

ESTUDIO COMPARATIVO DE ESQUEMAS DE CONVECCIÓN PARA EL TRANSPORTE DE LA FUNCIÓN DE LEVEL SET

L. Ruspini^a, R. Ausas^a, E. Dari^a, G. Buscaglia^b

^a*Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro, 8400, Bariloche, Argentina, e-mail:
ruspinil@ib.cnea.gov.ar, rfausas@gmail.com*

^b*Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Univ. de São Paulo, São Carlos, Brasil, e-mail:
gustavo.buscaglia@gmail.com*

Palabras Clave: Transporte de interfaces, Ecuaciones hiperbólicas, Método de Level Set, Esquemas TVD y ENO, Volúmenes Finitos.

Resumen.

En este trabajo se realiza un estudio comparativo de esquemas de convección para la función de level set, cuantificando el error introducido en la posición de la interfaz utilizando medidas de error específicas de interés en flujos a superficie libre. El algoritmo numérico empleado para el transporte de la función de level set, inicialmente desarrollado en una dimension espacial, está basado en un esquema de volúmenes finitos y puede ser utilizado inclusive con campos de velocidad de divergencia no nula. En éste, se considera una aproximación lineal por trozos de la función a transportar, para lo cual se emplean métodos del tipo TVD y ENO a fin de efectuar el cálculo de las pendientes involucradas. El esquema es extendido a mayor número de dimensiones espaciales mediante la técnica de "Dimensional Splitting". Finalmente, el método de transporte se complementa con un algoritmo de reinicialización que preserva la masa mediante ajustes basados en desbalances locales a diferencia de los algoritmos convencionales que emplean criterios globales de corrección.

1. INTRODUCCIÓN

El método de Level Set encuentra aplicaciones en las más diversas áreas de la industria y la ingeniería. Por ejemplo, en problemas de flujo multifásico en el área naval (Carrica et al., 2006), modelado de interfaces entre líquidos y gases o líquidos inmiscibles en problemas de flujo incompresible (Tornberg y Engquist, 2000; Luo et al., 2005), problemas de cambio de fase y solidificación (Benes, 2001; Schmidt, 1996), propagación de frentes de llama en problemas de combustión (Sethian, 1999), procesamiento digital de imágenes (Caselles et al., 1997; Sarti et al., 2000), optimización topológica de estructuras (Wang et al., 2003) entre otros.

En particular para problemas de movimiento de interfaces en flujos a superficie libre, debido a que la función de level set representa la interfaz aire/agua, la cual es una superficie material, el transporte gobierna el movimiento de la superficie a partir de un campo de velocidad dinámicamente equilibrado. En el cálculo de este transporte la difusión numérica es altamente indeseable ya que causa movimientos físicamente no realistas de la interfaz. Con el fin de tratar este problema, dentro del contexto de los métodos Eulerianos, los esquemas TVD (Total Variation Diminishing) y ENO (Essentially Non-oscillatory) de alto orden (Leveque, 2002; Harten y Osher, 1987; Osher y Sethian, 1988), han sido utilizados con éxito en algoritmos de volúmenes y diferencias finitas. Dichos métodos presentan limitada difusividad y comportamientos no oscilatorios.

En este trabajo se realiza un estudio comparativo de estos esquemas cuantificando el error introducido en la posición de la interfaz. Este tipo de estudios cuantitativos utilizando una medida de error específica de interés en flujos a superficie libre no ha sido aún realizado o al menos reportado en la literatura donde se suele realizar esta caracterización simplemente por medio de cálculos de pérdida de masa, que si bien son importantes, podrían ocultar falencias de los esquemas de transporte por fenómenos de compensación de error.

El algoritmo numérico propuesto para el transporte de la función de level set es presentado en detalle inicialmente en una dimensión espacial y está basado en un esquema de volúmenes finitos en combinación con los esquemas TVD y ENO antes mencionados. Posteriormente el esquema se extiende a mayor número de dimensiones espaciales mediante la técnica de "Dimensional Splitting" de la cual se presentan dos alternativas: "Godunov Splitting" y "Strang Splitting" que también son caracterizadas mediante la medida de error mencionada.

Finalmente, el esquema de transporte empleado se complementa con el algoritmo de reinicialización introducido por (Mut et al., 2006). El mismo, inicialmente desarrollado para mallas no estructuradas de elementos finitos es extendido en forma consistente con el esquema de volúmenes finitos usado. El algoritmo tiene la característica de preservar la masa mediante ajustes basados en desbalances de masa locales a diferencia de los algoritmos convencionales que emplean criterios globales de corrección.

2. EL MÉTODO DE LEVEL SET

En esta parte presentamos los conceptos básicos acerca del método de level set que empleamos a lo largo del trabajo.

Para comenzar, considérese una interfaz definida por una superficie $\Gamma \in \mathbb{R}^n$. Se desea analizar su evolución bajo un campo de velocidad \vec{u} arbitrario, que puede ser dependiente de la posición espacial, el tiempo, la geometría, etc. En principio, este problema está gobernado por la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{u}(\vec{x}) \quad (1)$$

que representa explícitamente el movimiento de la interfaz. Se dice que esta formulación es del tipo *Lagrangiano*.

La idea básica detrás del método de Level set, introducido por [Osher y Sethian \(1988\)](#), consiste en definir implícitamente la superficie Γ como la curva de nivel cero de una función ϕ . Entonces, si se llama Ω a la región delimitada por la superficie Γ , se asigna a la función ϕ las siguientes características:

$$\phi(\vec{x}, t) > 0 \quad \text{para } \vec{x} \in \Omega \quad (2)$$

$$\phi(\vec{x}, t) < 0 \quad \text{para } \vec{x} \notin \Omega \quad (3)$$

$$\phi(\vec{x}, t) = 0 \quad \text{para } \vec{x} \in \partial\Omega = \Gamma(t) \quad (4)$$

de lo cual se observa que la interfaz puede ser localizada mirando la curva (en dos dimensiones) o superficie (en tres dimensiones) a lo largo de la cual la función ϕ se anula a un dado tiempo.

El hecho de que cada punto de la interfaz evolucione de acuerdo a la Ec. (1) es consistente con la siguiente ecuación de transporte para la función ϕ tal como fue propuesto por Sethian y Osher:

$$\phi_t + \vec{u} \cdot \vec{\nabla}\phi = 0 \quad (5)$$

que es la llamada ecuación de Level Set. El objetivo principal de este trabajo entonces es el estudio de diferentes esquemas de volúmenes finitos para la resolución de esta ecuación en una y dos dimensiones espaciales.

3. FORMULACIÓN NUMÉRICA

Presentamos el método de volúmenes finitos empleado para el transporte de la función de level set. La descripción detallada se hace para el caso unidimensional. Este caso es de importancia, ya que los esquemas obtenidos son luego aplicados al extender el método a mayor número de dimensiones espaciales, lo cual se lleva a cabo mediante una técnica de “*Dimensional Splitting*” que está basada en la división del problema multidimensional en problemas unidimensionales independientes.

3.1. Método de Volúmenes Finitos - 1D

El método de volúmenes finitos, introducido por McDonald en 1971 y luego independientemente por McCormack y Paullay en 1972, se basa en la discretización de la formulación integral de las leyes de conservación. Si bien el método es bien conocido, y en particular su aplicación a problemas de transporte de interfaces con el método de level set ha sido estudiado recientemente en [Frolovic y Mikula \(2006\)](#) por ejemplo, donde se presenta el caso bidimensional, por razones de claridad y completitud presentamos las ideas básicas involucradas en la discretización de la ecuación de level set.

Se considera una discretización del dominio computacional en celdas o volúmenes de control $C_i = (x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}})$ (no necesariamente uniformes). Entonces, si se integra la Ec. (5) (en su versión unidimensional) sobre una celda C_i y a lo largo de un paso de tiempo $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ se obtiene

$$\int_{C_i} \int_{\Delta t} \{ \phi_t(x, t) + u(x) \phi_x(x, t) \} dt dx = 0 \quad (6)$$

luego de integración por partes para el segundo término y asumiendo un comportamiento suave de las derivadas dentro de cada celda computacional, se obtiene

$$\int_{C_i} \phi(x, t_{n+1}) - \phi(x, t_n) dx + \int_{\Delta t} \left[u(x) \phi(x, t) \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} - \int_{C_i} \frac{du(x)}{dx} \phi dx \right] dt = 0 \quad (7)$$

Ahora, dado que se pretende desarrollar esquemas de segundo orden, en este punto es conveniente introducir la siguiente aproximación lineal por trozos para la velocidad

$$u_h(x) = u(x_{i-\frac{1}{2}}) + \gamma_i (x - x_{i-\frac{1}{2}}) \quad x_{i-\frac{1}{2}} \leq x < x_{i+\frac{1}{2}} \quad (8)$$

en donde la pendiente γ_i viene dada por

$$\gamma_i = \frac{u(x_{i+\frac{1}{2}}) - u(x_{i-\frac{1}{2}})}{\Delta x_i}, \quad (9)$$

Entonces, haciendo un reordenamiento de términos en (7), no es difícil ver que resultan esquemas numéricos del tipo

$$Q_i^{n+1} \left(1 - \gamma_i \frac{\Delta t}{2} \right) = Q_i^n \left(1 + \gamma_i \frac{\Delta t}{2} \right) - \frac{\Delta t}{\Delta x_i} (F_{i+\frac{1}{2}}^n - F_{i-\frac{1}{2}}^n). \quad (10)$$

donde Q_i^n , que puede pensarse como el valor promedio de ϕ sobre la celda, viene dado por

$$Q_i^n = \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \phi(x, t_n) dx \quad (11)$$

y el flujo F queda definido como

$$F_{i-\frac{1}{2}}^n = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} u_h(x_{i-\frac{1}{2}}) \phi(x_{i-\frac{1}{2}}, t) dt \quad (12)$$

con una expresión análoga para $F_{i+\frac{1}{2}}^n$.

Cabe aclarar, que al tomar $\gamma_i = 0$ se obtienen esquemas del tipo

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x_i} (F_{i+\frac{1}{2}}^n - F_{i-\frac{1}{2}}^n) \quad (13)$$

los cuales posiblemente resulten más familiares al lector. Aún en este caso se pueden obtener esquemas de segundo de orden si la velocidad u es constante en todo el dominio.

Ahora, a fines de evaluar $F_{i-\frac{1}{2}}^n$ es necesario hacer alguna aproximación para $\phi(x_{i-\frac{1}{2}}, t_n)$, de manera tal de evaluar la integral en (12). Una posibilidad, con la cual se pueden obtener métodos de hasta segundo orden, consiste en asumir la siguiente representación lineal por trozos para ϕ

$$\phi_h(x, t_n) = Q_i^n + \sigma_i^n (x - x_i) \quad \text{para } x_{i-\frac{1}{2}} \leq x < x_{i+\frac{1}{2}} \quad (14)$$

(será justamente la definición de la pendiente σ_i^n lo que dará lugar a diferentes esquemas de volúmenes finitos).

Luego, basados en el hecho de que esencialmente $\phi(x_{i-\frac{1}{2}}, t) = \phi(x_{i-\frac{1}{2}} - u(x_{i-\frac{1}{2}})(t - t_n), t_n)$, no es difícil demostrar que $F_{i-\frac{1}{2}}^n$ tiene que ser de la forma

$$F_{i-\frac{1}{2}}^n = \begin{cases} u_h(x_{i-\frac{1}{2}}) Q_{i-1}^n + \frac{1}{2} u_h(x_{i-\frac{1}{2}})(\Delta x_{i-1} - u_h(x_{i-\frac{1}{2}}) \Delta t) \sigma_{i-1}^n & u_h(x_{i-\frac{1}{2}}) \geq 0 \\ u_h(x_{i-\frac{1}{2}}) Q_i^n - \frac{1}{2} u_h(x_{i-\frac{1}{2}})(\Delta x_i + u_h(x_{i-\frac{1}{2}}) \Delta t) \sigma_i^n & u_h(x_{i-\frac{1}{2}}) < 0 \end{cases} \quad (15)$$

y expresiones análogas para $F_{i+\frac{1}{2}}^n$.

Como se dijo, diferentes métodos de volúmenes finitos surgen de acuerdo al esquema empleado para determinar σ_i^n . En lo que sigue se presentan los esquemas que son comparados en este trabajo, a saber, *Esquemas Fijos de tres puntos*, *Esquemas TVD* y *Esquemas ENO*.

- **Esquemas Fijos de tres puntos**

Los cuatro esquemas que se pueden utilizar para hallar σ_i^n en este caso son:

$$\begin{aligned} \text{Simple Upwind: } \quad \sigma &= 0 \quad \forall u && \text{(Godunov)} \\ \text{Centered slope: } \quad \sigma_{Cs} &= \frac{Q_{i+1}^n - Q_{i-1}^n}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}} + \Delta x_{i-\frac{1}{2}}} \quad \forall u && \text{(Fromm)} \\ \text{Upwind slope: } \quad \sigma_{Us} &= \begin{cases} \frac{Q_i^n - Q_{i-1}^n}{\Delta x_{i-\frac{1}{2}}} & \text{si } u > 0 \\ \frac{Q_{i+1}^n - Q_i^n}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} & \text{si } u < 0 \end{cases} && \text{(Beam-Warming)} \\ \text{Downwind slope: } \quad \sigma_{Ds} &= \begin{cases} \frac{Q_{i+1}^n - Q_i^n}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} & \text{si } u > 0 \\ \frac{Q_i^n - Q_{i-1}^n}{\Delta x_{i-\frac{1}{2}}} & \text{si } u < 0 \end{cases} && \text{(Lax-Wendroff)} \end{aligned} \quad (16)$$

donde $\Delta x_{i-\frac{1}{2}}$ viene dado por

$$\Delta x_{i-\frac{1}{2}} = x_i - x_{i-1} = \frac{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}}{2}. \quad (17)$$

A excepción del esquema de Godunov que es de primer orden, los restantes esquemas son de segundo orden. Una falencia de estos métodos es que desarrollan oscilaciones espurias cerca de discontinuidades, para lo cual se proponen los esquemas TVD y ENO.

• Esquemas TVD

Harten introdujo el concepto de esquemas **TVD** (Total Variation Diminishing) para evitar la generación espuria de oscilaciones (Harten, 1983; Harten et al., 1987; Harten, 1984). Estos métodos tienen la propiedad de no aumentar la variación total, la cual se define en el caso discreto como

$$TV(Q) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} |Q_i - Q_{i-1}| \quad (18)$$

Entonces, un método será llamado TVD si para cualquier conjunto de datos Q^n , los valores Q^{n+1} satisfacen

$$TV(Q^{n+1}) \leq TV(Q^n) \quad (19)$$

Una particularidad muy importante de los métodos TVD, es la de conservar la monotonía de las soluciones, es decir, si $Q_i^n \geq Q_{i+1}^n$ se cumple que $Q_i^{n+1} \geq Q_{i+1}^{n+1} \forall i$.

Una forma de lograr que un método sea TVD es mediante la introducción de limitadores de pendiente. Para ello se define una función $\Psi(\theta)$ con $\theta = \frac{\sigma_{Us}}{\sigma_{Ds}}$ y se adopta una pendiente de “downwind” σ_i^n dada por

$$\sigma_i^n = \sigma_{Ds} \Psi(\theta). \quad (20)$$

Los diferentes esquemas de limitación de pendiente que se han usado en este trabajo son

$$\text{Min Mod} \quad \Psi(\theta) = \text{Minmod}(1, \theta) \quad (21)$$

$$\text{Super Bee} \quad \Psi(\theta) = \max(0, \min(1, 2\theta), \min(2, \theta)) \quad (22)$$

$$\text{Mc limiter} \quad \Psi(\theta) = \max(0, \min(\frac{1+\theta}{2}, 2, 2\theta)) \quad (23)$$

$$\text{Van Leer} \quad \Psi(\theta) = \left(\frac{\theta + |\theta|}{1 + |\theta|} \right) \quad (24)$$

donde la función Minmod está definida por

$$\text{Minmod}(a,b) = \begin{cases} a & \text{si } |a| < |b| \text{ y } ab > 0 \\ b & \text{si } |b| < |a| \text{ y } ab > 0 \\ 0 & \text{si } ab \leq 0 \end{cases} \quad (25)$$

Una descripción detallada de estos métodos de limitación de pendiente puede ser consultada en [Leveque \(2002\)](#).

• Esquemas ENO

Los esquemas ENO (**E**ssentially **N**on-**O**scillatory) han sido también desarrollados a fines de eliminar oscilaciones espurias de la solución. Los mismos fueron introducidos por Harten y Osher y a diferencia de los esquemas TVD, permiten el aumento de la variación total (ver Ec. (18)). En éstos se impone la restricción de no incrementar el número de extremos locales de la función aproximante ϕ_h en el tiempo. Este hecho es suficiente para garantizar que la aplicación de estos métodos a un conjunto de datos monótonos, resulta también en una función monótona. Si bien esta restricción resulta ser más débil que la de los métodos TVD, permite obtener métodos de alto orden bajo cualquier condición del sistema.

En este caso la idea es definir una función interpolante $H(x, Q)$ y una pendiente σ_i^n como

$$\sigma_i = \text{Minmod} \left(\frac{d}{dx} H(x_i - 0, Q), \frac{d}{dx} H(x_i + 0, Q) \right) \quad (26)$$

Entonces, para que el método sea no oscilatorio es necesario que la función interpolante sea no oscilatoria. De la Ec. (26), es posible verificar que para obtener un método de segundo orden es necesario que se cumpla

$$\frac{d}{dx} H(x \pm 0, Q) - \frac{d}{dx} \phi = \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (27)$$

por lo tanto, la función interpolante $H(x, Q)$ debe cumplir con

$$H(x, Q) - \phi = \mathcal{O}(\Delta x^3) \quad (28)$$

para lo cual se puede usar la siguiente función interpolante cuadrática en el intervalo $x_i \leq x \leq x_{i+1}$

$$H(x_i, Q) = Q_i + d_{i+\frac{1}{2}} Q \cdot \frac{(x - x_i)}{\Delta x} + \frac{1}{2} D_{i+\frac{1}{2}} Q \cdot \frac{(x - x_i)(x - x_{i+1})}{\Delta x^2} \quad (29)$$

De esta forma, para garantizar que la función interpolante sea no oscilatoria debe definirse lo siguiente

$$\sigma_i^n = \text{Minmod} (S_i^+, S_i^-) \quad (30)$$

donde

$$\left\{ \begin{array}{l} S_i^\pm = \frac{1}{\Delta x_{i\pm\frac{1}{2}}} d_{i\pm\frac{1}{2}} Q \mp \frac{1}{2\Delta x_{i\pm\frac{1}{2}}} D_{i\pm\frac{1}{2}} Q \\ d_{i+\frac{1}{2}} Q = Q_{i+1} - Q_i \\ D_{i+\frac{1}{2}} Q = \Delta x_{i+\frac{1}{2}} \text{Minmod}(D_i Q, D_{i+1} Q) \\ D_i Q = \frac{Q_{i+1} - Q_i}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} - \frac{Q_i - Q_{i-1}}{\Delta x_{i-\frac{1}{2}}} \end{array} \right. \quad (31)$$

Una descripción exhaustiva de estos esquemas puede ser consultada en [Harten y Osher \(1987\)](#) o [Harten et al. \(1987\)](#).

Finalmente, como es bien sabido, la condición necesaria para la convergencia de este tipo de esquemas numéricos queda expresada a través del número de Courant ν como sigue

$$\nu \equiv \max \left| \frac{u(x_i) \Delta t}{\Delta x_i} \right| < 1 \quad (32)$$

3.2. Formulación Multidimensional - “*Dimensional Splitting*”

El primer paso en la formulación numérica del problema para mayor número de dimensiones espaciales consiste en la aplicación de un esquema de “*Dimensional Splitting*” ([Leveque, 2002](#)). Como se dijo anteriormente, esto consiste básicamente en la separación del problema multidimensional en problemas independientes para cada una de coordenadas espaciales.

Para fijar ideas, consideremos el caso lineal bidimensional dado por

$$\begin{aligned} \phi_t + u \phi_x + v \phi_y &= 0 \\ \phi(x, y, 0) &= \phi^0(x, y) \end{aligned} \quad (33)$$

el cual puede ser dividido en dos problemas unidimensionales como sigue

$$\phi_t + u \phi_x = 0 \quad (34)$$

$$\phi_t + v \phi_y = 0 \quad (35)$$

La solución entonces, consiste simplemente en tomar ϕ^0 como condición inicial de la Ec. (34) y a la solución obtenida, como condición inicial de la Ec. (35).

Para ver esto, considérese el caso lineal. La solución exacta de (34) es de la forma

$$\phi^*(x, y, t) = \phi^0(x - ut, y) \quad (36)$$

y del mismo modo, tomando como condición inicial ϕ^* , la solución exacta de (35) queda

$$\phi^{**}(x, y, t) = \phi^*(x, y - vt) \quad (37)$$

con lo cual, la solución al problema lineal utilizando *Dimensional Splitting*, estará dada por

$$\phi^{**}(x, y, t) = \phi^0(x - ut, y - vt) \quad (38)$$

que resulta justamente la solución exacta del sistema inicial (33).

En cuanto a la formulación numérica del problema general, hay dos esquemas que se usan habitualmente dentro del contexto del método de volúmenes finitos y que hemos escogido para los ejemplos que se mostrarán, a saber, los métodos *Godunov Splitting* y *Strang Splitting*.

• *Godunov Splitting*

En este caso, el esquema de volúmenes finitos, que por simplicidad se presenta para el caso lineal con tamaño de celda Δx uniforme, resulta como sigue

$$Q_{ij}^* = Q_{ij}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(F_{i+\frac{1}{2},j}^n - F_{i-\frac{1}{2},j}^n \right) \quad (39)$$

$$Q_{ij}^{n+1} = Q_{ij}^* - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(G_{i,j+\frac{1}{2}}^* - G_{i,j-\frac{1}{2}}^* \right) \quad (40)$$

tomando para F y G las definiciones de flujos presentadas anteriormente para el caso unidimensional. Si bien para el caso lineal, no se introduce ningún error debido al *Splitting*, en el caso general no lineal el error del esquema *Godunov Splitting* resulta ser de primer orden, es decir $\mathcal{O}(\Delta t)$.

• *Strang Splitting*

Este esquema puede escribirse de la siguiente forma

$$Q_{ij}^* = Q_{ij}^n - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left(F_{i+\frac{1}{2},j}^n - F_{i-\frac{1}{2},j}^n \right) \quad (41)$$

$$Q_{ij}^{**} = Q_{ij}^* - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(G_{i,j+\frac{1}{2}}^* - G_{i,j-\frac{1}{2}}^* \right) \quad (42)$$

$$Q_{ij}^{n+1} = Q_{ij}^n - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left(F_{i+\frac{1}{2},j}^{**} - F_{i-\frac{1}{2},j}^{**} \right). \quad (43)$$

El esquema resulta de segundo orden aunque es posible que en algunos casos se introduzca un error adicional debido al hecho de que se está transportando a la función con un número de Courant cuyo valor es la mitad del anterior. Por otro lado, es evidente que el costo computacional de este método es mayor. La elección del esquema de *Dimensional Splitting* a utilizar, resulta una solución de compromiso y muchas veces por sencillez se elige al esquema *Godunov Splitting*.

3.3. Acondicionamiento del Level Set - Reinicialización

Aún utilizando métodos numéricos de alto orden de convergencia en la resolución de la ecuación de Level Set, es posible obtener resultados erróneos cuando la función ϕ se vuelve muy abrupta o plana o pierda su regularidad. Para reducir los errores numéricos provocados por estos fenómenos, [Chopp \(1993\)](#), introduce el concepto de **reinicialización** de la función ϕ . A partir

de este trabajo, han sido definidas un gran número de diferentes técnicas de reinicialización (ver [Adalsteinsson y Sethian \(1995\)](#); [Sussman et al. \(1994\)](#); [Sussman y Fatemi \(1999\)](#); [Mut \(2003\)](#)).

El concepto básico asociado a la reinicialización es realizar periódicamente una re-definición de la función de Level Set para eliminar posibles anomalías como resultado del transporte, que pudieran provocar resultados erróneos, pero manteniendo la interfaz que está siendo transportada. Se encuentra que una buena elección para inicializar ϕ antes de efectuar la operación de transporte resulta ser la “función distancia con signo”. Para esto se define la función distancia como

$$d(\vec{x}) = \min|\vec{x} - \vec{x}_l| \quad \forall \quad \vec{x}_l \in \partial\Omega \quad (44)$$

donde se puede ver que $d(\vec{x}) = 0$ para todos aquellos puntos que pertenecen a la interfaz representada por Γ .

Luego, la función distancia con signo ϕ_d , quedará definida de la siguiente manera:

$$\phi_d(\vec{x}, t) = d(\vec{x}) \quad \text{para } \vec{x} \in \Omega \quad (45)$$

$$\phi_d(\vec{x}, t) = -d(\vec{x}) \quad \text{para } \vec{x} \notin \Omega \quad (46)$$

$$\phi_d(\vec{x}, t) = 0 \quad \text{para } \vec{x} \in \partial\Omega = \Gamma(t) \quad (47)$$

Para el caso unidimensional, usando (44), el proceso de reinicialización, es decir, el cálculo de ϕ_d , es trivial una vez detectada la interfaz.

Por otra parte, para el caso bidimensional, el método de reinicialización que hemos escogido en este trabajo es el introducido por Mut (ver [Mut \(2003\)](#); [Mut et al. \(2006\)](#)). Las ventajas de este método sobre otros existentes, es la de cumplir con una estricta conservación de la “masa” o volumen limitado por el level set. El método se basa en producir ajustes en la función ϕ basados en desbalances de masa locales, a diferencia de muchos métodos que se basan en criterios globales de corrección. El mismo fue desarrollado para mallas no estructuradas de triángulos lineales, y debe extenderse apropiadamente a fines de ser empleado en conjunto con la discretización de volúmenes finitos para el transporte de la función ϕ . Una descripción detallada del método cae fuera del alcance de este trabajo y puede ser consultada en las referencias propuestas.

4. RESULTADOS NUMÉRICOS

En esta sección presentamos ejemplos numéricos donde se aplican los esquemas de transporte y reinicialización propuestos anteriormente a casos en una y dos dimensiones espaciales.

4.1. Medidas de Error

Antes de pasar a los resultados numéricos conviene describir las medidas de error empleadas en la evaluación de los esquemas de transporte.

- *Caso Unidimensional*

Para el caso unidimensional es necesario simplemente detectar los cruces por cero de la función ϕ . Para el caso de esquemas de hasta segundo orden, se debe emplear la siguiente fórmula para hallar el punto de cruce por cero x_c

$$x_c = x_j + \frac{0 - Q_j}{Q_{j+1} - Q_j} \frac{\Delta x_{j+1} + \Delta x_j}{2} \quad (48)$$

para todas aquellas celdas C_i en que el valor de nivel cero se encuentre entre los valores Q_{j+1} y Q_j . Otra alternativa considerada fue emplear la representación lineal por trozos de la función ϕ (ver Ec. (14)) con la pendiente σ_i^n del esquema empleado, pero se encontró que esto posee mayor error, no produce una mejora en el orden del método y además la interfaz no en todos los casos queda bien definida.

Una vez detectado el level set, el error simplemente se calcula comparando los valores x_c con los valores exactos x_e en el tiempo. Es decir, el error del esquema de transporte estará dado por

$$E_{l\infty} = \max |x_c - x_e| \quad \forall x_c, t \quad (49)$$

- *Caso Bidimensional*

Pasando al caso bidimensional, por un lado, se calculará el área encerrada por el level set que se denotará por $A(t)$ y se calcula como sigue

$$A(t) = \text{Medida}\{\Omega(t)\} = \int_{\Omega(t)} H(\phi) d\Omega \quad (50)$$

con $H(\phi)$ la función de Heavyside, la cual es cero fuera de Ω_c ($\phi < 0$) e igual a uno adentro de Ω_c ($\phi \geq 0$).

Por otra parte, se introduce una nueva medida de error en el transporte, que se denotará por $E(t)$ y estará dada por

$$E(t) = \text{Medida}\{(\Omega_e - \Omega_c) \cup (\Omega_c - \Omega_e)\} \quad (51)$$

donde el subíndice c denota la solución computada y e la exacta. Nótese que $E(t)$ es la medida del conjunto representado por la región sombreada en la figura 1. Esta medida de error permite detectar deformaciones de la interfaz debido al transporte, las cuales podrían pasar inadvertidas con el simple cálculo de $A(t)$ en el caso de existir compensación de errores. Como en el caso anterior, el error de los métodos se calculará evaluando el máximo error en el tiempo, es decir

$$E_{l\infty} = \max\{E(t)\} \quad \forall t \quad (52)$$

4.2. Casos Unidimensionales

Se presentarán dos ejemplos numéricos unidimensionales que corresponden a un campo de velocidad lineal y un campo de velocidad hiperbólico. Si bien estos ejemplos son sencillos, permiten mostrar las principales características de los esquemas numéricos introducidos.

- *Caso 1* \rightarrow *Campo de velocidad lineal*

En este caso el campo de velocidad tiene simplemente un comportamiento lineal del tipo

$$u(x) = \bar{u} x$$

donde \bar{u} es una constante.

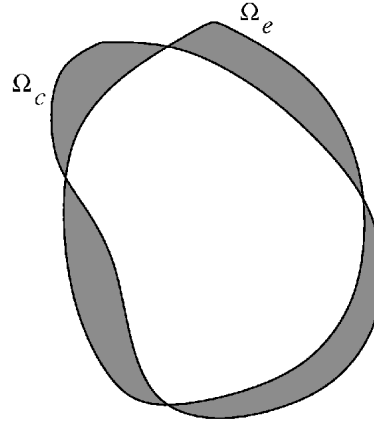


Figura 1: Regiones Ω_c y Ω_e definidas por la interfaz transportada en forma aproximada y exacta respectivamente.

Este caso es de interés ya que muestra la necesidad de considerar la interpolación lineal por trozos para la velocidad dada en la Ec. (8) si es que se pretende obtener esquemas de segundo orden. Para ver esto, en la Fig. 2(a) se muestran los órdenes de convergencia para el error en la posición de la interfaz, obtenidos mediante la aplicación del esquema de volúmenes finitos (13) con los métodos Godunov, TVD y ENO. Se puede ver que todos los esquemas resultan de primer orden, lo cual se puede verificar fácilmente mediante un análisis de convergencia.

Por otra parte, cuando se considera la interpolación lineal por trozos para $u(x)$, para lo cual se emplea el esquema de volúmenes finitos (10), los métodos TVD y ENO resultan de segundo orden como se esperaba, mientras que el método de Godunov resulta de primer orden, ver Fig. 2(b).

- **Caso 2** \rightarrow *Campo de velocidad hiperbólico*

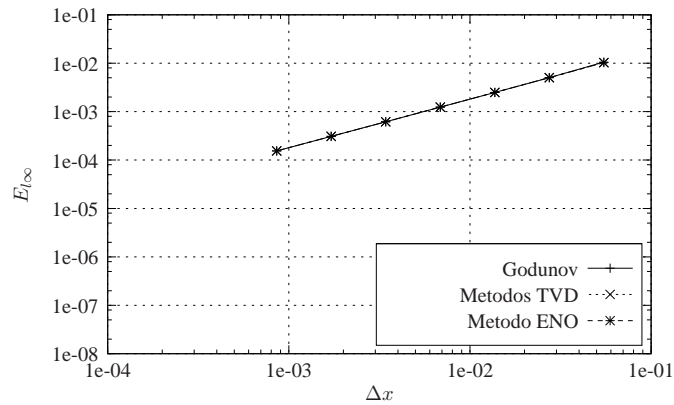
En este caso se considera un campo de velocidad dado por

$$u(x) = \frac{\bar{u}}{x}$$

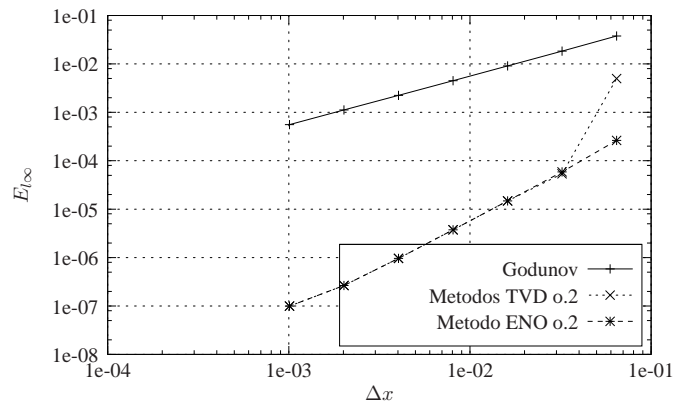
En la Fig. 3 se observa la solución numérica obtenida mediante algunos de los métodos a diferentes tiempos, así como la solución exacta del problema. En todos los casos, se toma un número de Courant $\nu = 0,9$ y una discretización uniforme de 50 celdas. Si bien, para el esquema de Lax-Wendroff con reinicialización se observa una disipación importante, el error de nivel (es decir, en los cruces por cero de la función ϕ) no es significativo, como se puede apreciar a simple vista si se compara con la solución exacta.

Tomando en cuenta ahora la reinicialización, en la Fig. 4 se muestra el error de nivel para el esquema de primer orden. En esta figura se puede ver que el error de nivel para el método Upwind sin reinicialización tiene un orden inferior a 0,5, por otra parte, para el caso en que se utiliza la reinicialización, el orden del método es aproximadamente igual a 1 como se esperaba. Como se puede ver, en este caso la reinicialización mejora notablemente la convergencia del método al orden esperado.

Pasando a los esquemas de segundo orden, en la Fig. 5 se muestran los órdenes de convergencia para el caso *sin reinicialización*. Para los métodos TVD, se puede ver que aquellos que



(a)



(b)

Figura 2: Error de nivel utilizando el esquema lineal (a) y el esquema general no lineal (b), para los diferentes métodos.

emplean limitadores de pendiente del tipo MC-Limiter y Van Leer resultan tener el mejor orden de convergencia para cualquier tamaño de celda. Por otra parte, los esquemas fijos de tres puntos en este caso son inestables por lo cual no aparecen en el gráfico. En la figura también se observa que el método ENO de segundo orden es el que mejor comportamiento tiene. Sin embargo, en estos casos el orden teórico esperado no alcanza a observarse para el rango de tamaño de celdas evaluado.

Por otra parte, si se analizan los esquemas de segundo orden *con reinicialización*, es posible comprobar que el comportamiento teórico esperado se establece para tamaños de celda mucho mayores que en el caso no reinicializado. Esto se observa en la Fig. 6 donde se muestra que para todos los métodos de segundo orden se establece un comportamiento similar con un orden de convergencia aproximadamente igual a 2 y en este caso inclusive los esquemas fijos de tres puntos convergen sin inconveniente y al orden esperado. Es importante notar la magnitud del error de nivel con respecto al caso en que no se utiliza la reinicialización, el cual resulta ser hasta dos órdenes inferior. Para observar esto claramente, en la Fig. 7 se compara el error de nivel para el esquema ENO con y sin reinicialización.

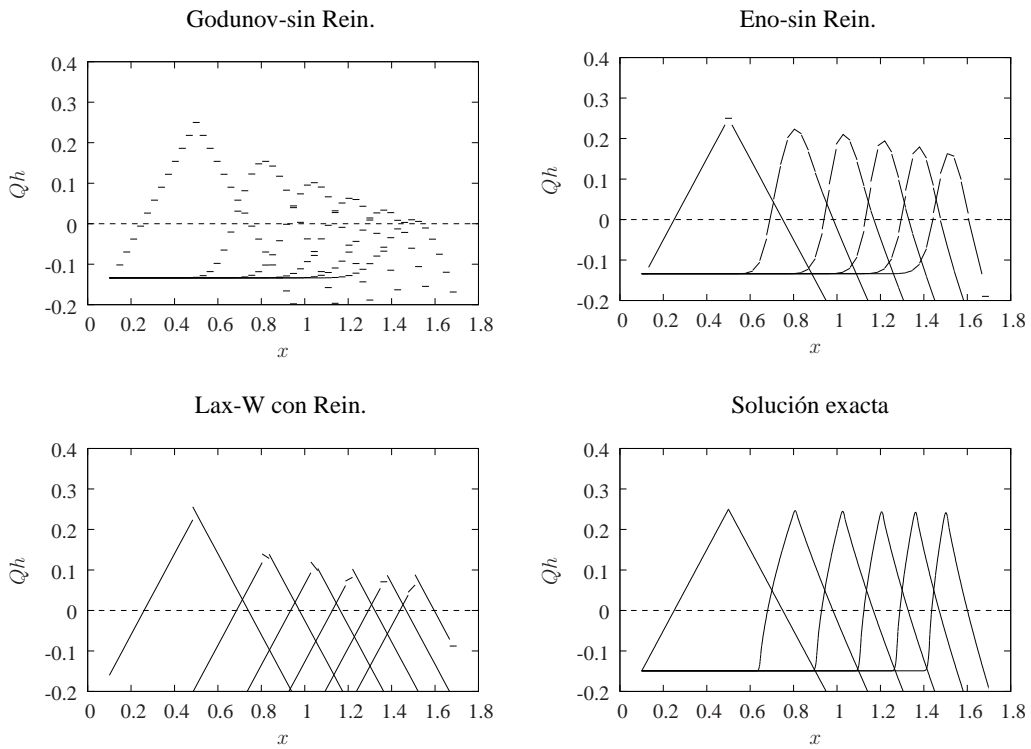


Figura 3: Evolución de la función ϕ para diferentes métodos en un campo de velocidad $u(x) = \frac{\bar{u}}{x}$.

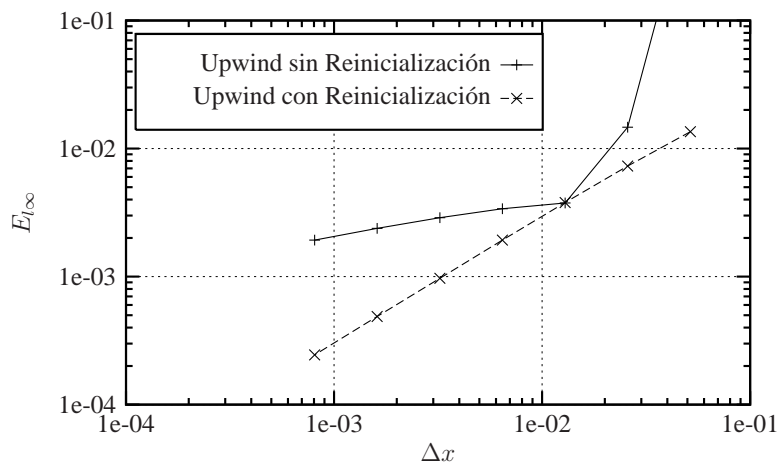


Figura 4: Error de nivel para el esquema de primer orden para un campo de velocidad $u(x) = \frac{\bar{u}}{x}$.

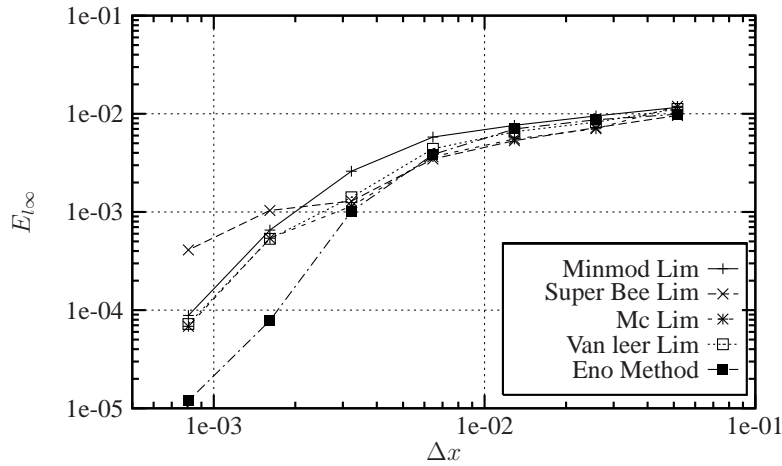


Figura 5: Error de nivel para los esquemas de segundo orden **sin reinicialización** para un campo de velocidad $u(x) = \frac{\bar{u}}{x}$.

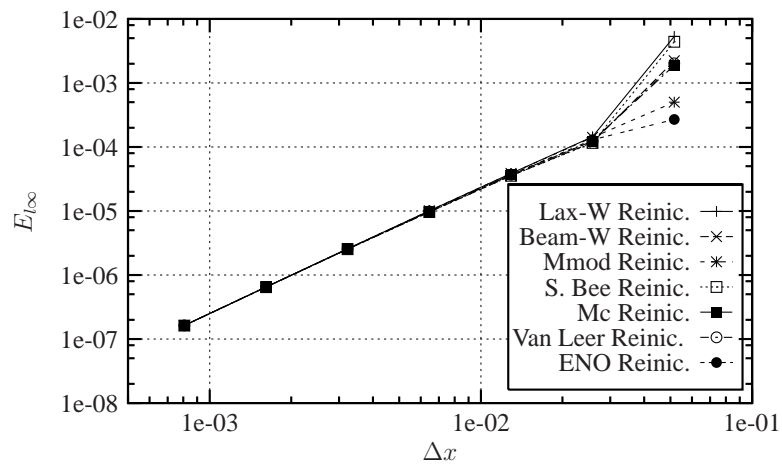


Figura 6: Error de nivel para los esquemas de segundo orden **con reinicialización** para $u(x) = \frac{\bar{u}}{x}$.

4.3. Casos Bidimensionales

El problema que hemos escogido para evaluar los esquemas de transporte en el caso multidimensional es *El disco de Zalesak*. Este es un problema clásico en level set, muy empleado como “benchmark”, y consiste de un disco con una ranura que está siendo transportado en el dominio $[-L, L] \times [-L, L]$ por un campo de velocidad de la siguiente forma

$$\begin{aligned} u &= -2\pi y \\ v &= 2\pi x \end{aligned}$$

el cual define una rotación rígida en sentido anti-horario con respecto al origen de coordenadas $(0, 0)$.

Inicialmente se efectúa una comparación cualitativa de los métodos de transporte, a tal fin, en la Fig. 8 se muestra el comportamiento de algunos de los métodos para este sistema, empleando una discretización de 150×150 celdas con un número de Courant $\nu = 0,9$ y utilizando el

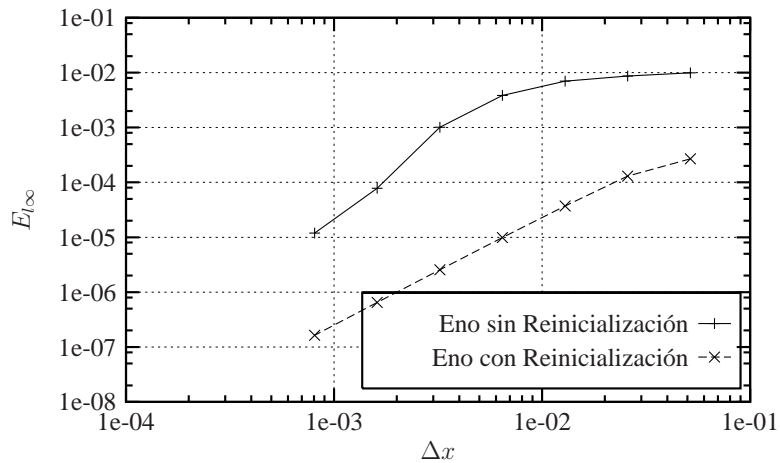


Figura 7: Error de nivel para el método Eno con y sin reinicialización para $u(x) = \frac{\bar{u}}{x}$.

esquema *Godunov Splitting*. Los resultados muestran la interfaz al cabo de una revolución ($t = 1$). En esta figura se puede ver, por un lado, la gran pérdida de masa que se produce con los métodos de primer orden, y por otro lado, la gran deformación que éstos introducen. También se puede apreciar que los métodos de segundo orden presentan un comportamiento cualitativo muy superior respecto al esquema de primer orden en el cual la ranura desaparece, tanto en el caso sin reinicilización como en el caso que la emplea.

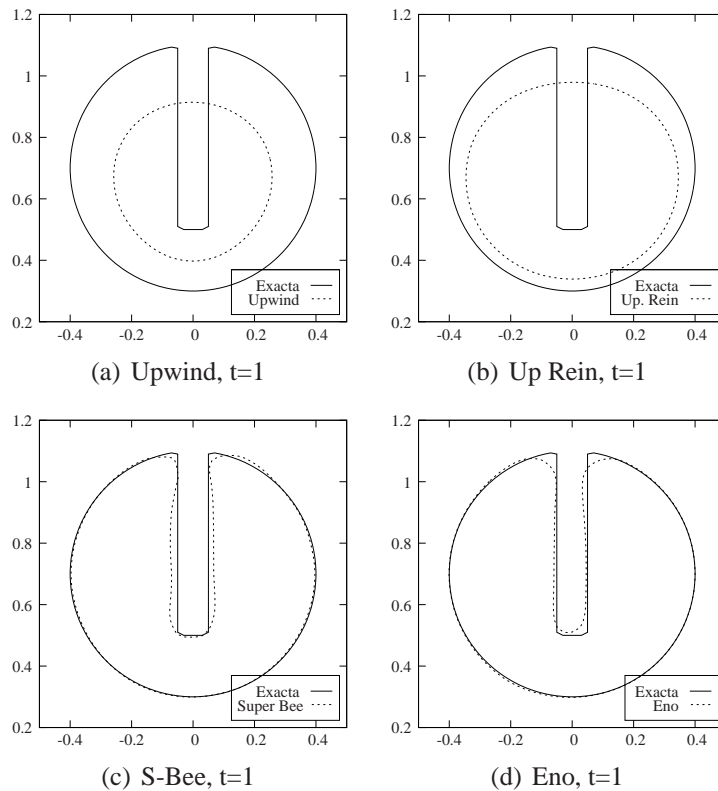


Figura 8: Transporte del disco de Zalesak al cabo de una revolución, empleando los métodos: Upwind (a), Upwind Reinicializado (b), TVD Super Bee (c) y ENO (d).

Con respecto al efecto de la reinicialización, a modo ilustrativo, en la Fig. 9 se muestra el transporte del disco empleando el método ENO con una malla de 100×100 sin reinicialización (izquierda) y con reinicialización cada 10 pasos de tiempo (derecha). Como se puede ver, en el primer caso, la ranura desaparece y se forma un burbuja en el interior del disco como resultado del colapso de las dos esquinas del disco. En este caso particular se muestra la importancia de una reinicialización periódica de la función de level set, aún cuando se emplea un método de alto orden.

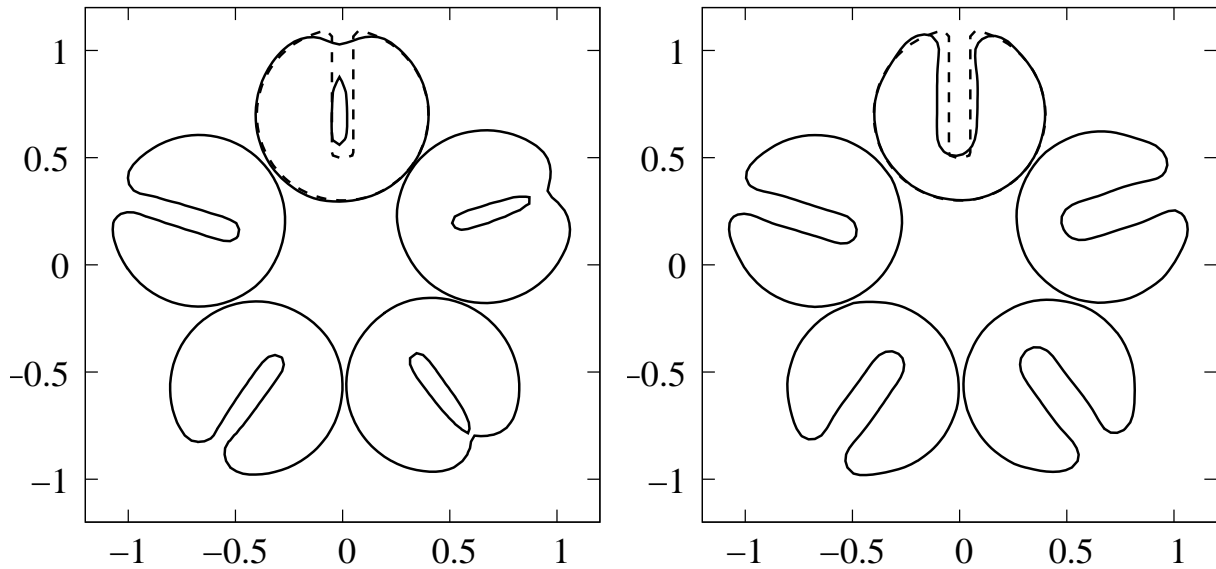


Figura 9: Transporte del disco de Zalesak con el método ENO en una malla de 100×100 . Izquierda: sin reinicialización, Derecha: con reinicialización cada 10 pasos de tiempo. En línea punteada se indica la condición inicial y en línea continua se muestra la interfaz a diferentes tiempos.

También resulta de utilidad para evaluar los métodos, el estudio de la masa y el error en función del tiempo. Esto se muestra en la Fig. 10 para algunos de los métodos empleados. En este caso la malla es de 160×160 celdas y el dominio computacional se extiende en la región $[-1,5, 1,5] \times [-1,5, 1,5]$. En la curva de masa en función del tiempo (izquierda) se puede apreciar inicialmente un aumento de la masa para el método de upwind, lo cual se debe a que la ranura desaparece en una situación similar a la mostrada en la Fig. 8. En este caso, empleando la discretización de 160×160 celdas, la reinicialización no produce una mejora significativa en los esquemas de segundo orden.

Pasando a la convergencia de los métodos, se compara el orden de convergencia en función del tamaño de celda para el método Upwind de primer orden (Fig. 11) y para el método ENO de segundo orden (Fig. 12), para los casos con y sin reinicialización y empleando diferentes frecuencias para la misma. En el primer caso, el efecto de la reinicialización es claramente positivo ya que contribuye a reducir el error y establecer el orden de convergencia esperado. Para los métodos ENO, la reinicialización no produce una mejora significativa, en algunos caso se observa una mejora mientras que en otros el error aumenta ligeramente, pero en cualquier caso, se puede observar el orden teórico esperado.

Finalmente, se comparan los esquemas de “Dimensional Splitting” propuestos. En la Fig. 13 se muestra el orden de convergencia cuando se emplea un método TVD y el método ENO y se puede apreciar que el método de “Strang Splitting” presenta el mejor comportamiento

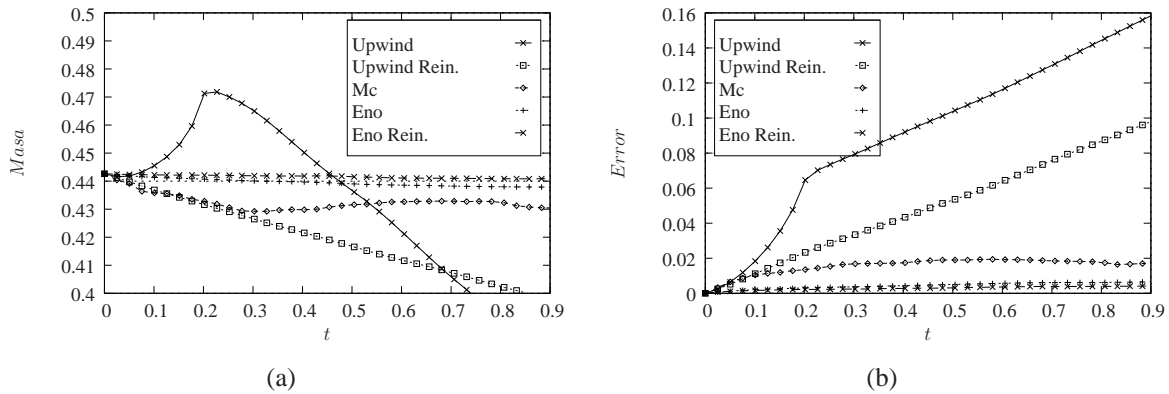


Figura 10: Masa (izquierda) y Error (derecha) en función del tiempo para diferentes métodos empleados.

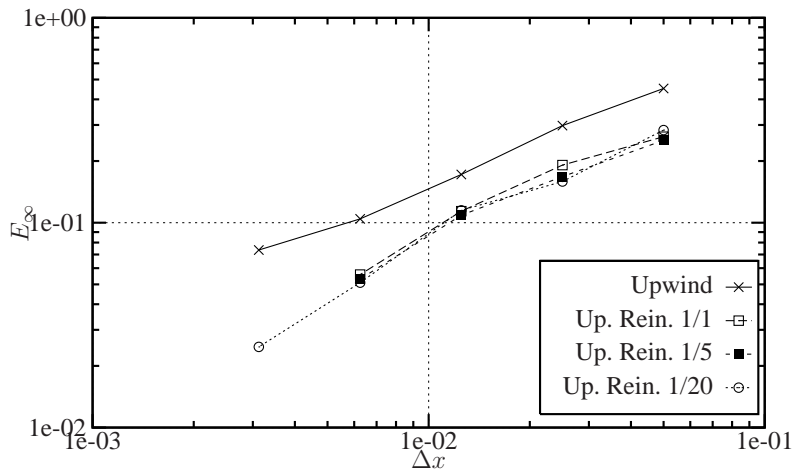


Figura 11: Orden de convergencia para el método Upwind de primer orden con y sin reinicialización para el disco de Zalesak.

como se esperaba. Al mismo tiempo se verificó que el costo computacional asociado no es significativamente mayor para este esquema lo cual lo hace más atractivo para su utilización.

5. CONCLUSIONES

En este trabajo se realiza un estudio comparativo de esquemas de volúmenes finitos para el transporte de la función de level set. En primer lugar se presentan en detalle los esquemas numéricos propuestos, considerando tres tipos de aproximaciones en la representación lineal por trozos de la función que se transporta, a saber, esquemas fijos de tres puntos, esquemas TVD y esquemas ENO. Además se introduce el esquema de reinicialización considerado para el acondicionamiento de la función de level set. Los métodos propuestos inicialmente en una dimensión espacial son extendidos al caso multidimensional mediante los esquemas “Godunov Splitting” y “Strang Splitting”.

En el caso unidimensional se concluyó lo siguiente:

- De entre todos los métodos de segundo orden, los esquemas ENO presentan el mejor orden de convergencia y el menor error.
- La reinicialización tiene un efecto claramente positivo sobre todos los métodos, ya que

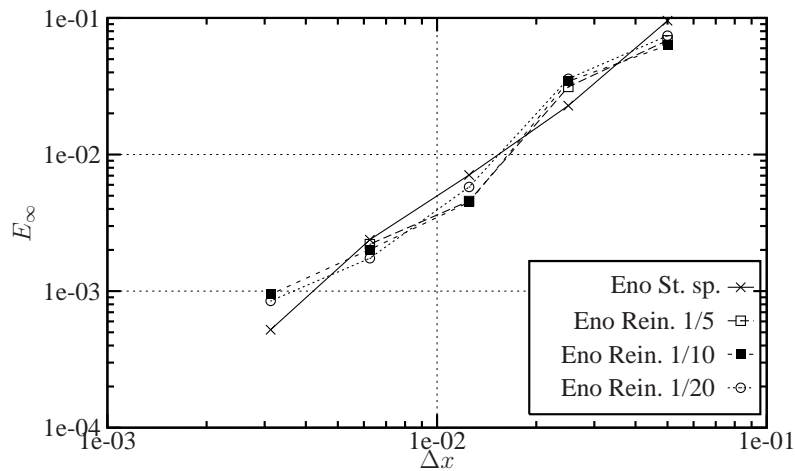


Figura 12: Orden de convergencia para el método Eno de segundo orden con y sin reinicialización para el disco de Zalesak.

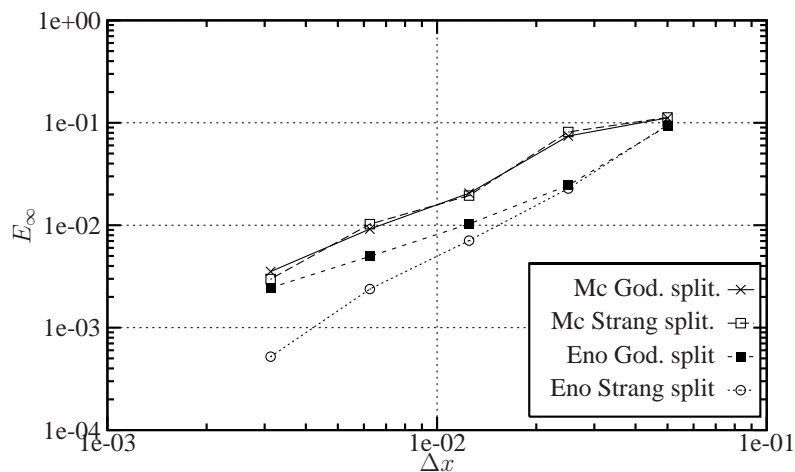


Figura 13: Comparación de los esquemas *Godunov Splitting* y *Strang Splitting* en métodos de segundo orden para el disco de Zalesak.

éstos convergen en forma ordenada a su orden teórico esperado y con un error hasta dos órdenes de magnitud menor, inclusive los esquemas fijos de tres puntos, que en el caso sin reinicialización son inestables.

Para el caso bidimensional, por otra parte, se concluyó que

- Nuevamente los esquemas ENO presentan el mejor comportamiento.
- Para el esquema Upwind de primer orden, la reinicialización produce una mejora importante.
- La reinicialización no tiene un efecto significativo sobre el orden de los métodos para el caso de esquemas de segundo orden, aunque en algunos casos particulares se pudo observar una mejora cualitativa sustancial. Posiblemente, para campos de velocidad que

deformen más la función de level set, tal como ocurría en el caso unidimensional, la reinicialización pase a jugar un rol más importante.

- El esquema “Strang Splitting” presenta un mejor comportamiento sin un costo computacional excesivamente mayor.

6. AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo de la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (Argentina). GB también pertenece al CONICET (Argentina) y al CNPq (Brasil). RA tiene beca de CONICET (Argentina).

REFERENCIAS

- D. Adalsteinsson y J. Sethian. A fast level set method for propagating interfaces. *J. Comput. Phys.*, 118:269–277, 1995.
- M. Benes. Mathematical and computational aspects of solidification of pure crystalline materials. *Acta Math. Univ. Comenian.*, 70:123–151, 2001.
- P. Carrica, R.V Wilson, R.Ñoack, T. Xing, M. Kandasamy, J. Shao, N Sakamoto, y F. Stern. A dynamic overset, single-phase level set approach for viscous ship flows and large amplitude motions and maneuvering. *26th Symposium on Naval Hydrodynamics, Rome, Italy*, 2006.
- V. Caselles, R. Kimmel, y G. Sapiro. Geodesic active contours. *Internat. J. Computat. Vision*, 22:61–79, 1997.
- D. Chopp. Computing minimal surfaces via level set curvature flow. *J. Comp. Phys.*, 106:77–91, 1993.
- P. Frolkovic y C. Mikula. Flux-based level set method: A finite volume method for evolving interfaces. *Applied numerical mathematics*, pages 436–454, 2006.
- A. Harten. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 49:357–393, 1983.
- A. Harten. On a class of high resolution total variation stable finite difference schemes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 21:1–23, 1984.
- A. Harten, B. Engquist, S. Osher, y S. Chakravarthy. Uniformly high-order accurate nonoscillatory schemes iii. *Journal of Computational Physics*, 71:231, 1987.
- A. Harten y S. Osher. Uniformly high-order accurate nonoscillatory schemes i. *SIAM J. Numer. Anal.*, 24:279–309, 1987.
- R. J. Leveque. *Finite volume methods for hiperbolic problems*. Cambridge University Press, 2002.
- X.Y. Luo, M.J.Ni.A. Ying, y M.A. Abdou. Numerical modeling for multphase incompressible flow with phase change. *Numer. Heat Transfer*, 48:425–444, 2005.
- F. Mut, G. Buscaglia, y E. Dari. New mass-conserving algorithm for level set redistancing on unstructured meshes. *Journal of applied mechanics*, 73:1011–1016, 2006.
- Fernando Mut. Algunas contribuciones al level set method en elementos finitos estabilizados. Master’s thesis, Instituto Balseiro, 2003.
- S. Osher y J. Sethian. Front propagating with curvature-dependent speed: algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, 79:12–49, 1988.
- A. Sarti, R. Malladi, y J.A. Sethian. Subjective surfaces: A method for completing missing boundaries. *Proc. National Acad. Sci. USA*, 12(97):6258–6263, 2000.
- A. Schmidt. Computation of three-dimensional dendrites with finite elements. *J. Comput. Phys.*, 125:293–312, 1996.

- J.A. Sethian. Level set method and fast marching methods: Evolving interfaces in computational geometry. *Computer Vision and Material Science, Cambridge University Press*, 1999.
- M. Sussman y E. Fatemi. An efficient, interface-preserving level set redistancing algorithm and its application to interfacial incompressible fluid flow. *SIAM J. Sci. Comput.*, 20:1165–1191, 1999.
- M. Sussman, P. Smereka, y S. Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *J. Comput. Phys.*, 114:146–159, 1994.
- A.K Tornberg y B. Engquist. A finite element based level set method for multiphase flow applications. *Comput. Visualization Sci.*, 33:93–101, 2000.
- M. Wang, X. Wang, y D. Guo. A level set method for structural topology optimization. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 192:227–246, 2003.