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \left( 2\rho\gamma\frac{\partial\rho}{\partial x_i}\frac{\partial\rho}{\partial x_j} \right) \\ &= \sum_{j=1}^3 \left[ \rho\gamma\frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial\rho}{\partial x_i}\frac{\partial\rho}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial\rho}{\partial x_i}\frac{\partial\rho}{\partial x_j}\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho\gamma) \right] \\ &= (\nabla\rho \cdot \nabla(\rho\gamma))\frac{\partial\rho}{\partial x_i} + \rho\gamma\sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial\rho}{\partial x_i}\frac{\partial\rho}{\partial x_j} \right) \\ &= (\rho\gamma)'(\nabla\rho \cdot \nabla\rho)\frac{\partial\rho}{\partial x_i} + \rho\gamma\sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial\rho}{\partial x_i}\frac{\partial\rho}{\partial x_j} \right) \\ &= (\rho\gamma)'|\nabla\rho|^2\frac{\partial\rho}{\partial x_i} + \rho\gamma\sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial\rho}{\partial x_i}\frac{\partial\rho}{\partial x_j} \right),\end{aligned}\quad (71)$$

calculando la derivada en la sumatoria de (71)

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \right) &= \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \right) + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \right) \\
&= \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \right) + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \right) \\
&= \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_{j=1}^3 \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \right)^2 \right] \\
&= \nabla^2 \rho \nabla \rho + \frac{1}{2} \nabla (|\nabla \rho|^2), \tag{72}
\end{aligned}$$

por lo tanto, el segundo término en la ecuación estática (64) se expresa como

$$\nabla \cdot (\rho \gamma \nabla \rho \otimes \nabla \rho) = (\rho \gamma)' |\nabla \rho|^2 \nabla \rho + \rho \gamma \nabla^2 \rho \nabla \rho + \frac{1}{2} \rho \gamma \nabla (|\nabla \rho|^2), \tag{73}$$

ahora sumando (69, 73) se obtiene

$$\begin{aligned}
E_{est} &= \rho \nabla ((\rho \omega)') - \frac{1}{2} \nabla (\rho^2 \gamma' |\nabla \rho|^2) - \nabla (\rho \gamma |\nabla \rho|^2) - \nabla (\rho^2 \gamma \nabla^2 \rho) \\
&\quad + (\rho \gamma)' |\nabla \rho|^2 \nabla \rho + \rho \gamma \nabla^2 \rho \nabla \rho + \frac{1}{2} \rho \gamma \nabla (|\nabla \rho|^2), \tag{74}
\end{aligned}$$

reacomodando términos, la ecuación estática (64) toma la forma

$$E_{est} = R_1 + R_2 + R_3 \tag{75}$$

donde

$$R_1 = \rho \nabla ((\rho \omega)'), \tag{76}$$

$$R_2 = -\nabla (\rho^2 \gamma \nabla^2 \rho) + \rho \gamma \nabla^2 \rho \nabla \rho, \tag{77}$$

$$R_3 = -\frac{1}{2} \nabla (\rho^2 \gamma' |\nabla \rho|^2) - \nabla (\rho \gamma |\nabla \rho|^2) + (\rho \gamma)' |\nabla \rho|^2 \nabla \rho + \frac{1}{2} \rho \gamma \nabla (|\nabla \rho|^2). \tag{78}$$

Ahora se procede a simplificar la ecuación estática, primero se suman los términos

en el segundo renglón

$$\begin{aligned}
R_2 &= [-\rho^2\gamma\nabla(\nabla^2\rho) - \nabla(\rho^2\gamma)\nabla^2\rho + \rho\gamma\nabla^2\rho\nabla\rho] \\
&= [-\rho^2\gamma\nabla(\nabla^2\rho) - (2\rho\gamma + \rho^2\gamma')\nabla^2\rho\nabla\rho + \rho\gamma\nabla^2\rho\nabla\rho] \\
&= [-\rho^2\gamma\nabla(\nabla^2\rho) - (\rho\gamma + \rho^2\gamma')\nabla^2\rho\nabla\rho] \\
&= -\rho[\rho\gamma\nabla(\nabla^2\rho) + (\gamma + \rho\gamma')\nabla^2\rho\nabla\rho] \\
&= -\rho[\rho\gamma\nabla(\nabla^2\rho) + (\gamma\rho)'\nabla^2\rho\nabla\rho] \\
&= -\rho\nabla(\rho\gamma\nabla^2\rho), \tag{79}
\end{aligned}$$

posteriormente se suman los términos en el tercer renglón

$$\begin{aligned}
R_3 &= -\frac{1}{2}\nabla(\rho^2\gamma'|\nabla\rho|^2) - \nabla(\rho\gamma|\nabla\rho|^2) + \nabla(\rho\gamma)|\nabla\rho|^2 + \frac{1}{2}\rho\gamma\nabla(|\nabla\rho|^2) \\
&= -\frac{1}{2}\nabla(\rho^2\gamma')|\nabla\rho|^2 - \frac{1}{2}\rho^2\gamma'\nabla(|\nabla\rho|^2) - \nabla(\rho\gamma)|\nabla\rho|^2 - \rho\gamma\nabla(|\nabla\rho|^2) \\
&\quad + \nabla(\rho\gamma)|\nabla\rho|^2 + \frac{1}{2}\rho\gamma\nabla(|\nabla\rho|^2) \\
&= \left[-\frac{1}{2}\nabla(\rho^2\gamma') - \nabla(\rho\gamma) + \nabla(\rho\gamma)\right]|\nabla\rho|^2 + \left[-\frac{1}{2}\rho^2\gamma' - \rho\gamma + \frac{1}{2}\rho\gamma\right]\nabla(|\nabla\rho|^2) \\
&= \left[-\frac{1}{2}\nabla(\rho^2\gamma')\right]|\nabla\rho|^2 + \frac{1}{2}[-\rho^2\gamma' - \rho\gamma]\nabla(|\nabla\rho|^2) \\
&= \left[-\frac{1}{2}\nabla(\rho^2\gamma')\right]|\nabla\rho|^2 - \frac{1}{2}\rho[\rho\gamma' + \gamma]\nabla(|\nabla\rho|^2) \\
&= \left[-\frac{1}{2}\rho\gamma'\nabla(\rho) - \frac{1}{2}\rho\nabla(\rho\gamma')\right]|\nabla\rho|^2 - \frac{1}{2}\rho(\rho\gamma)'\nabla(|\nabla\rho|^2) \\
&= -\frac{1}{2}\rho[\gamma'\nabla(\rho) + \nabla(\rho\gamma')]| \nabla\rho|^2 - \rho(\rho\gamma)'\nabla(|\nabla\rho|^2) \\
&= -\frac{1}{2}(\rho[\nabla(\gamma) + \nabla(\rho\gamma')]| \nabla\rho|^2 - \rho(\rho\gamma)'\nabla(|\nabla\rho|^2)) \\
&= -\frac{1}{2}(\rho[\nabla(\rho\gamma)'\nabla\rho|^2 + (\rho\gamma)'\nabla(|\nabla\rho|^2)]) \\
&= -\frac{1}{2}\rho\nabla[(\rho\gamma)'\nabla\rho|^2]. \tag{80}
\end{aligned}$$

De esta manera, se cumple que

$$\begin{aligned} E_{est} &= \rho \nabla ((\rho\omega)') - \rho \nabla (\rho\gamma \nabla^2 \rho) - \frac{1}{2} \rho \nabla [(\rho\gamma)' |\nabla \rho|^2] \\ &= \rho \nabla \left[ (\rho\omega)' - \rho\gamma \nabla^2 \rho - \frac{1}{2} (\rho\gamma)' |\nabla \rho|^2 \right], \end{aligned} \quad (81)$$

por lo tanto, la ecuación estática, se reduce a

$$\rho \nabla \left[ (\rho\omega)' - \rho\gamma \nabla^2 \rho - \frac{1}{2} (\rho\gamma)' |\nabla \rho|^2 \right] = 0, \quad (82)$$

integrando una vez, se obtiene la ecuación estática para el modelo *phase-field*

$$(\rho\omega)' - \rho\gamma \nabla^2 \rho - \frac{1}{2} (\rho\gamma)' |\nabla \rho|^2 = K. \quad (83)$$

La constante de integración  $K$  es el potencial químico, que en el contexto de este modelo representa los cambios de la energía libre con respecto a la densidad. Esta expresión es similar al potencial químico encontrado directamente de los perfiles de la interfase en equilibrio que minimizan la energía libre en el trabajo de Jacqmin (2000).

Para un fluido de dos fases, se considera a  $\rho_1$  como el valor de la densidad para una de las fases y a  $\rho_2$  como el valor para la otra. De esta manera, la función doble potencial toma la forma

$$\rho\omega = [A(\rho - \rho_1)(\rho - \rho_2)]^2, \quad (84)$$

donde  $A$  es una constante. La gráfica de la función doble potencial se muestra en la Figura 2.

Generalmente, el coeficiente del gradiente en la ecuación *phase-field* se considera con un valor constante, ver por ejemplo Jacqmin (2000), Lowengrub y Truskinovsky (1998), Badalassi *et al.* (2003) entre otros. De manera similar, aquí se considera que  $\rho\gamma(\rho) = B^2$ , donde  $B^2$  es una constante, por lo tanto la ecuación para el modelo



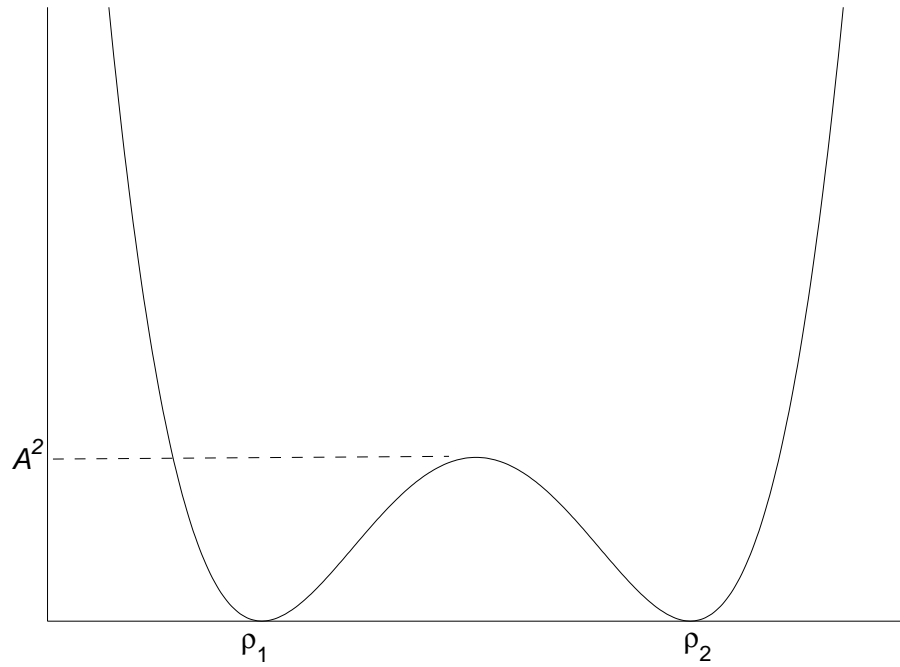


Figura 2: Función doble potencial.

*phase-field* se reduce a

$$(\rho\omega)' - B^2\nabla^2\rho = K, \quad (85)$$

el primer término de la izquierda es la derivada de una función doble potencial y es comúnmente referido como el término homogéneo, mientras que el segundo representa los cambios de densidad en la interfase. La ecuación (85) es equivalente a la ecuación estacionaria para un fluido binario con la concentración como parámetro de orden usada por Cahn y Hilliard (1958).

Considerando a  $f(\rho)$  como la derivada de la función doble potencial, entonces se cumple que

$$-B^2\nabla^2\rho + f(\rho) = K, \quad (86)$$

de esta manera  $f(\rho)$  toma la forma

$$\begin{aligned} f(\rho) &= (\omega\rho)' = \frac{d}{d\rho} [A^2 (\rho - \rho_1)^2 (\rho - \rho_2)^2] \\ &= 2A^2 (\rho - \rho_1) (\rho - \rho_2) [2\rho - (\rho_1 + \rho_2)], \end{aligned} \quad (87)$$

lo cual muestra claramente que los valores extremos de la función doble potencial  $(\rho\omega)$  están en  $\rho = \rho_1$ ,  $\rho = \rho_2$  y  $\rho = (\rho_1 + \rho_2)/2$ .

De la misma manera, la condición de frontera (63) se expresa por

$$(B^2\nabla\rho + \mathbf{r}) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0}, \quad (88)$$

al considerar que el coeficiente del gradiente es constante.

### II.1.8. Modelo adimensional

El análisis dimensional es una herramienta útil, en la cual se considera que las cantidades físicas tienen dimensiones y las leyes físicas deben permanecer sin alteración cuando se cambian las unidades fundamentales para medir las dimensiones de las cantidades físicas. Al llevar a la forma adimensional una ecuación se encuentran parámetros de los que depende la solución y la física no cambia si estos mantienen su valor. Además, el análisis adimensional sirve para determinar los términos importantes de una ecuación. Una descripción del análisis dimensional y de la utilidad del modelado basado en escalas, se puede encontrar en el texto de Szirtes (2006). Al introducir una escala para la densidad y una escala de longitud  $L$  típica de las dimensiones del sistema, quedan definidas las siguientes variables adimensionales,

$$\bar{\rho} = \frac{\rho - \rho_1}{\rho_2 - \rho_1}, \quad \bar{x} = \frac{x}{L}, \quad \bar{y} = \frac{y}{L}. \quad (89)$$

Con esto, el Laplaciano  $\nabla^2 \rho$  y el Laplaciano en forma adimensional  $\bar{\nabla}^2 \bar{\rho}$  están relacionados por

$$\nabla^2 \rho = \frac{1}{L^2} (\rho_2 - \rho_1) \bar{\nabla}^2 \bar{\rho}. \quad (90)$$

La forma adimensional de la derivada de la función doble potencial (87) queda como

$$\bar{f} = 2A^2 (\rho_2 - \rho_1)^3 \bar{\rho} (\bar{\rho} - 1) (2\bar{\rho} - 1). \quad (91)$$

Al sustituir estas cantidades en la relación (85), la ecuación del modelo adimensional toma la forma

$$-\varepsilon \bar{\nabla}^2 \bar{\rho} + \kappa \bar{\rho} (\bar{\rho} - 1) (2\bar{\rho} - 1) = K, \quad (92)$$

en donde las constantes  $\varepsilon$  y  $\kappa$  están dadas por,

$$\varepsilon = \frac{B^2}{L^2} (\rho_2 - \rho_1) \quad \text{y} \quad \kappa = 2A^2 (\rho_2 - \rho_1)^3. \quad (93)$$

Dividiendo (92) entre  $\kappa$ , la ecuación en forma adimensional que modela un fluido de dos fases, separados por una interfase difusa, queda como

$$-\bar{\varepsilon} \bar{\nabla}^2 \bar{\rho} + \bar{\rho} (\bar{\rho} - 1) (2\bar{\rho} - 1) = \bar{K}, \quad (94)$$

donde

$$\bar{K} = \frac{K}{\kappa} = \frac{K}{2A^2 (\rho_2 - \rho_1)^3}, \quad (95)$$

es el potencial químico adimensional. La otra cantidad adimensional,

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{2L^2} \frac{B^2}{A^2 (\rho_2 - \rho_1)^2}, \quad (96)$$

representa la razón entre una longitud asociada a la región interfacial y cierta longitud macroscópica del sistema.

Al introducir las escalas dadas por (89), la condición de frontera (63) queda como,

$$(\varepsilon L \bar{\nabla} \bar{\rho} + \mathbf{r}) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0}. \quad (97)$$

Como antes, definimos el vector

$$\bar{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{\varepsilon L} \quad (98)$$

que representa, de forma adimensional, la contribución de las fuerzas externas sobre la frontera. De esta manera, la condición de frontera (63) en forma adimensional se expresa como

$$(\bar{\nabla} \bar{\rho} + \bar{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0}. \quad (99)$$

Omitiendo las barras en (94, 99), la descripción del modelo en forma adimensional que se usará en este trabajo, queda descrita por la siguiente relación

$$-\varepsilon \nabla^2 \rho + \rho(\rho - 1)(2\rho - 1) = K, \quad (100)$$

sujeta a la condición de frontera

$$(\nabla \rho + \mathbf{r}) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0}. \quad (101)$$

Las dos fases estables del sistema corresponden a los valores extremos del parámetro de orden  $\rho$ , una de ellas queda descrita por el valor  $\rho = 1$ , y para la otra  $\rho = 0$ . Además, el valor  $\rho = 1/2$  corresponde a la tercer solución homogénea, la cual es inestable.

La dependencia en el gradiente de densidad en (100) da lugar a la existencia de un grosor finito de una interfase, así como la existencia de una energía de superficie.

## II.2. Fluido de dos fases en contacto con una superficie sólida

Se denomina tensión superficial al fenómeno por el cual la superficie de un líquido tiende a comportarse como si fuera una delgada película elástica. A nivel microscópico, la tensión superficial se debe a que las fuerzas que afectan a las moléculas son diferentes en el interior del líquido y en su superficie. El principal efecto de la tensión superficial es minimizar su superficie para un volumen dado. Esta es la causa por la cual las burbujas tienen una superficie con forma esférica.

Energéticamente las moléculas situadas en la superficie tienen una mayor energía promedio que las situadas en el interior, por lo tanto la tendencia del sistema será disminuir la energía total, y ello se logra disminuyendo el número de moléculas situadas en la superficie, lo cual reduce el área hasta el mínimo posible.

Al considerar un fluido de dos fases sobre una superficie sólida, la línea de contacto estática se forma en la intersección entre la interfase del fluido y el sólido, y el ángulo de contacto estático es el ángulo formado por la interfase y el sólido medido del lado de la fase líquida como se muestra en la Figura 3, una discusión detallada se encuentra en Dussan (1979).

Para que el sistema se encuentre en equilibrio estático, el balance de fuerzas horizontales debe ser cero. En la descripción clásica del continuo, el ángulo de contacto en equilibrio  $\theta_c$  se define por la relación de Young

$$\sigma_{lg} \cos \theta_c = \sigma_{gs} - \sigma_{ls}, \quad (102)$$

donde  $\sigma_{ls}$ ,  $\sigma_{gs}$  y  $\sigma_{lg}$  son las tensiones superficiales entre el sólido y el líquido, el sólido y la fase gaseosa, y el líquido y la fase gaseosa respectivamente.

De esta manera, la capacidad de un líquido para humedecer un sólido, es una función

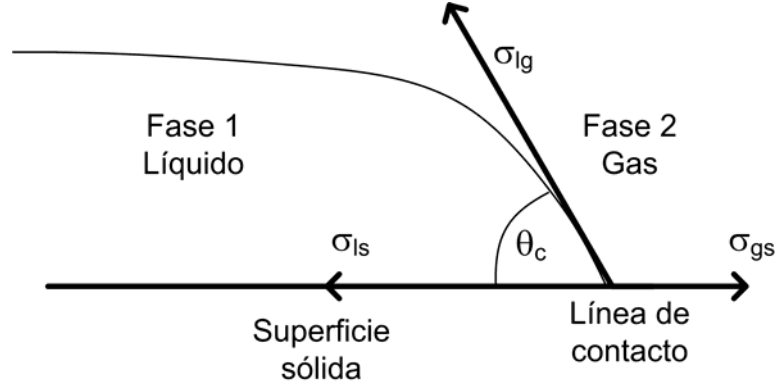


Figura 3: Fuerzas que actúan en una línea de contacto estática

de la energía de superficie de la interfase solido-gas, líquido-gas, y sólido-líquido. Una discusión detallada se encuentra en de Gennes (1985).

El fenómeno de humedecimiento o secado de un sólido por un líquido se puede entender al considerar el estudio del ángulo de contacto. Para modelar un fluido de dos fases usando el modelo *phase-field* dado por (100), en el grueso de las fases la densidad  $\rho$  tiene los valores en equilibrio. La condición de frontera en la superficie de contacto con el sólido, está dada por el valor normal del vector  $\mathbf{r}$  que aparece en (101), como la energía de superficie ocasionada por las fuerzas de adhesión entre la pared sólida y el fluido, definiendo  $\mathbf{r} \cdot \mathbf{n} = C\rho(\rho - 1)$  la condición de frontera en la interfase entre el fluido y el sólido está dada por

$$\nabla\rho \cdot \mathbf{n} = C\rho(\rho - 1), \quad (103)$$

donde  $\mathbf{n}$  es el vector normal unitario a la pared sólida, y  $C$  es una constante que relaciona la energía de superficie entre el fluido y el sólido, con el ángulo de contacto estático.

Cuando  $C = 0$  el ángulo de contacto es  $\theta_c = \pi/2$ , lo cual implica que hay un equilibrio entre las fuerzas cohesivas en el líquido y las fuerzas adhesivas en la interfase entre el sólido y el líquido. Un fluido de dos fases sobre una superficie sólida con ángulo

de contacto  $\theta_c = \pi/2$  se muestra en la Figura 4.

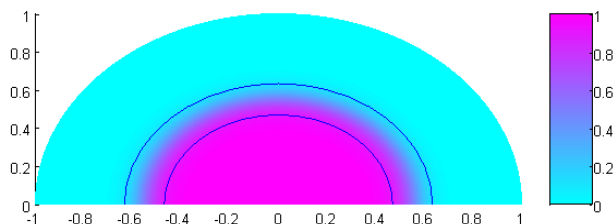


Figura 4: Ángulo de contacto igual a  $\pi/2$

Un valor de  $C < 0$  corresponde a un ángulo de contacto  $\theta_c < \pi/2$ , en este caso las fuerzas adhesivas son más fuertes que las cohesivas entonces ocurre humedecimiento en la superficie del sólido. En esta situación se presenta el conocido fenómeno de capilaridad. La Figura 5 muestra un fluido de dos fases con un ángulo de contacto menor a  $\pi/2$ .

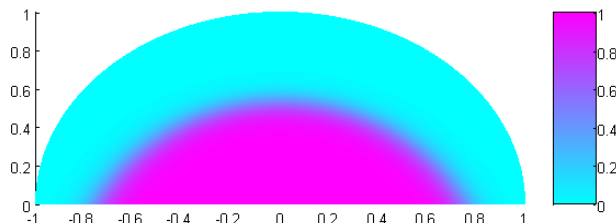


Figura 5: Ángulo de contacto menor a  $\pi/2$ .

Un ángulo de contacto mayor a  $\pi/2$ , se modela con  $C > 0$ , en esta situación las fuerzas adhesivas son más débiles que las cohesivas. La Figura 6 muestra un ángulo de contacto mayor a  $\pi/2$ .

Un aspecto importante en todos los procesos de ángulo de contacto, es la histéresis del ángulo de contacto, que se forma por un rango de ángulos de contacto estáticos  $\theta_c$

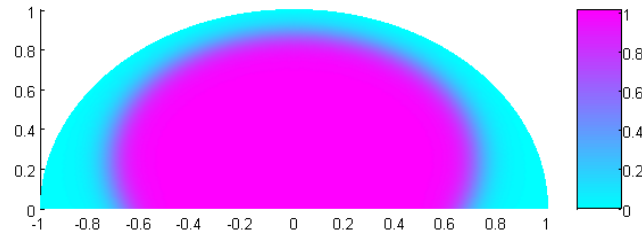


Figura 6: Ángulo de contacto mayor a  $\pi/2$ .

para los cuales una configuración estática es posible,  $\theta_R \leq \theta_c \leq \theta_A$ , donde  $\theta_A$  es el ángulo de contacto de avance, y  $\theta_R$  es el ángulo de contacto de retroceso. Si la configuración del sistema cambia tal que  $\theta_c > \theta_A$ , la línea de contacto debe avanzar y si  $\theta < \theta_R$  la línea de contacto debe retroceder. El origen de la histéresis es una consecuencia de la no homogeneidad de la superficie sólida. Este fenómeno es modelado combinando las dos condiciones de frontera anteriores como se muestra en la Figura 7.

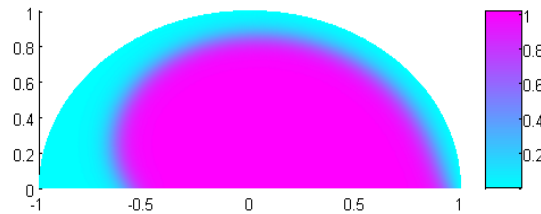


Figura 7: Histéresis en la línea de contacto.

En el capítulo III se presentan resultados para el modelo *phase-field* en una dimensión, mientras que en capítulo IV se presentan para dos dimensiones usando un proceso de continuación con adaptación de malla.



## Capítulo III

# Adaptación de malla en una dimensión

En los métodos espectrales de colocación, conocidos también como pseudoespectrales, la solución de una ecuación diferencial se aproxima por un interpolante global, el cual es generalmente un polinomio de grado alto, ya sea algebraico o trigonométrico. Las derivadas en la ecuación diferencial son aproximadas por diferenciación exacta del interpolante, y los coeficientes desconocidos en el interpolante se obtienen haciendo el residual igual a cero en puntos específicos del dominio del problema, llamados puntos de colocación. Como la interpolación y la diferenciación son operaciones lineales, los valores de la derivada de una función en el conjunto de puntos de colocación, se calculan multiplicando la matriz de diferenciación resultante por el vector que se obtiene al evaluar la función en los puntos de colocación. En la matriz de diferenciación de Chebyshev el dominio es el intervalo  $[-1, 1]$ , el interpolante es un polinomio algebraico, y los puntos de colocación pueden ser los puntos extremos o los ceros de un polinomio de Chebyshev. En este trabajo se usan los puntos extremos conocidos como puntos de Chebyshev-Gauss-Lobatto (CGL).

La principal ventaja de los métodos pseudoespectrales es que la rapidez de convergencia (es decir el orden de precisión), sólo depende de la suavidad de la solución. Esto significa que la solución numérica de una ecuación diferencial tiene alta precisión para problemas cuya solución es suficientemente suave (Boyd, 2001; Canuto *et al.*, 1988). Los métodos pseudoespectrales tienen convergencia exponencial, mientras que los métodos

de diferencias finitas y elemento finito son métodos locales y tienen un rango de convergencia algebraico. De esta manera, usando métodos pseudoespectrales, se puede obtener una precisión alta en la solución de una ecuación diferencial, con relativamente pocos puntos de colocación. En las desventajas se tiene que las matrices de diferenciación son densas de elementos diferentes de cero, mientras que en diferencias finitas y elemento finito las matrices son escasas. Además, estas matrices pueden presentar errores de redondeo cuando el número de puntos de colocación es grande. También se debe tener en cuenta que los métodos espectrales tienen menos flexibilidad para dominios irregulares (Peyret, 2002).

Cuando la solución tiene regiones de variación alta, exhibiendo un comportamiento tipo escalón tales como capas de transición en el interior del dominio o capas límite (conocidas en inglés como *interior layers* y *boundary layers* respectivamente), la precisión de los métodos numéricos, incluyendo métodos pseudoespectrales se degrada y se pueden presentar oscilaciones. Este tipo de problemas se presentan en diversas áreas de aplicación, tales como combustión, dinámica de fluidos, solidificación, propagación de ondas, modelado de interfase difusa, por mencionar algunas. La solución numérica de estos problemas requiere una malla extremadamente fina para capturar con precisión la solución en las regiones en que se presentan los gradientes altos. Con la finalidad de aumentar la precisión y al mismo tiempo decrementar el costo computacional en comparación con un método estándar con una malla muy fina, es necesario implementar un algoritmo para la adaptación de la malla.

En general, hay dos estrategias básicas para la adaptación de la malla, el refinamiento local de la malla o la redistribución de la malla, conocida como refinamiento de malla con movimiento de nodos. En el primer enfoque, se agregan puntos para enriquecer localmente la malla, donde la solución tiene gradientes altos y así lograr una mayor precisión. En el segundo enfoque, el número de puntos es fijo y su posición se ajusta

dinámicamente para mejorar la precisión en la solución numérica.

Cuando se tiene conocimiento previo de las características de la solución, por ejemplo la posición de la capa de transición, una transformación de coordenadas explícita con un número pequeño de parámetros, puede usarse para adaptar la malla (Bayliss *et al.*, 1995a,b). En caso contrario una transformación implícita de coordenadas es necesaria para capturar la posición de la capa de transición y adaptar la malla.

En este trabajo, la adaptación se realiza aplicando refinamiento de malla con movimiento de nodos, basado en el principio de equidistribución, usado originalmente por de Boor (1973), para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias con valores en la frontera. La técnica de equidistribución se basa en una transformación de coordenadas, la cual mueve puntos de regiones con gradientes pequeños, hacia regiones donde la solución tiene gradientes más grandes. A partir de su introducción, el principio de equidistribución ha sido usado en diversos trabajos para resolver problemas singularmente perturbados con valores en la frontera. Basándose en el método de diferencias finitas en el trabajo de Qiu *et al.* (2000) se presenta un análisis del error para la solución de un problema con valores en la frontera perturbado singularmente, la adaptación de la malla se realiza empleando equidistribución con una función monitor basada en la longitud de arco.

A diferencia de métodos tales como elemento finito, volumen finito y diferencias finitas, los métodos pseudoespectrales son muy sensibles a la adaptación de la malla, debido a que la precisión espectral además de depender de la suavidad de la solución, también depende del suavizado de la transformación de coordenadas. Por lo tanto, para lograr alta precisión, los puntos CGL deben mapearse suavemente en la malla física. Para este trabajo, la influencia de esta transformación de coordenadas es de vital importancia en la precisión del método pseudoespectral de Chebyshev.

La ecuación que resulta de aplicar el principio de equidistribución es no lineal y se

debe resolver usando métodos numéricos conocidos, como el método de Newton. En este trabajo, se implementa un algoritmo iterativo con un número fijo de iteraciones para resolver la ecuación de equidistribución.

El algoritmo de equidistribución en una dimensión se implementa con diferentes funciones monitor y se aplica a un problema de prueba lineal que presenta una capa interna. Posteriormente, se muestra la solución de un modelo *phase-field* en una dimensión y el modelado en dos dimensiones de una burbuja líquida sobre una superficie sólida, que al representarse en coordenadas polares requiere adaptación de malla en una sola dimensión. Una extensión del principio de equidistribución en dos dimensiones se encuentra en Huang y Sloan (1994) y es usada por Mackenzie (1998) aplicando el método de volumen finito.

### III.1. Método de colocación de Chebyshev

En esta sección se presenta una breve descripción del método de colocación de Chebyshev, un estudio más detallado se puede consultar en Peyret (2002), Boyd (2001) y Canuto *et al.* (1988), entre otros. Uno de los objetivos de este trabajo es obtener alta precisión en la solución de los problemas planteados, por lo tanto es importante revisar las estrategias para calcular la matriz de diferenciación y de esta manera usar la que genere menor error de redondeo.

La aproximación numérica  $u_N(x)$  de la solución  $u(x)$  de una ecuación diferencial definida en  $x \in [-1, 1]$ , con el método de colocación de Chebyshev, está dada por

$$u_N(x) = \sum_{k=0}^N \hat{u}_k T_k(x), \quad (104)$$

donde  $T_k(x)$  es el polinomio de Chebyshev del primer tipo de grado  $k$ , definido por

$$T_k(x) = \cos(k \cos^{-1} x).$$

Los coeficientes espectrales  $\hat{u}_k$ ,  $k = 0, \dots, N$  se determinan al hacer que  $u_N(x)$  coincida con  $u(x)$  en los puntos de colocación. Típicamente, estos son los puntos de Chebyshev-Gauss-Lobatto,

$$x_i = \cos \frac{\pi i}{N} \quad i = 0, \dots, N. \quad (105)$$

Se observa que el polinomio de grado  $N$  definido en (104) es el polinomio de interpolación de Lagrange basado en el conjunto de puntos de colocación  $\{x_i\}$ . Entonces en la implementación matricial de los métodos pseudoespectrales la solución aproximada  $u_N$  se puede calcular usando el polinomio de interpolación en su forma Lagrangiana

$$u_N(x) = \sum_{i=0}^N u(x_i) \psi_i(x), \quad (106)$$

con  $u_N(x_i) = u(x_i)$  y  $\psi_i(x)$  es el polinomio de Lagrange de grado  $N$  para los puntos CGL, definido por

$$\psi_i(x) = \frac{(-1)^{i+1} (1-x^2) T'_N(x)}{c_i N^2 (x-x_i)}, \quad (107)$$

donde  $c_i = 1$  para  $1 \leq i \leq N-1$  y  $c_0 = c_N = 2$ . Los elementos de la matriz de diferenciación de Chebyshev  $D$  son calculados tomando la derivada analítica de  $\psi_i(x)$  y evaluándola en los puntos de colocación  $\{x_i\}$ ,

$$D_{ij} = \frac{c_i (-1)^{i+j}}{c_j (x_i - x_j)}, \quad i \neq j, \quad (108)$$

$$D_{ii} = \frac{-x_i}{2(1-x_i^2)}, \quad i \neq 0, N, \quad (109)$$

$$D_{00} = -D_{NN} = \frac{2N^2 + 1}{6}. \quad (110)$$

Las matrices de diferenciación para derivadas de orden superior

$$\left. \frac{d^l u}{dx^l} \right|_{x=x_j} = \sum_{i=0}^N D_{ij} u(x_j) \quad l = 0, 1, 2, \dots, N$$

se pueden calcular con expresiones explícitas o tomando potencias de la matriz de diferenciación de Chebyshev, es decir  $D^{(l)} = (D)^l$ . Cabe señalar que esta igualdad no se cumple para todos los conjuntos de puntos de colocación y/o polinomios de interpolación. Canuto *et al.* (1988), Bayliss *et al.* (1994) entre otros, han notado que para valores grandes de  $N$  la implementación directa de las relaciones (108 – 110) resulta en errores de redondeo importantes en el cálculo de los elementos de la matriz  $D$ . Diversas estrategias han sido implementadas para reducir este error de redondeo, algunas de ellas se explican a continuación.

Con la finalidad de evitar el cálculo de diferencias pequeñas ( $x_i - x_j$ ), que son una de las causas del error de redondeo en las matrices de diferenciación, Tang y Trummer (1996) usan las siguientes relaciones trigonométricas,

$$x_i - x_j = 2 \sin \frac{\pi}{2N} (i + j) \sin \frac{\pi}{2N} (j - i), \quad (111)$$

$$1 - x_i^2 = \sin^2 \left( \frac{\pi i}{N} \right), \quad (112)$$

que al sustituirlas en (108) y (109), se tiene que

$$D_{ij} = -\frac{c_i}{c_j} \frac{(-1)^{i+j}}{2 \sin((i+j)\pi/(2N)) \sin((i-j)\pi/(2N))}, \quad i \neq j, \quad (113)$$

$$D_{ii} = \frac{-\xi_i}{2 \sin^2(i\pi/N)}, \quad i \neq 0, N. \quad (114)$$

Con estas relaciones (113 – 114), se calcula la parte triangular superior izquierda de  $D$

(con  $i + j \leq N$ ). Mientras que con la propiedad de simetría

$$D_{N-i,N-j} = D_{ij}, \quad (115)$$

se calculan el resto de los elementos de la matriz de diferenciación  $D$ .

Por otro lado, una causa de error de redondeo fue identificada en el trabajo de Bayliss *et al.* (1994). Los autores observaron que al multiplicar la matriz de diferenciación de Chebyshev (108 – 110) por una constante, el resultado no es exactamente cero, lo cual implica que la suma de los elementos de cada renglón de la matriz de diferenciación tampoco es exactamente cero, como se esperaba. Ellos proponen una estrategia de corrección conocida en inglés como *negative sum trick*, que consiste en calcular los elementos fuera de la diagonal principal, y con ellos calcular los elementos de la diagonal

$$D_{ii} = - \sum_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^N D_{ij}, \quad (116)$$

de esta manera se consigue que la suma de los elementos de cada renglón de la matriz de diferenciación sean exactamente cero. Finalmente, en el trabajo de Baltensperger y Trummer (2003) se muestra que la forma más precisa de aproximar la derivada de una función, por medio de la matriz de diferenciación de Chebyshev, es usar las fórmulas estándar (108 – 110) , aplicando la estrategia de *negative sum trick*. En total acuerdo con las recomendaciones de Peyret (2002), quien indica que el uso de las relaciones trigonométricas en la técnica de corrección de Bayliss *et al.* (1994) no da mejoras en los resultados y cuando lo hace son insignificantes. En este trabajo, seguimos precisamente este enfoque para calcular la matriz de diferenciación de Chebyshev.

### III.2. Discretización adaptativa de la malla

Cuando una ecuación diferencial con una capa de transición se resuelve numéricamente usando una malla con puntos no adaptados a la solución, se pueden generar soluciones espurias (ver Budd *et al.* (1998)). Además, la solución se puede contaminar con oscilaciones de tipo Gibbs, reduciendo significativamente la precisión de la solución. Si la ecuación diferencial es no lineal, la dependencia de la solución en la calidad de la malla se incrementa (Carey, 1997, p. 189). Por lo tanto, para encontrar una buena solución numérica, la malla se debe adaptar adecuadamente a la solución.

Cuando se usa el método de colocación basado en el polinomio de interpolación de Lagrange dado por (106), se podría pensar en usar un conjunto de puntos de colocación  $\{x_i\}$ , tal que los puntos se agrupen en la capa de transición, en vez de usar los puntos CGL y de esta manera resolver la ecuación en el espacio físico. Se sabe, que tal aproximación polinomial no necesariamente converge cuando  $N \rightarrow \infty$  (Funaro, 1992). El hecho de que la distribución de puntos no deba ser arbitraria se ejemplifica con el problema de Runge, en el cual se observa que la aproximación polinomial  $u_N(x)$  de  $u(x) = 1/(1+x^2)$  en  $[-5, 5]$ , basada en puntos igualmente espaciados, es tal que el error  $|u(x) - u_N(x)|$  no decrece, aunque se tenga una alta cantidad de puntos de colocación. Lo anterior significa que los métodos espectrales de colocación, con una distribución arbitraria de puntos puede resultar en una convergencia pobre. Por lo tanto, la concentración de puntos en la región de gradientes altos se debe obtener por medio de una transformación de coordenadas suavizada apropiadamente, usando una distribución de puntos provenientes de los puntos CGL en el espacio computacional.

En general, la adaptación de malla se lleva a cabo por medio de una transformación de coordenadas biyectiva del dominio computacional  $D_c$  al dominio físico  $D_p$

$$\mathbf{x} = g(\boldsymbol{\xi}; \boldsymbol{\lambda}), \quad \mathbf{x} \in D_p, \quad \boldsymbol{\xi} \in D_c, \quad (117)$$



donde  $\boldsymbol{\lambda}$  es una familia de parámetros. La distribución de nodos en el dominio computacional  $D_c$  es fija, mientras que en  $D_p$  los nodos se reacomodan de acuerdo a las características de la solución de la ecuación diferencial, bajo la transformación de coordenadas, que puede ser un mapeo analítico o una transformación numérica.

Considerando el caso en una dimensión, tomando a  $\{\xi_i\}_{i=0}^{i=N}$  como los puntos CGL y asumiendo que  $D_p$  es el intervalo  $[-1, 1]$ ,

$$x_i = x(\xi_i) = g(\xi_i; \boldsymbol{\lambda}) \quad (118)$$

mientras que los puntos en la frontera se mapean en si mismos. Si  $u(x)$  es la solución en el dominio físico y  $v(\xi) = u(x(\xi))$  es la solución en el dominio computacional, la primera derivada en el espacio físico está dada por,

$$\frac{du}{dx} = \frac{1}{x_\xi} \frac{dv}{d\xi}, \quad (119)$$

donde  $x_\xi = dx/d\xi$ . Las derivadas de orden superior, se calculan repitiendo el uso de la regla de la cadena. De esta manera, la relación para la segunda derivada entre el espacio físico y el computacional está dada por,

$$\frac{d^2u}{dx^2} = \frac{1}{(x_\xi)^2} \frac{d^2v}{d\xi^2} - \frac{x_{\xi\xi}}{(x_\xi)^3} \frac{dv}{d\xi}. \quad (120)$$

Si  $u(x)$  tiene una capa de transición, significa que tiene una región muy pequeña donde la solución no es suave, que resulta en la pérdida de la alta precisión de los métodos pseudoespectrales. Por lo tanto, es necesario elegir una transformación de coordenadas apropiada  $x = x(\xi)$ , tal que  $v(x(\xi))$  sea lo suficientemente suave y la aproximación pseudoespectral recupere la alta precisión en todo el dominio. En la Figura 11 se muestra la malla en el espacio físico y en el espacio computacional, se observa que en la malla en el espacio físico los puntos se concentran en la capa de transición

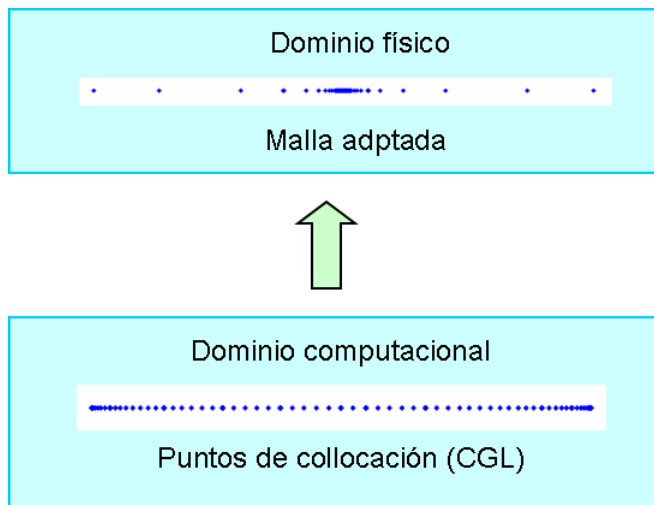


Figura 8: Malla en el espacio físico y en el espacio computacional.

Algunos mapeos analíticos han sido propuestos e implementados para mejorar la precisión de los métodos espectrales.

Kosloff y Tal-Ezer (1993), introdujeron el mapeo de un parámetro

$$x = \frac{\sin^{-1}(\lambda\xi)}{\sin^{-1}\lambda}, \quad 0 < \lambda < 1, \quad (121)$$

que mueve los puntos de colocación de Chebyshev  $\xi_i$  a puntos de interpolación más uniformes  $x_i$  en el espacio físico. Para valores apropiados del parámetro  $\lambda$ , el espacio mínimo cerca de la frontera es incrementado de  $O(N^{-2})$  a  $O(N^{-1})$ , dando como resultado mejores propiedades de estabilidad y disminución en los errores de redondeo, que al usar los puntos CGL en el espacio físico con el método de Chebyshev tradicional. Este mapeo (121), ha sido utilizado por Don y Solomonoff (1997) para mejorar la precisión de derivadas de orden superior. Mientras que Mead y Renaut (2002) estudiaron las propiedades del parámetro  $\lambda$  que aparece en (121), que permiten mejorar la precisión, resolución y estabilidad, en la solución numérica de la ecuación de onda en una dimensión.

En general, el método de Chebyshev con el mapeo definido por la relación (121) ha mostrado mejores propiedades de estabilidad y errores de redondeo menos severos, que el método de Chebyshev tradicional. Sin embargo, este mapeo no es eficiente para problemas que tengan solución con un comportamiento de cambios bruscos, debido a que no agrupa puntos en las regiones de gradientes altos.

De la relación (105), se observa que los puntos CGL se agrupan en la frontera, por lo tanto el método de colocación de Chebyshev se adapta naturalmente a la solución de problemas con capas límite, es decir donde los gradientes más altos se concentran en la frontera. Sin embargo, puede suceder que la capa límite sea tan delgada, que para resolverla sea necesario un número grande de puntos de colocación, esto resulta en errores de redondeo en el cálculo de las matrices y un alto costo computacional. Para este tipo de problemas, Tang y Trummer (1996) introdujeron una sucesión de mapeos usando funciones *seno*, dada por la recurrencia

$$g_0(\xi) = \xi, \quad g_m(\xi) = \sin\left(\frac{\pi}{2}g_{m-1}(\xi)\right), \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (122)$$

Ellos obtuvieron alta precisión con un número de puntos de colocación razonablemente pequeño.

En su estudio de capas de transición en propagación de flamas, Bayliss *et al.* (1995b) introducen el mapeo de dos parámetros

$$x = g(\xi; \boldsymbol{\lambda}) = \lambda_0 + \tan(a_1(\xi - a_0)) / \lambda_1, \quad (123)$$

donde  $\lambda_0$  indica la posición de la capa de transición, mientras que  $a_0$  y  $a_1$  son elegidos de tal manera que el intervalo completo es mapeado en si mismo, y que la relación (123) resulte en una función monótona creciente de  $\xi$ , para que no haya cruzamiento de nodos. Por otra parte, el parámetro  $\lambda_1$  controla la cantidad de puntos en la vecindad de

la capa de transición, definiendo el grado de adaptación de la malla. Este parámetro se escala inversamente con  $N$ , lo cual mantiene la misma proporción de puntos en la capa de transición con respecto al resto del dominio. La forma de los parámetros  $a_0$  y  $a_1$  es

$$a_0 = \frac{\eta - 1}{\eta + 1}, \quad a_1 = \tan^{-1}(\lambda_1(1 + \lambda_0)) / (1 - a_0), \quad (124)$$

donde

$$\eta = \tan^{-1}(\lambda_1(1 + \lambda_0)) / \tan^{-1}(\lambda_1(1 - \lambda_0)). \quad (125)$$

Para el mapeo definido por las relaciones (123 – 125), la forma explícita de las primeras dos derivadas de la transformación están dadas por

$$x_\xi = \frac{a_1}{\lambda_1} (\tan^2((\xi - a_0) a_1) + 1), \quad (126)$$

$$x_{\xi\xi} = 2 \frac{a_1^2}{\lambda_1} (\tan((\xi - a_0) a_1)) (\tan^2((\xi - a_0) a_1) + 1). \quad (127)$$

Cuando la posición de la capa de transición no se conoce, el mapeo anterior (123 – 125) no es una buena herramienta, para obtener alta precisión en la solución numérica, debido a que se pueden agrupar puntos en una región de variación pequeña. En este caso, se necesita un método adaptativo con una transformación de coordenadas que capture la posición de la capa de transición.

### III.2.1. Principio de equidistribución

Un enfoque intuitivo para encontrar la solución numérica de ecuaciones diferenciales con gradientes locales altos en una porción pequeña del dominio, está definido por el principio de equidistribución. Básicamente, este método busca distribuir uniformemente una función monitor sobre el dominio del problema. La función monitor está basada en el error computacional esperado asociado a las regiones de gradientes altos. Por lo

tanto, la equidistribución tiene la propiedad de generar mallas con un espaciado que está relacionado con la razón de cambio de la solución numérica.

La malla  $\{x_i\}_{i=1}^{N+1}$  con  $-1 = x_1 < x_2 < \dots < x_{N+1} = 1$  está equidistribuida si la función monitor  $M(x) > 0$  satisface que

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} M(x) dx = \frac{1}{N} \int_{-1}^1 M(x) dx, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (128)$$

Al aproximar numéricamente (128) mediante la técnica de cuadratura del punto medio, el principio de equidistribución en forma discreta se expresa como

$$(x_{i+1} - x_i) M_{i+1/2} = C. \quad (129)$$

Donde la constante  $C$  se calcula tomando la suma sobre los  $N$  intervalos

$$C = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_{i+1} - x_i) M_{i+1/2}, \quad (130)$$

y el valor de la función monitor en el punto medio del intervalo es

$$M_{i+1/2} = M\left(\frac{x_{i+1} - x_i}{2}\right). \quad (131)$$

La constante  $C$  se puede eliminar al restar ecuaciones adyacentes, entonces la ecuación de equidistribución está dada por

$$(x_{i+1} - x_i) M_{i+1/2} - (x_i - x_{i-1}) M_{i-1/2} = 0. \quad (132)$$

Generalmente, se usa la función monitor basada en la longitud de arco

$$M(x) = \sqrt{1 + \alpha \left(\frac{du}{dx}\right)^2}, \quad (133)$$

escalada por el parámetro  $\alpha > 0$  que controla la densidad de puntos agrupados en la región de gradientes altos, similar al parámetro  $\lambda_1$  que aparece en la relación (123). Típicamente, un valor apropiado se aproxima haciendo experimentos numéricos. La derivada que aparece en la función monitor (133), se aproxima por diferencias finitas centradas para obtener la función monitor discreta,

$$M_{i+1/2} = \sqrt{1 + \alpha \left( \frac{u_{i+1} - u_i}{x_{i+1} - x_i} \right)^2}. \quad (134)$$

Entonces la ecuación de equidistribución está explícitamente expresada por

$$(x_{i+1} - x_i) \sqrt{1 + \alpha \left( \frac{u_{i+1} - u_i}{x_{i+1} - x_i} \right)^2} - (x_i - x_{i-1}) \sqrt{1 + \alpha \left( \frac{u_i - u_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \right)^2} = 0. \quad (135)$$

El principio de equidistribución no ofrece ningún mecanismo para manejar la calidad de la malla, en consecuencia, se puede generar una malla no suave e incluso puede presentarse cruzamiento de nodos ( $x_i > x_{i+1}$  para algún  $i$ ). Por lo tanto, alguna estrategia se debe incorporar en el principio de equidistribución para controlar la calidad de la malla. El riesgo de cruzamiento de nodos se puede reducir mediante un proceso de continuación sobre el parámetro  $\alpha$ , iniciando con un valor pequeño y actualizándolo en cada iteración, este proceso se detiene cuando el parámetro  $\alpha$  tiene un valor tal que la malla adaptada genera una solución con suficiente precisión.

Un método para suavizar la malla en una dimensión fue introducido por Dorfy y Drury (1987), y usado por Mulholland *et al.* (1997, 1998), para evitar cruzamiento de nodos. Ellos reemplazaron la función monitor estándar (133) con la suavizada

$$\tilde{M}_{i+1/2} = \frac{\sum_{k=i-p}^{i+p} (q/(q+1))^{|k-i|} M_{k+1/2}}{\sum_{k=i-p}^{i+p} (q/(q+1))^{|k-i|}}, \quad (136)$$

para mejorar la calidad de la malla, donde el parámetro  $p$  indica la cantidad de puntos en la vecindad del punto  $x_i$ , que contribuyen al promedio ponderado de  $M_{i+1/2}$ . En esta

aproximación, el parámetro de suavizado  $q$  es un número positivo, que asigna un factor de peso a cada punto en la vecindad del punto  $x_i$ . Sustituyendo la relación (136) en (132) la ecuación de equidistribución suavizada está dada por

$$(x_{i+1} - x_i)\tilde{M}_{i+1/2} - (x_i - x_{i-1})\tilde{M}_{i-1/2} = 0, \quad (137)$$

que generalmente se resuelve usando el método de Newton.

En este trabajo, el principio de equidistribución se implementa con un enfoque diferente. Primeramente, se determina la longitud de cada subintervalo  $h_i = x_{i+1} - x_i$ , usando la ecuación de equidistribución (129), con la función monitor suavizada (136)

$$h_i = \frac{C}{\tilde{M}_{i+1/2}}, \quad (138)$$

con este método se evita el cruzamiento de nodos porque  $h_i$  es positiva en cada iteración. El proceso de continuación usado para adelgazar la capa de transición, permite entonces implementar un método iterativo sobre la longitud del subintervalo (138), con un número fijo de iteraciones para adaptar la malla usando equidistribución, de esta manera obtenemos la malla deseada evitando el tedioso proceso de verificar el cruzamiento de nodos.

Si se utiliza adaptación de malla bajo el principio de equidistribución, usando la función monitor suavizada  $\tilde{M}$  definida en (136) con la función monitor estándar  $M$  dada por la relación (134), la transformación de coordenadas no es lo suficientemente suave para lograr alta precisión. Por lo tanto, es necesario agrupar más puntos en la frontera y en las regiones donde la segunda derivada de la solución es grande. De esta manera, aquí se propone una modificación a la función monitor estándar. Primero se incrementa el valor de la función monitor en los extremos

$$\hat{M}_{i+1/2} = 3\text{round}(\log_{10}(1/\varepsilon)) M_{i+1/2}, \quad i = 1, N - 1, \quad (139)$$

con la finalidad de aumentar la densidad de puntos en la frontera. Posteriormente, se modifica la función monitor en los intervalos restantes

$$\hat{M}_{i+1/2} = M_{i+1/2} + \beta \log_2 (M_{i+1/2}), \quad i = 2, \dots, N - 2, \quad (140)$$

donde  $M_{i+1/2}$  está dado por (134) y  $\beta$  es un parámetro positivo, que permite incrementar el número de puntos donde la segunda derivada de la solución es grande, es decir cerca de la capa límite, lo cual hace más suave la transformación de coordenadas. Entonces aplicamos equidistribución por medio de (138), reemplazando  $M$  por  $\hat{M}$  en la función monitor suavizada (136).

En general, el principio de equidistribución acepta diferentes funciones monitor, generando mallas con diferentes propiedades, y la elección más apropiada de la función monitor no siempre es clara, de acuerdo con Budd *et al.* (1998). Es importante enfatizar que el suavizado permite uniformizar las propiedades de las funciones monitor. Otra elección para la función monitor es la primera derivada

$$M(x) = |u'(x)|, \quad (141)$$

con esta función monitor, la distribución de puntos se ajusta de tal manera que el mismo cambio en la solución ocurre sobre cada intervalo de la malla, esta elección tiene la desventaja de hacer excesivamente grande el tamaño de la malla en regiones donde el gradiente es pequeño. Una función monitor de primera derivada suavizada es usada por Beckett *et al.* (2001),

$$M(x) = \alpha + \sqrt{\left| \frac{du}{dx} \right|}. \quad (142)$$

Para aplicar el algoritmo de equidistribución implementado, la función monitor en forma



discreta está dada por

$$M_{i+1/2} = \alpha + \sqrt{\left| \frac{u_{i+1} - u_i}{x_{i+1} - x_i} \right|}. \quad (143)$$

Los resultados presentados en este trabajo fueron calculados usando la función monitor longitud de arco. Usando la función monitor de primera derivada suavizada en el algoritmo de equidistribución, se obtuvieron resultados similares que con la función monitor basada en longitud de arco, con los valores apropiados del parámetro  $\alpha$  en cada caso. Para usar la función monitor suavizada se sustituye (143) en (139 – 140).

### III.2.2. Algoritmo de adaptación de malla

El objetivo de esta sección, es mostrar la estrategia seguida para aplicar equidistribución y resolver numéricamente con alta precisión usando el método de Chebyshev un modelo de interfase difusa. Típicamente, en estos modelos se tiene una región de pequeña extensión, donde la solución cambia rápidamente, mientras que fuera de esta región la solución es básicamente constante.

En problemas donde la capa de transición es muy delgada, el principio de equidistribución no es eficiente y tiene algunas dificultades de convergencia cuando se intenta resolver la ecuación de equidistribución de la malla usando el método de Newton. Lo que se propone, es sustituir el método de Newton, o para tal caso cualquier método que resuelva un conjunto de ecuaciones no lineales, por un algoritmo de equidistribución con un número fijo de iteraciones en la relación (138), bajo un proceso de continuación. En todos los cálculos, la malla computacional está dada por un número fijo de puntos de colocación CGL, mientras que en el espacio físico, la malla es inicialmente uniforme y la posición de los nodos se va adaptando paulatinamente a las características de la solución, bajo la transformación de coordenadas (117).

El método de continuación inicia con un conjunto de parámetros que definen una

interfase relativamente amplia, lo cual garantiza que haya puntos dentro de la interfase, correspondientes a una malla uniforme en el espacio físico  $D_p$ . Con esta malla, se calcula la solución numérica  $\{u_i\}$  del problema. Aplicando el algoritmo de equidistribución, se encuentra una nueva malla que se ajuste a la solución  $\{u_i\}$ . De esta manera, se incrementa la cantidad de puntos en la región de transición. En la siguiente iteración se actualizan los parámetros para adelgazar la interfase, con estos nuevos parámetros se calcula una solución nueva y se repite la aplicación del algoritmo de equidistribución. El número de iteraciones en el proceso de continuación depende del ancho deseado de la capa de transición.

El algoritmo de equidistribución implementado en el proceso de continuación, toma como entrada la malla  $\{x_i\}$  y su solución correspondiente  $\{u_i\}$ . Antes de iniciar las iteraciones, se asigna  $\{x_i^1\} = \{x_i\}$  en preparación para la primera iteración de equidistribución. Una vez que se ha iniciado el proceso, la equidistribución se determina repitiendo un número fijo de veces las siguientes instrucciones.

Para cada intervalo  $h_i^k$  en la iteración  $k$ -ésima, se calcula la función monitor suavizada  $\tilde{M}_{i+1/2}^k$ , sustituyendo a la función  $M$  por la nueva función monitor  $\hat{M}$  en (136), entonces se calcula la constante  $C$  como sigue

$$C = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N h_i^k \tilde{M}_{i+1/2}^k. \quad (144)$$

La longitud de cada subintervalo en la iteración  $k$ -ésima se aproxima por medio de equidistribución, iterando en la relación (138)

$$h_i^{k+1} = \frac{C}{\tilde{M}_{i+1/2}^k}. \quad (145)$$

Esta aproximación no garantiza que  $\sum_{i=1}^N h_i^{k+1} = x_{N+1} - x_1$ , por lo tanto es necesario recalcular la longitud de cada subintervalo, el ajuste se hace proporcional a la longitud

anterior de cada subintervalo, usando la relación

$$h_i^{k+1} = h_i^{k+1} \frac{x_{N+1} - x_1}{\sum_{i=1}^N h_i^{k+1}}, \quad (146)$$

Se calcula la nueva malla con las longitudes de cada subintervalo, los puntos en la frontera son fijos, por lo tanto  $x_1^{k+1} = x_1$ ,  $x_{N+1}^{k+1} = x_{N+1}$  los puntos en el interior son calculados recursivamente por

$$x_i^{k+1} = x_{i-1}^{k+1} + h_{i-1}^{k+1} \quad \text{para } i = 2, \dots, N. \quad (147)$$

Se aproxima la solución  $\{u_i^{k+1}\}$  en los puntos  $\{x_i^{k+1}\}$  interpolando con la malla inicial  $\{x_i^1\}$ , cuya solución es  $\{u_i^1\}$ , con esta aproximación se inicia otra iteración, asignando  $k = k + 1$ . El algoritmo termina en un número determinado de iteraciones, regresando la malla adaptada  $\{x_i^k\}$ .

El algoritmo de adaptación de malla se resume en pseudocódigo en la Tabla I.

Tabla I: Pseudocódigo para el algoritmo de equidistribución usando continuación.

continuación	equidistribución
inic. parámetros	function <i>equidist</i> ( <b>x</b> , <b>u</b> )
inic. malla uniforme <b>x</b>	<b>begin</b>
calcular <b>u</b>	<b>x</b> <sup>1</sup> = <b>x</b>
<i>iter</i> = 0	<b>for</b> <i>k</i> = 1 to 3
<b>while</b> <i>iter</i> < <i>M</i>	calcular $\tilde{M}$
<b>x</b> <sub>new</sub> = <i>equidist</i> ( <b>x</b> , <b>u</b> )	$h_i^{k+1} = \frac{C}{\tilde{M}_{i+1/2}^k}$
actualizar parámetros	$h_i^{k+1} = h_i^{k+1} \frac{x_{N+1} - x_1}{\sum_{i=1}^N h_i^{k+1}}$
calcular <b>u</b> <sub>new</sub>	calcular $x_i^{k+1}$ de $h_i^{k+1}$
<b>x</b> = <b>x</b> <sub>new</sub>	calcular $u_i^{k+1}$ interpolando
<b>u</b> = <b>u</b> <sub>new</sub>	<b>end</b>
<i>iter</i> = <i>iter</i> + 1	return $x_i^{k+1}$
<b>end</b>	<b>end</b>

### III.3. Resultados numéricos

En esta sección, se muestran los resultados numéricos para problemas de interfase difusa, que se caracterizan por presentar una capa interna muy delgada, estos problemas se resuelven empleando el algoritmo de equidistribución propuesto en la sección anterior. Se desea obtener una alta precisión con el método de colocación de Chebyshev. Primero, se resuelve un problema de prueba de valores en la frontera que presenta una capa interna (Roos *et al.*, 1996). La solución a este problema por el método de Chebyshev, muestra claramente el efecto del suavizado de la transformación de coordenadas, que se presenta al agrupar una cantidad considerable de puntos en la región de gradientes altos. Posteriormente, se aplica el algoritmo de equidistribución para resolver en una dimensión el modelo *phase-field* que se obtuvo en el capítulo II. Además, se aplica el algoritmo de equidistribución para modelar una burbuja líquida como un fluido de dos fases sobre una superficie sólida, usando el mismo modelo. En ambos casos se logra obtener una frontera muy delgada, que separa las dos fases del fluido.

#### III.3.1. Problema prueba

Consideramos el siguiente problema con valores en la frontera representativo de una gran cantidad de problemas perturbados singularmente, en donde la región de gradientes altos se encuentra en el interior del dominio,

$$\varepsilon \frac{d^2 u}{dx^2} + 2x \frac{du}{dx} = 0, \quad x \in (-1, 1), \quad (148)$$

sujeto a las condiciones de frontera

$$u(-1) = -1, \quad u(1) = 1, \quad (149)$$

donde  $\varepsilon$  es el parámetro de perturbación. La solución exacta a (148 – 149) está dada por

$$u(x) = (1/\operatorname{erf}(1/\sqrt{\varepsilon})) \operatorname{erf}(x/\sqrt{\varepsilon}). \quad (150)$$

donde  $\operatorname{erf}(x)$  es la función error. De esta manera la solución presenta una capa de transición cuya anchura es de  $O(\sqrt{\varepsilon})$  en  $x = 0$  para  $0 < \varepsilon \ll 1$ . Cualquier método numérico que trate de resolver este problema con una malla no adaptada y una cantidad razonable de puntos, no tendrá la capacidad de capturar la capa de transición, ocasionando que se presenten oscilaciones en la solución. En la Figura 9 se muestra la solución numérica de (148 – 149) con  $\varepsilon = 10^{-4}$ , usando el método pseudoespectrales de Chebyshev con  $N = 64$  puntos de colocación. En la figura, la línea continua indica la solución exacta (150) y los puntos representan la solución numérica. la cual es contaminada con oscilaciones del tipo de Gibbs, lo que refleja la incapacidad del método numérico de capturar la capa de transición.

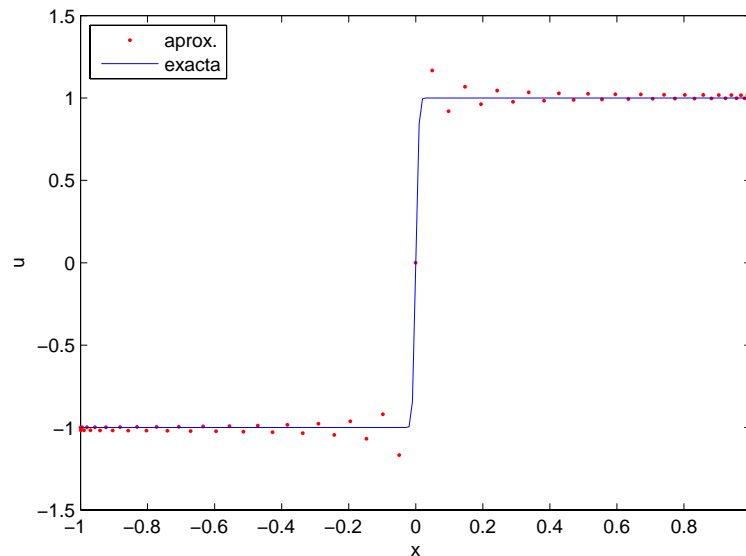


Figura 9: Solución numérica y analítica para el problema prueba, aplicando el método de colocación de Chebyshev.

Para capturar la capa interna es necesario agrupar más puntos en ella. Básicamente, hay dos opciones para este propósito, la primera consiste en usar una malla estándar, incrementando el número de puntos en todo el dominio, para capas internas muy delgadas, se tiene el inconveniente que el número de puntos necesario es excesivamente grande lo que representa un incremento significativo en el costo computacional. Además se tiene el problema de errores de redondeo en el cálculo de las matrices de diferenciación de Chebyshev.

En la Figura 10 se muestra el error  $|u(x_j) - u_N(x_j)|$  en cada punto de colocación  $x_j$ , donde  $u$  es la solución exacta de (148 – 149) con  $\varepsilon = 10^{-4}$  y  $u_N$  es la solución calculada por el método de Chebyshev. Se hacen los cálculos para diferentes cantidades de los  $N+1$  puntos de colocación. Es importante resaltar que el error en  $x = 0$  es exactamente igual a cero, mientras que los errores más grandes se presentan en los puntos de la malla cercanos a  $x = 0$ , debido a las condiciones de simetría de la solución. Este comportamiento se presenta para todos los valores de  $N$ . A continuación, se estudiará el error en los puntos cercanos a  $x = 0$  y en la frontera, usando los métodos de Chebyshev, elemento finito y diferencias finitas. Se observa que el error es simétrico en  $x = 0$ . Por lo tanto, solo se considerarán puntos de colocación positivos.

Se tomarán valores de  $N$  par, de tal manera que  $x = 0$  sea un punto de la malla, este punto está representado por  $x_{N/2}$ . En la Tabla II se presenta el error en los puntos  $x_{N/2}$ ,  $x_{N/2+1}$ ,  $x_{N/2+2}$  y  $x_{N-1}$  usando los métodos de Chebyshev, elemento finito y diferencias finitas. En el método de Chebyshev se hace la aproximación usando los puntos CGL, mientras que en elemento finito y diferencias finitas se usó una malla uniforme (la implementación de estos métodos se puede consultar en Ferziger y Peric (2002).

Se observa que en todos los casos el error en  $x = 0$ , es prácticamente nulo en los tres métodos. Además, el error en el método de elemento finito es menor que el error en diferencias finitas en todos los casos.

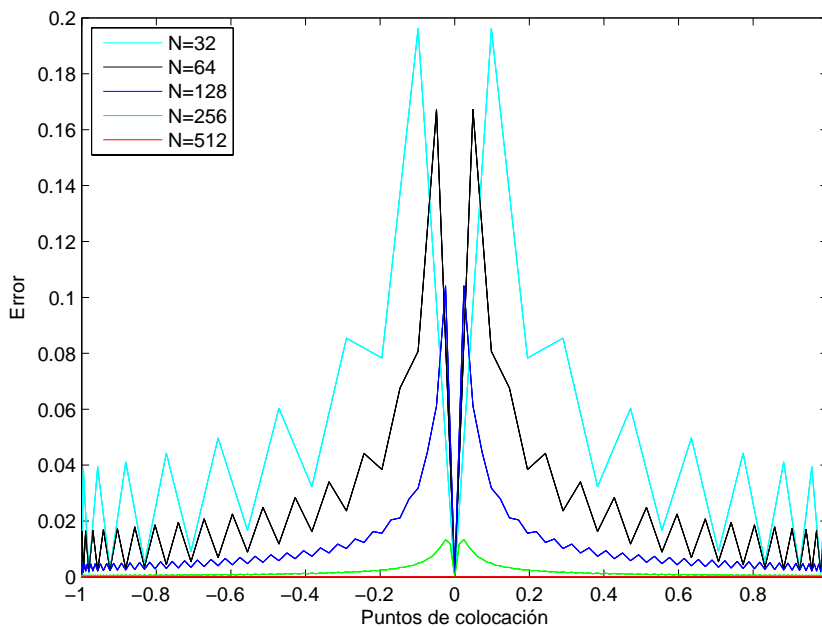


Figura 10: Error en cada punto de colocación en la solución del problema prueba, usando el método de Chebyshev.

Tabla II: Error en la interface y cerca de la frontera.

N	método	$x_{N/2}$	$x_{N/2+1}$	$x_{N/2+2}$	$x_{N-1}$
32	Chebyshev	$1.17 \times 10^{-14}$	$1.96 \times 10^{-1}$	$7.83 \times 10^{-2}$	$3.86 \times 10^{-2}$
	FEM	$1.24 \times 10^{-16}$	$4.90 \times 10^{-1}$	$2.13 \times 10^{-1}$	$1.32 \times 10^{-1}$
	Dif. Fin.	$2.28 \times 10^{-16}$	9.38	$4.82 \times 10^{-1}$	8.76
64	Chebyshev	$8.51 \times 10^{-14}$	$1.67 \times 10^{-1}$	$8.07 \times 10^{-2}$	$1.63 \times 10^{-2}$
	FEM	0	$3.51 \times 10^{-1}$	$1.80 \times 10^{-1}$	$3.75 \times 10^{-2}$
	Dif. Fin.	0	1.86	$4.68 \times 10^{-1}$	1.25
128	Chebyshev	$1.47 \times 10^{-13}$	$1.04 \times 10^{-1}$	$6.11 \times 10^{-2}$	$4.36 \times 10^{-3}$
	FEM	0	$1.44 \times 10^{-1}$	$4.78 \times 10^{-2}$	$6.10 \times 10^{-4}$
	Dif. Fin.	$1.83 \times 10^{-15}$	$3.95 \times 10^{-1}$	$2.05 \times 10^{-1}$	$2.68 \times 10^{-2}$
256	Chebyshev	$1.31 \times 10^{-14}$	$1.19 \times 10^{-2}$	$1.34 \times 10^{-2}$	$1.53 \times 10^{-4}$
	FEM	$1.67 \times 10^{-15}$	$2.39 \times 10^{-2}$	$2.86 \times 10^{-2}$	$2.04 \times 10^{-10}$
	Dif. Fin.	$4.47 \times 10^{-16}$	$8.69 \times 10^{-2}$	$4.26 \times 10^{-2}$	$3.94 \times 10^{-8}$
512	Chebyshev	$9.22 \times 10^{-15}$	$1.17 \times 10^{-5}$	$2.16 \times 10^{-5}$	$1.92 \times 10^{-7}$
	FEM	$4.99 \times 10^{-16}$	$2.90 \times 10^{-3}$	$6.60 \times 10^{-3}$	0
	Dif. Fin.	$1.18 \times 10^{-15}$	$1.31 \times 10^{-2}$	$1.96 \times 10^{-2}$	$2.22 \times 10^{-16}$

El error  $L_2/(N + 1)$ , es decir, el error dado por

$$Error = \frac{\sqrt{\sum_{j=1}^N (u(x_j) - u_N(x_j))^2}}{N + 1}, \quad (151)$$

es mostrado en la Tabla III, para diferentes valores de  $\varepsilon$  usando de nuevo los métodos de colocación de Chebyshev, elemento finito y diferencias finitas. Se observa en todos los casos que el error es menor al usar el método de Chebyshev y para  $\varepsilon = 10^{-3}$  se obtiene convergencia espectral, mientras que para  $\varepsilon = 10^{-4}$  y  $\varepsilon = 10^{-5}$  ya no es posible obtener convergencia espectral. Además se observa que el error es menor para el método de elemento finito que para el método de diferencias finitas.

Tabla III: Error para diferentes valores del parámetro de perturbación.

N	método	$\varepsilon = 10^{-3}$	$\varepsilon = 10^{-4}$	$\varepsilon = 10^{-5}$
32	Chebyshev	$8.00 \times 10^{-3}$	$1.10 \times 10^{-2}$	$1.14 \times 10^{-2}$
	FEM	$1.16 \times 10^{-2}$	$3.16 \times 10^{-2}$	$3.57 \times 10^{-2}$
	Dif. Fin.	$5.70 \times 10^{-2}$	1.07	11.62
64	Chebyshev	$1.37 \times 10^{-3}$	$4.85 \times 10^{-3}$	$5.44 \times 10^{-3}$
	FEM	$1.17 \times 10^{-3}$	$1.09 \times 10^{-2}$	$1.72 \times 10^{-2}$
	Dif. Fin.	$3.34 \times 10^{-3}$	$1.24 \times 10^{-1}$	1.73
128	Chebyshev	$1.89 \times 10^{-5}$	$1.61 \times 10^{-3}$	$2.57 \times 10^{-3}$
	FEM	$2.01 \times 10^{-4}$	$1.72 \times 10^{-3}$	$7.29 \times 10^{-3}$
	Dif. Fin.	$4.92 \times 10^{-4}$	$6.31 \times 10^{-3}$	$2.33 \times 10^{-1}$
256	Chebyshev	$2.42 \times 10^{-11}$	$1.60 \times 10^{-4}$	$1.11 \times 10^{-3}$
	FEM	$3.51 \times 10^{-5}$	$2.05 \times 10^{-4}$	$2.07 \times 10^{-3}$
	Dif. Fin.	$8.42 \times 10^{-5}$	$5.33 \times 10^{-4}$	$1.87 \times 10^{-2}$
512	Chebyshev	$9.41 \times 10^{-16}$	$3.28 \times 10^{-7}$	$2.88 \times 10^{-4}$
	FEM	$6.21 \times 10^{-6}$	$3.52 \times 10^{-5}$	$2.34 \times 10^{-4}$
	Dif. Fin.	$1.48 \times 10^{-5}$	$8.54 \times 10^{-5}$	$7.41 \times 10^{-4}$
1024	Chebyshev	$2.82 \times 10^{-15}$	$8.35 \times 10^{-16}$	$1.25 \times 10^{-5}$
	FEM	$1.10 \times 10^{-6}$	$6.18 \times 10^{-6}$	$3.57 \times 10^{-5}$
	Dif. Fin.	$2.61 \times 10^{-6}$	$1.48 \times 10^{-5}$	$8.92 \times 10^{-5}$
2048	Chebyshev	$1.50 \times 10^{-15}$	$2.06 \times 10^{-16}$	$1.30 \times 10^{-9}$
	FEM	$1.94 \times 10^{-7}$	$1.09 \times 10^{-6}$	$6.17 \times 10^{-6}$
	Dif. Fin.	$4.61 \times 10^{-7}$	$2.60 \times 10^{-6}$	$1.49 \times 10^{-5}$



El error  $L_\infty$ , es decir el máximo del valor absoluto de la diferencia entre la solución analítica y la calculada numéricamente, de todos los puntos de la malla, es mostrado en la Tabla IV, para diferentes valores de  $\varepsilon$  usando el método de Chebyshev. Se observa que al reducir el valor del parámetro de perturbación en un orden de magnitud, el número de puntos de colocación se incrementa considerablemente.

Tabla IV: Error  $L_\infty$  con puntos de colocación de Chebyshev

N	$\varepsilon = 10^{-3}$	$\varepsilon = 10^{-4}$	$\varepsilon = 10^{-5}$
64	$3.457 \times 10^{-2}$	$1.672 \times 10^{-1}$	$1.884 \times 10^{-1}$
128	$5.618 \times 10^{-4}$	$1.041 \times 10^{-1}$	$1.759 \times 10^{-1}$
256	$7.889 \times 10^{-10}$	$1.336 \times 10^{-2}$	$1.485 \times 10^{-1}$
512	$7.205 \times 10^{-14}$	$3.107 \times 10^{-5}$	$6.760 \times 10^{-2}$
1024	$2.425 \times 10^{-13}$	$1.189 \times 10^{-13}$	$3.493 \times 10^{-3}$
2048	$6.235 \times 10^{-13}$	$2.477 \times 10^{-13}$	$3.986 \times 10^{-7}$

Por otro lado, es de esperarse que se obtendrá una mejor solución numérica al usar una malla adaptada, que se ajuste a las características de la solución en el espacio físico, mientras que en el espacio computacional los cálculos se realizan usando una malla tradicional. Para adaptar la malla a las características de la solución, la ecuación (148) bajo una transformación de coordenadas, en el espacio computacional toma la forma,

$$\varepsilon \frac{1}{x_\xi} \frac{d^2 u}{d\xi^2} + \left( 2x - \varepsilon \frac{x_{\xi\xi}}{(x_\xi)^2} \right) \frac{du}{d\xi} = 0, \quad \xi \in (-1, 1), \quad (152)$$

con las mismas condiciones de frontera (149).

En general, existen problemas para los cuales se desconoce la posición de la capa de transición, en el problema (148 – 149) donde si se conoce la posición de la capa de transición, una transformación de coordenadas, como el mapeo explícito (123) – (125) propuesto por Bayliss *et al.* (1995b), se puede usar para adaptar la malla. En el problema (148 – 149) la posición de la interfase se encuentra en  $x = 0$ , el cual es el valor del

parámetro  $\lambda_0$  que aparece en la relación (123). Como se mencionó anteriormente al incrementar el valor del parámetro  $\lambda_1$  que aparece en (123), aumenta la densidad de puntos alrededor de  $\lambda_0$ , mejorando así la precisión. Si para un número de puntos de colocación fijo, estos se agrupan excesivamente, la precisión se reduce significativamente debido a que la región fuera de la capa de transición es discretizada pobremente. Por lo tanto, para obtener una alta precisión se debe usar un valor apropiado de  $\lambda_1$ .

Cuando se resuelve una ecuación diferencial empleando el método de colocación de Chebyshev es necesario que la solución sea suave para obtener alta precisión. Al usar adaptación de malla, se acumulan puntos donde la solución no es suave permitiendo que la solución sea suave en el espacio computacional. En la representación del problema en el espacio computacional aparecen nuevas derivadas  $x_\xi$  y  $x_{\xi\xi}$  en (152). Si se usa un mapeo analítico para obtener un problema suavizado en el espacio computacional,  $x_\xi$  y  $x_{\xi\xi}$  pueden calcularse analíticamente, por lo tanto la suavidad de la transformación no influye para obtener alta precisión. Si el mapeo es una transformación numérica,  $x_\xi$  y  $x_{\xi\xi}$  se calculan en forma numérica y en este caso la suavidad de la transformación tiene una influencia importante en la precisión. Esto significa que con un mapeo analítico se puede obtener una mayor precisión ya que es posible agrupar mas puntos en la capa de transición y no existen errores numéricos al calcular  $x_\xi$  y  $x_{\xi\xi}$ .

Es importante estudiar como afecta el valor del parámetro  $\lambda_1$  en la suavidad de la transformación de coordenadas, al calcular sus derivadas. Para un valor fijo de  $\lambda_1$  se quiere conocer la relación de convergencia del error para la solución de (152), cuando la primera derivada  $x_\xi$  y la segunda derivada  $x_{\xi\xi}$  de la transformación de coordenadas son calculadas en forma analítica usando (126) y numérica usando las matrices de diferenciación de Chebyshev.

En la Figura 11 se muestra el error  $L_\infty$  en la solución del problema prueba, usando derivadas analíticas y numéricas de la transformación de coordenadas, para diferentes

valores de  $N$ , con el valor del parámetro de perturbación  $\varepsilon = 10^{-8}$  el cual define una capa interna muy delgada, y el parámetro de concentración de puntos  $\lambda_1 = 890$ .

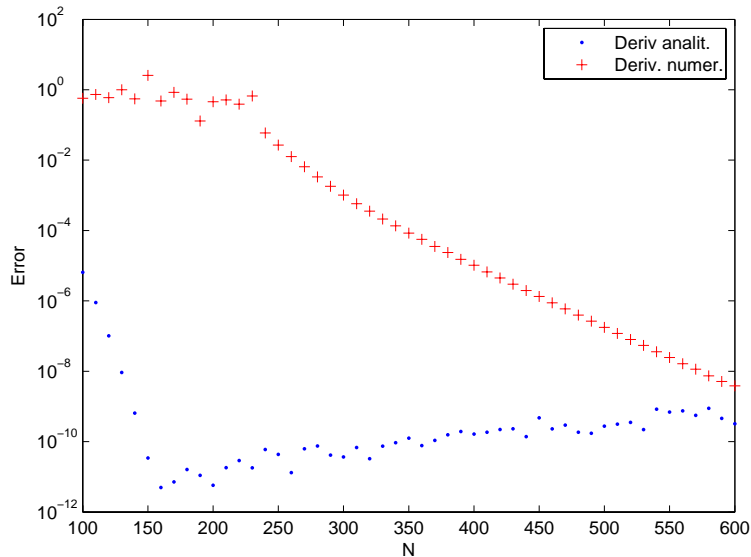


Figura 11: Error en la solución del problema prueba usando derivadas analíticas y numéricas de la transformación de coordenadas con  $\lambda_1$  fijo.

Se observa que en ambos casos se obtiene una alta precisión en la solución numérica al incrementar  $N$ , claramente al utilizar las derivadas analíticas de la transformación de coordenadas el error decae más rápido y se obtiene convergencia espectral. Además, el error mínimo se presenta para la solución con derivadas analíticas con  $N = 160$ . Debido a la no suavidad de la transformación de coordenadas para  $N$  pequeña, al utilizar derivadas numéricas el error es relativamente alto, al incrementar  $N$  la transformación de coordenadas se hace más suave, permitiendo tener una mayor precisión.

En la Figura 12 se muestra el error con el número de puntos de colocación  $N = 300$  fijo. Se observa que cuando  $\lambda_1$  es relativamente pequeña, los errores son prácticamente iguales en ambos casos. Esto se debe a que la transformación de coordenadas es suave. Al incrementar  $\lambda_1$  más puntos son agrupados en la región de transición, afectando la

suavidad de la transformación de coordenadas, y entonces el error se incrementa para el caso en que las derivadas de la transformación son calculadas numéricamente, mientras que continua decreciendo para el caso en que se calculan analíticamente.

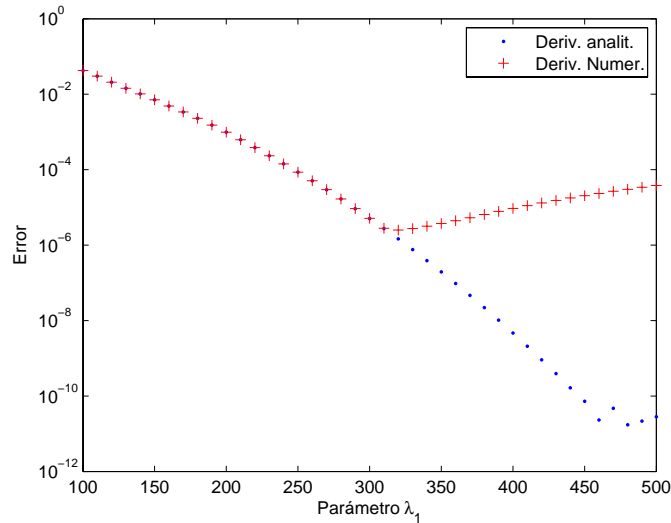


Figura 12: Error en la solución del problema prueba usando derivadas analíticas y numéricas de la transformación de coordenadas, con  $N$  fijo.

De los resultados anteriores, se concluye que existe un compromiso definido por el parámetro de agrupamiento  $\lambda_1$ , entre la suavidad de la solución dada por la cantidad de puntos agrupados en la capa de transición y el suavizado de la transformación de coordenadas, cuando  $x_\xi$  y  $x_{\xi\xi}$  se calculan numéricamente. Por lo tanto, la elección más apropiada de  $\lambda_1$  debe lograr un equilibrio entre concentración de puntos en la región de transición y el suavizado de la transformación de coordenadas.

A continuación, se muestra la solución del problema de prueba (148 – 149) usando el algoritmo de equidistribución y de esta manera probar sus capacidades para adaptar la malla. En la Tabla V, se muestra el error  $L_\infty$  y los parámetros del proceso de continuación, para un número fijo de  $N = 128$  puntos de colocación.

La trayectoria de la malla seguida con el algoritmo de equidistribución y el proceso

Tabla V: Parámetros para el proceso de continuación en el problema de prueba usando equidistribución.

$\varepsilon$	$\alpha$	$\beta$	$L_\infty$ error
$10^{-2}$	—	—	$3.733 \times 10^{-5}$
$10^{-3}$	0.30	0.30	$5.796 \times 10^{-6}$
$10^{-4}$	0.54	1.00	$6.266 \times 10^{-7}$
$10^{-5}$	0.76	1.89	$4.470 \times 10^{-7}$
$10^{-6}$	1.17	2.78	$1.089 \times 10^{-5}$

de continuación para la solución del problema de prueba es ilustrada en la Figura 13. Se observa que al iniciar con una malla uniforme los puntos se van moviendo en cada iteración hacia la región donde se presenta la capa límite del proceso de continuación. También se observa la tendencia de que los puntos cercanos a la frontera, de no separarse mucho, para hacer suave la transformación de coordenadas.

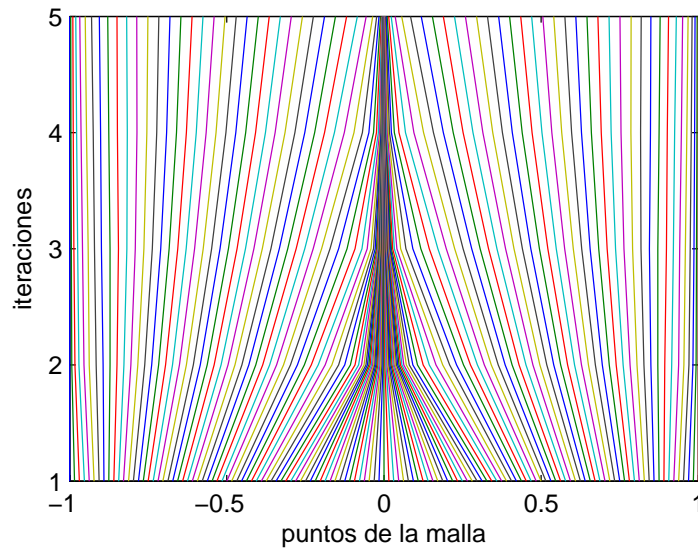


Figura 13: Trayectoria de la malla para el problema de prueba, usando equidistribución.

En la Figura 14 se presenta la gráfica de la solución numérica de (148) para la última iteración en el proceso de continuación. Las oscilaciones son removidas y se captura la

capa de transición.

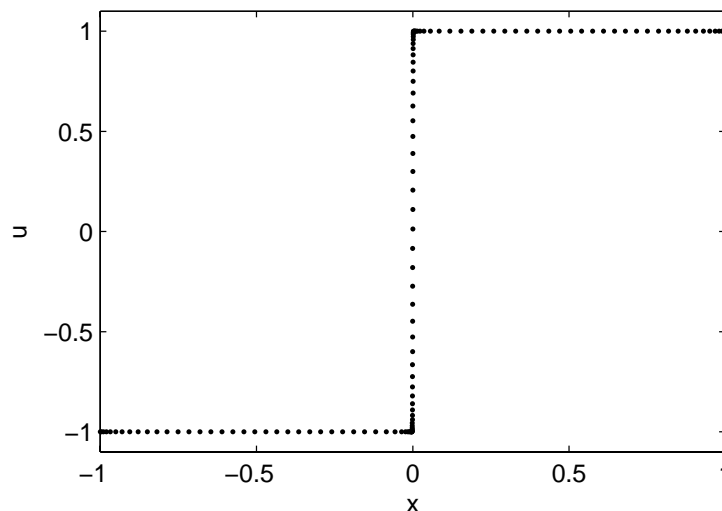


Figura 14: Solución para el problema de prueba con malla adaptada, usando equidistribución.

### III.3.2. Modelo *phase-field* en una dimensión

Aquí se muestra la solución numérica del modelo de un fluido de dos fases de la derivación del modelo *phase-field* para un fluido de dos fases, con el potencial químico  $K = 0$ , en una dimensión la ecuación (100) está expresada por

$$-\varepsilon \frac{d^2 \rho}{dx^2} + (\rho - 1)(2\rho - 1)\rho = 0. \quad (153)$$

En un dominio infinito la solución analítica  $\rho$  para (153) con condiciones de frontera  $\rho(x) = 1$  cuando  $x \rightarrow -\infty$  y  $\rho(x) = 0$  cuando  $x \rightarrow \infty$ , está dada por

$$\rho(x) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{x}{2\sqrt{\varepsilon}}\right). \quad (154)$$

Esta solución fue encontrada primero por van der Waals (1893), en su estudio de una

interfase de grueso proporcional a  $\sqrt{\varepsilon}$ . Desde entonces ha sido usada en diversos trabajos como Jacqmin (2000), Yue *et al.* (2004), entre otros. Es evidente, que al truncar el dominio infinito al intervalo  $[-1, 1]$  donde

$$\rho(-1) = 1, \quad \rho(1) = 0 \quad (155)$$

la ecuación (154) para  $\varepsilon$  pequeño está exponencialmente cerca de la solución del problema dado por (153), con condiciones de frontera (155). Por lo tanto, usamos (154) como solución analítica para calcular el error.

Usando la transformación de coordenadas (117), el modelo *phase-field* en el espacio computacional está dado por

$$-\varepsilon \left( \frac{1}{(x_\xi)^2} \frac{d^2 \rho}{d\xi^2} - \frac{x_{\xi\xi}}{(x_\xi)^3} \frac{d\rho}{d\xi} \right) + (\rho - 1)(2\rho - 1)\rho = 0. \quad (156)$$

La física del modelo *phase-field* esta determinada por el parámetro  $\varepsilon$ . Estamos interesados en resolver la interfase con pocos puntos, de esta manera fijamos el número de puntos de colocación en  $N = 128$ .

El sistema discreto asociado a (156) sujeto a las condiciones(155) es no lineal, por lo tanto es necesario resolverlo usando un método iterativo como el de Newton. Para  $\varepsilon \ll 1$  se pueden obtener soluciones numéricamente inestables, debido a la dificultad de tener una solución inicial cercana a la solución del sistema discreto. De tal manera que se aplica un proceso de continuación en el parámetro  $\varepsilon$  iniciando con un valor relativamente grande donde el sistema discreto tenga solución estable, esta solución se usa como solución inicial en la siguiente iteración del proceso de continuación, y así se sigue la trayectoria estable al disminuir el valor del parámetro  $\varepsilon$  en cada iteración del proceso de continuación.

Para este problema específico, podemos fijar la posición de la interfase de tal manera

que el mapeo analítico (123 – 125) con  $\lambda_0 = 0$ , puede ser usado para adaptar la malla, y de esta manera mapear los puntos CGL al espacio físico. El sistema discreto se resuelve usando el método de Newton en cada iteración del proceso de continuación para resolver (156). La Tabla VI muestra los parámetros del proceso de continuación y el valor absoluto del error máximo para cada iteración del proceso de continuación. Se observa que se obtiene una alta precisión. La trayectoria de la malla generada en el proceso de

Tabla VI: Parámetros para el proceso de continuación en el modelo *phase-field*, usando el mapeo de Bayliss.

$\lambda_1$	$\varepsilon$	error
3.0	$10^{-2}$	$4.540 \times 10^{-5}$
13.0	$10^{-3}$	$1.497 \times 10^{-6}$
20.0	$10^{-4}$	$5.223 \times 10^{-7}$
32.0	$10^{-5}$	$1.141 \times 10^{-7}$
67.0	$10^{-6}$	$1.649 \times 10^{-7}$
320.0	$10^{-7}$	$1.145 \times 10^{-7}$
660.0	$10^{-8}$	$1.698 \times 10^{-7}$

continuación con adaptación de malla, después de siete iteraciones es mostrada en la Figura 15. En la última iteración el valor del parámetro  $\lambda_1$  es grande, lo que implica que la malla es muy fina en la interfase, mientras que en el grueso de las fases la separación entre los puntos es grande. Como resultado, se logra una alta precisión debido a que el no suavizado de la transformación de coordenadas no afecta porque las derivadas de la transformación de coordenadas son calculadas analíticamente.

Ahora, se resuelve el modelo *phase-field* (156) usando el algoritmo de equidistribución con el proceso de continuación. La trayectoria de la solución estable es seguida usando los parámetros de la Tabla VII. En este caso, el parámetro  $\alpha$  define la concentración de puntos en la capa de transición, así como el parámetro  $\beta$  es usado para mejorar el suavizado en la transformación de coordenadas.



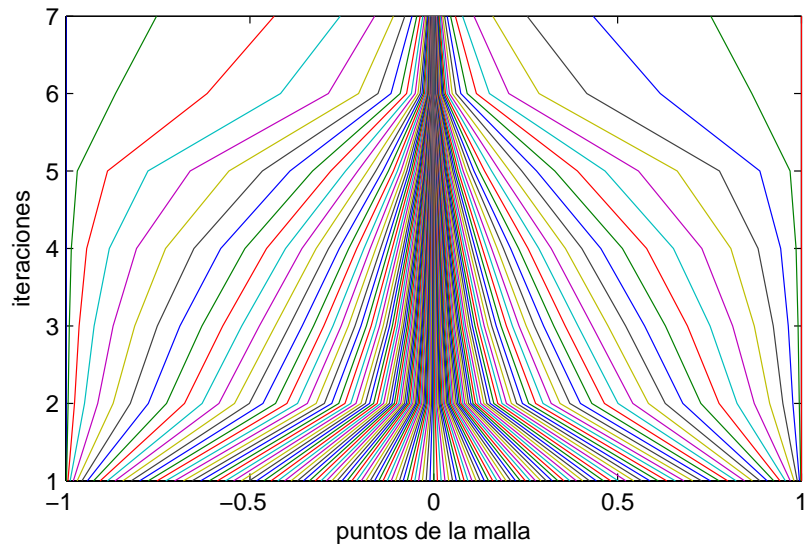


Figura 15: Trayectoria de la malla para el proceso de continuación, usando el método de Bayliss.

Tabla VII: Parámetros para el proceso de continuación en el modelo *phase-field*, usando equidistribución.

$\varepsilon$	$\alpha$	$\beta$	$L_\infty$ error
$10^{-2}$	—	—	$4.540 \times 10^{-5}$
$10^{-3}$	0.33	0.30	$3.868 \times 10^{-6}$
$10^{-4}$	0.36	0.34	$8.549 \times 10^{-6}$
$10^{-5}$	0.53	1.15	$3.978 \times 10^{-6}$
$10^{-6}$	0.77	1.96	$6.684 \times 10^{-3}$

El proceso de continuación inicia con parámetros tales que el algoritmo de equidistribución sea capaz de capturar la posición de la interfase. En la Figura 16a se muestra la solución numérica para la primera iteración en el proceso de continuación con el algoritmo de equidistribución.

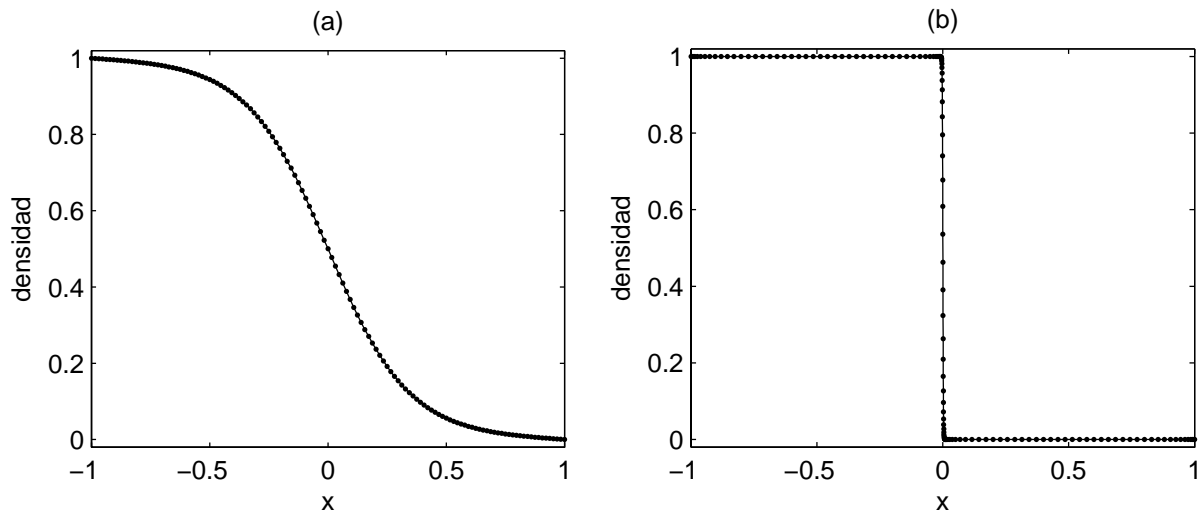


Figura 16: Solución del modelo phase-field, usando equidistribución mediante el proceso de continuación. (a) Primera iteración. (b) Última iteración.

En cada iteración del proceso de continuación, la solución previa se usa como solución inicial en el método de Newton. En la Figura 16b se grafica la solución numérica para la última iteración en el proceso de continuación con el algoritmo de equidistribución. Es importante destacar que no se presentan oscilaciones en la interfase. La Figura 17 muestra la trayectoria de la malla generada en el proceso de continuación con adaptación de malla, después de seis iteraciones. A diferencia de la trayectoria de la malla que resultó del método de Bayliss, desplegada en la Figura 15, en este caso, la malla en la frontera no es gruesa lo que resulta en un mejor suavizado en la transformación de coordenadas.

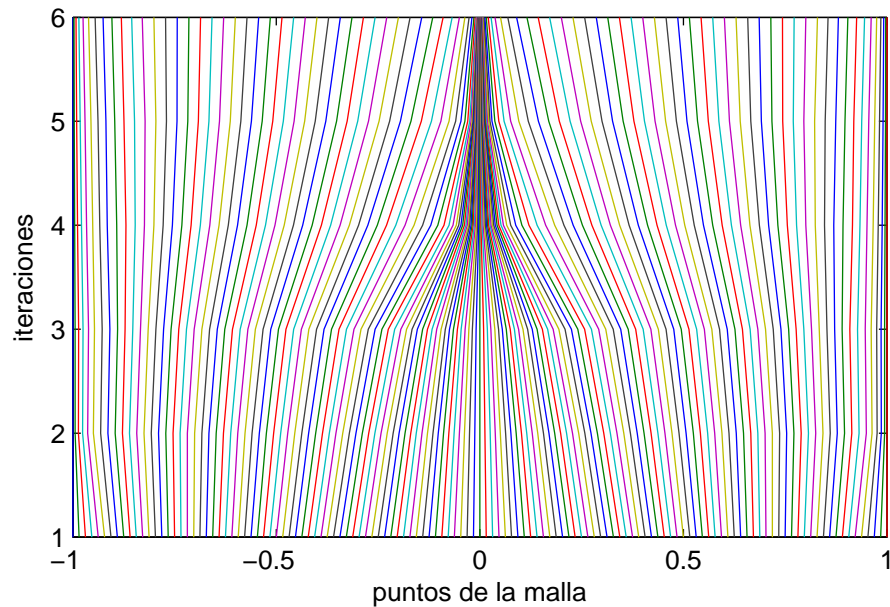


Figura 17: Trayectoria de la malla al resolver el modelo *phase-field* usando el algoritmo de equidistribución, con seis iteraciones en el proceso de continuación.

### III.3.3. Burbuja líquida sobre una superficie sólida

Existen problemas en dos dimensiones, donde la capa de transición se presenta a lo largo de una sola dirección. Por ejemplo, una gota líquida sobre una superficie sólida rodeada por un gas representada como un fluido de dos fases, en donde se usa la ecuación *phase-field* en dos dimensiones. Considerando un ángulo de contacto de  $\pi/2$  entre la interfase del fluido y la superficie sólida, la densidad es constante en la dirección angular y presenta una capa de transición en la dirección radial. La representación en coordenadas polares de la ecuación *phase-field* toma ventajas de estas características.

Tomando el medio disco como dominio, la discretización espectral más común es usar una discretización espectral de Fourier en la dirección angular  $\theta$  debido a la periodicidad de las condiciones de frontera, junto con una discretización dada por los puntos de colocación CGL en la dirección radial  $r$ , donde  $\theta \in [0, \pi]$  y  $r \in [0, 1]$ . Una descripción de

la discretización espectral del disco se encuentra en Trefethen (2000). En este trabajo, para modelar la burbuja líquida, se usa el método de colocación de Chebyshev en ambas direcciones, por lo tanto se agrupan muchos puntos de una manera natural en la interfase entre el sólido y el fluido al usar los puntos CGL en la dirección angular. Además se agrupan muchos puntos, en la región que separa las dos fases del fluido al usar adaptación de malla en la dirección radial usando el algoritmo de equidistribución.

En coordenadas polares la ecuación (100) se convierte en

$$-\varepsilon \left( \frac{\partial^2 \rho}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \rho}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 \rho}{\partial \theta^2} \right) + (\rho - 1)(2\rho - 1)\rho = 0. \quad (157)$$

La singularidad ficticia en  $r = 0$  que aparece al hacer el cambio de coordenadas rectangulares a polares, no se presenta porque se usa la condición de frontera  $\rho = 1$  en el origen. En la región donde el fluido no hace contacto con el sólido, la condición de frontera está dada por  $\rho = 0$ , mientras que en la interfase entre el fluido y el sólido se aplica la condición de frontera (103), obtenida en la derivación del modelo *phase-field*, que para un ángulo de contacto de  $\pi/2$  está dada por  $\nabla \rho \cdot \mathbf{n} = 0$ . Como resultado, se tiene que en el grueso de las fases, la densidad  $\rho$  tiene los valores de equilibrio  $\rho = 1$  para la fase líquida y  $\rho = 0$  para la fase gaseosa. En la Figura 18 se muestra la solución del modelo *phase-field* para una burbuja líquida para  $\varepsilon = 3,9 \times 10^{-5}$ , usando 51 puntos en la dirección radial, mientras que en la dirección angular son suficientes 24 puntos de colocación. La malla se adapta a la solución usando el algoritmo de equidistribución, con los parámetros en el proceso de continuación y suavizado que se muestran en la Tabla VIII

Se observa que como consecuencia de aplicar el proceso de continuación se llega a una interfase bastante delgada entre las fases líquida y gaseosa. Además se aprecia que el ángulo de contacto estático es de  $\pi/2$ .

Tabla VIII: Parámetros en el proceso de continuación para modelar una burbuja líquida, usando equidistribución.

$\varepsilon$	$\alpha$	$\beta$
$2,0 \times 10^{-2}$	—	—
$2,5 \times 10^{-3}$	0.42	0.30
$3,1 \times 10^{-4}$	0.45	0.32
$3,9 \times 10^{-5}$	0.5	0.34

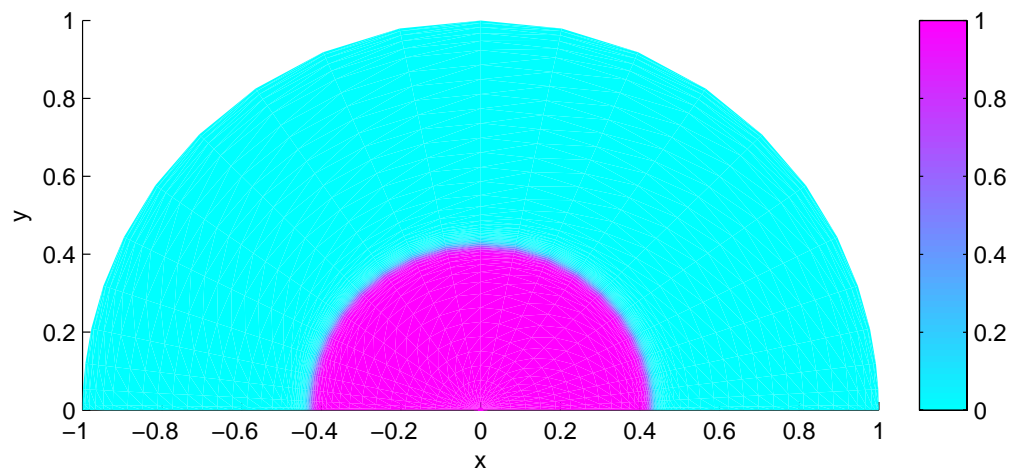


Figura 18: Burbuja líquida sobre una superficie sólida.

# Capítulo IV

## Adaptación de malla en dos dimensiones

En este capítulo se presenta un algoritmo de adaptación de malla en dos dimensiones basado en el principio de equidistribución de Huang y Sloan (1994). El algoritmo se aplica para resolver el modelo *phase-field* desarrollado en el capítulo II, para un fluido de dos fases contenido en un tubo y en contacto con una superficie sólida, en las paredes del tubo.

Diferentes técnicas numéricas han sido usadas para discretizar el modelo *phase-field*, en una variedad de aplicaciones. Por ejemplo, en Tan *et al.* (2006) la ecuación *phase-field* es discretizada usando un método de volumen finito con celdas centradas, aplicando un método de adaptación de malla con movimiento de nodos en una y dos dimensiones. En un trabajo reciente, Beckett *et al.* (2006) desarrollaron un método de adaptación de malla con movimiento de nodos usando elemento finito para la solución de la ecuación *phase-field* en dos dimensiones. Mackenzie y Robertson (2002) desarrollaron un método de movimiento de malla para problemas de cambio de fase en una dimensión modelados con la ecuación *phase-field*.

### IV.1. Transformación de coordenadas

En una dimensión, la posición de una capa interna está determinada por un punto, lo que significa que un mapeo analítico, como el definido por las relaciones (123 – 125),

se puede usar para que la malla adaptada permita obtener alta precisión, como se mostró en el capítulo anterior. En dos dimensiones, la capa de transición es en general una línea con forma arbitraria. Por lo tanto, aun conociendo la posición de la capa de transición, implementar un mapeo analítico del espacio computacional al espacio físico, no resulta ser una tarea fácil. Como consecuencia, lo más conveniente para adaptar la malla en dos dimensiones, es usar una transformación de coordenadas numérica del espacio computacional  $\Omega_c$  al espacio físico  $\Omega_f$  dada por

$$x = x(\xi, \eta), \quad y = y(\xi, \eta), \quad (158)$$

donde  $x, y$  son las variables físicas y  $\xi, \eta$  son las variables computacionales. Si  $u(x, y)$  es la solución en el espacio físico, y  $v(\xi, \eta) = u(x(\xi, \eta), y(\xi, \eta))$  es la solución en el espacio computacional de una ecuación diferencial. Usando la regla de la cadena las primeras derivadas parciales de la solución en los espacios físico y computacional están relacionadas por

$$u_x = v_\xi \xi_x + v_\eta \eta_x = (v_\xi y_\eta - v_\eta y_\xi) / J, \quad (159)$$

$$u_y = v_\xi \xi_y + v_\eta \eta_y = (-v_\xi x_\eta + v_\eta x_\xi) / J, \quad (160)$$

donde  $J = x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi$  es el Jacobiano de la transformación.

Repitiendo el uso de la regla de la cadena las segundas derivadas parciales de la solución en los espacios físico y computacional están relacionadas por

$$u_{xx} = v_\xi \xi_{xx} + (\xi_x)^2 v_{\xi\xi} + v_\eta \eta_{xx} + (\eta_x)^2 v_{\eta\eta} + 2v_{\xi\eta} \xi_x \eta_x, \quad (161)$$

$$u_{yy} = v_\xi \xi_{yy} + (\xi_y)^2 v_{\xi\xi} + v_\eta \eta_{yy} + (\eta_y)^2 v_{\eta\eta} + 2v_{\xi\eta} \xi_y \eta_y, \quad (162)$$

donde las segundas derivadas de la transformación están dadas por

$$\xi_{xx} = \frac{1}{J^3} \left[ -(y_\eta)^2 J_\xi + y_\xi y_\eta J_\eta + y_\eta y_{\xi\eta} J - y_\xi y_{\eta\eta} J \right], \quad (163)$$

$$\eta_{xx} = \frac{1}{J^3} \left[ -(y_\xi)^2 J_\eta + y_\xi y_\eta J_\xi - y_\xi y_{\xi\eta} J + y_\eta y_{\xi\xi} J \right], \quad (164)$$

$$\xi_{yy} = \frac{1}{J^3} \left[ -(x_\eta)^2 J_\xi + x_\xi x_\eta J_\eta + x_\eta x_{\xi\eta} J - x_\xi x_{\eta\eta} J \right], \quad (165)$$

$$\eta_{yy} = \frac{1}{J^3} \left[ -(x_\xi)^2 J_\eta + x_\xi x_\eta J_\xi + x_\xi x_{\xi\eta} J - x_\eta x_{\xi\xi} J \right]. \quad (166)$$

En el capítulo anterior, para el caso en una dimensión se recuperó la alta precisión del método de Chebyshev al resolver el modelo *phase-field* en el espacio computacional y usando adaptación de malla mediante una transformación de coordenadas. En dos dimensiones la representación del Laplaciano en el espacio computacional involucra la evaluación de una gran cantidad de derivadas parciales expresadas en las ecuaciones (161 – 166), que resultan de la transformación de coordenadas. Si esta transformación de coordenadas se realiza mediante un mapeo analítico, el cálculo de las derivadas de la transformación se obtiene en forma analítica, y no afectan en la precisión al calcular el Laplaciano en el espacio computacional. Cuando no es posible expresar la transformación mediante un mapeo analítico, es necesario calcular sus derivadas en forma numérica. Lo cual reduce significativamente la precisión, al usar el método de Chebyshev. Por lo tanto, para resolver el modelo *phase-field* en dos dimensiones, empleando el principio de equidistribución es conveniente emplear un método numérico como elemento finito, que no requiera que los nodos de la malla estén fijos, y de esta manera aplicar adaptación de malla en el espacio físico.



## IV.2. Método de Elemento Finito

El método de elemento finito es una técnica numérica, que permite resolver ecuaciones diferenciales con valores en la frontera. Inicialmente fue desarrollado y aplicado extensamente a problemas de análisis estructural en ingeniería civil y aeronáutica. En la actualidad, el método de elemento finito se aplica en una amplia variedad de problemas de ciencia e ingeniería. Existen básicamente dos enfoques del método de elemento finito, el enfoque variacional donde destaca el método de Ritz y el de residuos pesados, siendo el más usado el método de Galerkin.

En el método de residuos pesados como su nombre lo indica, busca la solución de la ecuación diferencial realizando una ponderación del residual de la solución numérica de la ecuación diferencial, una descripción del método se encuentra en Kwon y Bang (2000).

El método de elemento finito consiste en reemplazar un dominio continuo por subdominios pequeños con geometría sencilla, en los cuales la función desconocida está representada por funciones de interpolación simples con coeficientes desconocidos.

El análisis de elemento finito para problemas de valores en la frontera, se divide básicamente en

- 1.- Discretización o subdivisión del dominio en elementos.
- 2.- Selección de las funciones de interpolación.
- 3.- Formulación del sistema de ecuaciones.
- 4.- Solución del sistema de ecuaciones.

### IV.2.1. Subdivisión del dominio en elementos

El primer paso en el método de elemento finito es la discretización del dominio. La manera en que se discretice el dominio resulta importante ya que afectará la cantidad

de memoria, el tiempo de ejecución y la precisión de los resultados numéricos. El dominio completo  $\Omega$ , es subdividido en pequeños dominios, conocidos como elementos, los cuales se denotan por  $\Omega^e$ , para  $e = 1, 2, 3, \dots, N$ , donde  $N$  indica el número total de subdominios. Para un dominio en dos dimensiones, los elementos generalmente están representados por triángulos o rectángulos. Los elementos rectangulares son apropiados para discretizar regiones rectangulares, mientras que para dominios irregulares los elementos triangulares generan una mejor aproximación del dominio. En tres dimensiones, los elementos triangulares se extienden a tetraedros y los elementos rectangulares en hexaedros, de tal manera que los tetraedros son más apropiados para dominios con un volumen arbitrario.

Los elementos están definidos por nodos, una descripción completa de un nodo contiene los valores de sus coordenadas y la numeración tanto local como global. El número local de un nodo indica su posición en el elemento, mientras que el número global especifica su posición considerando el dominio completo.

Para resolver el modelo de *phase-field*, usamos elementos triangulares con un nodo en cada vértice. Lo anterior queda esquematizado en la Figura 19, en donde se considera la numeración local de los nodos en el sentido contrario al movimiento de las manecillas del reloj.

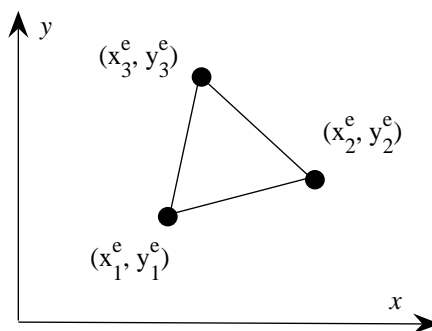


Figura 19: Numeración local de nodos para un elemento triangular

### IV.2.2. Selección de las funciones de interpolación

Para encontrar la aproximación numérica de la densidad  $\rho$  en el elemento  $e$  de la ecuación *phase-field*

$$-\varepsilon \nabla^2 \rho + (\rho - 1)(2\rho - 1)\rho = K, \quad (167)$$

se propone la aproximación lineal

$$\rho^e(x, y) = a^e + b^e x + c^e y, \quad (168)$$

para cada elemento. Los coeficientes  $a^e$ ,  $b^e$  y  $c^e$  son constantes que se tienen que determinar. En el método de elemento finito la aproximación (168), se debe expresar en función del valor de  $\rho$  en cada nodo del elemento  $e$ . Por lo tanto, se evalúa  $\rho^e(x, y)$  en los tres nodos

$$\rho^e(x_j, y_j) = a^e + b^e x_j + c^e y_j, \quad (169)$$

y se resuelve este sistema de ecuaciones para  $a^e$ ,  $b^e$  y  $c^e$ . De esta manera, se encuentra que la aproximación está dada por

$$\rho^e(x, y) = \sum_{j=1}^3 N_j^e(x, y) \rho_j^e, \quad (170)$$

donde  $\rho_j^e$  es la solución en el nodo  $j$  del elemento  $e$  y  $N_j^e$  son las funciones de interpolación correspondientes dadas por

$$N_j^e(x, y) = \frac{1}{2\Delta^e} (a_j^e + b_j^e x + c_j^e y), \quad (171)$$

donde

$$\begin{aligned} a_1^e &= x_2^e y_3^e - x_3^e y_2^e, & b_1^e &= y_2^e - y_3^e, & c_1^e &= x_3^e - x_2^e, \\ a_2^e &= x_3^e y_1^e - x_1^e y_3^e, & b_2^e &= y_3^e - y_1^e, & c_2^e &= x_1^e - x_3^e, \end{aligned}$$

$$a_3^e = x_1^e y_2^e - x_2^e y_1^e, \quad b_3^e = y_1^e - y_2^e, \quad c_3^e = x_2^e - x_1^e, \quad (172)$$

mientras que

$$\Delta^e = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & x_1^e & y_1^e \\ 1 & x_2^e & y_2^e \\ 1 & x_3^e & y_3^e \end{vmatrix} \quad (173)$$

es el área del elemento  $e$ . Cuando los índices  $i$  y  $j$  representan la numeración local de los nodos, toman los valores 1, 2 y 3.

En general, la solución numérica de una ecuación diferencial se aproxima en los nodos de una malla específica. Para encontrar la solución en un punto fuera de la malla, se debe emplear alguna técnica de interpolación posterior, que es independiente del método de solución de la ecuación diferencial. En el método de elemento finito la aproximación de la solución en cada elemento está dada explícitamente por la relación (170), es decir al encontrar la solución en los nodos, automáticamente se tiene la solución en todo el elemento  $e$  y como se encuentra la solución para todos los elementos, se tiene la solución en todo el dominio.

### IV.2.3. Formulación del sistema de ecuaciones

Usando el enfoque de residuos pesados, el residual de la aproximación numérica de la ecuación *phase-field* (167), con potencial químico  $K = 0$  está dado por

$$R = -\varepsilon \nabla^2 \rho + g(\rho)\rho, \quad (174)$$

donde  $g(\rho) = (\rho - 1)(2\rho - 1)$ . De esta manera, el residual ponderado del nodo  $i$ -ésimo para cada elemento  $e$  es

$$R_i^e = \int_{\Omega_e} w_i^e R dx dy, \quad (175)$$

donde  $w_i^e$  son las funciones peso correspondientes. Dentro del método de residuos pesados, existen diferentes variantes e.g. de colocación, mínimos cuadrados, de Galerkin, dependiendo de las funciones peso que se utilizan. En este trabajo, se aplica el método de Galerkin, en el cual las funciones peso  $w_i^e$  resultan ser las funciones de interpolación, es decir,

$$w_i^e = N_i^e. \quad (176)$$

Al reemplazar los valores de  $w_i^e$  y del residual  $R$  en (175), el residual para cada elemento se expresa como,

$$R_i^e = \int_{\Omega_e} N_i^e (-\varepsilon \nabla^2 \rho + g(\rho)\rho) dx dy. \quad (177)$$

Para simplificar la integración, es conveniente reducir el orden de diferenciación, para lo cual se emplea la formulación débil, que consiste en una integración, para bajar el orden de la derivada. Para realizar esto usamos la siguiente relación

$$\nabla \cdot (N_i^e \nabla \rho) = N_i^e \cdot \nabla^2 \rho + \nabla N_i^e \cdot \nabla \rho, \quad (178)$$

en la ecuación (177)

$$R_i^e = \int_{\Omega_e} (\nabla N_i^e \cdot \nabla \rho - \nabla \cdot (N_i^e \nabla \rho)) + N_i^e g(\rho)\rho dx dy. \quad (179)$$

Aplicando el teorema de la divergencia, se obtiene el residual en cada elemento  $e$

$$R_i^e = \int_{\Omega_e} \varepsilon \left( \frac{\partial N_i^e}{\partial x} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{\partial N_i^e}{\partial y} \frac{\partial \rho}{\partial y} \right) dx dy + g(\rho) \int_{\Omega_e} N_i^e \rho dx dy - \oint_{\partial \Omega_e} N_i^e \mathbf{D} \cdot \hat{n}^e d\Gamma, \quad (180)$$

donde  $\partial \Omega^e$  denota el contorno que encierra a  $\Omega^e$ , mientras que  $\hat{n}^e$  denota el vector unitario normal a  $\partial \Omega^e$ , y  $\mathbf{D}$  es el gradiente en dos dimensiones

$$\mathbf{D} = \left( \frac{\partial \rho}{\partial x} \hat{x} + \frac{\partial \rho}{\partial y} \hat{y} \right). \quad (181)$$

El residual pesado para el elemento  $e$ , se obtiene de (180) al substituir la aproximación de  $\rho$ , dada por (170), en la relación (180)

$$R_i^e = \sum_{j=1}^3 \left\{ \int_{\Omega^e} \varepsilon \left( \frac{\partial N_i^e}{\partial x} \frac{\partial N_j^e}{\partial x} + \frac{\partial N_i^e}{\partial y} \frac{\partial N_j^e}{\partial y} \right) \rho_j^e dx dy + \right. \\ \left. g(\rho^e) \int_{\Omega^e} N_i^e N_j^e \rho_j^e dx dy \right\} - \oint_{\Gamma^e} N_i^e \mathbf{D} \cdot \hat{n}^e d\Gamma. \quad (182)$$

Si usamos las llaves  $\{ \}$  para denotar vectores y los paréntesis cuadrados  $[ \ ]$  para denotar matrices, la relación (182) se representa en forma compacta de la siguiente manera.

$$\{R^e\} = \varepsilon [K^e] \{\rho^e\} + [M^e] \{\rho^e\} \{g(\rho^e)\} - \{h^e\}, \quad (183)$$

donde

$$K_{ij}^e = \int_{\Omega^e} \left( \frac{\partial N_i^e}{\partial x} \frac{\partial N_j^e}{\partial x} + \frac{\partial N_i^e}{\partial y} \frac{\partial N_j^e}{\partial y} \right) dx dy, \quad (184)$$

$$M_{ij}^e = \int_{\Omega^e} N_i^e N_j^e dx dy \quad (185)$$

y el vector que aparece al aplicar el teorema de la divergencia

$$h_i^e = \oint_{\Gamma^e} N_i^e \mathbf{D} \cdot \hat{n}^e d\Gamma. \quad (186)$$

Es importante resaltar que la aproximación para la densidad  $\rho$  expresada por (170) no está siendo evaluada en la función  $g(\rho)$ , la cual es no lineal.

Calculando las integrales (184 – 185) para cada elemento  $e$  se obtienen las matrices locales

$$K_{ij}^e = \frac{1}{4\Delta^e} (b_i^e b_j^e + c_i^e c_j^e) \quad (187)$$

$$M_{ij}^e = \frac{\Delta^e}{12} (1 + \delta_{ij}). \quad (188)$$

Para calcular la matriz global  $[\bar{K}^e]$  de cada elemento  $e$ , para cada nodo  $(x_n, y_n)$ ,

donde  $n = 1, 2, \dots, N$  es la numeración global de los nodos, se genera un vector  $1 \times N$ , si el nodo  $n$  no está en el elemento  $e$ , se tiene el vector  $\mathbf{0}$  en caso contrario  $\bar{K}_{nm}^e = K_{ij}^e$ , donde el nodo *enésimo* en la numeración global corresponde al nodo *iésimo* en la numeración local y el nodo *emésimo* en la numeración global es el nodo *jotaésimo* en la numeración local. De la misma manera, se encuentra la matriz global  $[\bar{M}^e]$ .

El sistema de ecuaciones no lineales se obtiene ensamblando las matrices globales  $[\bar{K}^e]$  y  $[\bar{M}^e]$  para cada elemento, entonces el residual global para un dominio con  $M$  elementos está dado por

$$\{R\} = \sum_{e=1}^M (\varepsilon [\bar{K}^e] + [\bar{M}^e] \{\bar{\rho}^e\} g(\rho) - \{\bar{h}^e\}) = \{0\}. \quad (189)$$

Los lados de los elementos internos no contribuyen al vector  $\{h\}$ , solo aquellos residuando en la frontera  $\partial\Omega$  tienen una contribución diferente de cero en la relación (186). Entonces  $h_i$  será cero si su nodo asociado  $i$  está dentro de  $\Omega$ , y tendrá un valor de acuerdo a las condiciones de frontera, si el nodo reside en la frontera  $\partial\Omega$ .

#### IV.2.4. Solución del sistema de ecuaciones

El método de elemento finito es local, lo cual implica que la matriz que representa el sistema de ecuaciones es escasa, por lo tanto no es necesario manipular la matriz completa. El sistema de ecuaciones (189) es no lineal y se resuelve aplicando el método de Newton. Para resolver la capa interna que se presenta en la solución del modelo *phase-field* (167) se aplica adaptación de malla usando el principio de equidistribución en dos dimensiones mediante un proceso de continuación.

### IV.3. Principio de equidistribución en dos dimensiones

Como se explicó en el capítulo III, el principio de equidistribución es un método intuitivo para adaptación de malla en una dimensión. Para el caso de dos dimensiones Huang y Sloan (1994) concluyen que el principio de equidistribución no se satisface globalmente en toda la malla, ellos desarrollan un método de adaptación de malla en dos dimensiones, aplicando el principio de equidistribución en forma local, usando líneas coordenadas, también conocido como método de adaptación línea por línea.

Una expresión para el principio de equidistribución, desarrollada por Huang y Sloan (1994), se escribe como

$$(d\mathbf{x}^T M d\mathbf{x})^{\frac{1}{2}} = c_1(n_j), \quad \text{para } 2 \leq j \leq NY - 1, \quad (190)$$

$$(d\mathbf{x}^T M d\mathbf{x})^{\frac{1}{2}} = c_2(n_i), \quad \text{para } 2 \leq i \leq NX - 1, \quad (191)$$

donde  $M$  denota la función monitor dada por  $c_1(n_j)$  y  $c_2(n_i)$  son constantes y la función monitor  $M$  en dos dimensiones está dada por

$$M = \alpha \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 & \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial y} & \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2 \end{bmatrix} + I. \quad (192)$$

Para obtener un conjunto de ecuaciones algebraicas, aplicando el principio de equidistribución, las relaciones (190 - 191) son discretizadas usando la cuadratura del punto medio, lo cual resulta en el siguiente sistema de ecuaciones

$$\left\{ \begin{bmatrix} x_{i+1,j} - x_{i,j} \\ y_{i+1,j} - y_{i,j} \end{bmatrix}^T M_{i+1/2} \begin{bmatrix} x_{i+1,j} - x_{i,j} \\ y_{i+1,j} - y_{i,j} \end{bmatrix} \right\}^{1/2} = c_1(\eta_j), \quad (193)$$



para  $1 \leq i \leq NX$ ,  $1 \leq j \leq NY - 1$  y

$$\left\{ \begin{bmatrix} x_{i,j+1} - x_{i,j} \\ y_{i,j+1} - y_{i,j} \end{bmatrix}^T M_{i,j+1/2} \begin{bmatrix} x_{i,j+1} - x_{i,j} \\ y_{i,j+1} - y_{i,j} \end{bmatrix} \right\}^{1/2} = c_2(\xi_i), \quad (194)$$

para  $1 \leq j \leq NY$ ,  $1 \leq i \leq NX - 1$ .

La matriz que expresa a la función monitor  $M$ , es transformada en el espacio computacional a

$$M(\xi, \eta) = \frac{\alpha}{J^2} \begin{bmatrix} u_\xi y_\eta - u_\eta y_\xi \\ -u_\xi x_\eta + u_\eta x_\xi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_\xi y_\eta - u_\eta y_\xi & -u_\xi x_\eta - u_\eta x_\xi \end{bmatrix} + I, \quad (195)$$

entonces se discretiza  $M$  en los puntos  $(\xi_{i+\frac{1}{2}}, \eta_{j+\frac{1}{2}})$  usando diferencias finitas centradas de segundo orden, para calcular las derivadas parciales  $x_\xi$ ,  $x_\eta$ ,  $y_\xi$ ,  $y_\eta$ ,  $u_\xi$  y  $u_\eta$ . A continuación se presenta el cálculo de  $u_\xi$  y  $u_\eta$

$$u_\xi \left( \xi_{i+\frac{1}{2}}, \eta_{j+\frac{1}{2}} \right) = \frac{1}{2h_\xi} (u_{i+1,j} - u_{i,j} + u_{i+1,j+1} - u_{i,j+1}), \quad (196)$$

$$u_\eta \left( \xi_{i+\frac{1}{2}}, \eta_{j+\frac{1}{2}} \right) = \frac{1}{2h_\eta} (u_{i,j+1} - u_{i,j} + u_{i+1,j+1} - u_{i+1,j}). \quad (197)$$

donde  $h_\xi = \xi_{i+1,j} - \xi_{i,j}$  y  $h_\eta = \eta_{i,j+1} - \eta_{i,j}$ . Las derivadas restantes se calculan de manera similar, se calcula la función monitor  $M_{i+1/2,j}$  en la dirección  $\xi$

$$M_{i+1/2,j} = \frac{1}{2} (M_{i+1/2,j+1/2} + M_{i+1/2,j-1/2}) \quad (198)$$

y  $M_{i,j+1/2}$  en la dirección  $\eta$

$$M_{i,j+1/2} = \frac{1}{2} (M_{i+1/2,j+1/2} + M_{i-1/2,j+1/2}).$$

La matriz que expresa la función monitor se puede suavizar, siguiendo el criterio

propuesto por Dorfy y Drury (1987), para dos dimensiones

$$M_{i+1/2,j} = \sum_{k=i-p}^{k=i+p} \sum_{l=j-p}^{l=j+p} M_{k+1/2,l} \left( \frac{q}{q+1} \right)^{|k-i|+|l-j|} \quad (199)$$

$$M_{i,j+1/2} = \sum_{k=i-p}^{k=i+p} \sum_{l=j-p}^{l=j+p} M_{k,l+1/2} \left( \frac{q}{q+1} \right)^{|k-i|+|l-j|}, \quad (200)$$

donde los parámetros  $p$  y  $q$  tienen el mismo significado del caso de una dimensión en la ecuación (136). Otra alternativa de suavizado es el filtro pasa bajas

$$\begin{aligned} M_{i,j} = & \frac{4}{16}M_{i,j} + \frac{2}{16}(M_{i+1,j} + M_{i-1,j} + M_{i,j+1} + M_{i,j-1}) \\ & + \frac{1}{16}(M_{i-1,j-1} + M_{i-1,j+1} + M_{i+1,j-1} + M_{i+1,j+1}), \end{aligned} \quad (201)$$

el cual es usado en los trabajos de Ceniceros y Hou (2001); y Huang y Russell (1999).

### IV.3.1. Algoritmo de equidistribución en dos dimensiones

Al igual que en una dimensión, en problemas en dos dimensiones, donde la capa de transición es muy delgada, la malla es adaptada usando un proceso de continuación, aunque el principio de equidistribución no es eficiente y tiene algunas dificultades de convergencia cuando se usa el método de Newton. En este trabajo, en vez del método de Newton se implementa un algoritmo de equidistribución con un número fijo de iteraciones. El método de continuación inicia con parámetros del problema que definen una interfase relativamente amplia, que garantizan que al menos un punto esté dentro de la interfase, para una malla uniforme en el espacio físico. De esta manera, la malla computacional está dada por una malla uniforme, mientras que en el espacio físico, la malla es inicialmente uniforme, y la posición de los nodos se ajusta a las características de la solución.

Los pasos en el proceso de continuación se resumen a continuación.

1. Se inicia con parámetros que definan una interfase relativamente amplia.
2. Se calcula la solución numérica  $u$ .
3. El contador de iteraciones en el proceso de continuación, se inicializa a uno.
4. Mientras que el contador de iteraciones sea mas pequeño que el total de iteraciones, se repiten los siguientes pasos.
  5. Se aplica el algoritmo de equidistribución usando como parámetros el valor de las coordenadas  $x$ ,  $y$  y la solución  $u$ .
  6. Actualizar los parámetros para una interfase más delgada.
  7. Calcular una nueva solución  $u$ , con la nueva malla  $(x_{new}, y_{new})$  obtenida con el algoritmo de equidistribución.
  8. Se incrementa el contador de iteraciones.

En el paso 5 del proceso de continuación se ejecuta el algoritmo de equidistribución, el cual consiste en los siguientes pasos.

1. Se inicializa el contador de iteraciones para el algoritmo de equidistribución, con  $k = 1$ .
2. Se calcula la función monitor  $M_{i+1/2,j}$  para cada línea coordenada en la dirección  $x$  y  $M_{i,j+1/2}$  en la dirección  $y$ .
3. Las constantes  $C_1$  y  $C_2$  se calculan para cada línea coordenada.
4. Se obtiene la longitud de cada subintervalo  $hx_{i,j}^{(k)}$  y  $hy_{i,j}^{(k)}$  para ambas direcciones  $x$  e  $y$ .
5. Se calculan los puntos de la malla  $x_{i,j}^{(k)}$  y  $y_{i,j}^{(k)}$  de  $hx_{i,j}^{(k)}$  y  $hy_{i,j}^{(k)}$  respectivamente.
6. Se aproxima la solución  $u^{(k)}$  usando interpolación.
7. Se actualiza el contador de iteraciones  $k = k + 1$ .
8. Si el contador de iteraciones  $k$  es más pequeño que el número de iteraciones ir al paso 2, en caso contrario, terminar y regresar la malla adaptada  $x_{i,j}^{(k)}$  y  $y_{i,j}^{(k)}$ .

## IV.4. Resultados numéricos

En esta sección se presentan resultados numéricos para demostrar la habilidad del algoritmo de equidistribución de agrupar puntos en regiones con gradientes altos. Primero se presenta una función analítica, donde los resultados numéricos demuestran la precisión y efectividad en el proceso de adaptación de malla. Posteriormente, se presentan resultados numéricos para el modelo *phase-field*.

### IV.4.1. Función analítica

Antes de aplicar el algoritmo de equidistribución en dos dimensiones para adaptar la malla en un problema *phase-field*, se estudia la generación de malla para la función analítica

$$u(x, y) = \tanh \left[ R \left( \frac{1}{16} - \left( x - \frac{1}{2} \right)^2 - \left( y - \frac{1}{2} \right)^2 \right) \right], \quad (202)$$

definida en el dominio rectangular  $[0, 1] \times [0, 1]$ . Esta es una función interesante, porque la malla necesita ser adaptada en todas las direcciones, la constante  $R > 0$  es un parámetro de perturbación, que define el grosor de la capa interna. La Figura 20 muestra la grafica y la malla adaptada para la función analítica en el espacio físico para  $R = 33$ , usando 50 puntos en cada dirección.

En este ejemplo fue necesario usar la función monitor suavizada para evitar que se deforme la malla, donde los gradientes altos se presentan en ambas direcciones. Considerando la simetría en  $y = x$  se probó el algoritmo de equidistribución, calculando el máximo de  $(x_{ij} - y_{ij}^T)$ , resultando un valor de  $10^{-14}$ .

### IV.4.2. Fluido de dos fases en un tubo

Ahora se presentan resultados numéricos para un fluido de dos fases contenido en un tubo, el dominio está dado por  $\Omega = [0, 1/2] \times [0, 1]$ . El método de elemento finito se usa

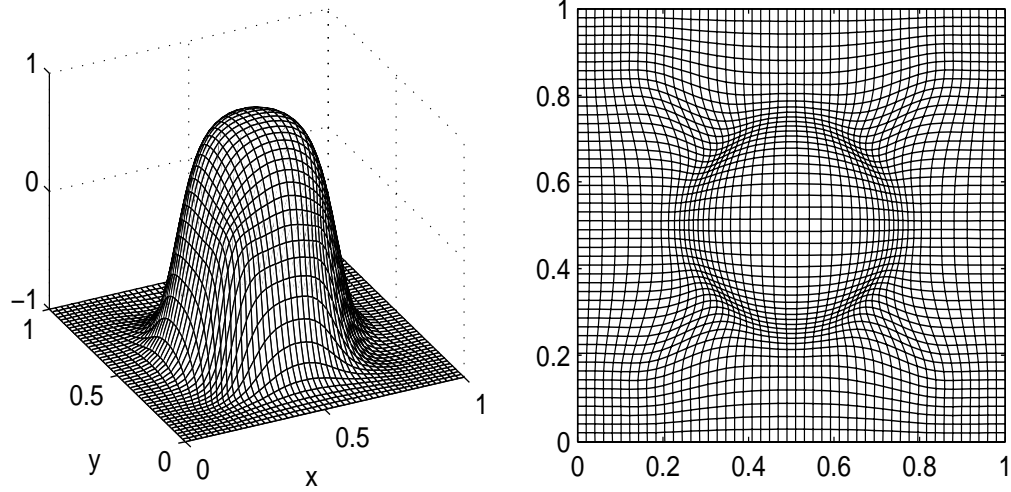


Figura 20: Adaptación de malla para una función analítica.

para resolver la ecuación *phase-field* (167), con una malla estructurada generada con triangulación Delaunay (Carey, 1997), la adaptación de malla se realiza en el espacio computacional, mientras que el modelo se resuelve en el espacio físico, usando el método de elemento finito, por lo tanto no es necesario calcular el Jacobiano de la transformación de coordenadas. Las condiciones de frontera que definen un fluido de dos fases, están dadas por  $\rho(x, 1) = 0$  en la parte superior del tubo,  $\rho(x, 0) = 1$  en la parte inferior, mientras que la condición de frontera en las paredes del tubo, está dada por  $\nabla\rho \cdot \mathbf{n} = C\rho(\rho - 1)$ , la cual determina un ángulo de contacto igual a  $\pi/2$  en la interface entre el fluido y el sólido, cuando  $C = 0$ . La solución numérica usando equidistribución para el fluido de dos fases se muestra en la Figura 21. Se observa la presencia de una capa de transición que separa las dos fases a la mitad del tubo.

Para calcular el error, consideramos el problema *phase-field* en una dimensión, para un dominio infinito con condiciones de frontera  $\rho_1(y) = 1$  cuando  $y \rightarrow -\infty$  y  $\rho_1(y) = 0$

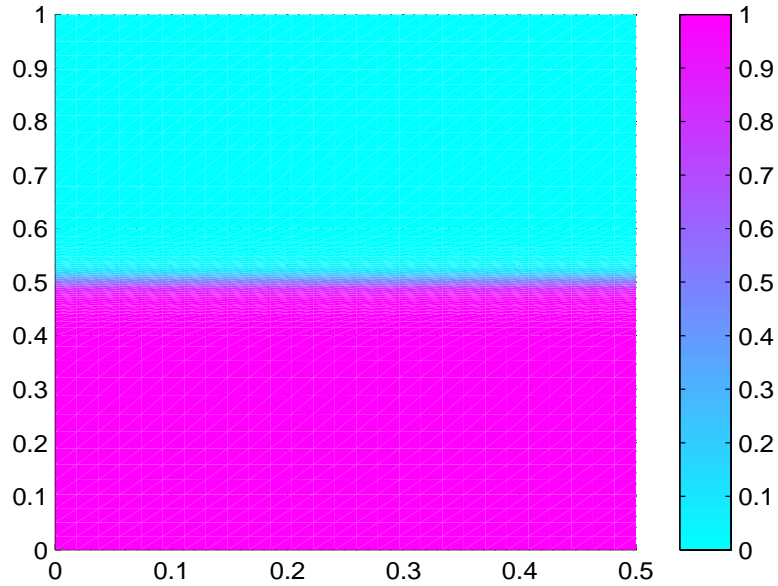


Figura 21: Fluido de dos fases en un tubo para un ángulo de contacto  $\theta_c = \pi/2$ .

cuando  $y \rightarrow \infty$ , la solución analítica está dada por

$$\rho_1(y) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \tanh \left( \sqrt{\frac{1}{\varepsilon}} \left( \frac{y - 0,5}{2} \right) \right). \quad (203)$$

La solución para el modelo *phase-field* en el tubo en la dirección  $y$  es muy cercana a la función  $\rho_1$  para  $0 < \varepsilon \ll 1$ . El dominio en el tubo es finito, entonces evaluamos la diferencia entre  $\rho_1$  y las condiciones de frontera. Por ejemplo, si  $\varepsilon = 2 \times 10^{-4}$  la diferencia es

$$\rho(x, 0) - \rho_1(0) = \rho(x, 1) - \rho_1(1) = 4,44 \times 10^{-16}. \quad (204)$$

Por lo tanto, podemos usar (203) como la solución analítica en la dirección  $y$  para calcular el error del método numérico. En este problema *phase-field* en dos dimensiones, el fenómeno superficial se presenta en una dirección. Esta característica se aplica para

probar la calidad del algoritmo de movimiento de malla. Usando el algoritmo de equidistribución se resuelve el modelo *phase-field* en un tubo, para  $\varepsilon = 10^{-4}$ , con  $N = 28$  y  $M = 64$  puntos en las direcciones  $x$  e  $y$  respectivamente. En el primer paso del proceso de continuación, la malla es uniforme con  $\varepsilon = 10^{-2}$ , entonces en cada iteración se asigna  $\varepsilon = \varepsilon/10$ . En la última iteración  $\varepsilon = 10^{-4}$ . El error de valor absoluto máximo es  $E = 7,9 \times 10^{-3}$ . La malla adaptada para el dominio completo se muestra en la Figura 22. Se observa que hay una alta concentración de puntos en una vecindad de la interfase. Una ampliación de la malla en esta región, se presenta en la Figura 23. Los resultados numéricos muestran líneas rectas en la malla, tanto en  $x$  como en  $y$ , lo cual es esperado teóricamente. En la dirección  $x$ , la densidad debe ser constante, esta característica de la solución se usa para probar la efectividad del método de adaptación.

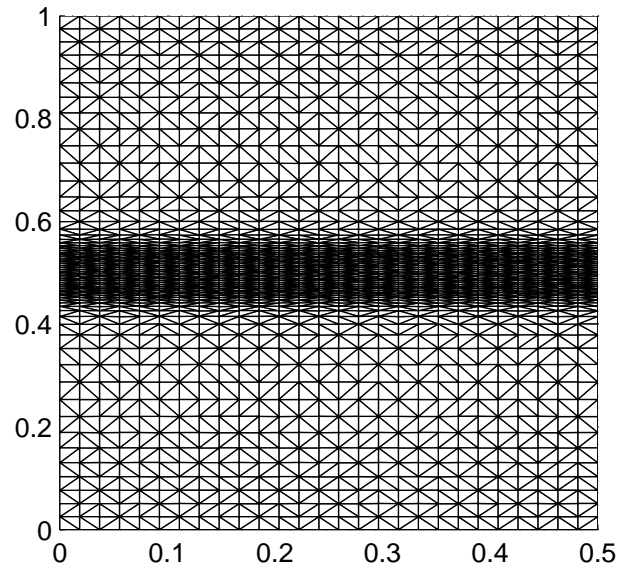


Figura 22: Malla adaptada en el dominio completo, para un fluido de dos fases con un ángulo de contacto  $\theta_c = \pi/2$ .

Entonces calculamos la diferencia entre el valor máximo y mínimo de la densidad

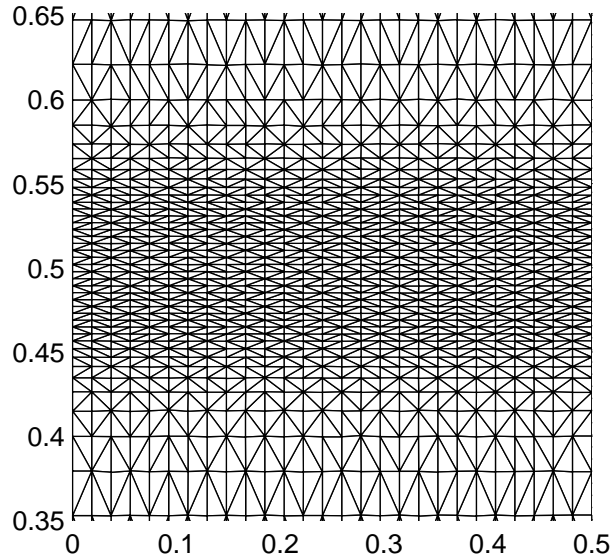


Figura 23: Malla ampliada en la interfase para un ángulo de contacto estático  $\theta_c = \pi/2$ .

para cada línea coordenada  $x$ . Tomando el valor más grande de estas diferencias, el resultado fuera de la interface es  $1,1 \times 10^{-4}$ , mientras que dentro de ella es  $1,2 \times 10^{-2}$ . Como un resultado de la adaptación de la malla, la relación de compresión definida como el cociente del tamaño de la malla uniforme y el tamaño mas pequeño de la malla adaptada es 30,7. Al resolver el modelo *phase-field*, las iteraciones en el método de Newton son ejecutadas hasta alcanzar una tolerancia de  $10^{-14}$ .

Ahora se modela un fluido de dos fases con un valor diferente de cero del parámetro  $C$  en la ecuación (103) que modela la interacción entre el fluido y el sólido. Al igual que en el caso anterior se usa un proceso iterativo de continuación en el grosor de la interfase, y además se aplica continuación en el parámetro  $C$ , iniciando con un valor de  $C = 0$ . Primero se modela un ángulo de contacto  $\theta_c < \pi/2$  en las paredes del tubo, usando un parámetro  $C < 0$ . En la Figura 24 se muestra la solución numérica.

Posteriormente se modela un ángulo de contacto  $\theta_c > \pi/2$  usando un valor positivo del parámetro  $C$ . La Figura 25 muestra los resultados



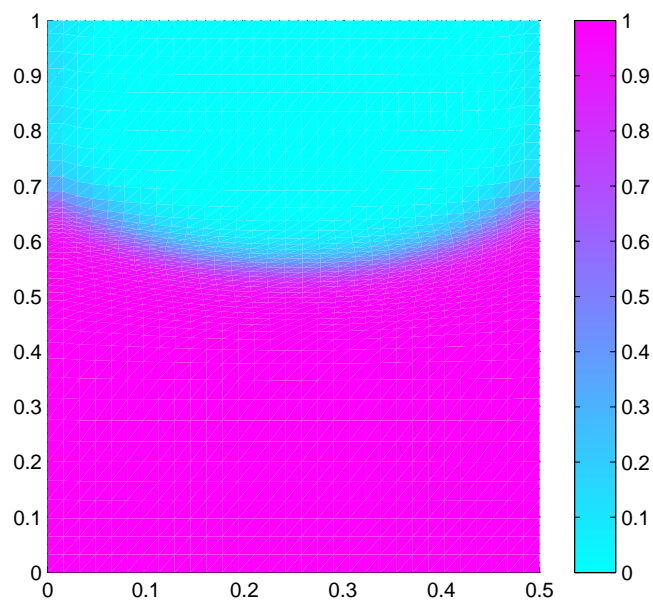


Figura 24: Fluido de dos fases en un tubo con un ángulo de contacto  $\theta_c < \pi/2$ .

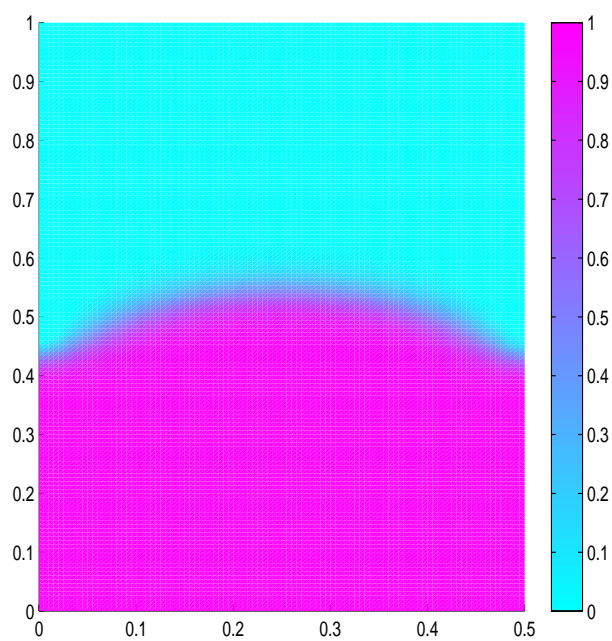


Figura 25: Fluido de dos fases en un tubo con un ángulo de contacto  $\theta_c > \pi/2$ .

# Capítulo V

## Conclusiones y Trabajo Futuro

En este trabajo, se deriva un modelo del tipo *phase-field*, para un fluido de dos fases mediante una formulación variacional para la energía, en la cual la densidad de masa juega el papel de parámetro de orden. Típicamente, en estos sistemas se siguen las ideas de van der Waals (1893), en donde la interacción superficial entre las fases aparece al dejar que la energía libre sea también una función de los gradientes locales de la densidad. Se obtiene la ecuación de conservación de masa considerando un movimiento de comparación y tomando la derivada material del Jacobiano de dicho movimiento. Las ecuaciones de evolución, se obtienen como un resultado de aplicar el principio de Hamilton, en la primera variación del Lagrangiano. Este sistema es equivalente a las ecuaciones de Navier Stokes, con un término adicional que modela la no homogeneidad. Además, las condiciones de frontera del sistema se obtienen como un resultado natural del proceso de aplicar el principio de Hamilton. Al final, se obtuvo un sistema de ecuaciones que captura la dinámica de uno o varios fluidos que pueden ser no homogéneos, en donde las capas superficiales que en los sistemas clásicos representan una superficie de discontinuidad, son reemplazadas por un región de grosor finito. Cabe destacar que en este modelo, las condiciones de frontera que se obtienen, son capaces de modelar la interacción de estas capas con un sólido, es decir la línea de contacto. Al interpretar este tipo de condiciones, el modelo puede mitigar los problemas asociados cuando se estudia la línea triple que se presenta en los modelos clásicos, ver los trabajos de Gennes (1985) y Dussan y Davis (1974). En el caso estático, se recupera la ecuación de Cahn y Hilliard (1958) en forma estacionaria, para un fluido de dos fases, la cual contiene

una expresión para modelar la interacción con el sólido, una condición similar a la que propone Jacqmin (1999).

Los métodos para buscar la solución de este tipo de modelos, deben ser capaces de capturar una interfase muy delgada. En este trabajo, se muestra explícitamente que cuando se utiliza un esquema numérico con una malla no adaptada en las regiones de cambios bruscos, este no es capaz de capturar apropiadamente las capas interiores. Aquí, se utiliza una malla adaptada que tiene la capacidad de capturar la interfase adecuadamente, utilizando una cantidad moderada de puntos. Primero se presenta la solución a un problema en un dimensión que presenta una capa interna, usando la transformación propuesta por Bayliss *et al.* (1995b). Con esto, se manifiesta la importancia en el suavizado de la transformación de coordenadas para recuperar la alta precisión del método de colocación de Chebyshev.

La estrategia que se siguió para la adaptación de malla, consiste en aplicar el principio de equidistribución usando una función monitor suavizada con un número fijo de iteraciones, manejada por un proceso de continuación. De esta manera, se obtuvo alta precisión usando un método de colocación de Chebyshev mapeado en una malla adaptada a la solución en el espacio físico. Una característica importante del algoritmo implementado, es que la solución de la ecuación de equidistribución se aproxima recursivamente con un número fijo de iteraciones. El movimiento de nodos es guiado por una función monitor suavizada. El algoritmo corre bajo un proceso de continuación y el cruzamiento de nodos se evita de una manera natural.

Se muestran los resultados numéricos para encontrar la solución del modelo *phase-field* para una burbuja líquida que descansa sobre una superficie sólida, usando coordenadas polares y aplicando el método de colocación de Chebyshev en ambas direcciones.

El algoritmo de equidistribución adaptativo en dos dimensiones está basado en el principio de equidistribución en una dimensión a lo largo de líneas coordenadas en el

espacio computacional. En este caso, se concluye que la precisión se reduce significativamente, al usar el método de colocación de Chebyshev mapeado en el espacio físico, debido a que la representación del Laplaciano en el espacio computacional involucra una gran cantidad de derivadas parciales. Se opta por usar el método de elemento finito que resuelve el problema en el espacio físico y la transformación de coordenadas se usa solo para la adaptación de malla. Se presenta una formulación de residuos pesados del método de elemento finito, para el modelo *phase-field*, obteniéndose la matriz que representa al sistema. Se muestran resultados numéricos para un fluido de dos fases contenido en un tubo, lográndose capturar una interfase muy delgada.

Los resultados numéricos indican que el algoritmo de equidistribución producen mallas que arrojan resultados con buena precisión para este tipo de modelos con una cantidad relativamente pequeña de puntos de colocación. Una mayor precisión se puede lograr, con la combinación de la flexibilidad de elemento finito y la alta precisión de los métodos espectrales, este enfoque numérico se conoce como método de elemento espectral.

Como trabajo futuro, para modelos *phase-field* de más de una dimensión se puede aplicar el método de elemento espectral. Además, se puede extender de una manera natural el principio de equidistribución por principios variacionales para realizar la adaptación de malla.

# Bibliografía

- Anderson, D. M., G. B. McFadden, y A. Wheeler 1998. “Diffuse-interface methods in fluid mechanics”. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 30:139-165 p.
- Badalassi, V. E., H. D. Ceniceros, y S. Banerjee 2003. “Computation of multiphase systems with phase field models”. *J. Comput. Phys.*, 190:371-397 p.
- Baltensperger, R. y M. R. Trummer 2003. “Spectral differencing with a twist”. *SIAM J. Sci. Comput.*, 24:1465-1487 p.
- Barosan, I., P. D. Anderson, y H. E. Meijer 2006. “Application of mortar elements to diffuse-interface methods”. *Computers Fluids*, 35:1384-1399 p.
- Batchelor, G. K. 2000. “An introduction to fluid dynamics”. Cambridge University Press. 634 pp.
- Bayliss, A., A. Class, y B. Matkowsky 1994. “Roundoff error in computing derivatives using the Chebyshev differentiation matrix”. *J. Comput. Phys.*, 116:380-383 p.
- Bayliss, A., A. Class, y B. J. Matkowsky 1995a. “Adaptive approximation of solutions to problems with multiple layers by Chebyshev pseudospectral methods”. *J. Comput. Phys.*, 116:160-172 p.
- Bayliss, A., A. Class, y B. J. Matkowsky 1995b. “Adaptive pseudo-spectral domain decomposition and the approximation of multiple layers”. *J. Comput. Phys.*, 119:132-141 p.
- Beckett, G., J. A. Mackenzie, A. Ramage, y D. M. Sloan 2001. “On the numerical solution of one-dimensional PDEs using adaptive methods based on equidistribution”. *J. Comput. Phys.*, 167:372-392 p.

- Beckett, G., J. A. Mackenzie, y M. L. Robertson 2006. "An r-adaptive finite element method for the solution of the two-dimensional phase-field equation". *Commun. Comput. Phys.*, 1(5):805-826 p.
- Bedford, A. 1985. "Hamilton's principle in continuum mechanics". Pitman publishing. 106 pp.
- Bedford, A. y D. Drumheller 1978. "A variational theory of immiscible mixtures". *Arch. Rational Mech. Anal*, 68:37-51 p.
- Boyd, J. P. 2001. "Chebyshev and Fourier spectral methods". Dover Publications, Inc., New York, second edition. 688 pp.
- Brackbill, J. U., D. B. Kothe, y C. Zemach 1992. "A continuum method for modeling surface tension". *J. Comput. Phys.*, 100:335-354 p.
- Budd, C. J., G. P. Koomullil, y A. M. Stuart 1998. "On the solution of convection-diffusion boundary value problems using equidistributed grids". *SIAM J. Sci. Comput*, 20:591-618 p.
- Cahn, J. W. y J. E. Hilliard 1958. "Free energy of a nonuniform system I. interfacial energy.". *J Chem. Phys*, 28:258-267 p.
- Canuto, C., M. Y. Hussaini, A. Quarteroni, y T. A. Zang 1988. "Spectral methods in fluid dynamics". Springer-Verlag, New York.
- Carey, G. F. 1997. "Computational grids: Generation, adaptation and solution strategies". Taylor Francis. 496 pp.
- Ceniceros, H. D. y T. Y. Hou 2001. "An efficient dynamically adaptive mesh for potentially singular solutions". *J. Comput. Phys.*, 172:609-639 p.
- de Boor, C. 1973. "Good aproximation by splines with variable knots II". *Lecture Notes Series 363*. Springer-Verlang, Berlin. 12-20 p.

- de Gennes, P. G. 1985. "Wetting: statics and dynamics". *Rev. Mod. Phys.*, 57(3):827-863 p.
- Don, W. S. y A. Solomonoff 1997. "Accuracy enhancement for higher derivatives using Chebyshev collocation and mapping technique". *SIAM J. Sci. Comput.*, 18:1040-1055 p.
- Dorfy, E. A. y L. O. Drury 1987. "Simple adaptive grids for 1-d initial value problems". *J. Comput. Phys.*, 69:175-195 p.
- Dussan, E. B. 1979. "On the spreading of liquids on solid surfaces: Static and dynamic contact lines". *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 11:371-400 p.
- Dussan, E. B. y S. H. Davis 1974. "On the motion of a fluid-fluid interface along a solid surface". *J. Fluid Mech.*, 65:71-95 p.
- Feng, W. M., P. Yu, S. Y. Hu, Z. K. Liu, Q. Du, y L. q. Chen 2006. "Spectral implementation of an adaptive moving mesh method for phase-field equations". *J. Comput. Phys.*, 220:498-510 p.
- Feng, X. 2006. "Fully discrete finite element approximations of the Navier-Stokes-Cahn-Hilliard diffuse interface model for two-phase fluid flows". *SIAM J. Numer. Anal.*, 44:1049-1072 p.
- Ferziger, J. H. y M. Peric 2002. "Computational methods for fluid dynamics". Springer, Berlin. 423 pp.
- Funaro, D. 1992. "Polynomial approximation of differential equations". Springer, Berlin. 305 pp.
- Greenspan, H. P. 1978. "On the motion of a small viscous droplet that wets a surface". *J. Fluid Mech.*, 84:125-143 p.
- Haley, P. J. y M. J. Miksis 1991. "The effect of the contact line on droplet spreading". *J. Fluid Mech.*, 223:57-81 p.

- Huang, W. y R. D. Russell 1999. "Moving mesh strategy based on a gradient flow equation for two-dimensional problems". *SIAM J. Sci. Comput.*, 20:998-1015 p.
- Huang, W. y D. M. Sloan 1994. "A simple adaptive grid in two dimensions". *SIAM J. Sci. Comput.*, 15:776-797 p.
- Jacqmin, D. 1999. "Calculation of two-phase Navier-Stokes flows using phase-field modeling". *J. Comput. Phys.*, 155:96-127 p.
- Jacqmin, D. 2000. "Contact-line dynamics of a diffuse fluid interface". *J. Fluid Mech.*, 402:57-88 p.
- Kosloff, D. y H. Tal-Ezer 1993. "A modified Chebyshev pseudospectral method with an  $O(n^{-1})$  time step restrictions". *J. Comput. Phys.*, 104:457-469 p.
- Kwon, Y. W. y H. Bang 2000. "The finite element method using matlab". CRC Press, second edition. 624 pp.
- Liu, C. y J. Shen 2003. "A phase field model for the mixture of two incompressible fluids and its approximation by a Fourier-spectral method". *Phys. D*, 179:211-228 p.
- López, P. G., S. G. Bankoff, y M. J. Miksis 1996. "Non-isothermal spreading of a thin liquid film on an inclined plane". *J. Fluid Mech.*, 324:261-286 p.
- López, P. G., M. J. Miksis, y S. G. Bankoff 1997. "Inertial effects on contact line instability in the coating of a dry inclined plate". *Phys. Fluids.*, 9:2177-2179 p.
- Lowengrub, J. y L. Truskinovsky 1998. "Quasi-incompressible cahn-hilliard fluids and topological transition". *Proc. Royal Soc. London*, 454:2617-2654 p.
- Mackenzie, J. 1998. "The efficient generation of simple two-dimensional adaptive grids". *SIAM J. Sci. Comput.*, 19:1340-1365 p.
- Mackenzie, J. A. y M. L. Robertson 2002. "A moving mesh method for the solution of the one-dimensional phase-field equations". *J. Comput. Phys.*, 181:526-544 p.



- Mead, J. L. y R. A. Renaut 2002. "Accuracy, resolution, and stability properties of a modified Chebyshev method". *SIAM J. Sci. Comput.*, 24:143-160 p.
- Mulholland, L. S., W. Z. Huang, y D. M. Sloan 1998. "Pseudospectral solution of near-singular problems using numerical coordinate transformations based on adaptivity". *SIAM J. Sci. Comput.*, 19:1261-1289 p.
- Mulholland, L. S., W. Y. Qiu, y D. M. Sloan 1997. "Solution of evolutionary partial differential equations using adaptive finite differences with pseudospectral post-processing". *J. Comput. Phys.*, 131:280-298 p.
- Peyret, R. 2002. "Spectral methods for incompressible viscous flow". Springer, New York. 448 pp.
- Pismen, L. M. y Y. Pomeau 2000. "Disjoining potential and spreading of thin liquid layers in the diffuse-interface model couples to hydrodynamics". *Phys. Rev. E*, 62:2480-2492 p.
- Qian, T., X.-P. Wang, y P. Sheng 2006. "Molecular hydrodynamics of the moving contact line in two-phase immiscible flows". *Commun. Comput. Phys.*, 1(1):1-52 p.
- Qiu, Y., D. M. Sloan, y T. Tang 2000. "Numerical solution of a singularly perturbed two-point boundary value problem using equidistribution: analysis of convergence". *J. Comput. and Appl. Mat.*, 116:121-143 p.
- Roos, H. G., M. Stynes, y L. Tobiska 1996. "Numerical methods for singularly perturbed differential equations". Springer, Berlin.
- Seppacher, P. 1996. "Moving contact lines in the Cahn-Hilliard theory". *Int. J. Engng. Sci.*, 34(9):977-922 p.
- Sussman, M., P. Semerka, y S. Osher 1994. "A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow". *J. Comput. Phys.*, 114:146-159 p.
- Szirtes, T. 2006. "Applied dimensional analysis and modeling". McGraw-Hill, second edition. 856 pp.

- Tan, Z., T. Tan, y Z. Zhang 2006. "A simple moving mesh method for one- and two-dimensional phase field". *J. Comput. and Appl. Mat*, 190:252-269 p.
- Tang, T. y M. R. Trummer 1996. "Boundary layer resolving pseudospectral methods for singular perturbation problems". *SIAM J. Sci. Comput.*, 17:430-438 p.
- Trefethen, L. 2000. "Spectral methods in matlab". SIAM. 184 pp.
- Unverdi, S. O. y G. Tryggvason 1992. "A front-tracking method for viscous, incompressible multi-fluid flows". *J. Comput. Phys.*, 100:25-37 p.
- van der Waals 1893. "The thermodynamic theory of capillarity under the hypothesis of a continuous density variation. transl. JS Rowlinson, 1979". *J. Stat. Phys.*, 20:197-244 p.
- Verschueren, M., F.Ñ. V. de Vosse, y H. Mejer 2001. "Diffuse-interface modelling of thermocapillary flow instabilities in a hele-shaw cell". *J. Fluid Mech.*, 434:153-166 p.
- Yue, P., J. J. Feng, C. Liu, y J. Shen 2004. "A diffuse-interface method for simulating two-phase flows of complex fluids". *J. Fluid Mech.*, 515:293-317 p.
- Yue, P., C. Zhou, J. J. Feng, C. F. Olliver-Gooch, y H. H. Hu 2006. "Phase-field simulations of interfacial dynamics in viscoelastic fluids using finite elements with adaptive meshing". *J. Comput. Phys.*, 219:47-67 p.

# Apéndice A

## Analisis dimensional

Las cantidades físicas involucradas en la formulación del modelo se pueden expresar en términos de las dimensiones básicas de masa, longitud y tiempo, denotadas por  $M$ ,  $L$  y  $T$  respectivamente. Es importante resaltar que el concepto de unidad es diferente al concepto de dimensión. Por ejemplo, la cantidad física velocidad puede ser medida en unidades de metros por segundo, millas por hora, etc.; mientras que la dimensión de la velocidad es longitud dividida entre tiempo ( $L/T$ ). Las leyes físicas deben permanecer sin alteración cuando las unidades fundamentales de dimensión son cambiadas. En la Tabla IX se muestran las dimensiones de las cantidades físicas que aparecen en la formulación del modelo.

Tabla IX: Dimensiones de las cantidades físicas que aparecen en la formulación del modelo phase-field.

Cantidada física	Símbolo	Dimensión
Energía cinética	$T$	$ML^2T^{-2}$
Energía interna	$U_F$	$ML^2T^{-2}$
Densidad de energía libre	$u_F$	$L^2T^{-2}$
No homogeneidad del fluido	$\mathbf{h}$	$M^{-1}L^6T^{-2}$
Doble potencial	$\rho u_F$	$ML^{-1}T^{-2}$
	$\omega$	$L^2T^{-2}$
Vector de línea externo	$\mathbf{r}$	$L^3T^{-2}$
Tensor de superficie	$\mathbf{P}$	$ML^{-1}T^{-2}$
Presión	$\lambda$	$ML^{-1}T^{-2}$
Coefficiente del gradiente	$\gamma$	$M^{-2}L^{10}T^{-2}$
Constante	$A^2$	$M^{-3}L^{11}T^{-2}$
Constante	$B^2$	$M^{-1}L^7T^{-2}$