



Facultad de
Ingeniería
Universidad Nacional de Mar del Plata

Una metodología biológicamente inspirada para la optimización de mallas en problemas de interacción fluido-estructura

Nicolás Biocca

Tesis presentada para optar por el título de
Doctor en Ingeniería, orientación Mecánica

Director: Dr. Santiago A. Urquiza

Codirector: Dr. Guillermo A. Lombera

Mar del Plata, Argentina

Marzo 2022



RINFI se desarrolla en forma conjunta entre el INTEMA y la Biblioteca de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de Mar del Plata.

Tiene como objetivo recopilar, organizar, gestionar, difundir y preservar documentos digitales en Ingeniería, Ciencia y Tecnología de Materiales y Ciencias Afines.

A través del Acceso Abierto, se pretende aumentar la visibilidad y el impacto de los resultados de la investigación, asumiendo las políticas y cumpliendo con los protocolos y estándares internacionales para la interoperabilidad entre repositorios



Esta obra está bajo una [Licencia Creative Commons Atribución-
NoComercial-CompartirIgual 4.0 Internacional](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/).



Facultad de
Ingeniería
Universidad Nacional de Mar del Plata

Una metodología biológicamente inspirada para la optimización de mallas en problemas de interacción fluido-estructura

Nicolás Biocca

Tesis presentada para optar por el título de
Doctor en Ingeniería, orientación Mecánica

Director: Dr. Santiago A. Urquiza

Codirector: Dr. Guillermo A. Lombera

Mar del Plata, Argentina

Marzo 2022

A mis padres

Agradecimientos

La realización de este trabajo es el resultado de mi esfuerzo y formación realizados durante estos últimos años. Sin embargo, la realización del mismo no hubiera sido posible sin el apoyo de muchas personas, tanto en el plano profesional como personal.

En primer lugar, agradecer a mi director, el Dr. Santiago Urquiza, por su calidad humana, por asistirme en cada duda y orientarme a resolver cada dificultad encontrada a lo largo del doctorado, por darme la posibilidad de formarme a su lado, por ser mi *maestro*. Asimismo, a mi codirector, el Dr. Guillermo Lombera, por depositar su confianza en mí para la realización de este trabajo desde un comienzo. Agradecer también a mis compañeros del Grupo de Ingeniería Asistida por Computador, por propiciar un excelente ambiente de trabajo. A mis compañeros de doctorado, Dani y Manu, por hacer de cada día en la oficina uno grato y divertido. A Gonza y Gus, por llevar la buena onda del grupo a las clases en la universidad, por compartir su conocimiento y experiencia.

En lo personal, agradezco a mis padres, por sus consejos y completo apoyo a lo largo de toda mi vida, a ellos debo quien soy hoy. Agradezco a todos mis amigos de las distintas etapas de mi vida, con quienes compartimos grandes experiencias y recuerdos. Especial mención a mis amigos cercanos durante el doctorado, quienes han sabido apoyarme moral y humanamente, tanto en los buenos como malos momentos que he atravesado durante este proceso. Agradezco a Meli y a su fiel compañera Morita, juntas han sabido darme su más sincero y sano amor en los últimos años de mi doctorado.

Resumen

En las últimas décadas ha habido un considerable crecimiento en el ámbito de la investigación dedicado al estudio de flujos en dominios deformables y su interacción con estructuras sólidas. Este tipo de problemas suele denominarse como problemas de Interacción Fluido-Estructura (FSI). En el contexto de la hemodinámica, esta clase de problemas surge naturalmente de la interacción del flujo sanguíneo con distintos componentes del sistema cardiovascular, tales como paredes arteriales, la pared cardíaca, válvulas cardíacas, entre otros. En este sentido, los desafíos impuestos por la naturaleza de estos problemas han sido abordados tradicionalmente por dos estrategias bien establecidas. Estas estrategias comprenden los métodos de *seguimiento de interfase* y los de *captura de interfase*. Los métodos de captura de interfase son convenientes en la resolución de problemas con flujos complejos con salpicaduras y olas rompientes mientras que los métodos de seguimiento de interfase son más adecuados para la resolución de problemas FSI donde sea necesario resolver con precisión la interfase para un correcto acoplamiento de los subsistemas. Un caso particular que desafía estos métodos lo podemos encontrar en el problema FSI de válvulas cardíacas y su interacción con el torrente sanguíneo. Al tratarse de membranas delgadas muy flexibles y con densidades similares a las del flujo sanguíneo, la dinámica se vuelve muy sensible a las fuerzas viscosas efectuadas por el flujo, y en el peor de los casos pueden plegarse sobre sí mismas y evolucionar en patrones complejos. En este caso, las capas límites deben ser correctamente representadas para capturar correctamente los esfuerzos viscosos. Además, esta interacción se da en el contexto de cuerpos sujetos a grandes deformaciones y desplazamientos, incluso movimientos cíclicos, volviéndose relevante resolver esta clase de aplicaciones adecuadamente. En este contexto, hay una necesidad imperiosa de contar con discretizaciones y técnicas de movimiento de mallas adecuadas, las cuales deben ser capaces de capturar fenómenos de alta deformación y capas límite en un marco de referencia altamente dinámico.

El objetivo de esta tesis es el desarrollo de métodos de optimización y movimiento de mallas como parte de la resolución de problemas FSI en el contexto de grandes deformaciones y desplazamientos dentro de un marco referencial Arbitrariamente Lagrangiano-Euleriano (ALE). En esta tesis se presenta un método original para resolver el problema de movimiento de mallas inspirado en la capacidad de adaptación de los tejidos biológicos. En una primera instancia se presenta la metodología introducida, se valida en una serie de casos sencillos como prueba de su potencial capacidad de optimización para luego resolver pruebas numéricas ampliamente utilizadas en la literatura. En una segunda instancia, se resuelven problemas de movimientos cíclicos, haciendo foco en la acumulación de error que suelen presentar las técnicas tradicionales y cómo el método introducido en esta tesis se comporta frente a este tipo de movimientos. Además, se presentan problemas de movimiento de mallas que cuentan con las principales desafíos del problema FSI de válvulas cardíacas.

Abstract

The last decades have witnessed considerable growth in the research efforts dedicated to the field of flow computation with moving boundaries and interfaces, such as free surface flow, multi-phase flows, Fluid-Structure Interaction (FSI) among others. In the field of hemodynamics, these class of FSI problems derives naturally for several components of the cardiovascular system, such as arterial walls, the cardiac wall, cardiac valves among others. In this regard the challenge involved in these problems have been addressed through two well-established techniques, say, *interface tracking* and *interface capturing*. Interface capturing is more suitable for complex flows with splashing and breaking waves while interface tracking is well suited for FSI problems where a high fidelity resolution of the interface is required. A particular case challenge these methods is the FSI problem related to the interaction between cardiac valves and blood flow. This problem concerns highly flexible thin membranes with a density similar to the blood flow, turning the motion dynamics so sensitive to the viscous forces exerted by the blood flow. In the worst case, they can fold on themselves and evolve in a rather complicated pattern. In this concern, boundary layers require to be accurately represented. Often this interaction comes along with large displacements motions (including cyclic and near-cyclic), being of great relevance to adequately deal with these applications. In this context, there is a compelling need for proper mesh discretization and mesh motion techniques, which are able to capture warping phenomena and boundary layers in a highly dynamic moving frame.

The aim of this thesis is the development of optimization and mesh moving methods as a vital component of the resolution of FSI simulations in the context of large displacements through the use of Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) reference frames. In this thesis, we present a novel method to solve the mesh motion problem inspired by the ability of living tissues to adapt. First, we introduce the method proposed in this thesis and validate it in a collection of minimal working examples to show its ability to optimize. Therefore, we solve some mesh moving test cases widely used in the literature and compare results with traditional methods. Also, we solve cyclic motions and analyze the error accumulation (due to mesh distortion) that is usually observed in traditional mesh moving techniques. Besides, we solve mesh motion problems with the main challenges of the FSI problem in cardiac valves.

Índice

| | |
|---|------------|
| Agradecimientos | I |
| Resumen | II |
| Abstract | III |
| Índice | V |
| Introducción | 1 |
| Motivación | 1 |
| Objetivos | 5 |
| Principales contribuciones | 7 |
| Producción científica | 8 |
| Organización | 11 |
| 1. Ecuaciones de gobierno | 13 |
| 1.1. Mecánica del sólido en grandes deformaciones | 14 |
| 1.1.1. Cinemática | 14 |
| 1.1.2. Espacios funcionales involucrados en el PPV | 17 |
| 1.1.3. Ecuaciones de equilibrio | 19 |
| 1.1.4. Proceso de linealización | 21 |
| 1.1.5. Forma fuerte de las ecuaciones de equilibrio | 25 |
| 1.1.6. Cinemática plana | 26 |
| 1.2. Mecánica de fluidos incompresibles | 28 |
| 1.2.1. Cinemática | 28 |
| 1.2.2. Ecuaciones de equilibrio | 32 |

| | | |
|-----------|---|-----------|
| 1.2.3. | Forma fuerte de las ecuaciones de equilibrio | 34 |
| 1.2.4. | Adimensionalización de las ecuaciones de Navier-Stokes | 35 |
| 1.2.5. | Tratamiento del término convectivo | 38 |
| 1.2.6. | Discretización del problema | 40 |
| 1.3. | Mecánica de los Fluidos en dominios deformables | 43 |
| 1.3.1. | Formulación Arbitrariamente Lagrangeana-Euleriana (ALE) | 44 |
| 1.3.2. | Ecuaciones de equilibrio | 46 |
| 1.3.3. | Formulación variacional semi-discreta en el tiempo | 50 |
| 1.3.4. | Proceso de linealización | 53 |
| 1.3.5. | Discretización del problema | 58 |
| 1.3.6. | Forma fuerte de las ecuaciones de equilibrio | 59 |
| 1.4. | El problema de Interacción Fluido-Estructura (FSI) | 60 |
| 2. | Métodos de movimiento de malla | 65 |
| 2.1. | Introducción | 66 |
| 2.2. | <i>Mesh Jacobian-Based Method</i> (MJBS) | 69 |
| 2.3. | <i>Biologically-Inspired Mesh Optimizer</i> (BIMO) | 72 |
| 2.3.1. | Cinemática | 74 |
| 2.3.2. | Equilibrio Mecánico | 76 |
| 2.3.3. | Configuración Virtual | 78 |
| 2.3.4. | Modelo constitutivo del pseudo-material | 79 |
| 2.3.5. | Endurecimiento basado en elementos | 83 |
| 2.3.6. | Remodelado del pseudo-material | 86 |
| 2.3.7. | Proceso de linealización del problema mecánico | 88 |
| 3. | Optimización de mallas: ejemplos prácticos | 92 |
| 3.1. | Condiciones generales de prueba | 93 |
| 3.1.1. | Hexágono regular | 93 |
| 3.1.2. | Paralelogramo rectangular | 96 |
| 3.1.3. | Paralelogramo rectangular con reclutamiento de fibras | 97 |
| 3.1.4. | Icosaedro regular | 98 |
| 3.1.5. | Cuboide | 100 |
| 3.2. | Conclusiones | 102 |

| | |
|---|------------|
| 4. Movimiento de mallas: casos de prueba | 103 |
| 4.1. Condiciones generales | 104 |
| 4.2. Casos de prueba | 105 |
| 4.2.1. <i>2D Thin-Walled Beam</i> | 105 |
| 4.2.2. <i>3D Hollow Beam</i> | 110 |
| 4.3. Conclusiones | 113 |
| 5. Movimientos cíclicos | 114 |
| 5.1. Introducción | 115 |
| 5.2. Configuración de referencia - estrategias de selección | 116 |
| 5.3. Casos de prueba | 122 |
| 5.3.1. <i>2D Thin-Walled Beam</i> | 123 |
| 5.3.2. <i>3D Hollow Beam</i> | 128 |
| 5.4. Conclusiones | 132 |
| 6. Movimiento de mallas: aplicaciones | 134 |
| 6.1. Condiciones generales | 135 |
| 6.2. Casos de aplicación | 135 |
| 6.2.1. <i>Domain undergoing compression</i> | 136 |
| 6.2.2. <i>Friction Stir Spot Welding (FSSW)</i> | 141 |
| 6.2.3. <i>Heart-valve inspired benchmark</i> | 145 |
| 6.3. Conclusiones | 148 |
| 7. Conclusiones generales | 149 |
| 7.1. Conclusiones y resultados obtenidos | 149 |
| 7.2. Trabajo futuro | 151 |
| Referencias | 152 |
| Apéndices | 162 |
| A. Derivada de Gâteaux - relaciones básicas | 163 |
| B. Estado de tensiones plano - cálculo del espesor | 165 |
| C. Derivada temporal del Jacobiano | 167 |

Introducción

Motivación

Las ciencias biomédicas han experimentado una inmensa revolución durante las últimas dos décadas. Los avances en tecnología, respaldados por un enorme salto en los recursos computacionales, proporcionaron una riqueza de datos sin precedentes en todos los niveles de organización biológica (tanto a nivel molecular, celular, tisular, orgánico, entre otros). Si bien se están haciendo esfuerzos por incorporar los aspectos dinámicos entre los diferentes niveles de integración, la complejidad experimental limita, por lo general, las observaciones a escala individual o a un intervalo muy restringido espacial y/o temporal. El propósito general de este tipo de enfoques es determinar cómo las funciones biológicas y fisiológicas surgen en los organismos vivos, existiendo un creciente interés hacia enfoques sistémicos e integradores, orientados a la determinación de las interacciones funcionales de los sistemas complejos [46]. Una comprensión completa de las funciones biológicas surge sólo si es posible integrar toda la información pertinente a múltiples escalas y niveles de organización o integración, con el objetivo de recrear las complejas interacciones dinámicas [67]. En los últimos tiempos, se ha producido un gran cambio respecto del rol asignado por los médicos y biólogos a la mecánica, resaltando, por sobre todas las cosas, el valor de la simulación computacional aplicados al análisis de dichas afecciones, ya que es una herramienta que, por ser virtual (consistente en simulaciones y modelos computacionales), aporta valiosa información sin afectar al paciente. Más aún, hace posible el análisis de casos bajo condiciones de difícil implementación clínico-experimental.

Las irregularidades hemodinámicas naturalmente presentes en el sistema cardiovascular o las originadas por las intervenciones están asociadas al desarrollo de patologías (placas de aterona, entre otros) y a fallas en el comportamiento post-intervención. Cada año,

cientos de miles de implantes de prótesis cardíacas son implantadas cada año [55, 63]. Por lejos, el remplazo quirúrgico más famoso es el de válvulas cardíacas bioprotésicas (BHV¹), las cuales son fabricadas a partir de material biológico, con el objetivo de diseño de biomímesis mecánica con respecto a las válvulas nativas. Del mismo modo que las valvas nativas, las BHV se componen de delgadas membranas que son forzadas a la apertura por el flujo sanguíneo en una dirección y cerradas por el cese del mismo. Las BHV tienen un comportamiento hemodinámico más natural que los antiguos diseños de prótesis mecánicas, que se componen de valvas rígidas y requieren de una terapia anticoagulante de por vida [55]. Sin embargo, la duración promedio de una BHV está limitada a unos 10-15 años por fallas debida al deterioro estructural por la fatiga y la mineralización del tejido [55, 63, 65]. Aunque se han conseguido importantes avances en el desarrollo de métodos para mitigar la mineralización, los métodos para extender la durabilidad siguen siendo en gran parte inexplorados. Uno de los aspectos críticos de los esfuerzos para mejorar el diseño de BHV es comprender las tensiones que actúan sobre las valvas durante el ciclo cardíaco.

Las simulaciones computacionales han sido la mayor fuerza impulsora para generar un mejor entendimiento de la mecánica de válvulas cardíacas. A medida que la calidad de las imágenes médicas y la caracterización mecánica de sistemas biológicos han mejorado, también lo han hecho la relevancia y el realismo de los modelos computacionales para predecir mejor los resultados fisiológicos. Por ejemplo, en base a estas nuevas tecnologías, investigadores han utilizado ecocardiogramas 3D para generar modelos computacionales—específicos del paciente—de la válvula mitral [26, 50, 66]. A través de estos modelos, se ha revelado la dinámica patológica y logrado cuantificaciones útiles basadas en la geometría valvular. Por ejemplo, al caracterizar el movimiento, los investigadores han descubierto que los cambios en la forma de silla de montar del anillo mitral son importantes para el funcionamiento eficiente de la válvula, reduciendo las deformaciones sistólicas en la valva posterior y las tensiones en ambas valvas en general, lo cual podría mejorar la durabilidad a largo tiempo [54, 61].

Otro ejemplo de gran utilidad se encuentra en las simulaciones computacionales de válvulas aórticas. Los modelos *in silico* han permitido la simulación y el estudio de muchos parámetros mecánicos relevantes, lo que lleva a una comprensión nueva y detallada de la fisiología nativa, permitiendo también abordar el estudio de patologías complejas. Muchos modelos nuevos se han desarrollado para responder preguntas en relación a anomalías

¹Del término *Bioprosthetic Heart Valve*.

hemodinámicas y técnicas de reparación quirúrgica [28, 56, 58]. Por ejemplo, en una serie de estudios computacionales con el objetivo de investigar las válvulas aortícas bicúspides—una de las cardiopatías congénitas más común—se han reportado los siguientes resultados: este tipo de geometrías induce regiones con altos niveles de tensión en las valvas, lo cual podría influir en la degradación mecánica a largo plazo así como también la calcificación de las valvas [11, 15, 43]. Estos estudios, integrados con simulaciones hemodinámicas, las cuales pueden identificar los efectos temporales del flujo sanguíneo en válvulas cardíacas, han generado herramientas poderosas para comparar válvulas sanas y enfermas a partir de modelos computacionales (en algunos casos, específicos del paciente) [12, 23, 96].

Esta clase de problemas, por la naturaleza de sus subsistemas y su interacción, se encuentra en el marco de problemas de Interacción Fluido-Estructura (FSI²), siendo el de válvulas en particular uno de los más desafiantes y complejos de la mecánica cardiovascular. Estos desafíos incluyen flujo altamente dinámico a través de geometrías complejas, interfases móviles—las valvas y las paredes cardíacas o arteriales—sujetas a grandes desplazamientos y deformaciones, y el colapso del volumen entre distintas interfases debido al contacto entre valvas. Más aún, todas estas condiciones transcurren de manera cíclica. En este sentido, los desafíos impuestos por la naturaleza de estos problemas han sido abordados por dos estrategias bien definidas: los métodos de *captura de interfase* y los de *seguimiento de interfase* [77, 81–83]. Por un lado, los métodos de *captura de interfase* son convenientes en la resolución de problemas con flujos complejos con salpicaduras y olas rompientes. Por otro lado, los métodos de *seguimiento de interfase* son más adecuados para la resolución de problemas FSI donde es necesario resolver con precisión la interfase para un correcto acoplamiento de los subsistemas [87]. Una particularidad del problema FSI de válvulas cardíacas se encuentra en la flexibilidad de membranas delgadas cuya densidad es similar a la del flujo—sanguíneo—circundante, volviéndose la dinámica de las valvas muy sensible a las fuerzas viscosas efectuadas por el flujo, y en el peor de los casos plegándose sobre sí mismas en una evolución de patrones complejos. En este caso, las capas límites deben ser resueltas correctamente y de manera precisa, por lo tanto, a pesar de las dificultades geométricas encontradas, vale la pena el esfuerzo por la resolución de esta clase de problemas a través de estrategias de *seguimiento de interfases* [86, 87].

Este problema FSI está en el contexto de cuerpos inmersos en el seno de un medio fluido sujetos a grandes desplazamientos y deformaciones, incluso movimientos cíclicos.

²Del término *Fluid-Structure Interaction*.

En este contexto, hay una necesidad imperiosa de contar con discretizaciones y métodos de movimiento de mallas adecuados, los cuales deben ser capaces de capturar fenómenos de alta deformación y capas límites en un marco de referencia altamente dinámico. Por esta razón, la malla debe mantener una buena calidad incluso en dominios altamente distorsionados mientras la integridad de los elementos es preservada, evitando el remallado tanto como sea posible. De hecho, la etapa de remallado es, en general, no sólo un procedimiento demandante en tiempo y computacionalmente costoso, sino que también tiene asociados errores de proyección en las soluciones transferidas, degradando la calidad de los resultados [47, 71]. Estos inconvenientes han sido abordados con éxito en el contexto de problemas de paracaídas en naves espaciales [71], en donde un problema de deformaciones finitas se plantea con el objetivo de “relajar” elementos distorsionados, preservando su calidad para disminuir las etapas de remallado o incluso evitarlas. En este procedimiento, conocido como *Element Based Mesh Relaxation* (EBMR) [71], los nodos son desplazados para mejorar la calidad de algunos elementos sin alterar la topología de la malla. Esto se logra reubicando los nodos de la malla por intermedio de ecuaciones de la mecánica del sólido en grandes deformaciones, en lugar del uso tradicional de ecuaciones de elasticidad lineal con endurecimiento basado en los Jacobianos de la transformación [44, 78, 79, 82], la cual es una técnica que ha sido ampliamente utilizada en una gran variedad de problemas [4, 44, 70–72, 77–79, 85, 91]. Algunas de las principales fortalezas del EBMR son la habilidad para utilizar diferentes ecuaciones constitutivas para impulsar la relajación de mallas, además de incluir rigidización basada en aspectos geométricos al introducir formas ideales arbitrariamente orientadas, denominadas elementos *target*, en una estrategia de selección de configuraciones libres de tensión (ZSS³) basada en elementos. De esta manera, la relajación de mallas debe entenderse como la resolución de un problema de equilibrio mecánico con pretensiones (debido al apartamiento de los elementos de las formas ideales) que van disminuyendo a medida que la malla alcanza una configuración de autoequilibrio. Estas ideas fueron extendidas en una metodología de movimiento de mallas de baja distorsión [72], la cual se basa en un modelo constitutivo con refuerzo de fibras hiperelásticas y configuraciones ZSS optimizadas, aportando una mejora a los métodos de movimiento de mallas al mantener baja la distorsión de los elementos a medida que la malla se deforma debido a la evolución de las fronteras del dominio. En ese sentido, orienta las direcciones de las fibras utilizando las coordenadas paramétricas de los elementos para prevenir una excesiva distorsión.

³Del término *Zero-Stress State*.

Siguiendo de cerca las ideas y metodologías en las referencias [71, 72], sacamos provecho del problema mecánico en tejidos biológicos para proponer una formulación al problema de relajación de mallas. En nuestro enfoque, el problema de movimiento de malla es puesto en analogía con el de equilibrio mecánico de las paredes arteriales, considerando el método basado en materiales hiperelásticos, con fibras y configuraciones ZSS optimizadas [72]. Asumimos que el comportamiento constitutivo corresponde al de un modelo de mezcla compuesto por un material de base (isótropo) y otro de fibras, en analogía con las sustancias de elastina y colágeno de la pared arterial [38]. A su vez, también nos inspiramos en mecanismos de adaptación de la pared arterial, en particular, el de crecimiento y remodelado (G&R⁴) [59] para definir el reclutamiento de las fibras y configuraciones ZSS en una escala de tiempo alternativa independiente de la escala propia del problema físico. A su vez, el problema mecánico propuesto considera la predeformación que surge de una configuración ZSS incompatible.

En base a lo mencionado, el principal aporte de esta tesis será el desarrollo de una metodología de movimiento y/o optimización de mallas, inspirada en los mecanismos de adaptación biológicos mencionados. Este enfoque saca ventaja de la habilidad intrínseca de los procesos de adaptación mecanobiológicos para mejorar la calidad de mallas de elementos finitos. De esta manera, ponemos en analogía el proceso de relajación de mallas con procesos homeostáticos en los tejidos vivos, lo cual nos permite el diseño de métodos de movimiento de mallas biológicamente inspirados de una manera intuitiva. La finalidad es resolver problemas de movimiento de mallas con interfases móviles sujetas a grandes desplazamientos y deformaciones, las cuales, pueden estar en condiciones próximas al contacto entre las mismas, incluso movimientos cíclicos y cómo estos se desempeñan con respecto a la acumulación de distorsión. Por estas razones, consideramos que esta clase de movimientos cuentan con las principales dificultades del problema de movimiento de mallas asociado al problema FSI de válvulas cardíacas, así como también para una gran variedad de problemas en la ingeniería.

Objetivos

Este trabajo tiene como objetivo general el desarrollo de métodos de movimiento de mallas en el contexto de problemas de Interacción Fluido-Estructura, tomando como inspiración los mecanismos de adaptación de los tejidos biológicos, como parte de una

⁴Del término *Growth and Remodeling*.

estrategia de solución de *seguimiento de interfases*. Para ello, planteamos los siguientes objetivos específicos:

- Implementación de métodos de movimiento de mallas basados en ecuaciones de elasticidad lineal (MJBS). Análisis de sus ventajas y desventajas.
- Desarrollo e implementación de método de movimiento de mallas basados en ecuaciones de la mecánica del sólido en grandes desplazamiento y deformaciones, en el contexto de materiales hiperelásticos (principal componente de la metodología introducida en esta tesis).
- Estudio y análisis de configuraciones virtuales ZSS (desagregadas) basadas por elementos.
- Estudio de distintos mecanismos de adaptación de los tejidos biológicos, en particular, aquellos de la pared arterial. Entre estos podemos encontrar ecuaciones constitutivas desglosadas en componentes isotrópicas y anisotrópicas (en analogía con las sustancias de elastina y colágeno), así como también distintos mecanismos de crecimiento y remodelado.
- Estudio, análisis e implementación de distintas opciones para la disposición geométrica de familias de fibras y selección de configuraciones de referencia (libre de tensión).
- Análisis de la elastina como componente estabilizador en el diseño del pseudo-material de la malla.
- Aplicación de la metodología como optimizador de mallas en pequeños casos de prueba a modo de mostrar las potenciales presentes y análisis de los parámetros involucrados.
- Aplicación de la metodología propuesta en casos de prueba 2D y 3D basados en distintos modos de deformación, en el contexto de grandes desplazamientos.
- Aplicación de la metodología propuesta en problemas de naturaleza cíclica. Análisis de la acumulación de distorsión de malla entre diferentes ciclos para problemas 2D y 3D.

- Integración de la metodología propuesta como parte de la resolución de problemas multifísicos. Como particularidad, estos problemas estarán sujetos a grandes desplazamientos y deformaciones, requerirán el control de la calidad de malla en capas límite y la dinámica del movimiento podría incluir el colapso de volumen entre interfases móviles simulando una condición de contacto húmedo.

Principales contribuciones

Desarrollo de una metodología de optimización y/o movimiento de mallas inspirada por la biomecánica de los tejidos vivos, en particular, aquellos en paredes arteriales. Denominamos a esta metodología BIMO, según las siglas del término en inglés *Biologically-Inspired Mesh Optimizer*. Por un lado, esta metodología se basa en la mecánica de tejidos biológicos para proponer una formulación al problema de *relajación de mallas*. Además, se encuentra en el marco de un método de movimiento de mallas basada en materiales compuestos hiperelásticos reforzados con fibras unidireccionales y configuraciones de referencias libres de tensión (ZSS) optimizadas.

La metodología propone un modelo de doble constituyente compuesto por una sustancia de *ground* (similar a la elastina) y fibras (similar al colágeno). El diseño de este “pseudo-material” considera la predeformación que surge de una configuración libre de tensiones incompatible. Como novedades, consideramos la posibilidad de que las configuraciones libres de tensión de cada constituyente sean, en general, distintas para cada de ellos. Además, se introduce un paradigma de crecimiento y remodelado para definir el reclutamiento de las fibras y configuraciones libres de tensión en una escala “pseudo-temporal”, potencialmente distinta a la escala de tiempo del problema físico.

Notablemente, consideramos este método como un técnica de propósito general de relajación de mallas, es decir, una técnica de optimización y movimiento de mallas que pueden desempeñarse conjuntamente. En ese sentido, se modifican las ecuaciones de equilibrio para considerar un balance de fuerzas nodales mediante la calidad de los elementos pertenecientes al soporte compacto de dichos nodos, en lugar de su tamaño. Esto se logra por intermedio de una estrategia de endurecimiento selectivo para escalar las fuerzas nodales considerando sólo la distorsión de los elementos, a través de técnicas de análisis dimensional para ponderar las fuerzas mencionadas. Con respecto a la configuración libre de tensiones (ZSS) del constituyente fibroso, presentamos un procedimiento para generar la ZSS basada en elementos, como aquel de forma *objetivo* escalado en términos del tamaño

de arista característico en lugar del área o volumen.

Otra contribución de esta tesis es el reporte de un conjunto de ideas conceptuales tomadas del campo de los tejidos vivos, con el objetivo de mejorar la robustez de los procedimientos de movimientos de mallas, los cuales se desempeñan con éxito en casos de muy alta deformación. En ese sentido, se introduce procedimiento de adaptación a altas tensiones en analogía con la capacidad de tejidos arteriales para encargarse de tensiones anómalas por intermedio del remodelado de los constituyentes, adaptando localmente la configuración de reclutamiento de las fibras. De esta manera, el esquema propuesto evita el uso de aplicación de cargas en pasos y gana robustez.

Con respecto a resultados, en el contexto de optimización, se presentan pequeños casos de prueba en 2D y 3D con solución conocida para un análisis de las potencialidades del método y cómo sus distintos componentes se comportan. Por otro lado, en el contexto de problemas de movimiento de mallas, se resuelven una serie de problemas en 2D y 3D ampliamente utilizados en la literatura. Se comparan los resultados entre metodologías tradicionales y la aportada por esta tesis. En esta misma línea, presentamos un conjunto de casos de prueba para una clase particular de movimiento de mallas, aquellos de carácter cíclico. Se analizan y comparan resultados en términos de calidad de malla y acumulación de distorsión de mallas. Finalmente, integramos los métodos de movimiento de malla utilizados en esta tesis en problemas de aplicación de diversos campos de la ingeniería. Estos problemas incluyen movimientos con alto nivel de deformación y cercanos al colapso de volumen entre interfases móviles (contacto), el problema de soldadura por fricción-agitación de punto (FSSW⁵) y un problema en el campo de la hemodinámica, usualmente utilizado en la literatura como caso de prueba, inspirado en válvulas cardíacas.

Producción científica

Durante la producción de esta tesis han sido presentadas distintas publicaciones y resúmenes en revistas y congresos de índole nacional e internacional. Las temáticas abordadas incluyen, a nivel general, problemas de *seguimiento* y *captura de interfases*. En particular, se han presentado trabajos en el área de la mecánica del sólido, mecánica de lo fluidos, hemodinámica, multiescala, problemas de interacción fluido-estructura (FSI), problemas de soldadura de fricción-agitación en punto (FSSW), hidrodinámica naval, inyección de moldes, entre otros. En cuanto a esta tesis, su principal aporte se encuentra

⁵Del término *Friction Stir Spot Welding*.

enmarcado en el desarrollo de métodos de movimiento de mallas, como parte de las estrategias de *seguimiento de interfases*. A continuación damos un listado de la producción mencionada.

Artículos en journals

- Biocca, N., Blanco, P.J., Caballero, D.E., Gimenez, J.M., Carr, G.E., Urquiza, S.A.. 2021. *A biologically-inspired mesh optimizer based on pseudo-material remodeling*. Computational Mechanics. Vol. 69(2). <https://www.doi.org/10.1007/s00466-021-02101-6>.
- Caballero, D.E., Montini Ballarin, F., Gimenez, J.M., Biocca, N., Rull, N., Frontini, P., Urquiza S.A.. 2022. *Reduced kinematic multiscale model for tissue engineering electrospun scaffolds*. Mechanics of Material. <https://www.doi.org/10.1016/j.mechmat.2022.104214>.

Artículos completos en congresos

- Carr, G.E., Biocca, N., Urquiza, S.A., Lombera G.A.. 2021. *Numerical Modeling of FSSW Joining Considering the Tool Plunging*. Mecánica Computacional. Vol XXXVIII.
- Antonelli, N.A., Kunert, H.G., Gogniat, G., Biocca, N., Gimenez, J.M., Carr, G.E., Urquiza, S.A.. 2021. *A Parametric Shape Modeller Tool for Inverted Bow Fishing Vessel*. Mecánica Computacional. Vol XXXVIII.
- Antonelli, N.A., Kunert, H.G., Gogniat, G., Biocca, N., Gimenez, J.M., Carr, G.E., Urquiza, S.A.. 2021. *Study of the effect of navigation in confined waters in a circulating water channel*. Mecánica Computacional. Vol XXXVIII.
- Colabella, L., Biocca, N., Urquiza, S.A., Cisilino, A.. 2019. *Determination of the permeability of trabecular microstructures by the fast fourier transform method*. Mecánica Computacional. Vol XXXVII.
- Antonelli, N.A., Kunert, H.G., Vaccari, A., Urquiza S.A., Biocca, N., Gimenez, J.M., Carr, G.E.. 2019. *Determining resistance coefficient for series 60 vessels using computational fluid dynamics*. Mecánica Computacional. Vol XXXVII.

- Gimenez, J.M., Ares, G.D., Biocca, N., Antonelli, N., Blanco, P.J., Urquiza, S.A.. 2019. *A method for assigning directional properties from boundary data in realistic geometries of vascular segments*. Mecánica Computacional. Vol XXXVII.
- Biocca, N., Ares, G.D., Caballero D.E., Gimenez, J.M., Carr, G.E., Vaccari, A., Urquiza, S.A.. 2018. *Fluid-structure interaction problems with large displacements*. Mecánica Computacional. Vol XXXVI.
- Gimenez, J.M., Ares, G.D., Biocca, N., Caballero, D.E., Blanco, P.J., Urquiza, S.A.. 2018. *Impact of asymmetric prestretch on the mechanical response of the iliac bifurcation*. Mecánica Computacional. Vol XXXVI.
- Carr, G.E., Vaccari, A., Giménez, J., Sánchez, Y., Biocca, N., Antonelli, N., Martínez, J.F., Urquiza, S.A.. 2018. *Mesh generation automatisation for optimisation of naval propellers*. Mecánica Computacional. Vol XXXVI.
- Vaccari, A., Giménez, J., Antonelli, N., Biocca, N., Carr, G.E., Urquiza, S.A.. 2018. *Free surface profile determination in an experimental circulating water channel*. Mecánica Computacional. Vol XXXVI.
- Vaccari, A., Giménez, J., Sánchez, Y., Biocca, N., Carr, G.E., Antonelli, N.A., Martínez, J.F., Urquiza, S.A.. 2017. *Simulación de rompevórtices en el colector de entrada de un canal de ensayos*. Mecánica Computacional. Vol XXXV.
- Vaccari, A., Gorga, T., Giménez, J., Sánchez, Y., Biocca N., Urquiza, S.A.. 2016. *Modelo computacional de un canal de ensayos hidrodinámicos*. Mecánica Computacional. Vol XXXIV.

Resúmenes presentados en congresos

- Biocca, N., Gimenez, J.M., Caballero, D.E., Urquiza, S.A.. 2021. *Mesh moving methods for fluid-structure interaction problems with large displacements*. Mecánica Computacional. Vol XXXVIII.
- Caballero, D.E., Montini Ballarin, F., Ares, G.D, Biocca, N., Gimenez, J.M., Urquiza, S.A.. 2018. *Elastic behavior of nanofibrous materials considering fiber recruitment*. Mecánica Computacional. Vol XXXVI.

- Biocca, N., Quintana, C., Urquiza, S.A., Frontini, P. 2017. *Prediction of weld line location for injection molded thermoplastic components*. Mecánica Computacional. Vol XXXV.
- Gimenez, J.M., Ares, G.D., Caballero, D.E., Biocca, N., Carr, G.E.. 2017. *Modelos de crecimiento y remodelado en aneurismas*. Mecánica Computacional. Vol XXXV.
- Gimenez, J.M., Blanco, P.J., Biocca, N., Caballero, D.E., Ares, G.D., Carr, G.E., Urquiza, S.A.. 2016. *Influencia de parámetros mecánicos y geométricos en el inicio y crecimiento de aneurismas*. Mecánica Computacional. Vol XXXIV.
- Biocca, N., Quintana, C., Urquiza, S.A., Frontini, P. 2016. *Predictive engineering tool for injection molded thermoplastic components*. Mecánica Computacional. Vol XXXIV.

Organización

La tesis se organiza de la siguiente manera:

- En el capítulo 1 se presentan las principales ramas de la Mecánica del Continuo para el desarrollo de esta tesis. Se introduce la Mecánica del Sólido en grandes deformaciones para sólidos hiperelásticos y la cinemática involucrada bajo una descripción *Lagrangeana*. En un procedimiento análogo, se introduce la Mecánica de Fluidos en el contexto de flujos incompresibles de comportamiento constitutivo Newtoniano por intermedio de una descripción *Euleriana* y presentamos, junto con la forma adimensional de las ecuaciones de gobierno resultantes, una serie de números adimensionales de interés. A partir de este problema, presentamos las ecuaciones de gobierno de fluidos incompresible en dominios deformables por intermedio de una descripción *Arbitrariamente Lagrangeana-Euleriana* (ALE). Como consecuencia de esta descripción, surge la necesidad del planteo de Métodos de Movimiento de Mallas, los cuales, representan un problema desafiante en el contexto de interfases móviles sujetas a grandes desplazamientos y deformaciones e incluso movimiento cíclicos. Finalmente, presentamos brevemente el problema de Interacción Fluido-Estructura (FSI) como parte de una resolución desagregada del problema fluidos en dominios deformables y el problema de sólido en grandes deformaciones, en el contexto de las metodologías de *seguimiento de interfases*.

- En el capítulo 2 se introducen los Métodos de Movimiento de Mallas. Estos surgen naturalmente como parte de las descripciones ALE para dominios deformables, en particular para esta tesis, en el contexto de la Mecánica de Fluidos. En segundo lugar, presentamos un de los métodos más generales y ampliamente utilizado en la literatura para el movimiento de mallas basados en ecuaciones de la elasticidad lineal denominado *Mesh Jacobian-Based Stiffening* (MJBS). Este método será utilizado en múltiples ocasiones para contrastar resultados con el método introducido en esta tesis, por considerarlo un procedimiento estándar en el área. Finalmente, introducimos el principal aporte de esta tesis, una metodología biológicamente inspirada para optimizar mallas, el cual denominamos BIMO, según las siglas del término en inglés *Biologically-Inspired Mesh Optimizer*.
- En el capítulo 3 se presentan experimentos numéricos sencillos para validar las características principales de la metodología BIMO en el contexto de optimización de mallas en modelos 2D y 3D.
- En el capítulo 4 presentamos una serie de casos usualmente reportados en la literatura para estructuras sujetas a diversos modos de deformación en el contexto de problemas de movimiento de mallas sujetas a grandes desplazamientos en geometrías 2D y 3D. Todos los casos presentados aquí se resuelven con las metodologías MJBS y BIMO y se comparan resultados en términos de calidad de malla.
- En capítulo 5 se presenta una clase particular de movimiento de mallas, estos son, los movimientos cíclicos. Presentamos problemas de movimiento de mallas en geometrías 2D y 3D de naturaleza cíclica y comparamos el desempeño de las metodologías MJBS y BIMO en términos de parámetros de calidad de malla y cómo estos métodos acumulan distorsión de malla entre ciclos.
- En el capítulo 6 presentamos una serie de problemas de movimiento de mallas asociados a problemas multifísicos de distinta naturaleza. Entre estos problemas encontramos el flujo en un canal sujeto a altos niveles de deformación, el problema FSSW y un problema FSI inspirado en válvulas cardíacas reportado en la literatura. Vale la pena remarcar que el énfasis en este capítulo está puesto en la resolución del problema de movimiento de mallas asociado. En ese sentido, se reportan resultados de las configuraciones de malla resolviendo con las metodologías MJBS y BIMO.

Capítulo 1

Ecuaciones de gobierno

En este capítulo presentamos los principales conceptos y modelos mecánicos de la Mecánica del Continuo que conciernen a esta tesis. Estos representan la base para el método de optimización y movimiento de mallas introducido en los siguientes capítulos.

En una primera etapa presentamos el problema de la mecánica del sólido en grandes deformaciones, considerando materiales hiperelásticos. Además, presentamos algunas consideraciones cinemáticas y sus implicancias para abordar problemas bidimensionales de deformación y tensión plana.

Luego se presentan las ecuaciones de gobierno para fluidos incompresibles en dominios fijos y su forma adimensional. Tomando como punto de partida este problema, se introducen las ecuaciones de fluidos incompresibles en el contexto de dominios deformables por intermedio de una descripción Arbitrariamente Lagrangeana-Euleriana (ALE). Como consecuencia de esta descripción, surge la necesidad del planteo de métodos de movimiento de malla robustos, fundamentalmente en el contexto de problemas que involucren grandes desplazamientos y deformaciones e incluso movimientos cíclicos. El desarrollo de estos métodos es el principal aporte de esta tesis, los cuales trataremos en capítulos posteriores.

Por último, presentamos el problema de FSI como parte de una resolución desagregada de los problemas de fluido y sólido con adecuadas condiciones de contorno en el contexto de las metodologías de *seguimiento de interfases*.

1.1. Mecánica del sólido en grandes deformaciones

En esta sección presentamos la formulación variacional para el problema de equilibrio mecánico de sólidos en grandes deformaciones tomando como punto de partida el Principio de Potencia Virtual (PPV). En ese sentido, se introducen los principales aspectos cinemáticos y los espacios funcionales utilizados. Partiendo de los mismos, por aplicación del PPV se deriva el problema variacional asociado. Por tratarse este de un problema con múltiples fuentes de no linealidad, presentamos un esquema de linealización por el método de Newton-Raphson. Además, se discute una clase particular de problemas asociados al anterior, estos son aquellos de cinemática bidimensionales en deformación y tensión plana y sus implicancias desde un punto de vista cinemático y las consideraciones para la linealización de los mismos. Por último, presentamos la forma *fuerte* de las ecuaciones de gobierno asociadas al problema variacional enunciado.

1.1.1. Cinemática

Una de las características más importantes de los cuerpos es la de ocupar regiones del espacio Euclidiano. Un cuerpo puede ocupar diferentes regiones de este espacio en distintos instantes de tiempo. Siempre es posible seleccionar alguna de estas, la cual designaremos con Ω_0 , y establecer una relación biunívoca entre cada una de sus partículas y el lugar \mathbf{x}_0 ocupado por ellas. Es así que el cuerpo pasa a ser formalmente una región Ω_0 del espacio Euclidiano que llamaremos *configuración de referencia*. Observar que un cuerpo puede tomar múltiples configuraciones de referencia, siendo muy común utilizar la configuración libre de cargas. Esta configuración de referencia suele ser seleccionada para facilitar el análisis. Por ejemplo, si se quisiera analizar un cuerpo con deformaciones iniciales, una buena práctica sería elegir como configuración de referencia a la configuración libre de tensiones. Este ejemplo muestra una característica muy importante de la configuración de referencia: esta no debe ser necesariamente ocupada por el cuerpo durante su movimiento real.

Dada la configuración de referencia Ω_0 , cada punto $\mathbf{x}_0 \in \Omega_0$ es llamado *punto material*. Debido a determinadas acciones, el cuerpo puede pasar a ocupar distintas regiones (es decir, *configuraciones*), volviéndose necesario la introducción de un parámetro $t \in [t_o, t_f]$ para identificar cualquier configuración $\Omega = \Omega(t) \equiv \Omega_t$ del cuerpo al instante t . Es destacable que t no es necesariamente un parámetro referido al tiempo, sino que puede establecer un orden de precedencia entre configuraciones debido, por ejemplo, a la sucesión de

aplicación de las cargas.

Uno de los principales aspectos de la mecánica es el estudio de la *deformación* de un cuerpo. Se dice que un cuerpo se *deforma* cuando pasa de la configuración Ω_0 a otra Ω_t . De esta manera, la deformación queda caracterizada por la aplicación

$$\begin{aligned}\varphi : \Omega_0 &\rightarrow \Omega_t, \\ \mathbf{x}_0 &\mapsto \mathbf{x}_t = \varphi(\mathbf{x}_0, t).\end{aligned}\tag{1.1}$$

No obstante, esta aplicación debe cumplir ciertos requerimientos para ser considerada válida

- **Continuidad:** La deformación de un cuerpo debe ser representable por funciones suficientemente diferenciables, al menos por tramos.
- **Conservación:** En ninguna evolución, se crea o se destruye materia.

El *primer axioma* hace referencia a lo esperado por un *medio continuo*, es decir, un medio “suave”. Así, las funciones que representan la *deformación* deben ser tan diferenciables como las operaciones matemáticas lo requieran. Esto es, que a cada punto \mathbf{x}_0 de Ω_0 le corresponde un único punto \mathbf{x}_t en Ω_t . En cuanto al *segundo axioma*, este se refiere a que ningún volumen finito de materia durante la *deformación* puede colapsar en un punto (volumen nulo), ni tampoco en un volumen infinito en tiempo finito. También implica que ningún volumen material puede reducirse a superficies y/o líneas. De este modo, la *deformación de un cuerpo* al pasar de la configuración Ω_0 a Ω_t quedará definida como la aplicación (1.1), diferenciable y biunívoca que satisface

$$\begin{aligned}\det \nabla \varphi(\mathbf{x}_0, t) &\geq 0 \quad \forall \mathbf{x}_0 \in \Omega_0, \\ \varphi(\mathbf{x}_0, t)|_{\mathbf{x}_0 \in \Omega_0} &= \mathbf{x}_t \in \Omega_t, \\ \varphi(\mathbf{x}_0, t)|_{\mathbf{x}_0 \in \partial\Omega_0} &= \mathbf{x}_t \in \partial\Omega_t,\end{aligned}\tag{1.2}$$

siendo $\partial\Omega_0$ y $\partial\Omega_t$ las fronteras de las configuraciones Ω_0 y Ω_t , respectivamente.

Este mapeo puede ser caracterizado por un campo vectorial definido a partir de las posiciones de las partículas antes y luego de la deformación, quedando este campo naturalmente definido sobre todos los puntos de la configuración Ω_0 , como se indica en la Figura 1.1, tal que $\mathbf{x}_t = \varphi(\mathbf{x}_0, t)$, o lo que es equivalente

$$\mathbf{x}_t = \mathbf{x}_0 + \mathbf{u}(\mathbf{x}_0),\tag{1.3}$$

siendo $\mathbf{u} = \varphi - \mathbf{x}_0$ el campo de desplazamientos.

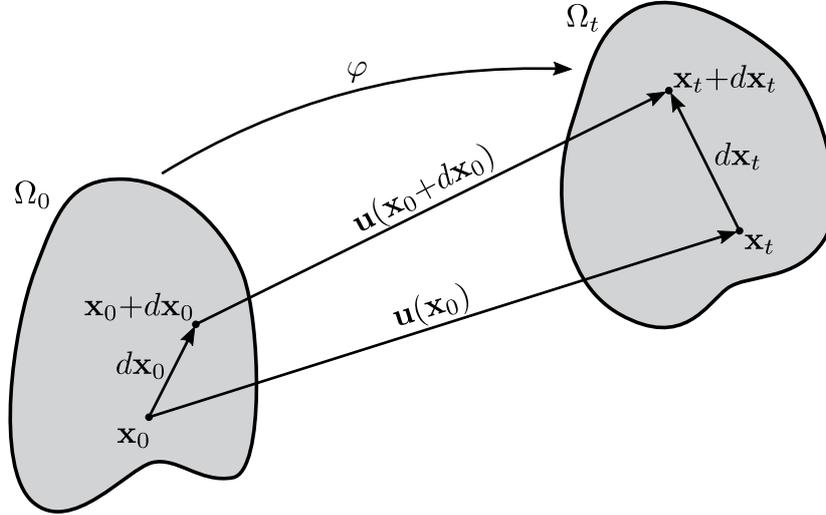


Figura 1.1: Mapeo φ que caracteriza la *deformación* del cuerpo entre las configuraciones Ω_0 y Ω_t . Los puntos \mathbf{x}_0 y $\mathbf{x}_0 + d\mathbf{x}_0$ representan dos puntos materiales que se mapean según φ en los puntos \mathbf{x}_t y $\mathbf{x}_t + d\mathbf{x}_t$, respectivamente.

A continuación mostraremos que el estado de la deformación no queda estrictamente caracterizado por el campo de desplazamientos sino por su gradiente. En ese sentido, definimos el tensor gradiente de deformación

$$\mathbf{F}^u = \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{x}_0} = \nabla \varphi = \nabla_{\mathbf{x}_0} + \nabla \mathbf{u} = \mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}, \quad (1.4)$$

siendo \mathbf{I} el tensor identidad de segundo orden.

Si consideramos un punto arbitrario \mathbf{x}_0 , dada una cierta vecindad suficientemente pequeña alrededor del mismo se tiene

$$\varphi(\mathbf{x}_0 + d\mathbf{x}_0, t) = \varphi(\mathbf{x}_0, t) + \nabla \varphi(\mathbf{x}_0, t) d\mathbf{x}_0 + \mathcal{O}(d\mathbf{x}_0^2). \quad (1.5)$$

A continuación procedemos en busca de una medida de la *deformación*. Para ello, en primer lugar calculamos cómo una *fibra material* $d\mathbf{x}_0$ transforma según la aplicación φ . De esta manera, a partir de un desarrollo en serie de Taylor de la aplicación φ en un entorno

al punto \mathbf{x}_0 (ver ecuación (1.5)), se obtiene la siguiente expresión

$$\begin{aligned} d\mathbf{x}_t &= (\mathbf{x}_t + d\mathbf{x}_t) - \mathbf{x}_t = \varphi(\mathbf{x}_0 + d\mathbf{x}_0, t) - \varphi(\mathbf{x}_0, t) \\ &\approx \varphi(\mathbf{x}_0, t) + \nabla\varphi(\mathbf{x}_0, t)d\mathbf{x}_0 - \varphi(\mathbf{x}_0, t) \\ &= \nabla\varphi(\mathbf{x}_0, t)d\mathbf{x}_0. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Por aplicación de la definición en la ecuación (1.4) se puede obtener la conocida expresión

$$d\mathbf{x}_t = \mathbf{F}^u d\mathbf{x}_0. \quad (1.7)$$

Luego, una medida de la deformación para una dada fibra material $d\mathbf{x}_0$, cuando la misma se mapea a la configuración deformada $d\mathbf{x}_t$ viene dada por

$$d\mathbf{x}_t \cdot d\mathbf{x}_t - d\mathbf{x}_0 \cdot d\mathbf{x}_0 = 2\mathbf{E}^u d\mathbf{x}_0 \cdot d\mathbf{x}_0, \quad (1.8)$$

siendo \mathbf{E}^u el tensor de Green-Lagrange

$$\mathbf{E}^u = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^{uT}\mathbf{F}^u - \mathbf{I}). \quad (1.9)$$

Es importante notar que hasta aquí se ha optado por presentar la deformación en términos de una descripción *Lagrangeana* en la cual el foco está puesto en los puntos $\mathbf{x}_0 \in \Omega_0$. Observar que dados los postulados definidos en (1.2), existe $\varphi^{-1}(\mathbf{x}_t, t)$ suficientemente regular. En este sentido, es posible invertir el razonamiento y hacer foco en el punto $\mathbf{x}_t \in \Omega_t$ en lugar del punto \mathbf{x}_0 . Notar que ahora a medida que el parámetro t varía, el punto \mathbf{x}_t pasa a ser el lugar ocupado por distintos puntos \mathbf{x}_0 . Este tipo de descripción se la conoce como descripción *Euleriana* o *Espacial*.

1.1.2. Espacios funcionales involucrados en el PPV

En las siguientes secciones, la definición del equilibrio mecánico se aborda en términos del Principio de Potencia Virtual (PPV) [24]. En dicho contexto, es fundamental definir apropiadamente algunos espacios funcionales lo cuales, siguiendo de cerca las referencias [2, 73], definimos a continuación.

El conjunto de todas las *configuraciones posibles* que el cuerpo puede tomar constituye un espacio vectorial \mathcal{U} . Luego, el *movimiento* de un cuerpo queda definido por el conjunto de estas configuraciones posibles. Este movimiento tiene una deformación caracterizada

a cada instante t por el mapeo $\varphi(\mathbf{x}_0, t)$ y un campo de velocidades $\mathbf{v}(\mathbf{x}_t, t)$ asociado que denominaremos *acción de movimiento*

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}_t, t) = \left. \frac{\partial \mathbf{u}(\mathbf{x}_0, t)}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}_0 = \varphi^{-1}(\mathbf{x}_t, t)}. \quad (1.10)$$

El conjunto de todas las acciones de movimiento *posibles* a partir de las configuraciones en \mathcal{U} define el espacio \mathcal{V} constituido por todos los campos de velocidades al que puede estar sujeto el cuerpo. Vale destacar que, con esta definición, el campo de velocidad real del cuerpo en un instante t es un elemento del conjunto \mathcal{V} .

En general, es normal que el problema de equilibrio mecánico de un cuerpo deba satisfacer determinadas *restricciones cinemáticas* (ver Figura 1.2). Las configuraciones posibles del cuerpo que además cumplen con estas restricciones se denominan *configuraciones admisibles*. El subconjunto de \mathcal{U} formado por todas las configuraciones admisibles se define según

$$\text{Kin}_{\mathbf{u}} = \{\mathbf{u} \in \mathcal{U}, \mathbf{u} \text{ es una configuración cinemáticamente admisible}\}. \quad (1.11)$$

Un movimiento a partir de una configuración admisible será admisible si cada una de las configuraciones de ese movimiento es también admisible. Además, a cada movimiento admisible en $\text{Kin}_{\mathbf{u}}$ le corresponderá una *acción de movimiento admisible* y el conjunto de todas ellas está representado por el subconjunto

$$\text{Kin}_{\mathbf{v}} = \{\mathbf{v} \in \mathcal{V}, \mathbf{v} \text{ cinemáticamente admisible}\}. \quad (1.12)$$

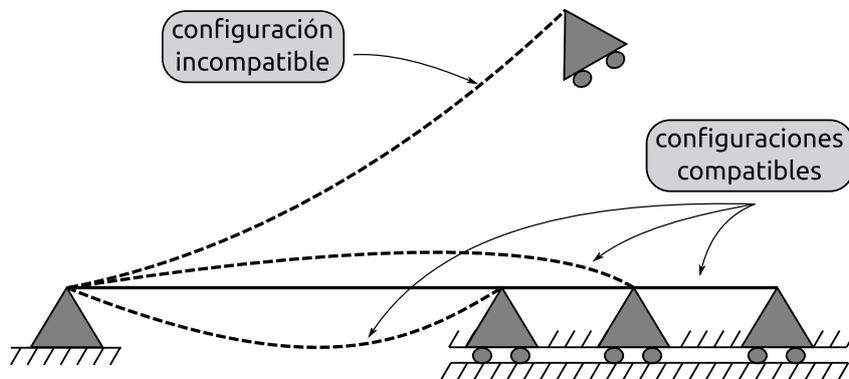


Figura 1.2: Configuraciones admisibles para una determinada restricción cinemática.

También es posible definir el subconjunto de acciones de movimiento *variacionalmente*

admisibles Var_v dado por el conjunto de campos de velocidad tal que $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ donde haya prescritas acciones de movimiento. Se verifica luego que $\text{Kin}_v = \bar{v} + \text{Var}_v$, siendo $\bar{v} \in \text{Kin}_v$ una acción de movimiento arbitraria compatible con las restricciones cinemáticas.

1.1.3. Ecuaciones de equilibrio

Dada un cuerpo en sus configuraciones Ω_0 y Ω_t como indica la Figura 1.3. La configuración Ω_0 se encuentra *libre de cargas y libre de tensiones* y la configuración espacial Ω_t se encuentra en equilibrio para un determinado sistema de cargas.

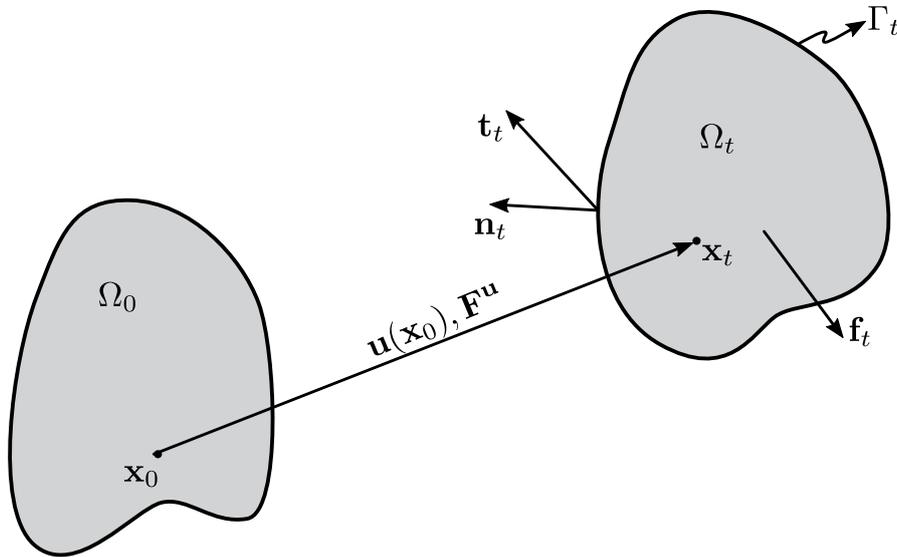


Figura 1.3: Configuraciones involucradas en el problema de equilibrio mecánico. La configuración Ω_0 representa un estado libre de cargas y tensiones. La configuración Ω_t representa un estado de equilibrio con el sistema de cargas. Estas configuraciones se mapean a través del campo de desplazamientos $\mathbf{u}(\mathbf{x}_0)$ y la deformación está caracterizada por el tensor \mathbf{F}^u . El sistema de cargas externo está formado por dos tipos de esfuerzos externos: fuerzas distribuidas en el volumen \mathbf{f}_t y fuerzas distribuidas en la frontera de Neumann $\Gamma_{N,t} \subset \Gamma_t$.

A continuación enunciaremos la formulación variacional correspondiente al equilibrio mecánico, dando por conocida la configuración material Ω_0 y la configuración espacial Ω_t desconocida. De este modo, el problema puede plantearse de la siguiente manera: encontrar $\mathbf{u} \in \text{Kin}_u$ tal que

$$\int_{\Omega_t} \boldsymbol{\sigma}^u \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}) d\Omega = \int_{\Omega_t} \rho \mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{u}} d\Omega + \int_{\Gamma_{N,t}} \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{u}} d\Gamma \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_u, \quad (1.13)$$

en donde los índices t de las variables pertenecientes al integrando fueron omitidos con

el objeto simplificar la notación. De esta manera resulta, la densidad ρ y la superficie de Neumann Γ_N tal que $\Gamma_N \subset \Gamma$. De manera análoga, \mathbf{f} es una carga distribuida en el volumen mientras que \mathbf{t} una carga distribuida en la superficie Γ_N . Notar que \mathbf{t} representa una carga seguidora y que puede descomponerse en dirección normal y tangencial a $\Gamma_{N,t}$, es decir $\mathbf{t} = \mathbf{t}^n + \mathbf{t}^t$, siendo $\mathbf{t}^n = (\mathbf{t} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}$ la componente normal y $\mathbf{t}^t = \mathbf{P}\mathbf{t}$ la componente tangencial. En esta descomposición utilizamos el versor \mathbf{n} como normal de la superficie y $\mathbf{P} = \mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}$ es el tensor proyección tangencial. Notar que, de manera trivial, podemos escribir $\mathbf{t}^t = \mathbf{P}\mathbf{t}^t$, es decir, el tensor proyección tangencial hace las veces de identidad sobre un vector tangente a una superficie. Además, el tensor de tensiones de Cauchy [27] $\boldsymbol{\sigma}$ está relacionado con el tensor de tensiones de Piola-Kirchhoff de segunda especie [27] \mathbf{S} del siguiente modo

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{\det \mathbf{F}^u} \mathbf{F}^u \mathbf{S}(\mathbf{E}^u) \mathbf{F}^{uT}, \quad (1.14)$$

en donde el tensor de tensiones de Piola-Kirchhoff de segunda especie depende del tensor de Green-Lagrange (1.9) a través de apropiadas relaciones constitutivas [36, 42]. El espacio de soluciones cinemáticamente admisibles queda definido

$$\text{Kin}_{\mathbf{u}} = \{\mathbf{u} \in \mathbf{H}^1(\Omega_t), \mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \text{ en } \Gamma_{D,t}\}, \quad (1.15)$$

que se encuentra asociado al espacio de variaciones admisibles

$$\text{Var}_{\mathbf{u}} = \{\hat{\mathbf{u}} \in \mathbf{H}^1(\Omega_t), \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{0} \text{ en } \Gamma_{D,t}\}, \quad (1.16)$$

siendo $\mathbf{H}^1 \stackrel{def}{=} (H^1)^{n_{sd}}$ el espacio de funciones vectoriales con n_{sd} componentes y $H^1(\Omega_t)$ el espacio de Hilbert cuyos elementos son de cuadrado integrable hasta su primer derivada en el dominio Ω_t , cuya frontera es Γ_t . Es importante notar que todos los campos hasta aquí mencionados se encuentran definidos en la configuración espacial Ω_t .

A continuación escribiremos las ecuaciones de equilibrio en la configuración de referencia Ω_0 . Luego, el problema variacional (1.13) puede plantearse de la siguiente manera: encontrar $\mathbf{u} \in \text{Kin}_{\mathbf{u}} \circ \boldsymbol{\varphi}$ tal que

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_0} \mathbf{S}(\mathbf{E}^u) \cdot \dot{\mathbf{E}}^u \, d\Omega &= \int_{\Omega_0} \rho \mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Omega + \int_{\Gamma_{N,0}} t^n \mathbf{F}^{u-T} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, \det \mathbf{F}^u \, d\Gamma \\ &+ \int_{\Gamma_{N,0}} \mathbf{P} \mathbf{t}^t \cdot \hat{\mathbf{u}} \, \det \mathbf{F}^u |\mathbf{F}^{u-T} \mathbf{n}| \, d\Gamma \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathbf{u}} \circ \boldsymbol{\varphi}, \end{aligned} \quad (1.17)$$

siendo $\dot{\mathbf{E}}^u = \frac{1}{2} (\mathbf{F}^{uT} \nabla \hat{\mathbf{u}} + \nabla \hat{\mathbf{u}}^T \mathbf{F}^u)$, $\mathbf{S}(\mathbf{E}^u)$ el tensor de tensiones de Piola-Kirchhoff de segunda especie (1.14), $t^n = \mathbf{t} \cdot \mathbf{n}$ la componente normal del vector tracción y \mathbf{P} es el tensor proyección tangencial descrito en la configuración material

$$\mathbf{P} = \mathbf{I} - \frac{\mathbf{F}^{u-T} \mathbf{n}}{|\mathbf{F}^{u-T} \mathbf{n}|} \otimes \frac{\mathbf{F}^{u-T} \mathbf{n}}{|\mathbf{F}^{u-T} \mathbf{n}|}. \quad (1.18)$$

Es importante notar que todos los campos se encuentran definidos en la configuración material Ω_0 . En ese sentido, por ejemplo, note el siguiente abuso de notación: la densidad $\rho(\mathbf{x}_0) = \rho(\mathbf{x}_t) \det \mathbf{F}^u$.

Ahora, los espacios de soluciones cinemáticamente admisibles junto a su asociado de variaciones admisibles, en contraparte a los definidos en (1.15) y (1.16), respectivamente, quedan determinados

$$\text{Kin}_u \circ \varphi = \{\mathbf{u}(\mathbf{x}_0) = \mathbf{u}(\mathbf{x}_t) \circ \varphi(\mathbf{x}_0, t) \mid \mathbf{u}(\mathbf{x}_t) \in \mathbf{H}^1(\Omega_t), \mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \text{ en } \Gamma_{D,t}\}, \quad (1.19)$$

$$\text{Var}_u \circ \varphi = \{\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x}_0) = \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x}_t) \circ \varphi(\mathbf{x}_0, t) \mid \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x}_t) \in \mathbf{H}^1(\Omega_t), \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{0} \text{ en } \Gamma_{D,t}\}. \quad (1.20)$$

Como comentario final, para modelar materiales incompresibles, es necesario considerar la restricción cinemática $\det \mathbf{F}^u = 1$ en todo el dominio. Esta puede ser incorporada en la definición de los espacios $\text{Kin}_u \circ \varphi$ y $\text{Var}_u \circ \varphi$, sin embargo, este tipo de restricciones suele ser relajada de estos espacios a través de la definición de multiplicadores de Lagrange distribuidos en el volumen.

1.1.4. Proceso de linealización

El problema de equilibrio mecánico formulado en la Sección 1.1.3 descrito tanto en la configuración material como espacial, según las ecuaciones (1.13) y (1.17), respectivamente, son de carácter no lineal por distintas fuentes. Estas no lineales pueden ser de origen geométrico, constitutivo y del sistema de cargas aplicado. Como fuentes de origen geométrico podemos mencionar el desconocimiento de la configuración de equilibrio así como la medida de deformación propia del contexto de grandes deformaciones. Desde el punto de vista constitutivo, en esta tesis haremos foco en materiales hiperelásticos, ampliamente utilizados para describir tejidos biológicos [36, 42, 59], los cuales son de carácter no lineal. Además, el sistema de cargas también puede representar una fuente de no linealidad, por ejemplo, al considerar *cargas seguidoras*, como es el caso de la presión aplicada sobre una superficie deformable cuya configuración no es conocida *a priori*.

El proceso de linealización se lleva a cabo por el método de Newton-Raphson. El mismo debe ser realizado en una configuración conocida, en nuestro caso será Ω_0 . Esto explica la razón por la cual el PPV, naturalmente descrito en la configuración de equilibrio Ω_t , es expresado en la configuración material (en este problema asumida como conocida) Ω_0 , esto es, describir el problema (1.13) como el problema (1.17). Vale la pena mencionar que ambos problemas son totalmente equivalentes, cambiando simplemente la forma en que cada uno es descrito. Una vez realizada la linealización, las expresiones resultantes pueden ser devueltas a la configuración espacial Ω_t . Como se verá, esto presenta una ventaja en la precisión con la cual se evalúan ciertos términos en la frontera.

El problema variacional (1.17) puede escribirse como la siguiente forma compacta: hallar $\mathbf{u} \in \text{Kin}_{\mathbf{u}} \circ \varphi$ tal que

$$\langle \mathcal{R}_0(\mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle_{\Omega_0} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathbf{u}} \circ \varphi. \quad (1.21)$$

La linealización por el método de Newton-Raphson aplicada a la expresión anterior alrededor de un punto $\mathbf{u}^k \in \text{Kin}_{\mathbf{u}} \circ \varphi$ se lee: hallar $\delta \mathbf{u} \in \text{Var}_{\mathbf{u}} \circ \varphi$ tal que

$$\langle \mathcal{R}_0(\mathbf{u}^k), \hat{\mathbf{u}} \rangle_{\Omega_0} + \left. \frac{d}{d\epsilon} \langle \mathcal{R}_0(\mathbf{u}^k + \epsilon \delta \mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle \right|_{\epsilon=0} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathbf{u}} \circ \varphi, \quad (1.22)$$

siendo $\left. \frac{d}{d\epsilon} (\cdot) \right|_{\epsilon=0}$ el operador derivada de Gâteaux.

Al introducir la perturbación $\epsilon \delta \mathbf{u}$ en aquellos campos que dependen de \mathbf{u} se introduce el índice ϵ . Por ejemplo, $\mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}} = \mathbf{I} + \nabla(\mathbf{u} + \epsilon \delta \mathbf{u}) = \mathbf{F}^{\mathbf{u}} + \epsilon \nabla \delta \mathbf{u}$. Para simplificar la notación, se hace omisión del índice k indicando campos evaluados en la iteración previa. Luego, el residuo perturbado del segundo término de la ecuación (1.22) resulta

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{d\epsilon} \langle \mathcal{R}_0(\mathbf{u}^k + \epsilon \delta \mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle \right|_{\epsilon=0} &= \int_{\Omega_0} \left. \frac{d}{d\epsilon} \left[\mathbf{S}(\mathbf{E}_\epsilon^{\mathbf{u}}) \cdot \dot{\mathbf{E}}_\epsilon(\hat{\mathbf{u}}) \right] \right|_{\epsilon=0} d\Omega \\ &\quad - \int_{\Omega_0} \left. \frac{d}{d\epsilon} [\mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{u}} \det \mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}}] \right|_{\epsilon=0} d\Omega \\ &\quad - \int_{\Gamma_{N,0}} \left. \frac{d}{d\epsilon} [t^n \mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{u}} \det \mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}}] \right|_{\epsilon=0} d\Gamma \\ &\quad - \int_{\Gamma_{N,0}} \left. \frac{d}{d\epsilon} [\mathbf{P}_\epsilon t^t \cdot \hat{\mathbf{u}} \det \mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}} | \mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}] \right|_{\epsilon=0} d\Gamma \\ &\quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathbf{u}} \circ \varphi, \end{aligned} \quad (1.23)$$

siendo $\dot{\mathbf{E}}_\epsilon^{\mathbf{u}} = \frac{1}{2} (\mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}T} \nabla \hat{\mathbf{u}} + \nabla \hat{\mathbf{u}}^T \mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}})$ y $\mathbf{P}_\epsilon = \mathbf{I} - \frac{\mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}}{\|\mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}\|} \otimes \frac{\mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}}{\|\mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}\|}$ el tensor proyección

tangencial perturbado, descrito materialmente. Usando las expresiones del Apéndice A para el cálculo de las derivadas con respecto a ϵ (evaluadas en $\epsilon = 0$) se obtiene la siguiente expresión

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\epsilon} \langle \mathcal{R}_0(\mathbf{u}^k + \epsilon \delta \mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle \Big|_{\epsilon=0} &= \int_{\Omega_0} \left(\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}^{\mathbf{u}}} (\nabla \delta \mathbf{u}^T \mathbf{F}^{\mathbf{u}})^S \right) \cdot \dot{\mathbf{E}}(\hat{\mathbf{u}}) d\Omega \\
&+ \int_{\Omega_0} \mathbf{S} \cdot (\nabla \delta \mathbf{u}^T \nabla \hat{\mathbf{u}})^S d\Omega \\
&- \int_{\Omega_0} \mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{u}} (\mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \cdot \nabla \delta \mathbf{u}) \det \mathbf{F}^{\mathbf{u}} d\Omega \\
&- \int_{\Gamma_{N,0}} t^n \mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{u}} (\det \mathbf{F}^{\mathbf{u}} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \cdot \nabla \delta \mathbf{u}) d\Gamma \\
&- \int_{\Gamma_{N,0}} t^n (-\mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \nabla \delta \mathbf{u}^T \mathbf{F}^{\mathbf{u}-T}) \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{u}} \det \mathbf{F}^{\mathbf{u}} d\Gamma \\
&- \int_{\Gamma_{N,0}} \left(\frac{d}{d\epsilon} \left[\frac{\mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}}{|\mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}|} \right] \Big|_{\epsilon=0} \otimes \frac{\mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}}{|\mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}|} \right)^S \mathbf{t}^t \cdot \hat{\mathbf{u}} |\mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \cdot \nabla \delta \mathbf{u}| \det \mathbf{F}^{\mathbf{u}} d\Gamma \\
&- \int_{\Gamma_{N,0}} \mathbf{P} \mathbf{t}^t \cdot \hat{\mathbf{u}} |\mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}| (\det \mathbf{F}^{\mathbf{u}} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \cdot \nabla \delta \mathbf{u}) d\Gamma \\
&- \int_{\Gamma_{N,0}} \mathbf{P} \mathbf{t}^t \cdot \hat{\mathbf{u}} \frac{(-\mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \nabla \delta \mathbf{u}^T \mathbf{F}^{\mathbf{u}-T}) \mathbf{n} \cdot \mathbf{F}^{\mathbf{u}-T}}{|\mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}|} \det \mathbf{F}^{\mathbf{u}} d\Gamma \\
&\forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathbf{u}} \circ \varphi,
\end{aligned} \tag{1.24}$$

siendo el término $\frac{d}{d\epsilon} \left[\frac{\mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}}{|\mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}|} \right] \Big|_{\epsilon=0}$ dado por la expresión (A.13) del Apéndice A.

Luego, el residuo linealizado alrededor del punto \mathbf{u}^k (ver ecuación (1.24)) puede ser expresado en la configuración espacial Ω_t^k , la cual, no se corresponde estrictamente con una configuración de autoequilibrada hasta no alcanzar convergencia. La principal ventaja de esta operación se encuentra en la precisión con la cual son evaluados los términos en la frontera, al eliminar la dependencia del tensor $\mathbf{F}^{\mathbf{u}}$. De esta operación resulta

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\epsilon} \langle \mathcal{R}_t(\mathbf{u}^k + \epsilon \delta \mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle \Big|_{\epsilon=0} &= \int_{\Omega_t} \mathbf{D}\varepsilon(\delta \mathbf{u}) \cdot \varepsilon(\hat{\mathbf{u}}) d\Omega \\
&+ \int_{\Omega_t} \nabla \delta \mathbf{u} \boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{u}} \cdot \nabla \hat{\mathbf{u}} d\Omega \\
&- \int_{\Omega_t} \mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{u}} \text{div} \delta \mathbf{u} d\Omega \\
&- \int_{\Gamma_{N,t}} t^n (\nabla \delta \mathbf{u}^T - \text{div} \delta \mathbf{u}) \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{u}} d\Gamma
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \int_{\Gamma_{N,t}} (\mathbf{H}(\delta\mathbf{u}) \mathbf{n} \otimes \mathbf{n})^S \mathbf{t}^t \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Gamma \\
& - \int_{\Gamma_{N,t}} \mathbf{P} \mathbf{t}^t \cdot \hat{\mathbf{u}} \operatorname{div} \delta\mathbf{u} \, d\Gamma \\
& - \int_{\Gamma_{N,t}} \mathbf{P} \mathbf{t}^t \cdot \hat{\mathbf{u}} (-\nabla \delta\mathbf{u}^T \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}) \, d\Gamma \\
& \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \operatorname{Var}_{\mathbf{u}},
\end{aligned} \tag{1.25}$$

en donde $\mathbf{H}(\delta\mathbf{u})$ viene dado por

$$\mathbf{H}(\delta\mathbf{u}) = -\nabla \delta\mathbf{u}^T + (\nabla \delta\mathbf{u}^T \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{I}. \tag{1.26}$$

Además, se hizo uso del siguiente abuso de notación para el tensor proyección tangencial $\mathbf{P} = \mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}$, ahora descripto espacialmente y \mathbf{D} el tensor de elasticidad de cuarto orden simétrico cuyas componentes en una base cartesiana están dadas por la siguiente expresión

$$\begin{aligned}
(\mathbf{D})_{ijkl} &= \frac{1}{\det \mathbf{F}^{\mathbf{u}}} (\mathbf{F}^{\mathbf{u}})_{ia} (\mathbf{F}^{\mathbf{u}})_{jb} (\mathbf{F}^{\mathbf{u}})_{kc} (\mathbf{F}^{\mathbf{u}})_{ld} \left(\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}^{\mathbf{u}}} \right)_{abcd} \\
& \quad \forall i, j, k, l = 1, 2, 3.
\end{aligned} \tag{1.27}$$

Además, $\left(\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}^{\mathbf{u}}} \right)_{abcd} = \frac{\partial \mathbf{S}_{ab}}{\partial \mathbf{E}_{cd}^{\mathbf{u}}}$, $\forall a, b, c, d = 1, 2, 3$.

Finalmente, en cada iteración de Newton-Raphson se obtiene una nueva configuración Ω_t^{k+1} con coordenadas $\mathbf{x}_t^{k+1} = \mathbf{x}_0 + \mathbf{u}^{k+1}$, siendo $\mathbf{u}^{k+1} = \mathbf{u}^k + \delta\mathbf{u}$. En lo que sigue, el índice k será omitido para mayor claridad en la notación. Así, el sistema lineal a resolver resulta: dado \mathbf{u} (desplazamiento en la iteración anterior) hallar $\delta\mathbf{u} \in \operatorname{Var}_{\mathbf{u}}$ tal que

$$a(\delta\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) = l(\hat{\mathbf{u}}) \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \operatorname{Var}_{\mathbf{u}} \tag{1.28}$$

siendo $a(\cdot, \cdot)$ y $l(\cdot)$ operadores bilineales y lineales, respectivamente

$$\begin{aligned}
a(\delta\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) &= \int_{\Omega_t} \mathbf{D} \boldsymbol{\varepsilon}(\delta\mathbf{u}) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}) \, d\Omega \\
& + \int_{\Omega_t} \nabla \delta\mathbf{u} \boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{u}} \cdot \nabla \hat{\mathbf{u}} \, d\Omega \\
& - \int_{\Omega_t} \mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{u}} \operatorname{div} \delta\mathbf{u} \, d\Omega \\
& - \int_{\Gamma_{N,t}} t^n (\nabla \delta\mathbf{u}^T - \operatorname{div} \delta\mathbf{u}) \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Gamma
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \int_{\Gamma_{N,t}} (\mathbf{H}(\delta \mathbf{u}) \mathbf{n} \otimes \mathbf{n})^S \mathbf{t}^t \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Gamma \\
& - \int_{\Gamma_{N,t}} \mathbf{P} \mathbf{t}^t \cdot \hat{\mathbf{u}} \operatorname{div} \delta \mathbf{u} \, d\Gamma \\
& - \int_{\Gamma_{N,t}} \mathbf{P} \mathbf{t}^t \cdot \hat{\mathbf{u}} (-\nabla \delta \mathbf{u}^T \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}) \, d\Gamma,
\end{aligned} \tag{1.29}$$

$$\begin{aligned}
l(\hat{\mathbf{u}}) = & - \int_{\Omega_t} \boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{u}} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}) \, d\Omega \\
& + \int_{\Omega_t} \rho \mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Omega \\
& + \int_{\Gamma_{N,t}} t^n \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Gamma \\
& + \int_{\Gamma_{N,t}} \mathbf{P} \mathbf{t}^t \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Gamma.
\end{aligned} \tag{1.30}$$

1.1.5. Forma fuerte de las ecuaciones de equilibrio

La forma *fuerte* de las ecuaciones de equilibrio, normalmente asociadas a sistemas de ecuaciones diferenciales, puede obtenerse fácilmente a partir de la formulación variacional. En ese sentido, será posible obtener dichas formas descritas en las mismas configuraciones que su contraparte variacional. Pondremos foco aquí en la forma fuerte de las ecuaciones de equilibrio descritas en la configuración espacial, como suele encontrarse en la literatura. Para ello, el equilibrio mecánico planteado en la ecuación (1.13) puede reescribirse integrando por partes el término correspondiente al tensor de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$, notando su simetría y aplicando las condiciones de frontera definidas en el espacio $\text{Var}_{\mathbf{u}}$, resultando

$$\int_{\Omega_t} (\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f}) \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Omega + \int_{\Gamma_{N,t}} (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} - \mathbf{t}) \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Gamma = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathbf{u}}. \tag{1.31}$$

Dada la arbitrariedad de las funciones $\hat{\mathbf{u}}$ se cumple

$$\begin{aligned}
\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f} &= \mathbf{0} \quad \text{en } \Omega_t, \\
\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} &= \mathbf{t} \quad \text{en } \Gamma_{N,t}, \\
\mathbf{u} &= \bar{\mathbf{u}} \quad \text{en } \Gamma_{D,t}.
\end{aligned} \tag{1.32}$$

1.1.6. Cinemática plana

Ahora formularemos el problema variacional de la mecánica del sólido en grandes deformaciones para una serie de problemas bidimensionales. Estos pueden derivarse del problema variacional general (1.13) con las hipótesis correspondientes.

Consideremos el problema variacional (1.13) particularizado para un dominio plano como indica la Figura 1.4. El mismo tiene un espesor H en la configuración material Ω_0 y luego de cierta deformación el espesor es h . Vale la pena notar que los espesores no son necesariamente uniformes. Por simplicidad, asumiremos que el dominio se encuentra en el plano xy . De esta manera, dos estados tensionales surgen espontáneamente: el estado de deformación plana y el estado de tensión plana.

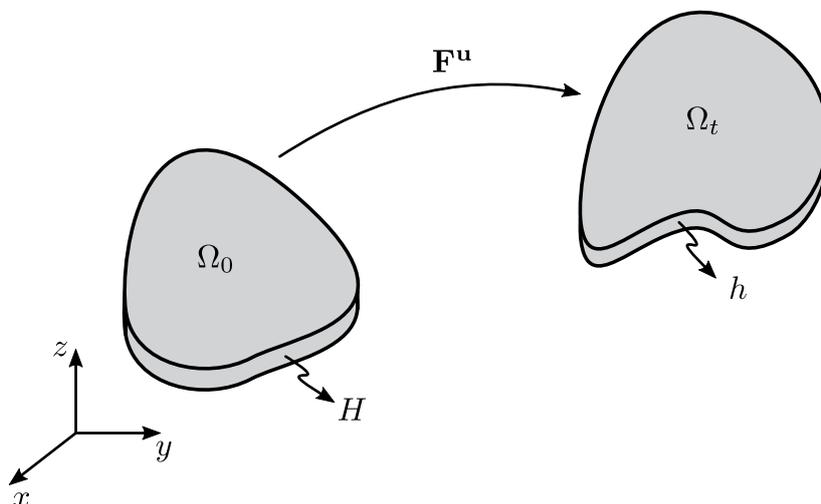


Figura 1.4: Cinemática del problema de grandes deformaciones para problemas bidimensionales en el plano xy . El dominio queda representado por una *chapa* sin curvatura de espesor H en la configuración material Ω_0 y espesor h en la configuración espacial Ω_t . El tensor \mathbf{F}^u caracteriza la deformación entre ambas configuraciones.

Deformación plana

El estado tensional de deformación plana se caracteriza por la ausencia de estiramiento en la dirección del espesor (dirección z), es decir, el espesor h en la configuración material Ω_0 coincide con el espesor h en la configuración espacial Ω_t , esto es, $H = h$. De esta manera, el campo de desplazamientos \mathbf{u} puede ser caracterizado según

$$(\mathbf{u}(\mathbf{x}_0))_z = 0 \quad \forall \mathbf{x}_0 \in \Omega_0, \quad (1.33)$$

donde además se considera la ausencia de movimientos rígidos fuera del plano xy . En sentido riguroso, la condición $(\nabla \mathbf{u})_{zz} = 0$ es suficiente. Así, el tensor gradiente de deformación $\mathbf{F}^{\mathbf{u}}$ resulta

$$\mathbf{F}^{\mathbf{u}} = \begin{bmatrix} F_{xx}^{\mathbf{u}} & F_{xy}^{\mathbf{u}} & 0 \\ F_{yx}^{\mathbf{u}} & F_{yy}^{\mathbf{u}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (1.34)$$

Luego, estas ecuaciones pueden fácilmente ser introducidas en el problema lineal (1.28) y eliminar $(\mathbf{u})_z$ como grado de libertad.

Tensión plana

En el caso de asumir la hipótesis de tensión plana se tiene la condición

$$(\boldsymbol{\sigma})_{iz} = 0 \quad \forall i = x, y, z. \quad (1.35)$$

El problema queda resuelto una vez conocido el desplazamiento $(\mathbf{u})_z$. Este desplazamiento es consecuencia de un estado de deformaciones completo—en el sentido tridimensional. De esta manera, el tensor gradiente de deformación $\mathbf{F}^{\mathbf{u}}$ resulta

$$\mathbf{F}^{\mathbf{u}} = \begin{bmatrix} F_{xx}^{\mathbf{u}} & F_{xy}^{\mathbf{u}} & 0 \\ F_{yx}^{\mathbf{u}} & F_{yy}^{\mathbf{u}} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda \end{bmatrix}, \quad (1.36)$$

siendo $\lambda = \frac{(\mathbf{u})_z}{H}$ el estiramiento en la dirección del espesor. El problema queda resuelto una vez conocido λ y posteriormente $(\mathbf{u})_z$, pudiendo luego resolverse directamente el sistema lineal (1.28). Este problema de cálculo del estiramiento λ es de carácter no lineal y puede resolverse para punto del dominio del punto del dominio. A efectos prácticos, en el contexto de una resolución a través del Método de Elementos Finitos (FEM) [98], el estiramiento debe ser resuelto en los puntos de gauss de cada elemento finito. Un caso particular que abordamos aquí es el de elementos simplex lineales en donde los gradientes se aproximan según tramos constantes por elemento. En ese caso, alcanzará con resolver el problema de estiramiento según el espesor elemento por elemento. Planteando un esquema de resolución tipo Newton-Raphson (ver Apéndice B) resulta el siguiente problema lineal:

Dado $\lambda^k \in \mathbb{R}^+$ hallar $\delta\lambda \in \mathbb{R}$ tal que

$$\left(\frac{(\boldsymbol{\sigma}^k)_{zz} + (\mathbf{D}^k)_{zzzz}}{\lambda^k} \right) \delta\lambda = -(\boldsymbol{\sigma}^k)_{zz} \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}^+. \quad (1.37)$$

Notar la dependencia de $(\boldsymbol{\sigma})_{zz}$ y \mathbf{D}_{zzzz} con $\mathbf{F}^u(\lambda)$ por intermedio de relaciones constitutivas y por lo tanto los primeros mencionados con el estiramiento λ . El proceso iterativo continua con la actualización $\lambda^{k+1} = \lambda^k + \delta\lambda$ hasta la convergencia, es decir, $\delta\lambda \rightarrow 0$.

1.2. Mecánica de fluidos incompresibles

En esta sección introducimos el problema variacional para fluidos incompresibles. Desde el punto de vista cinemático, se utilizan algunos elementos de manera análoga a los utilizados en la mecánica de sólidos (ver Sección 1.1), por ejemplo, la existencia de una función mapeo. Una particularidad es la incorporación de la condición de incompresibilidad del medio como una restricción cinemática distribuida en el volumen, hipótesis válida en una gran mayoría de aplicaciones.

1.2.1. Cinemática

La introducción a la cinemática para un medio continuo cuyo comportamiento constitutivo es la de un fluido será la misma—en principio— a la ya introducida en la Sección 1.1.3 para un medio continuo de comportamiento sólido. En ese sentido, consideremos un conjunto de partículas que componen el medio continuo dentro del espacio Euclidiano \mathcal{E} . El movimiento de estas partículas en un intervalo de tiempo los describimos por la siguiente aplicación

$$\begin{aligned} \varphi : \Omega_0 &\rightarrow \Omega_t, \\ \mathbf{x}_0 &\mapsto \mathbf{x}_t = (\mathbf{x}_0, t). \end{aligned} \quad (1.38)$$

De esta manera, \mathbf{x}_0 representa la posición de una partícula en un dado instante de referencia t_0 y \mathbf{x}_t representa, a través de la aplicación φ definida por la expresión (1.38), la posición de la misma partícula \mathbf{x}_0 en el instante t_0 .

Como ya fue visto en la Sección 1.1, el campo de velocidades material $\dot{\mathbf{x}} = \dot{\mathbf{x}}(\mathbf{x}_0, t)$ y

el espacial $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x}_t, t)$ quedan definidos según

$$\dot{\mathbf{x}}(\mathbf{x}_0, t) = \left. \frac{\partial \varphi(\mathbf{x}_0, t)}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}_0}, \quad (1.39)$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}_t, t) = \frac{\partial \varphi(\mathbf{x}_0, t)}{\partial t} \circ \varphi^{-1}(\mathbf{x}_t, t), \quad (1.40)$$

siendo φ^{-1} la aplicación inversa, tal que $\mathbf{x}_t = \varphi(\mathbf{x}_0 = \varphi^{-1}(\mathbf{x}_t, t), t)$, la cual existe y es diferenciable, de acuerdo con los postulados (1.2).

Del mismo modo, la aceleración de la partículas es su descripción material y espacial resultan, respectivamente, según

$$\ddot{\mathbf{x}}(\mathbf{x}_0, t) = \left. \frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{x}_0, t)}{\partial t^2} \right|_{\mathbf{x}_0}, \quad (1.41)$$

$$\dot{\mathbf{v}}(\mathbf{x}_t, t) = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}(\mathbf{x}_t, t) + \nabla \mathbf{v}(\mathbf{x}_t, t) \mathbf{v}(\mathbf{x}_t, t). \quad (1.42)$$

Por otro lado, la tasa de deformación $\boldsymbol{\varepsilon}$ de una partícula queda caracterizada por el tensor

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}) = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) = (\nabla \mathbf{v})^S, \quad (1.43)$$

siendo $(\cdot)^S$ la componente simétrica del tensor *velocidad de deformación*. Su contraparte, la componente anti-simétrica $(\cdot)^A \stackrel{def}{=} \frac{1}{2} ((\cdot) - (\cdot)^T)$ está asociada a movimientos rígidos. Además, para movimiento restringidos por la condición de incompresibilidad considerados en esta sección, se verifica

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0. \quad (1.44)$$

Esto último es simple de demostrar considerando una porción arbitraria de dominio y como la misma se mapea de la configuración material a la espacial a través del mapeo *Lagrangeano* φ . Para ello, consideremos una porción arbitraria \mathcal{P}_0 de Ω_0 , como se indica en la Figura 1.5. El movimiento de esta porción queda caracterizado por la aplicación

$$\mathcal{P}_t = \varphi(\mathcal{P}_0, t). \quad (1.45)$$

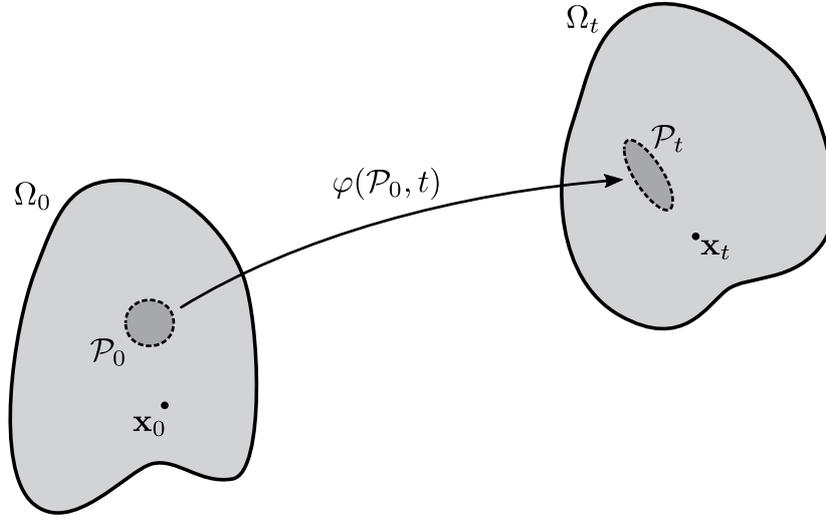


Figura 1.5: Deformación de una porción arbitraria de dominio $\mathcal{P} \subset \Omega$ a través del mapeo Lagrangeano φ .

Además, el volumen ocupado por esta región está dado por

$$\text{vol}(\mathcal{P}_t) = \int_{\mathcal{P}_t} dV. \quad (1.46)$$

Recordando que $\det \mathbf{F} = \det \nabla \varphi$, este cálculo puede ser expresado en la configuración referencia

$$\text{vol}(\mathcal{P}_t) = \int_{\mathcal{P}_0} \det \mathbf{F} dV. \quad (1.47)$$

Por definición, un movimiento se dice que es incompresible si para cada porción arbitraria \mathcal{P}_t de Ω_t a todo tiempo t , el volumen permanece invariante, es decir

$$\frac{d}{dt} (\text{vol}(\mathcal{P}_t)) = 0. \quad (1.48)$$

De este modo, utilizando la expresión (1.47) se puede escribir

$$\frac{d}{dt} (\text{vol}(\mathcal{P}_t)) = \frac{d}{dt} \left(\int_{\mathcal{P}_0} \det \mathbf{F} dV \right) = \int_{\mathcal{P}_0} \frac{d}{dt} (\det \mathbf{F}) dV. \quad (1.49)$$

Luego, considerando la derivada del determinante del tensor gradiente de deformaciones

(ver Apéndice C, expresión (C.3)), se obtiene

$$\frac{d}{dt} (\text{vol}(\mathcal{P}_t)) = \int_{\mathcal{P}_0} \text{div } \mathbf{v} \det \mathbf{F} \, dV = \int_{\mathcal{P}_t} \text{div } \mathbf{v} \, dV. \quad (1.50)$$

Notar el abuso de notación en la divergencia del campo de velocidad \mathbf{v} , la cual está expresada en términos de $\mathbf{x}_0 \in \Omega_0$ cuando la integral se realiza en la porción de referencia \mathcal{P}_0 y luego según $\mathbf{x}_t \in \Omega_t$ para la integral en la porción \mathcal{P}_t . Luego, la expresión resultante en (1.50) debe cumplirse para cualquier porción arbitraria \mathcal{P}_t , por lo tanto, localmente se obtiene la expresión (1.44).

Consideremos ahora el espacio \mathcal{V} de todas los campos de velocidades que pueden caracterizar el movimiento de partículas en un medio fluido. Dado que estamos considerando fluidos incompresibles y también consideraremos restricciones cinemáticas adicionales sobre determinada porción de la superficie del dominio Ω_0 , que denominaremos $\Gamma_{D,0} \subset \Gamma_0$, se tiene el siguiente *espacio de soluciones cinemáticamente admisibles*

$$\text{Kin}_{\mathbf{v}} = \{ \mathbf{v} \in \mathcal{V} \mid \mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} \text{ en } \Gamma_{D,0}, \text{div } \mathbf{v} = 0 \text{ en } \Omega_0 \}. \quad (1.51)$$

Es importante notar que dado $\mathbf{v}(\mathbf{x}_t, t)$, utilizamos una descripción *Euleriana* para describir el movimiento de las partículas. De esta manera, todos los campos están definidos en el dominio Ω_0 , el cual es arbitrariamente elegido según las necesidades del problema en estudio. Este dominio podría ser, por ejemplo, el dominio ocupado por las partículas \mathbf{x}_0 al tiempo $t = t_0$. En lo que sigue de esta sección asumiremos que el dominio Ω_0 es invariante en el tiempo¹. Por último, hacemos notar que se ha considerado la velocidad de las partículas sobre una porción $\Gamma_{D,0} \subset \Gamma_0$ según el campo $\bar{\mathbf{v}}$. La Figura 1.6 muestra el dominio y su frontera correspondiente de análisis.

Note que, $\text{Kin}_{\mathbf{v}}$ definido en (1.51) es un espacio afín y por lo tanto es una traslación de un espacio lineal. Este espacio lineal es definido según

$$\text{Var}_{\mathbf{v}} = \{ \hat{\mathbf{v}} \in \mathcal{V} \mid \hat{\mathbf{v}} = \mathbf{0} \text{ en } \Gamma_{D,0}, \text{div } \hat{\mathbf{v}} = 0 \text{ en } \Omega_0 \}, \quad (1.52)$$

¹En problemas donde la dinámica del flujo de interés está enmarcada en el seno de dominios deformables, esta hipótesis se elimina y la definición del dominio pasa a ser dependiente del tiempo. Más aún, la definición del dominio puede depender de la misma solución del problema, en analogía al problema de mecánica del sólido en grandes deformaciones y desplazamientos. Típicamente, esta situación la encontramos en problemas FSI en donde la estructura describe grandes desplazamientos dentro del flujo.

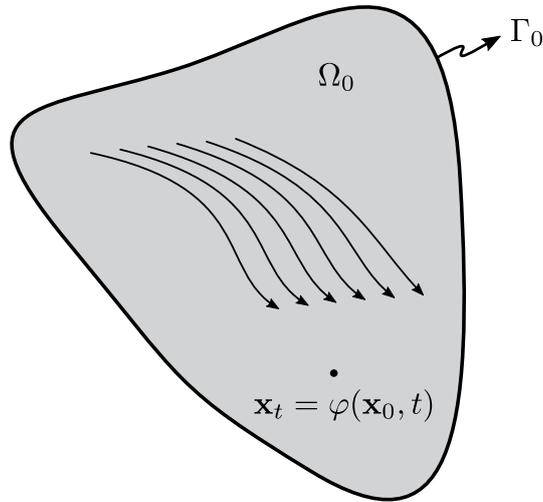


Figura 1.6: Cinemática para el problema de fluidos incompresibles a través de una descripción *Euleriana* (fija). El dominio Ω_0 es constante así como su frontera Γ_0 . La frontera Γ_0 puede representarse como la unión de dos fronteras disjuntas $\Gamma_{D,0}$ y $\Gamma_{N,0}$, denominadas fronteras de Dirichlet y Neumann, respectivamente.

y por lo tanto

$$\text{Kin}_{\mathbf{v}} = \mathbf{v}_0 + \text{Var}_{\mathbf{v}}, \quad (1.53)$$

con $\mathbf{v}_0 \in \text{Kin}_{\mathbf{v}}$ arbitrario.

1.2.2. Ecuaciones de equilibrio

En la sección anterior introducimos los elementos básicos para describir la cinemática del problema de fluidos incompresibles. A continuación, enunciamos la formulación variacional correspondiente al problema de equilibrio mecánico, partiendo del Principio de Potencia Virtual (PPV). El procedimiento es análogo al aplicado para el caso de la mecánica de sólidos (ver Sección 1.1.3). De hecho, es el mismo principio con la salvedad de las siguientes diferencias: (i) la cinemática de partículas sólidas se describe en forma *Lagrangeana* mientras que la cinemática de partículas de fluido se describe en forma *Euleriana*, lo cual implica considerar una forma funcional distinta para el cálculo de la aceleración de las partículas; (ii) el comportamiento constitutivo es de distinta naturaleza, como consecuencia de la forma en que se constituye cada medio, es decir, en un medio sólido se relaciona a las tensiones con la deformación mientras que para un medio fluido simple (Newtoniano) las tensiones se relacionan con la velocidad de deformación; (iii)

la restricción sobre la incompresibilidad del fluido². Para simplificar la presentación, tomaremos el problema variacional asociado al PPV con las hipótesis mencionadas de Taroco *et al.* [73].

Consideremos ahora, teniendo en cuenta los comentarios arriba mencionados, el siguiente problema variacional: encontrar $\mathbf{v} \in \text{Kin}_{\mathbf{v}}$ tal que

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_0} \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega + \int_{\Omega_0} \rho \nabla \mathbf{v} \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega + \int_{\Omega_0} \boldsymbol{\sigma}^D(\mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{v}}) \, d\Omega \\ & = \int_{\Omega_0} \rho \mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega + \int_{\Gamma_{N,0}} \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Gamma \quad \forall \hat{\mathbf{v}} \in \text{Var}_{\mathbf{v}}, \end{aligned} \quad (1.54)$$

siendo $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{v}) = 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v})$ la componente desviadora del tensor de tensiones de Cauchy para un fluido Newtoniano $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{v}, p) = -p \mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v})$, \mathbf{f} una fuerza por unidad de volumen y \mathbf{t} representando una fuerza por unidad de área definida sobre la frontera $\Gamma_{N,0} \subset \Gamma_0$.

Normalmente, a la hora de la implementación numérica de estas ecuaciones, no es sencillo buscar soluciones en espacios de divergencia nula, condición exigida por la restricción cinemática de incompresibilidad. En ese sentido, como la presión tiene el sentido físico de ser la reacción de vínculo a esta restricción cinemática (la incompresibilidad), es usual liberar esta restricción de los espacios $\text{Kin}_{\mathbf{v}}$ y $\text{Var}_{\mathbf{v}}$ e imponerla a través de multiplicadores de Lagrange. De esta manera, surgen los siguientes espacios

$$\text{Kin}_{\mathbf{v}}^* = \{\mathbf{v} \in \mathcal{V} \mid \mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} \text{ en } \Gamma_{D,0}\}, \quad (1.55)$$

$$\text{Var}_{\mathbf{v}}^* = \{\hat{\mathbf{v}} \in \mathcal{V} \mid \hat{\mathbf{v}} = \mathbf{0} \text{ en } \Gamma_{D,0}\}. \quad (1.56)$$

Luego, se debe agregar los siguientes términos que contribuyen con la potencia producida en dualidad por el multiplicador de Lagrange (la presión p) y la restricción que se desea imponer

$$- \int_{\Omega_0} (p \operatorname{div} \hat{\mathbf{v}} + \hat{p} \operatorname{div} \mathbf{v}) \, d\Omega, \quad (1.57)$$

siendo p y \hat{p} funciones pertenecientes a un espacio \mathcal{Q} suficientemente regular. Este espacio es $\mathcal{Q} = H^0(\Omega_0) = L^2(\Omega_0)$. Como consecuencia, se obtiene el siguiente problema

²Una analogía aún más próxima se encuentra en el caso de sólidos incompresibles, donde se expresa la restricción de incompresibilidad en forma material, por intermedio del tensor gradiente de deformación.

variacional: encontrar $(\mathbf{v}, p) \in \text{Kin}_{\mathbf{v}}^* \times \mathcal{Q}$ tal que

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_0} \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega + \int_{\Omega_0} \rho \nabla \mathbf{v} \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega + \int_{\Omega_0} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{v}, p) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{v}}) \, d\Omega \\ & - \int_{\Omega_0} \hat{p} \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\Omega = \int_{\Omega_0} \rho \mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega + \int_{\Gamma_{N,0}} \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Gamma = 0 \\ & \forall (\hat{\mathbf{v}}, \hat{p}) \in \text{Var}_{\mathbf{v}}^* \times \mathcal{Q}. \end{aligned} \quad (1.58)$$

1.2.3. Forma fuerte de las ecuaciones de equilibrio

La forma *fuerte* de las ecuaciones de Navier-Stokes para fluidos incompresibles puede obtenerse partiendo del problema variacional (1.58). Para ello, esta expresión puede ser reescrita por integración por partes del término correspondiente con el tensor de Cauchy $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{v}, p)$, considerando su simetría y aplicando condiciones de frontera definidas por el espacio $\text{Var}_{\mathbf{v}}^*$, resulta la siguiente forma

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_0} \left(\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho \nabla \mathbf{v} \mathbf{v} + \nabla p - \operatorname{div}(2\mu \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v})) - \rho \mathbf{f} \right) \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega \\ & + \int_{\Gamma_{N,0}} (-p \mathbf{n} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}) - \mathbf{t}) \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega \\ & + \int_{\Omega_0} \operatorname{div} \mathbf{v} \hat{p} \, d\Omega = 0 \quad \forall (\hat{\mathbf{v}}, \hat{p}) \in \text{Var}_{\mathbf{v}}^* \times \mathcal{Q}. \end{aligned} \quad (1.59)$$

Dada la arbitrariedad de las funciones $\hat{\mathbf{v}}$ y \hat{p} , localmente se cumple

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho \nabla \mathbf{v} \mathbf{v} - \operatorname{div}(2\mu \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v})) + \nabla p &= \rho \mathbf{f} & \text{en } \Omega_0, \\ \operatorname{div} \mathbf{v} &= 0 & \text{en } \Omega_0, \\ -p \mathbf{n} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}) \mathbf{n} &= \mathbf{t} & \text{en } \Gamma_{N,0}, \\ \mathbf{v} &= \bar{\mathbf{v}} & \text{en } \Gamma_{D,0}. \end{aligned} \quad (1.60)$$

Es posible obtener una forma más tradicional de las ecuaciones de Navier-Stokes. Para ello, consideremos la primera de las ecuaciones (1.60), asumiendo la viscosidad μ del fluido constante y la condición de divergencia nula de la velocidad, la misma puede ser expresada según

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho \nabla \mathbf{v} \mathbf{v} - \mu \nabla^2 \mathbf{v} + \nabla p = \rho \mathbf{f}. \quad (1.61)$$

1.2.4. Adimensionalización de las ecuaciones de Navier-Stokes

Presentamos en esta sección el proceso de adimensionalización de las ecuaciones de Navier-Stokes. La adimensionalización de ecuaciones—sea cual fuese el tipo—facilita el análisis del problema en cuestión, reduciendo el número de parámetros libres. Además, por intermedio de números adimensionales es posible indicar la importancia de determinados términos en forma relativa, típicamente, en ecuaciones de balance, dando lugar a un análisis sistemático para desprestigiar términos bajo determinadas condiciones. A continuación, se muestran la naturaleza de cada uno de los términos de la forma *fuerte* de las ecuaciones de Navier-Stokes (1.61), en analogía con ecuaciones de cantidad de movimiento a nivel diferencial, $\mathbf{F} = m\dot{\mathbf{v}}$, es decir, el conocido *Principio de Newton*, siendo \mathbf{F} la resultante de fuerzas externas, m la masa y $\dot{\mathbf{v}}$ la velocidad de una partícula material. Consideremos la ecuación (1.61), aquí podemos identificar la naturaleza de cada uno de sus términos

$$\underbrace{\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}}_{\substack{\text{inercia} \\ \text{(temporal)}}} + \underbrace{\rho \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}}_{\substack{\text{inercia} \\ \text{(espacial)}}} = - \underbrace{\nabla p}_{\text{presión}} + \underbrace{\mu \nabla^2 \mathbf{v}}_{\substack{\text{esfuerzos} \\ \text{viscosos}}} + \underbrace{\rho \mathbf{f}}_{\text{volumen}}$$

La velocidad se adimensionalizará tomando una velocidad de referencia del flujo, que podrá ser la media o la máxima para un caso particular. La idea es capturar el orden de magnitud, de tal modo que la variable adimensional $(\cdot)^*$ resulte de orden $\mathcal{O}(1)$, esto es, de orden unitario.

$$\mathbf{v} \approx V \rightarrow \mathbf{v}^* = \frac{\mathbf{v}}{V} \approx \mathcal{O}(1). \quad (1.62)$$

En adelante, se asume que los deltas (variaciones) de las variables, con los que se aproximan las derivadas, tienen el mismo orden de magnitud que las variables en cuestión. Según la naturaleza del caso esta hipótesis podrá ser o no válida.

Para la derivada temporal de la velocidad, se toma un tiempo característico que capte la variación de velocidad. Por ejemplo, en el flujo de aire sobre un perfil alar será el tiempo que una partícula tarda en atravesar el perfil, es decir el “tiempo de residencia”. Otro ejemplo podría ser el caso de flujo sanguíneo dentro de una arteria, aquí el tiempo característico será el “*time to peak*” (aproximadamente un tercio del período cardíaco). De

este modo, la adimensionalización resulta

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \approx \frac{\Delta V}{\Delta T} = \frac{V - 0}{T - 0} \rightarrow \frac{\partial \mathbf{v}^*}{\partial t^*} = \frac{\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}}{\frac{V}{T}} \approx \mathcal{O}(1). \quad (1.63)$$

Para captar el orden del gradiente de velocidad, se deberá elegir un ΔX sobre el cual se dé la variación de velocidad. Por ejemplo, en el caso de flujo en tuberías comúnmente se usa el radio o diámetro (evidentemente ambos del mismo orden), ya que el perfil de velocidades varía de cero a un máximo en el radio del caño.

$$\nabla \mathbf{v} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} \approx \frac{\Delta V}{\Delta X} = \frac{V}{D} \rightarrow \frac{\partial \mathbf{v}^*}{\partial \mathbf{x}^*} = \frac{\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}}}{\frac{V}{D}} \approx \mathcal{O}(1). \quad (1.64)$$

En forma análoga es posible determinar el orden de $\nabla^2 \mathbf{v}$. Aquí, supondremos que los cambios del gradiente de velocidad se dan en la misma dirección espacial, hipótesis que podría no ser válida en todos los casos

$$\nabla^2 \mathbf{v} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} \right) \approx \frac{\frac{\Delta V}{\Delta X} - 0}{\Delta X} = \frac{V}{D^2} \rightarrow \frac{\partial^2 \mathbf{v}^*}{\partial \mathbf{x}^* \partial \mathbf{x}^*} = \frac{\frac{\partial^2 \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}}}{\frac{V}{D^2}} \approx \mathcal{O}(1). \quad (1.65)$$

La presión, al igual que la velocidad, se adimensionaliza con un valor de referencia adecuado, que dependerá del caso que se quiera analizar. Por ejemplo, cuando los efectos dinámicos son importantes (flujos de alta velocidad) suele utilizarse $p_{ref} = \rho V^2$. En cambio, para el caso de flujos con efectos viscosos dominantes es posible utilizar $p_{ref} = \mu \frac{V}{L}$, siendo L una longitud de característica del desarrollo de capas límite.

$$p \approx p_{ref} \rightarrow p^* = \frac{p}{p_{ref}} \approx \mathcal{O}(1). \quad (1.66)$$

El proceso para adimensionalizar los gradientes de presión, es el mismo que se utilizó para los gradientes de velocidad. Es importante notar que, los ΔX donde se da la variación de presión no necesariamente deberán ser los mismos que los usados para captar el orden de los gradientes de velocidad. Generalmente, para flujos externos las variaciones de presión y velocidad se darán en el mismo ΔX . Pero existen casos donde estas variaciones se dan en distintas longitudes y direcciones, como lo es en lubricación o flujo en tuberías.

$$\nabla p = \frac{\partial p}{\partial \mathbf{x}} \approx \frac{\Delta p}{\Delta X} = \frac{p_{ref}}{L} \rightarrow \frac{\partial p^*}{\partial \mathbf{x}^*} = \frac{\frac{\partial p}{\partial \mathbf{x}}}{\frac{p_{ref}}{L}} \approx \mathcal{O}(1). \quad (1.67)$$

Por último, la adimensionalización de las fuerzas distribuidas en el volumen resultan

$$\mathbf{f} \approx g \rightarrow \mathbf{f}^* = \frac{\mathbf{f}}{g} \approx \mathcal{O}(1) \quad (1.68)$$

Reemplazando en la ecuación de Navier-Stokes (1.61) las expresiones de orden de unitario $\mathcal{O}(1)$ (ecuaciones (1.62) a (1.68)) se obtienen las ecuaciones de Navier-Stokes adimensionalizadas

$$[\text{St}] \frac{\partial \mathbf{v}^*}{\partial t^*} + \frac{\partial \mathbf{v}^*}{\partial \mathbf{x}^*} \mathbf{v}^* = -[\text{Eu}] \frac{D}{L} \frac{\partial p^*}{\partial \mathbf{x}^*} + \left[\frac{1}{\text{Re}} \right] \frac{\partial^2 \mathbf{v}^*}{\partial \mathbf{x}^* \partial \mathbf{x}^*} + \left[\frac{1}{\text{Fr}^2} \right] \mathbf{f}^*, \quad (1.69)$$

indicando con $[\cdot]$ los siguientes números adimensionales

$$\text{St} = \frac{D}{T V}, \quad (1.70)$$

$$\text{Eu} = \frac{p_{ref}}{\rho V^2}, \quad (1.71)$$

$$\text{Re} = \frac{\rho V D}{\mu}, \quad (1.72)$$

$$\text{Fr}^2 = \frac{V^2}{g D}. \quad (1.73)$$

Es importante dejar en claro que, en la medida que capturemos con mayor precisión los órdenes de magnitud de las variables involucradas y sus gradientes, estos números estarán representando correctamente las proporciones entre distintos tipos de fuerzas. Por lo tanto, para el análisis y simplificación de la ecuación de Navier-Stokes (o cualquier otra) es necesario garantizar una correcta proporción de esfuerzos.

A continuación describimos brevemente los números adimensionales que surgieron en las ecuaciones de Navier-Stokes derivadas (1.69).

- *Número de Strouhal*: mide las fuerzas de inercia debidas a la naturaleza transitoria del flujo o perturbaciones externas respecto a las fuerzas de inercia que se dan por el cambio de la velocidad en el dominio espacial. Una hipótesis a la hora de obtener este número fue que los cambios de velocidad con los que se aproximaron los gradiente temporales y espaciales son los mismos, lo cual según el problema podrá ser o no correcto. Una observación interesante de este número que ayuda a reflejar la hipótesis recién discutida, sería

$$\text{St} = \frac{\text{Fuerza inercia (cambio temporal)}}{\text{Fuerza inercia (cambio espacial)}} = \frac{(\Delta V)^{temp} D}{(\Delta V)^{esp} T V} \quad (1.74)$$

- *Número de Euler*: en la literatura este número es obtenido bajo el supuesto de que los gradientes de velocidad y presión se dan en la misma variación espacial, si no fuera el caso, este número no representaría correctamente la proporción entre las fuerzas debidas al cambio de presión entre dos puntos espaciales y las fuerzas de inercia convectivas. Aquí se optó por dejar en evidencia las consecuencias de relajar dicha hipótesis. Por lo tanto, al igual que en el caso anterior, una versión general sería

$$\begin{aligned} \text{Eu} &= \frac{\text{Fuerza presión}}{\text{Fuerza inercia (cambio espacial)}} = \frac{(\Delta X)^{vel} p_{ref}}{(\Delta X)^{pres} \rho V^2} \\ &= \frac{D p_{ref}}{L \rho V^2} \end{aligned} \quad (1.75)$$

- *Número de Reynolds*: mide las fuerzas de inercia debidas a los gradientes espaciales de velocidad respecto a las fuerzas viscosas provocadas por el cambio de dicho gradiente. Además este número es usado para predecir el carácter laminar o turbulento del flujo.

$$\text{Re} = \frac{\text{Fuerza inercia (cambio espacial)}}{\text{Fuerza viscosa}} = \frac{\rho V D}{\mu} \quad (1.76)$$

- *Número de Froude*: relaciona el efecto de las fuerzas de inercia y las fuerzas de gravedad, la proporción real entre estas esta dada por el cuadrado del número de Froud (Fr^2). Este número adquiere relevancia en problemas de flujos en vertederos, flujos de canales, ríos y en el diseño del buques, donde la fuerza de gravedad es significativa.

$$\text{Fr}^2 = \frac{\text{Fuerza inercia (cambio espacial)}}{\text{Fuerza gravedad}} = \frac{V^2}{gD} \quad (1.77)$$

1.2.5. Tratamiento del término convectivo

El término convectivo correspondiente a las ecuaciones de Navier-Stokes (1.60) puede escribirse en la forma compacta $\mathcal{C}(\mathbf{v}, \mathbf{v}) = \nabla \mathbf{v} \mathbf{v}$. Al considerar la condición de incompresibilidad del campo de velocidades \mathbf{v} surgen distintas opciones equivalentes a nivel

continuo, estas son

$$\mathcal{C}(\mathbf{v}, \mathbf{c}) = \begin{cases} \nabla \mathbf{v} \mathbf{c} & \text{forma convectiva} & (1.78) \\ \operatorname{div}(\mathbf{v} \otimes \mathbf{c}) & \text{forma de la divergencia} & (1.79) \\ \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v} \mathbf{c} + \operatorname{div}(\mathbf{v} \otimes \mathbf{c})) & \text{forma antisimétrica} & (1.80) \end{cases}$$

Siendo \mathbf{c} la velocidad de convección del campo de velocidades \mathbf{v} . Este término se corresponde con la fuente de no linealidad de las ecuaciones de Navier-Stokes en dominios fijos (estacionarios), haciendo $\mathbf{c} = \mathbf{v}$. Sin embargo, nos tomamos la libertad aquí de expresarlo como un campo general, el cual puede ser escrito como $\mathbf{c} = \mathbf{c}(\mathbf{v})$, siendo conveniente para el tratamiento de estas ecuaciones en dominios deformables, como se verá más adelante.

Consideremos el término convectivo de cualquier campo vectorial escrito en la forma *convectiva* (ecuación (1.78)). Es simple mostrar que este término representa transporte de energía cinética en el problema de fluidos, por ejemplo, haciendo $\mathbf{c} = \mathbf{v}$ para la función \mathcal{C} , esto es, $\mathcal{C}(\mathbf{v}, \mathbf{c} = \mathbf{v}) = \nabla \mathbf{v} \mathbf{v}$, cuyo producto interno asociado es

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_0} \mathcal{C}(\mathbf{v}, \mathbf{v}) \cdot \mathbf{v} \, d\Omega &= \int_{\Omega_0} \nabla \mathbf{v} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega \\ &= \int_{\Omega_0} \frac{\partial v_i}{\partial x_i} v_i v_i \, d\Omega \\ &= \int_{\Omega_0} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{2} v_i v_i \right) v_i \, d\Omega \\ &= \int_{\Omega_0} \nabla K(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{v} \, d\Omega, \end{aligned} \quad (1.81)$$

donde hemos utilizado la notación indicial $\mathbf{v} = v_i \hat{\mathbf{e}}_i$ con suma en el índice $i = 1, 2, 3$, la energía cinética por unidad de masa $K(\mathbf{v}) = \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}$. El resultado en (1.81) muestra que la contribución de la integral correspondiente a la convección de la cantidad de movimiento no implica acumulación de energía cinética.

Por otro lado, la forma *antisimétrica* del término convectivo (ecuación (1.80)) es una combinación de la forma *convectiva* y de la *divergencia*, ecuaciones (1.78) y (1.79), respectivamente. Se puede mostrar que esta forma asegura que la integral del término convectivo conserve la energía cinética para cualquier campo de velocidad (suficientemente regular) y no sólo aquellos de divergencia nula. Este es un resultado importante, fundamentalmente para el uso de métodos de pasos fraccionarios en la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes [16, 17, 74, 75], donde no siempre se cumple la condición de divergencia nula, al menos en el cálculo de velocidades intermedias. De este modo, la forma *antisimétrica*

asegura que este error en la divergencia no se propague en términos de energía cinética.

Para un análisis en profundidad del sistema de ecuaciones semidiscreto que surgen de las ecuaciones de Navier-Stokes se recomienda la lectura de las referencias [31–34]. Para analizar la estabilidad y obtener una estimación de la energía, estos autores utilizan la forma *antisimétrica*—ampliamente utilizada por *solvers* contemporáneos—del término convectivo [75]. Se puede verificar que la forma *antisimétrica* (1.80) es equivalente al siguiente reemplazo de la forma *convectiva* (1.78)

$$\nabla \mathbf{v} \mathbf{v} \rightarrow \nabla \mathbf{v} \mathbf{v} + \frac{1}{2} \operatorname{div} \mathbf{v} \mathbf{v}. \quad (1.82)$$

Notar que este cambio es válido para campos con divergencia nula. Más aún, este esquema de discretización garantiza la estabilidad incondicional de los esquemas semi-implícitos en la integración temporal de las ecuaciones de Navier-Stokes, además de la conveniente linealización del término convectivo. Para más detalles, se recomienda la lectura de la referencia [20].

1.2.6. Discretización del problema

Se presenta un esquema de discretización mediante el Método de Elementos Finitos (FEM) para las ecuaciones de Navier-Stokes. Además, estas ecuaciones son estabilizadas con las técnicas *streamline upwind/Petrov-Galerkin* (SUPG) [9, 40] y *pressure stabilizing/Petrov-Galerkin* (PSPG) [81, 88]. De esta manera, es posible utilizar interpolaciones de igual orden para los campos de velocidad y presión, evitando oscilaciones espurias producto de problemas con convección dominante y/o propias de la falta de cumplimiento de la condición “inf-sup”, conocida como LBB por Ladyzhenskaya [48], Babuška [1] y Brezzi [8].

La discretización detallada a continuación se realiza tomando como punto de partida el problema variacional (1.58), siendo el procedimiento para otras formulaciones análogo. La estabilización se presenta en el contexto de flujos incompresibles. Algunas de estas ideas pueden extenderse hacia la estabilización de sólidos en grandes deformaciones, en particular, aquellos de comportamiento incompresible.

A continuación detallamos los espacios de soluciones cinemáticamente admisibles junto a su asociado de variaciones admisibles (ver ecuaciones (1.55) y (1.56), respectivamente)

para un espacio de dimensión finita

$$\mathbf{Kin}_v^h = \{\mathbf{v}^h \in \mathbf{H}^{1h}(\Omega_0), \mathbf{v}^h = \bar{\mathbf{v}} \text{ en } \Gamma_{D,0}\}, \quad (1.83)$$

$$\mathbf{Var}_v^h = \{\hat{\mathbf{v}}^h \in \mathbf{H}^{1h}(\Omega_0), \hat{\mathbf{v}}^h = \mathbf{0} \text{ en } \Gamma_{D,0}\}, \quad (1.84)$$

siendo $\mathbf{H}^{1h} \stackrel{def}{=} (H^{1h})^{n_{sd}}$ el espacio de dimensión finita de funciones vectoriales de dimensión n_{sd} y H^{1h} el espacio finito

$$H^{1h} = \{\psi^h | \psi^h \in C^0(\Omega_0), \psi^h|_{\Omega_0^e} \in \mathcal{P}^1, \forall \Omega_0^e \in \mathcal{T}^h(\Omega_0)\}, \quad (1.85)$$

siendo C^0 el espacio de funciones cuyas derivadas de orden 0 (es decir, la función en sí misma) son continuas entre las interfases de los elementos, \mathcal{P}^1 el espacio de polinomios de primer orden (es decir, aquellos de interpolación lineal) y $\mathcal{T}^h(\Omega_0)$ la triangulación de N_{el} elementos finitos que componen el dominio Ω_0 , tal que $\Omega_0^e \neq \emptyset, \forall e = 1, \dots, N_{el}$. Finalmente, agregamos el espacio de funciones de dimensión finita \mathcal{Q}^h para la presión. Al considerar una formulación estabilizada para interpolar con funciones de igual orden los campos de velocidad \mathbf{v} y presión p , el espacio \mathcal{Q}^h resulta

$$\mathcal{Q}^h = \{(p^h, \hat{p}^h) \in H^{1h}\}. \quad (1.86)$$

Las ecuaciones de Navier-Stokes semi-discretas (en términos espaciales) estabilizadas quedan enunciadas de la siguiente manera: hallar $(\mathbf{v}^h, p^h) \in \mathbf{Kin}_v^h \times \mathcal{Q}^h$ tal que

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_0} \hat{\mathbf{v}}^h \cdot \rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}^h}{\partial t} + \mathcal{C}(\mathbf{v}^h, \mathbf{v}^h) - \mathbf{f}^h \right) d\Omega + \int_{\Omega_0} \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{v}}^h) \cdot \boldsymbol{\sigma}^h d\Omega \\ & + \sum_e \int_{\Omega_0^e} \tau_{SUPG} \nabla \mathbf{v}^h \hat{\mathbf{v}}^h \cdot \mathcal{R}(\mathbf{v}^h, p^h) d\Omega + \sum_e \int_{\Omega_0^e} \tau_{PSPG} \frac{1}{\rho} \nabla \hat{p}^h \cdot \mathcal{R}(\mathbf{v}^h, p^h) d\Omega \\ & + \int_{\Omega_0} \hat{p}^h \operatorname{div} \mathbf{v}^h d\Omega + \sum_e \int_{\Omega_0^e} \nu_{LSIC} \rho \operatorname{div} \hat{\mathbf{v}}^h \cdot \mathcal{R}(\mathbf{v}^h, p^h) d\Omega \\ & = \int_{\Gamma_{N,0}} \hat{\mathbf{v}}^h \cdot \mathbf{t} d\Gamma \quad \forall (\hat{\mathbf{v}}^h, \hat{p}^h) \in \mathbf{Var}_v^h \times \mathcal{Q}^h, \end{aligned} \quad (1.87)$$

siendo

$$\mathcal{R}(\mathbf{v}^h, p^h) = \rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}^h}{\partial t} + \mathcal{C}(\mathbf{v}^h, \mathbf{v}^h) \right) - \mu \nabla^2 \mathbf{v}^h + \nabla p^h - \rho \mathbf{f}^h, \quad (1.88)$$

el residuo de la ecuación de cantidad de movimiento correspondiente a la forma *fuerte*

de las ecuaciones de equilibrio mecánico (1.61), expresando el término convectivo en términos general a través de la función \mathcal{C} . Vale la pena notar que, por las características del espacio Kin_v^h (1.83), el término viscoso $\nabla^2 \mathbf{v}^h$ es nulo dado que este espacio está formado por polinomios de primer orden, según la expresión (1.85).

Aquellos términos que involucran el parámetro τ_{SUPG} estabilizan la formulación de Galerkin en presencia de efectos convectivos dominantes. Es fácil probar que este mecanismo de estabilización agrega difusión a lo largo de las líneas de corrientes.

$$\tau_{SUPG} = \left(\frac{1}{\tau_{S1}} + \frac{1}{\tau_{S2}} + \frac{1}{\tau_{S3}} \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (1.89)$$

$$\tau_{S1} = \frac{h}{2\|\mathbf{v}\|}, \quad (1.90)$$

$$\tau_{S2} = \frac{\Delta t}{2}, \quad (1.91)$$

$$\tau_{S3} = \frac{h^2}{4\nu}, \quad (1.92)$$

siendo h una longitud característica del elemento en la dirección de la línea de corriente, usualmente calculada como

$$h = 2 \left(\sum_i^N \|\mathbf{s} \cdot \nabla \phi_i\| \right)^{-1}, \quad (1.93)$$

siendo $\nabla \phi_i$ el gradiente de la función de forma ϕ asociada al nodo i , N el número de nodos del elemento y \mathbf{s} el versor orientado según las líneas de corriente.

El término que involucra ν_{LSIC} también agrega difusión. Fue introducido como una estabilización tipo cuadrados mínimos sobre la restricción de incompresibilidad [84]. Proporciona estabilidad para flujos a altos números de Reynolds.

$$\nu_{LSIC} = \frac{\|\mathbf{v}\|h}{2} z(\text{Pe}), \quad (1.94)$$

siendo el número de Peclet

$$\text{Pe} = \frac{\|\mathbf{v}\|h}{2\nu}, \quad (1.95)$$

y la función de ponderación

$$z(\text{Pe}) = \begin{cases} \text{Pe}/3 & 0 \leq \text{Pe} \leq 3, \\ 1 & 3 \leq \text{Pe}. \end{cases} \quad (1.96)$$

Los términos asociados al coeficiente τ_{PSPG} permiten el uso de elementos de igual interpolación para los campos de velocidad y la presión.

$$\tau_{PSPG} = \left(\frac{1}{\tau_{P1}} + \frac{1}{\tau_{P2}} + \frac{1}{\tau_{P3}} \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (1.97)$$

$$\tau_{P1} = \frac{h^\#}{2\|\mathbf{v}\|}, \quad (1.98)$$

$$\tau_{P2} = \frac{\Delta t}{2}, \quad (1.99)$$

$$\tau_{P3} = \frac{(h^\#)^2}{4\nu}, \quad (1.100)$$

siendo $h^\#$ una longitud característica del elemento de carácter isótropo. Normalmente suele calcularse como el diámetro del círculo de igual área que el elemento en 2D, o de la esfera de igual volumen para problemas 3D.

Cabe destacar que todos los términos de estabilización están ponderados por el residuo, asegurándose de este modo la consistencia de la formulación. Distintas opciones para el cálculo de los parámetros de estabilización han sido desarrolladas en las últimas décadas. Por ejemplo, algunos autores [84] sugieren evaluar estos parámetros utilizando los vectores y matrices elementales que se generan automáticamente en el proceso de ensamblado de las ecuaciones, los cuales consideran de manera intrínseca las escalas de longitud de referencia, la convección de los campos y el número de Reynolds. Por otro lado, en las referencias [18, 64] se definen variantes del *tiempo característico* de estabilización τ_{PSPG} .

1.3. Mecánica de los Fluidos en dominios deformables

En esta sección describiremos las ecuaciones de gobierno para fluidos incompresibles, previamente detalladas en un marco *Euleriano*, para el caso de dominios deformables. Para ello, se utilizará una descripción *Arbitrariamente Lagrangeana-Euleriana* (ALE) [20, 41]. El análisis descripto aquí será utilizado en la Sección 1.4 para describir el problema de Interacción Fluido-Estructura (FSI) en grandes desplazamientos como parte de una

estrategia de *seguimiento de interfaces* [77] como parte de la resolución de flujos con interfaces móviles.

Además, como parte de la resolución de este problema en el contexto de grandes desplazamientos y deformaciones, surge la necesidad de desarrollar Métodos de Movimiento de Malla robustos y eficientes, siendo este el principal objetivo de esta tesis. Este problema será abordado en los siguientes capítulos.

1.3.1. Formulación Arbitrariamente Lagrangeana-Euleriana (ALE)

El marco de referencia Arbitrariamente Lagrangeano-Euleriano (ALE) que será utilizado para describir el problema de fluidos incompresibles en dominios deformables³, puede ser definido de un modo análogo a una descripción *Lagrangeana* (ver Sección 1.1), ampliamente utilizada en la Mecánica del Continuo. Consideremos la aplicación \mathcal{A} que mapea un punto $\boldsymbol{\chi} \in \Omega_R$ con un punto $\mathbf{x}_t \in \Omega_t$

$$\begin{aligned} \mathcal{A} : \Omega_R &\rightarrow \Omega_t, \\ \boldsymbol{\chi} &\mapsto \mathbf{x}_t = \mathcal{A}(\boldsymbol{\chi}, t). \end{aligned} \tag{1.101}$$

Esta aplicación puede ser caracterizada por un campo de desplazamientos $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\boldsymbol{\chi}, t)$ definido a partir de las posiciones de puntos $\boldsymbol{\chi} \in \Omega_R$ y puntos $\mathbf{x}_t \in \Omega_t$, como se indica en la Figura 1.7. Es importante notar que este desplazamiento no es el correspondiente a la partícula material en $\boldsymbol{\chi} \in \Omega_R$. A modo representativo, se indica con una línea punteada la trayectoria—mapeada por la aplicación *Lagrangeana* φ —correspondiente a una partícula material que pasa por el punto $\boldsymbol{\chi} \in \Omega_R$ al instante de tiempo $t = 0$ la cual, en general, no mapeará al punto $\mathbf{x}_t \in \Omega_t$.

A menudo será necesario cambiar entre diferentes marcos de referencia. En ese sentido, supongamos $f : \Omega_t \rightarrow \mathbb{R}$ una función definida en el marco *Euleriano* y $\hat{f} \stackrel{def}{=} f \circ \mathcal{A}$ la misma función descrita en el marco ALE, definida según

$$\hat{f}(\boldsymbol{\chi}, t) = f(\mathbf{x}_t = \mathcal{A}(\boldsymbol{\chi}, t), t). \tag{1.102}$$

El símbolo $\frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{\boldsymbol{\chi}}$ indicará derivada temporal en el marco referencial ALE, escrito en el

³Es importante mencionar que esta marco de referencia es absolutamente general y válido para describir cualquier tipo de problema físico en dominios móviles, no quedando restringido su uso únicamente al caso de fluidos.

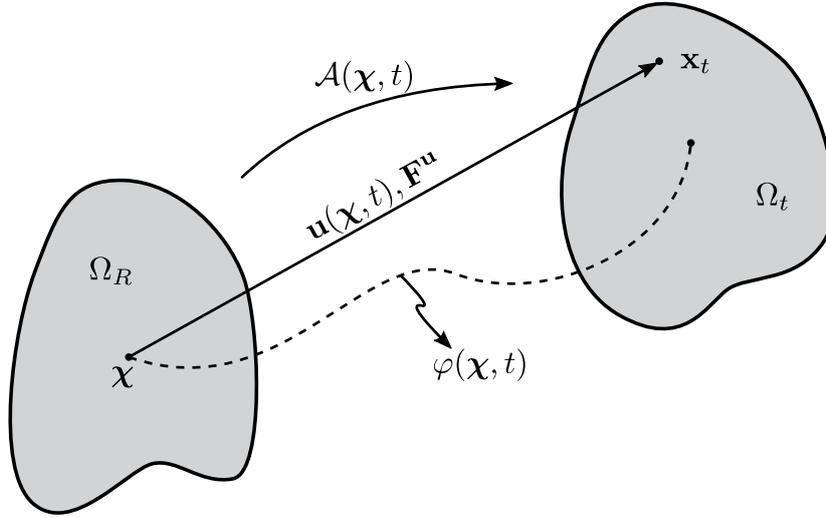


Figura 1.7: Representación del dominio deformable a través del mapeo \mathcal{A} . El punto χ pertenece al dominio de referencia Ω_R y se mapea al punto \mathbf{x}_t a través de la transformación \mathcal{A} . La línea punteada indica la trayectoria de una partícula material en $\chi \in \Omega_R$. La trayectoria de esta partícula queda determinada por la función de mapeo *Lagrangeana* φ .

marco *espacial* y se define

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}_t, t) = \frac{\partial \hat{f}}{\partial t}(\chi = \mathcal{A}^{-1}(\mathbf{x}_t, t), t). \quad (1.103)$$

Luego, definimos la *velocidad del marco referencial*⁴ del siguiente modo

$$\mathbf{v}_R(\mathbf{x}_t, t) = \left. \frac{\partial \mathcal{A}(\chi, t)}{\partial t} \right|_{\chi = \mathcal{A}^{-1}(\mathbf{x}_t, t)} \quad (1.104)$$

Para expresar ecuaciones de gobierno⁵ en un marco ALE, una relación entre derivadas temporales es necesaria. En particular, la derivada total (o *material*) la cual es inherente a leyes de conservación, puede ser convenientemente escrita como derivadas temporales en el marco ALE. Para ello, en primer lugar relacionamos las derivadas en el marco ALE con aquellas en el marco *espacial*. Esta operación puede llevarse a cabo por intermedio de la regla de cadena y utilizando la expresión (1.104) de la *velocidad del marco referencial*,

⁴También suele ser denominada como *velocidad del dominio* o incluso *velocidad de malla* dado que, a nivel discreto, representa la velocidad de los nodos de la malla.

⁵En esta tesis nos concentramos en la conservación de la cantidad de movimiento y de la masa. Sin embargo, estas leyes de conservación pueden generalizarse a cualquier campo arbitrario (suficientemente regular), por ejemplo, en problemas térmicos como una derivación de la ecuación de la conservación de la energía.

esto es

$$\begin{aligned}
\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}_t, t) &= \frac{\partial f}{\partial t}(\mathbf{x}_t = \mathcal{A}(\boldsymbol{\chi}, t), t) \\
&= \frac{\partial f}{\partial t}(\mathbf{x}_t, t) + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}_t}(\mathbf{x}_t, t) \cdot \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial t}(\boldsymbol{\chi}, t) \Big|_{\boldsymbol{\chi} = \mathcal{A}^{-1}(\mathbf{x}_t, t)} \\
&= \frac{\partial f}{\partial t} + \nabla f \cdot \mathbf{v}_R.
\end{aligned} \tag{1.105}$$

Luego, el operador derivada material en un marco ALE resulta

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}_0} = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\boldsymbol{\chi}} + \nabla f \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{v}_R), \tag{1.106}$$

el cual puede interpretarse del siguiente modo: la variación de una cantidad f para una dada partícula \mathbf{x}_0 es la variación local (es decir, con respecto a la referencia $\boldsymbol{\chi}$) más un término convectivo que considera el movimiento relativo entre el sistema *material* y *referencial*. En este último término se encuentra la arbitrariedad de la descripción ALE. Si la función de mapeo \mathcal{A} es tal que $\mathbf{v}_R = \mathbf{v}$, la descripción ALE se vuelve una descripción *Lagrangeana*. Por otro lado, si se cumple $\mathbf{v}_R = \mathbf{0}$, es decir, el dominio referencial se encuentra fijo y en ese caso se tratará de una descripción *Euleriana*.

1.3.2. Ecuaciones de equilibrio

Sean las configuraciones Ω_R y Ω_t una configuración de referencia del fluido y su configuración al instante de tiempo t , respectivamente, según se indica en la Figura 1.8. La configuración Ω_R es una configuración conocida de referencia y la configuración Ω_t se encuentra en equilibrio a un dado instante t para un determinado sistema de cargas externas formado por fuerzas distribuidas en el volumen \mathbf{f}_t y en la superficie \mathbf{t}_t . La frontera Γ_t puede diferenciarse en dos fronteras disjuntas $\Gamma_{D,t}$ (Dirichlet) y $\Gamma_{N,t}$ (Neumann), esto es, $\Gamma_{D,t} \cap \Gamma_{N,t} = \emptyset$. Una condición típica ocurre cuando $\bar{\mathbf{v}} \circ \mathcal{A}(\boldsymbol{\chi}, t) = \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial t}(\boldsymbol{\chi}, t)$ en la frontera $\Gamma_{D,0}$, esto es, cuando el fluido tiene la misma velocidad que la frontera móvil en $\Gamma_{D,t}$. Un caso típico de esta condición se encuentra en el problema FSI cuando sobre frontera $\Gamma_{D,t}$ se asume la condición de adherencia entre el fluido y la estructura.

Para obtener el problema variacional partimos del PPV considerando efectos inerciales.

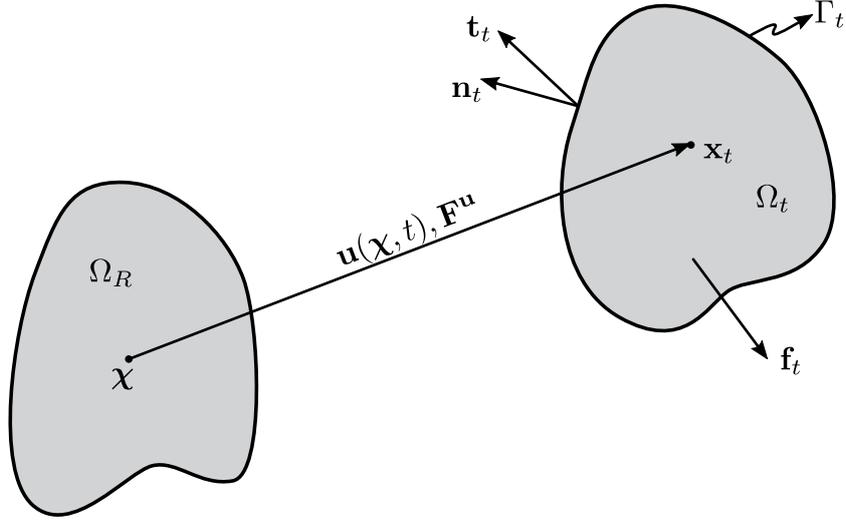


Figura 1.8: Configuraciones involucradas en el problema de equilibrio mecánico. La configuración Ω_R representa una configuración de referencia (conocida.) La configuración Ω_t representa una configuración en equilibrio al instante t . Ambas configuraciones se encuentran conectadas por el desplazamiento $\mathbf{u}(\boldsymbol{\chi}, t)$ y la deformación está caracterizada por el tensor \mathbf{F}^u . El sistema de cargas externo está formado por dos tipos de esfuerzos externos: cargas distribuidas en el volumen \mathbf{f} y en la superficie $\Gamma_{N,t} \subset \Gamma$ según el vector tracción \mathbf{t}_t .

A partir del PPV resulta el siguiente problema: hallar $\mathbf{v} \in \text{Kin}_{\mathbf{v}}$ tal que

$$\int_{\Omega_t} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{v}}) d\Omega = \int_{\Omega_t} (\mathbf{f} - \dot{\mathbf{v}}) \cdot \hat{\mathbf{v}} d\Omega + \int_{\Gamma_{N,t}} \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{v}} d\Gamma \quad \hat{\mathbf{v}} \in \text{Var}_{\mathbf{v}}, \quad (1.107)$$

siendo $\dot{\mathbf{v}}$ la derivada material de la velocidad, la cual puede ser descrita en un marco referencial ALE como un aplicación de la expresión (1.106) para el campo de velocidad \mathbf{v}

$$\dot{\mathbf{v}} = \left. \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}_0} = \left. \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \right|_{\boldsymbol{\chi}} + \nabla \mathbf{v} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{v}_R), \quad (1.108)$$

siendo \mathbf{v}_R la *velocidad del marco referencial* (ver ecuación (1.104)). Los espacios de soluciones cinemáticamente admisibles y su contraparte de variaciones admisibles son

$$\text{Kin}_{\mathbf{v}} = \{ \mathbf{v} \in \mathbf{H}^1(\Omega_t) \mid \mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} \text{ en } \Gamma_{D,t}, \text{div } \mathbf{v} = 0 \text{ en } \Omega_t \}, \quad (1.109)$$

$$\text{Var}_{\mathbf{v}} = \{ \hat{\mathbf{v}} \in \mathbf{H}^1(\Omega_t) \mid \hat{\mathbf{v}} = \mathbf{0} \text{ en } \Gamma_{D,t}, \text{div } \hat{\mathbf{v}} = 0 \text{ en } \Omega_t \}, \quad (1.110)$$

siendo $\mathbf{H}^1 \stackrel{\text{def}}{=} (H^1)^{n_{sd}}$ el espacio de funciones vectoriales con n_{sd} componentes y $H^1(\Omega_t)$ el espacio de Hilbert cuyos elementos son de cuadrado integrable hasta su primer derivada

en el dominio Ω_t , cuya frontera es Γ_t .

Luego, si en el problema enunciado por el PPV (ver ecuación (1.107)) se considera comportamiento del fluido Newtoniano (esto es, $\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + 2\mu\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v})$), relajando la condición de incompresibilidad en los espacios Kin_v y Var_v a través de un multiplicador de Lagrange distribuido en el volumen en el espacio funcional \mathcal{Q} e introduciendo la dinámica del dominio Ω_t como parte del problema variacional expresado en forma general por intermedio su residuo asociado $\mathcal{M} = \mathcal{M}(\mathbf{u})$, resulta el siguiente problema: hallar $(\mathbf{v}, p, \mathbf{u}) \in \text{Kin}_v^* \times \mathcal{Q} \times \text{Kin}_u$ tal que

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_t} \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \Big|_{\mathcal{X}} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega + \int_{\Omega_t} \rho \nabla \mathbf{v} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_R) \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega + \int_{\Omega_t} 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{v}}) \, d\Omega_t \\ & - \int_{\Omega_t} p \operatorname{div} \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega + \int_{\Omega_t} \hat{p} \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\Omega + \langle \mathcal{M}(\mathbf{u}), (\hat{\mathbf{u}}) \rangle_{\Omega_t} \\ & = \int_{\Omega_t} \rho \mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega - \int_{\Gamma_{N,t}} \pi \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Gamma \quad \forall (\hat{\mathbf{v}}, \hat{p}, \hat{\mathbf{u}}) \in \text{Var}_v^* \times \mathcal{Q} \times \text{Var}_u. \end{aligned} \quad (1.111)$$

Vale la pena mencionar que sólo consideramos la componente normal de la tracción \mathbf{t} , denotada según π ⁶. Esta hipótesis será razonable en el caso de flujos con números de Reynolds suficientemente altos, como consecuencia de despreciar efectos viscosos (ver Sección 1.2.4). En este sentido, la componente normal la podemos aproximar del siguiente modo

$$\begin{aligned} \mathbf{t} \cdot \mathbf{n} &= -p \mathbf{n} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}) \mathbf{n} \\ &\approx -p \mathbf{n}, \end{aligned} \quad (1.112)$$

esto indica que la componente normal de la tracción se aproxima al valor de la presión del fluido en el medio. Por otro lado, el término $\langle \mathcal{M}(\mathbf{u}), (\hat{\mathbf{u}}) \rangle_{\Omega_t}$ puede ser tratado como un problema variacional en sí mismo. Este problema constituye el núcleo de esta tesis y será abordado con mayor detalle en los siguientes capítulos.

En referencia a los espacios funcionales utilizados, estos quedan definidos según

$$\text{Kin}_v^* = \{ \mathbf{v} \in \mathbf{H}^1(\Omega_t) \mid \mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} \text{ en } \Gamma_{D,t} \}, \quad (1.113)$$

$$\text{Kin}_u = \{ \mathbf{u} \in \mathbf{H}^1(\Omega_t) \mid \mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \text{ en } \Gamma_{W,t} \}, \quad (1.114)$$

⁶Vale la pena notar que, es posible considerar la tracción en su totalidad, esto es, tanto la componente normal como tangencial, por intermedio de un procedimiento totalmente análogo al realizado en la Sección 1.1 para el problema de sólido, haciendo uso del tensor proyección tangencial.

$$\text{Var}_{\mathbf{v}}^* = \{\mathbf{v} \in \mathbf{H}^1(\Omega_t) \mid \hat{\mathbf{v}} = \mathbf{0} \text{ en } \Gamma_{D,t}\}, \quad (1.115)$$

$$\text{Var}_{\mathbf{u}} = \{\mathbf{u} \in \mathbf{H}^1(\Omega_t) \mid \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{0} \text{ en } \Gamma_{D,t}\}, \quad (1.116)$$

$$\mathcal{Q} = \{(p, \hat{p}) \in H^0(\Omega_t)\}, \quad (1.117)$$

siendo $\mathbf{H}^1 \stackrel{def}{=} (H^1)^{n_{sd}}$ el espacio de funciones vectoriales de n_{sd} (dimensión del espacio Euclidiano) componentes compuesto por el espacio de Hilbert H^1 . Por otro lado, $H^0(\Omega_t) = L^2(\Omega_t)$ es el espacio de Hilbert cuyos elementos son de cuadrado integrable en el dominio Ω_t , sin ninguna condición sobre sus derivadas.

Haciendo uso de la siguiente identidad para el cálculo de derivadas temporales en dominios deformables en una descripción ALE (ver Nobile [53] p. 16)

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega_t} \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega \right) = \int_{\Omega_t} \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \Big|_{\mathbf{x}} + \mathbf{v} \operatorname{div} \mathbf{v}_R \right) \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega, \quad (1.118)$$

es posible escribir la forma no conservativa de las ecuaciones de Navier-Stokes en dominios deformables (1.111) en formato conservativo. De esta manera, resulta el siguiente problema variacional: hallar $(\mathbf{v}, p, \mathbf{u}) \in \text{Kin}_{\mathbf{v}}^* \times \mathcal{Q} \times \text{Kin}_{\mathbf{u}}$ tal que

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega_t} \rho \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega \right) + \int_{\Omega_t} \rho \operatorname{div}(\mathbf{v} \otimes (\mathbf{v} - \mathbf{v}_R)) \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega + \int_{\Omega_t} 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{v}}) \, d\Omega \\ & - \int_{\Omega_t} p \operatorname{div} \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega + \int_{\Omega_t} \hat{p} \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\Omega + \langle \mathcal{M}(\mathbf{u}), (\hat{\mathbf{u}}) \rangle_{\Omega_t} \\ & = \int_{\Omega_t} \rho \mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega - \int_{\Gamma_{N,t}} \pi \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Gamma \quad \forall (\hat{\mathbf{v}}, \hat{p}, \hat{\mathbf{u}}) \in \text{Var}_{\mathbf{v}}^* \times \mathcal{Q} \times \text{Var}_{\mathbf{u}}. \end{aligned} \quad (1.119)$$

A continuación escribimos el problema variacional (1.111) en la configuración de referencia Ω_R . Este procedimiento está motivado en la linealización del problema, la cual debe ser realizada en una configuración conocida. Luego, el problema variacional (1.111) puede plantearse del siguiente modo: hallar $(\mathbf{v}, p, \mathbf{u}) \in (\text{Kin}_{\mathbf{v}}^* \times \mathcal{Q} \times \text{Kin}_{\mathbf{u}}) \circ \mathcal{A}$ tal que

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_R} \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \Big|_{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, J^{\mathbf{u}} \, d\Omega + \int_{\Omega_R} \rho \nabla \mathbf{v} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-1} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_R) \cdot \hat{\mathbf{v}} \, J^{\mathbf{u}} \, d\Omega \\ & + \int_{\Omega_R} 2\mu (\nabla \mathbf{v} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-1})^S \cdot (\nabla \hat{\mathbf{v}} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-1})^S \, J^{\mathbf{u}} \, d\Omega \\ & - \int_{\Omega_R} p \nabla \hat{\mathbf{v}} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-1} \cdot \mathbf{I} \, J^{\mathbf{u}} \, d\Omega + \int_{\Omega_R} \hat{p} \nabla \mathbf{v} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-1} \cdot \mathbf{I} \, J^{\mathbf{u}} \, d\Omega + \langle \mathcal{M}_R(\mathbf{u}), (\hat{\mathbf{u}}) \rangle_{\Omega_R} \\ & = \int_{\Omega_R} \rho \mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, J^{\mathbf{u}} \, d\Omega - \int_{\Gamma_{N,R}} \pi \mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, J^{\mathbf{u}} \, d\Gamma \end{aligned}$$

$$\forall(\hat{\mathbf{v}}, \hat{p}, \hat{\mathbf{u}}) \in (\text{Var}_{\mathbf{v}}^* \times \mathcal{Q} \times \text{Var}_{\mathbf{u}}) \circ \mathcal{A}. \quad (1.120)$$

La notación $(\text{Var}_{\mathbf{v}}^* \times \mathcal{Q} \times \text{Var}_{\mathbf{u}}) \circ \mathcal{A}$ indica que cada uno de los subespacios está compuesto por la función de mapeo \mathcal{A} , por ejemplo, el subespacio $\text{Var}_{\mathbf{v}}^*$ puede ser escrito en la configuración de referencia Ω_R a través de la composición con \mathcal{A} , esto es

$$\text{Var}_{\mathbf{v}}^* \circ \mathcal{A} = \{\mathbf{v}(\boldsymbol{\chi}, t) = \mathbf{v}(\mathbf{x}_t, t) \circ \mathcal{A}(\boldsymbol{\chi}, t) \in \mathbf{H}^1(\Omega_R) \mid \mathbf{v}(\boldsymbol{\chi}, t) = \mathbf{0} \text{ en } \Gamma_{D,R}\}. \quad (1.121)$$

Este procedimiento es análogo para todos los subespacios de soluciones cinemáticamente admisibles.

Por otro lado, el problema variacional en formato conservativo (1.119) también puede ser escrito en la configuración de referencia Ω_R , resultando el siguiente problema: hallar $(\mathbf{v}, p, \mathbf{u}) \in (\text{Kin}_{\mathbf{v}}^* \times \mathcal{Q} \times \text{Kin}_{\mathbf{u}}) \circ \mathcal{A}$ tal que

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega_R} \rho \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{v}} J^{\mathbf{u}} d\Omega \right) + \int_{\Omega_R} \rho (\nabla (\mathbf{v} \otimes (\mathbf{v} - \mathbf{v}_R))) \mathbf{F}^{\mathbf{u}-1} \cdot \mathbf{I} \cdot \hat{\mathbf{v}} J^{\mathbf{u}} d\Omega \\ & + \int_{\Omega_R} 2\mu (\nabla \mathbf{v} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-1})^S \cdot (\nabla \hat{\mathbf{v}} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-1})^S J^{\mathbf{u}} d\Omega \\ & - \int_{\Omega_R} p \nabla \hat{\mathbf{v}} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-1} \cdot \mathbf{I} J^{\mathbf{u}} d\Omega + \int_{\Omega_R} \hat{p} \nabla \mathbf{v} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-1} \cdot \mathbf{I} J^{\mathbf{u}} d\Omega + \langle \mathcal{M}_R(\mathbf{u}), (\hat{\mathbf{u}}) \rangle_{\Omega_R} \\ & = \int_{\Omega_R} \rho \mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{v}} J^{\mathbf{u}} d\Omega - \int_{\Gamma_{N,R}} \pi \mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{v}} J^{\mathbf{u}} d\Gamma \\ & \forall(\hat{\mathbf{v}}, \hat{p}, \hat{\mathbf{u}}) \in (\text{Var}_{\mathbf{v}}^* \times \mathcal{Q} \times \text{Var}_{\mathbf{u}}) \circ \mathcal{A}. \end{aligned} \quad (1.122)$$

Es importante mencionar que todos los campos se encuentran descritos según $\boldsymbol{\chi}$. Por ejemplo, al cambiar la expresión de la velocidad \mathbf{v} de la configuración Ω_t a la configuración Ω_R se realiza la operación

$$\mathbf{v}(\boldsymbol{\chi}, t) = \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \circ \mathcal{A}(\boldsymbol{\chi}, t), \quad (1.123)$$

en donde se carga la notación del campo \mathbf{v} pudiendo el mismo estar representado tanto en la configuración de referencia Ω_R como en la espacial Ω_t , según corresponda.

1.3.3. Formulación variacional semi-discreta en el tiempo

En esta sección planteamos la discretización temporal de los problemas variacionales enunciados en (1.111) y (1.119), esto es, las ecuaciones de Navier-Stokes en dominios

deformables en formato no conservativo y conservativo, respectivamente.

En primer lugar presentamos un esquema uniparamétrico de implicitud θ [21], siendo θ un parámetro que varía entre 0 y 1. A partir de este esquema es posible derivar una familia de métodos de discretización temporal. Consideremos la siguiente ecuación diferencial ordinaria (escalar)

$$\frac{dy}{dt}(t) = \mathcal{F}(y(t), t), \quad t > 0, \quad y(0) = y_0, \quad (1.124)$$

siendo posible aproximarla del siguiente modo

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\Delta t} = \mathcal{F}(y_{n+\theta}, t_{n+\theta}) \approx \theta \mathcal{F}(y_{n+1}, t_{n+1}) + (1 - \theta) \mathcal{F}(y_n, t_n). \quad (1.125)$$

Para ciertos valores de implicitud, tales como $\theta = (0, 0.5, 1)$, se obtienen los métodos de *Backward Euler*, *Crank-Nicolson* y *Backward Euler*, respectivamente. Aquellos métodos con $\theta < 0.5$ son condicionalmente estables [21]. En general, el procedimiento tiene una precisión $\mathcal{O}(\Delta t)$, a excepción del esquema *Crank-Nicolson* ($\theta = 0.5$), el cual tiene una precisión $\mathcal{O}(\Delta t^2)$.

Por otro lado, una familia de métodos totalmente implícitos muy utilizada es la denominada *Backward Differentiation Formula* (BDF) [19]. En particular, detallamos la regla BDF(2), cuya precisión es $\mathcal{O}(\Delta t^2)$. Con este procedimiento, la expresión (1.124) se discretiza según

$$\frac{3y_{n+1} - 4y_n + y_{n-1}}{2\Delta t} = \mathcal{F}(y_{n+1}, t_{n+1}). \quad (1.126)$$

La ventaja de los métodos BDF es la facilidad para implementar reglas de alto orden de precisión modificando sólo el segundo miembro de las ecuaciones. Como contra, estos métodos requieren la solución en varios pasos de tiempos (en función del grado de precisión de la regla utilizada) para inicializar correctamente así como también costo computacional asociado (en términos de memoria) para tener acceso a la solución en múltiples pasos de tiempo. El esquema BDF(2) presentado puede ser inicializado por un método $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ de un sólo paso, por ejemplo, el método de *Crank-Nicolson*, de acuerdo con la ecuación (1.125) para $\theta = 0.5$.

Con respecto a la selección del paso de tiempo Δt , es útil considerar la condición de *Courant-Friedrichs-Lewy* (CFL) [49], la cual establece que el dominio de dependencia numérico debe contener al físico, esto es, que cada elemento de la discretización reciba

información que viaja con la velocidad del problema. Por ejemplo, para una partícula viajando a una velocidad \mathbf{v} que se mueve sobre una grilla de tamaño característico h y es evaluada a pasos de tiempo Δt , atraviesa un elemento de la grilla en un tiempo $h/|\mathbf{v}|$. Si este tiempo es mayor que Δt , entonces la información que transporta la partícula potencialmente puede no quedar registrada por elementos en su trayectoria. Este fenómeno puede controlarse por intermedio del número de *Courant* [21]

$$\text{Co} = \frac{\|\mathbf{c}\|\Delta t}{h}, \quad (1.127)$$

siendo $\mathbf{c} = \mathbf{v} - \mathbf{v}_R$ la velocidad relativa de la partícula respecto al marco referencial. Luego, para cumplir la condición CFL se debe satisfacer $\text{Co} < 1$, de tal modo que el paso de tiempo Δt se acota en forma superior una vez conocida la longitud característica h de la discretización.

A continuación, presentamos el problema variacional en formato conservativo (1.119) discretizado de acuerdo con un esquema de un paso de implicitud θ (1.125). El problema semi-discreto resulta: hallar $(\mathbf{v}, p, \mathbf{u}) \in \text{Kin}_{\mathbf{v}}^* \times \mathcal{Q} \times \text{Kin}_{\mathbf{u}}$ tal que

$$\begin{aligned} & \frac{\rho}{\Delta t} \int_{\Omega_{t_{n+1}}} \mathbf{v}_{n+1} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega - \frac{\rho}{\Delta t} \int_{\Omega_{t_n}} \mathbf{v}_n \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega + \int_{\Omega_{t_{n+\theta}}} \rho \operatorname{div}(\mathbf{v} \otimes (\mathbf{v} - \mathbf{v}_R)) \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega \\ & + \int_{\Omega_{t_{n+\theta}}} 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{v}}) \, d\Omega - \int_{\Omega_{t_{n+\theta}}} p \operatorname{div} \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega + \int_{\Omega_{t_{n+\theta}}} \hat{p} \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\Omega \\ & + \langle \mathcal{M}(\mathbf{u}), (\hat{\mathbf{u}}) \rangle_{\Omega_{t_{n+\theta}}} = \int_{\Omega_{t_{n+\theta}}} \rho \mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega - \int_{\Gamma_{N,t_{n+\theta}}} \pi \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Gamma \\ & \forall (\hat{\mathbf{v}}, \hat{p}, \hat{\mathbf{u}}) \in \text{Var}_{\mathbf{v}}^* \times \mathcal{Q} \times \text{Var}_{\mathbf{u}}. \end{aligned} \quad (1.128)$$

Aquí hemos omitido el tiempo en el que se encuentran evaluadas las integrales en la configuración $\Omega_{t_{n+\theta}}$ de acuerdo con la siguiente regla: toda integral de la forma $\int_{\Omega_{t_{n+\theta}}} (\cdot)$ tiene su integrando evaluado en el tiempo $t_{n+\theta}$ y puede calcularse en términos de las configuraciones en t_n y t_{n+1} según

$$\int_{\Omega_{t_{n+\theta}}} (\cdot)_{n+\theta} \, d\Omega = \theta \int_{\Omega_{t_{n+1}}} (\cdot)_{n+1} \, d\Omega + (1 - \theta) \int_{\Omega_{t_n}} (\cdot)_n \, d\Omega. \quad (1.129)$$

En forma análoga se puede proceder con aquellos términos sobre la frontera $\Gamma_{t_{n+\theta}}$.

El problema variacional (1.128) discretizado en el tiempo representa un sistema de ecuaciones no lineales. Estas ecuaciones serán linealizadas por el método de Newton-

Raphson. Para ello, es necesario escribir las ecuaciones en una configuración conocida. De este manera, surgen algunas alternativas para esta elección, dado que para un instante de tiempo t , todas aquellas configuraciones en tiempos anteriores pueden considerarse como conocidas, pudiendo la elección de esta configuración ser única o variable con el tiempo. En particular, consideraremos como configuración conocida, la configuración de referencia Ω_R . Es fácil notar que la discretización temporal puede llevarse a cabo en cualquier configuración, es decir, tanto en la configuración de referencia Ω_R como en la configuración espacial Ω_t y luego linealizar el problema⁷. En esta sección hemos optado por realizar la discretización temporal en la configuración Ω_t para dejar en evidencia las configuraciones en la que naturalmente resultan planteadas las ecuaciones para la forma conservativa. Vale la pena notar que estas configuraciones no coinciden con la forma no conservativa del problema de equilibrio, la cual no hemos considerando por motivos de simplificación de la presentación. Para reforzar la arbitrariedad de la configuración en la cual se discretiza el tiempo, en la siguiente sección realizaremos la secuencia inversa, es decir, discretizaremos el tiempo para el problema variacional (1.122) enunciado en la configuración de referencia Ω_R .

1.3.4. Proceso de linealización

El problema de equilibrio mecánico formulado en la Sección 1.3.2, tanto en su forma no conservativa como conservativa, posee distintas fuentes de no linealidades. En primer lugar, se encuentra el término convectivo de las ecuaciones, el cual es intrínseco a las ecuaciones de Navier-Stokes, dado que el campo de velocidad se transporta a sí mismo. Además, al introducir las ecuaciones en dominios deformables se agrega como fuente de no linealidad la geometría del dominio.

El proceso de linealización se lleva a cabo por el método de Newton-Raphson y puede ser aplicado a cualquiera de los problemas variacionales (1.111) y (1.119), los cuales se corresponden a la formas no conservativa y conservativa, respectivamente. Estos problemas surgen naturalmente a partir del PPV en la configuración espacial Ω_t . En particular, tomaremos como punto de partida la formulación conservativa (1.119). Para ello, en primer lugar el problema debe ser expresado en una configuración conocida *a priori*, es decir, la configuración de referencia Ω_R . Luego, plantearemos el problema semi-discreto en el tiempo en esta configuración de acuerdo con un esquema temporal de un

⁷Sin embargo, enfatizamos que el proceso de linealización debe realizarse en una configuración conocida. Luego, las expresiones linealizadas pueden ser expresadas en cualquier configuración

paso e implícitud arbitraria θ , esto es, el esquema (1.125) presentado en la Sección 1.3.3.

Como ya fue mostrado en la Sección 1.3.2, el problema variacional (1.119) puede escribirse en la configuración de referencia Ω_R , resultando la expresión (1.122). A su vez, este último acepta la siguiente forma compacta: hallar $(\mathbf{v}, p, \mathbf{u}) \in (\text{Kin}_\mathbf{v}^* \times \mathcal{Q} \times \text{Kin}_\mathbf{u}) \circ \mathcal{A}$ tal que

$$\langle \mathcal{R}_R(\mathbf{v}, p, \mathbf{u}), (\hat{\mathbf{v}}, \hat{p}, \hat{\mathbf{u}}) \rangle_{\Omega_R} = 0 \quad \forall (\hat{\mathbf{v}}, \hat{p}, \hat{\mathbf{u}}) \in (\text{Var}_\mathbf{v}^* \times \mathcal{Q} \times \text{Var}_\mathbf{u}) \circ \mathcal{A}, \quad (1.130)$$

siendo

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{R}_R(\mathbf{v}, p, \mathbf{u}), (\hat{\mathbf{v}}, \hat{p}, \hat{\mathbf{u}}) \rangle_{\Omega_R} &\stackrel{def}{=} \\ &\frac{\rho}{\Delta t} \int_{\Omega_R} \mathbf{v}_{n+1} \cdot \hat{\mathbf{v}} J^{\mathbf{u}_{n+1}} d\Omega - \frac{\rho}{\Delta t} \int_{\Omega_R} \mathbf{v}_n \cdot \hat{\mathbf{v}} J^{\mathbf{u}_n} d\Omega \\ &+ \int_{\Omega_R} (\rho (\nabla (\mathbf{v} \otimes (\mathbf{v} - \mathbf{v}_R))) \mathbf{F}^{\mathbf{u}^{-1}} \cdot \mathbf{I}) \cdot \hat{\mathbf{v}} J^{\mathbf{u}} \Big|_{n+\theta} d\Omega \\ &+ \int_{\Omega_R} \left(2\mu (\nabla \mathbf{v} \mathbf{F}^{\mathbf{u}^{-1}})^S \cdot (\nabla \hat{\mathbf{v}} \mathbf{F}^{\mathbf{u}^{-1}})^S J^{\mathbf{u}} \right) \Big|_{n+\theta} d\Omega \\ &- \int_{\Omega_R} (p \nabla \hat{\mathbf{v}} \mathbf{F}^{\mathbf{u}^{-1}} \cdot \mathbf{I} J^{\mathbf{u}}) \Big|_{n+\theta} d\Omega + \int_{\Omega_R} (\hat{p} \nabla \mathbf{v} \mathbf{F}^{\mathbf{u}^{-1}} \cdot \mathbf{I} J^{\mathbf{u}}) \Big|_{n+\theta} d\Omega \\ &- \int_{\Omega_R} (\rho \mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{v}} J^{\mathbf{u}}) \Big|_{n+\theta} d\Omega + \int_{\Gamma_{N,R}} (\pi \mathbf{F}^{\mathbf{u}^{-T}} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{v}} J^{\mathbf{u}}) \Big|_{n+\theta} d\Gamma \\ &+ \langle \mathcal{M}_R(\mathbf{u}), (\hat{\mathbf{u}}) \rangle_{\Omega_R} \quad \forall (\hat{\mathbf{v}}, \hat{p}, \hat{\mathbf{u}}) \in (\text{Var}_\mathbf{v}^* \times \mathcal{Q} \times \text{Var}_\mathbf{u}) \circ \mathcal{A}. \end{aligned} \quad (1.131)$$

La linealización por el método de Newton-Raphson aplicada a la expresión (1.130) alrededor de un punto $(\mathbf{v}^k, p^k, \mathbf{u}^k) \in (\text{Kin}_\mathbf{v}^* \times \mathcal{Q} \times \text{Kin}_\mathbf{u}) \circ \mathcal{A}$ resulta en el siguiente problema: hallar $(\delta \mathbf{v}, \delta p, \delta \mathbf{u}) \in (\text{Var}_\mathbf{v}^* \times \mathcal{Q} \times \text{Var}_\mathbf{u}) \circ \mathcal{A}$ tal que

$$\begin{aligned} &\langle \mathcal{R}_R(\mathbf{v}^k, p^k, \mathbf{u}^k), (\hat{\mathbf{v}}, \hat{p}, \hat{\mathbf{u}}) \rangle_{\Omega_R} \\ &+ \frac{d}{d\epsilon} \langle \mathcal{R}_R(\mathbf{v}^k + \epsilon \delta \mathbf{v}, p^k + \epsilon \delta p, \mathbf{v}^k + \epsilon \delta \mathbf{u}), (\hat{\mathbf{v}}, \hat{p}, \hat{\mathbf{u}}) \rangle \Big|_{\epsilon=0} = 0 \\ &\forall (\hat{\mathbf{v}}, \hat{p}, \hat{\mathbf{u}}) \in (\text{Var}_\mathbf{v}^* \times \mathcal{Q} \times \text{Var}_\mathbf{u}) \circ \mathcal{A}, \end{aligned} \quad (1.132)$$

siendo $\frac{d}{d\epsilon}(\cdot) \Big|_{\epsilon=0}$ el operador derivada de Gâteaux. Para introducir las perturbaciones $(\delta \mathbf{v}, \delta p, \delta \mathbf{u})$ en aquellos campos que dependen de $(\mathbf{v}, p, \mathbf{u})$, introducimos el índice ϵ de la

siguiente manera

$$\mathbf{v}_\epsilon = \mathbf{v} + \epsilon \delta \mathbf{v}, \quad (1.133)$$

$$p_\epsilon = p + \epsilon \delta p, \quad (1.134)$$

$$\mathbf{u}_\epsilon = \mathbf{u} + \epsilon \delta \mathbf{u}, \quad (1.135)$$

además se perturba todo campo que dependa de ellas, por ejemplo, el tensor $\mathbf{F}^{\mathbf{u}} = \mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}$ resulta $\mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}} = \mathbf{I} + \nabla(\mathbf{u} + \epsilon \delta \mathbf{u})$. Se procede de manera análoga con todo campo función de las variables $(\mathbf{v}, p, \mathbf{u})$. Así, el residuo perturbado (segundo término de la ecuación (1.132)) resulta

$$\begin{aligned} & \left. \frac{d}{d\epsilon} \langle \mathcal{R}_R(\mathbf{v}^k + \epsilon \delta \mathbf{v}, p^k + \epsilon \delta p, \mathbf{u}^k + \epsilon \delta \mathbf{u}), (\hat{\mathbf{v}}, \hat{p}, \hat{\mathbf{u}}) \rangle \right|_{\epsilon=0} \\ &= \int_{\Omega_R} \left. \frac{d}{d\epsilon} \left[\frac{\rho}{\Delta t} \mathbf{v}_{n+1, \epsilon} \cdot \hat{\mathbf{v}} J_\epsilon^{\mathbf{u}_{n+1}} \right] \right|_{\epsilon=0} d\Omega - \int_{\Omega_R} \left. \frac{d}{d\epsilon} \left[\frac{\rho}{\Delta t} \mathbf{v}_{n, \epsilon} \cdot \hat{\mathbf{v}} J_\epsilon^{\mathbf{u}_n} \right] \right|_{\epsilon=0} d\Omega \\ &+ \int_{\Omega_R} \left. \frac{d}{d\epsilon} \left[(\rho (\nabla(\mathbf{v}_\epsilon \otimes (\mathbf{v}_\epsilon - \mathbf{v}_{R, \epsilon}))) \mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}^{-1}} \cdot \mathbf{I}) \cdot \hat{\mathbf{v}} J_\epsilon^{\mathbf{u}} \right]_{n+\theta} \right|_{\epsilon=0} d\Omega \\ &+ \int_{\Omega_R} \left. \frac{d}{d\epsilon} \left[(2\mu (\nabla \mathbf{v}_\epsilon \mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}^{-1}})^S \cdot (\nabla \hat{\mathbf{v}} \mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}^{-1}})^S J_\epsilon^{\mathbf{u}}) \right]_{n+\theta} \right|_{\epsilon=0} d\Omega \\ &- \int_{\Omega_R} \left. \frac{d}{d\epsilon} \left[(p_\epsilon \nabla \hat{\mathbf{v}} \mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}^{-1}} \cdot \mathbf{I} J_\epsilon^{\mathbf{u}}) \right]_{n+\theta} \right|_{\epsilon=0} d\Omega \\ &- \int_{\Omega_R} \left. \frac{d}{d\epsilon} \left[(\hat{p} \nabla \mathbf{v}_\epsilon \mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}^{-1}} \cdot \mathbf{I} J_\epsilon^{\mathbf{u}}) \right]_{n+\theta} \right|_{\epsilon=0} d\Omega \\ &- \int_{\Omega_R} \left. \frac{d}{d\epsilon} \left[(\rho \mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{v}} J_\epsilon^{\mathbf{u}}) \right]_{n+\theta} \right|_{\epsilon=0} d\Omega \\ &+ \int_{\Gamma_{N,R}} \left. \frac{d}{d\epsilon} \left[(\pi \mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{v}} J_\epsilon^{\mathbf{u}}) \right]_{n+\theta} \right|_{\epsilon=0} d\Gamma \\ &+ \left. \frac{d}{d\epsilon} \langle \mathcal{M}_R(\mathbf{u}), (\hat{\mathbf{u}}) \rangle_{\Omega_R} \right|_{\epsilon=0} \\ &\forall (\hat{\mathbf{v}}, \hat{p}, \hat{\mathbf{u}}) \in (\text{Var}_{\mathbf{v}}^* \times \mathcal{Q} \times \text{Var}_{\mathbf{u}}) \circ \mathcal{A}, \quad (1.136) \end{aligned}$$

siendo $\mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{v}(\boldsymbol{\chi}, t_{n+1})$, $\mathbf{v}_n = \mathbf{v}(\boldsymbol{\chi}, t_n)$ y $J^{\mathbf{u}_{n+1}} = \det \mathbf{F}^{\mathbf{u}_{n+1}}$ el Jacobiano del tensor gradiente de deformación $\mathbf{F}^{\mathbf{u}_{n+1}} = \mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}(\boldsymbol{\chi}, t_{n+1})$. Dejamos expresada en forma genérica la linealización correspondiente a la dinámica del mapeo $\mathcal{A}(\boldsymbol{\chi}, t)$, determinada en forma compacta por el residuo $\mathcal{M} = \mathcal{M}(\mathbf{u})$. Además, se hace omisión del índice k , dejando todas aquellas expresiones dependientes de los campos $(\mathbf{u}, p, \mathbf{v})$ evaluadas en la iteración previa de manera implícita. La notación $(\cdot)_{n+\theta}$ indica evaluación en el tiempo $t_{n+\theta}$ y puede

calcularse según la ecuación (1.125). De esta manera, la derivada de Gâteaux de aquellos términos evaluados en el tiempo $t_{n+\theta}$ pueden expresarse de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_R} \frac{d}{d\epsilon} [(\cdot)_{n+\theta}] \Big|_{\epsilon=0} d\Omega &= \int_{\Omega_R} \frac{d}{d\epsilon} [\theta (\cdot)_{n+1} + (1-\theta) (\cdot)_n] \Big|_{\epsilon=0} d\Omega \\ &= \theta \int_{\Omega_R} \frac{d}{d\epsilon} [(\cdot)_{n+1}] \Big|_{\epsilon=0} d\Omega. \end{aligned} \quad (1.137)$$

Haciendo uso de las expresiones para la derivadas Gâteaux del Apéndice A se obtiene la siguiente expresión

$$\begin{aligned} &\frac{d}{d\epsilon} \langle \mathcal{R}_R(\mathbf{v}^k + \epsilon \delta \mathbf{v}, p^k + \epsilon \delta p, \mathbf{u}^k + \epsilon \delta \mathbf{u}), (\hat{\mathbf{v}}, \hat{p}, \hat{\mathbf{u}}) \rangle \Big|_{\epsilon=0} \\ &= \frac{\rho}{\Delta t} \int_{\Omega_R} \delta \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{v}} J^{\mathbf{u}} d\Omega + \frac{\rho}{\Delta t} \int_{\Omega_R} \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{v}} (J^{\mathbf{u}} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \cdot \nabla \delta \mathbf{u}) d\Omega \\ &\quad + \theta \int_{\Omega_R} \rho (\nabla (\delta \mathbf{v} \otimes (\mathbf{v} - \mathbf{v}_R)) \mathbf{F}^{\mathbf{u}-1} \cdot \mathbf{I}) \cdot \hat{\mathbf{v}} J^{\mathbf{u}} d\Omega \\ &\quad + \theta \int_{\Omega_R} \rho (\nabla (\mathbf{v} \otimes (\delta \mathbf{v} - \delta \mathbf{v}_R)) \mathbf{F}^{\mathbf{u}-1} \cdot \mathbf{I}) \cdot \hat{\mathbf{v}} J^{\mathbf{u}} d\Omega \\ &\quad + \theta \int_{\Omega_R} \rho (\nabla (\mathbf{v} \otimes (\mathbf{v} - \mathbf{v}_R)) (-\mathbf{F}^{\mathbf{u}-1} \nabla \delta \mathbf{u} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-1}) \cdot \mathbf{I}) \cdot \hat{\mathbf{v}} J^{\mathbf{u}} d\Omega \\ &\quad + \theta \int_{\Omega_R} \rho (\nabla (\mathbf{v} \otimes (\mathbf{v} - \mathbf{v}_R)) \mathbf{F}^{\mathbf{u}-1} \cdot \mathbf{I}) \cdot \hat{\mathbf{v}} (J^{\mathbf{u}} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \cdot \nabla \delta \mathbf{u}) d\Omega \\ &\quad - \theta \int_{\Omega_R} \delta p \nabla \hat{\mathbf{v}} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-1} \cdot \mathbf{I} J^{\mathbf{u}} d\Omega - \theta \int_{\Omega_R} p \nabla \hat{\mathbf{v}} (-\mathbf{F}^{\mathbf{u}-1} \nabla \delta \mathbf{u} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-1}) \cdot \mathbf{I} J^{\mathbf{u}} d\Omega \\ &\quad - \theta \int_{\Omega_R} p \nabla \hat{\mathbf{v}} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-1} \cdot \mathbf{I} (J^{\mathbf{u}} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \cdot \nabla \delta \mathbf{u}) d\Omega \\ &\quad - \theta \int_{\Omega_R} \hat{p} \nabla \delta \mathbf{v} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-1} \cdot \mathbf{I} J^{\mathbf{u}} d\Omega - \theta \int_{\Omega_R} \hat{p} \nabla \mathbf{v} (-\mathbf{F}^{\mathbf{u}-1} \nabla \delta \mathbf{u} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-1}) \cdot \mathbf{I} J^{\mathbf{u}} d\Omega \\ &\quad - \theta \int_{\Omega_R} \hat{p} \nabla \mathbf{v} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-1} \cdot \mathbf{I} (J^{\mathbf{u}} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \cdot \nabla \delta \mathbf{u}) d\Omega \\ &\quad - \theta \int_{\Omega_R} \rho \mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{v}} (J^{\mathbf{u}} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \cdot \nabla \delta \mathbf{u}) d\Omega \\ &\quad - \theta \int_{\Gamma_R} \pi (\mathbf{F}^{\mathbf{u}-1} \nabla \delta \mathbf{u} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-1})^T \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{v}} J^{\mathbf{u}} d\Gamma \\ &\quad + \theta \int_{\Gamma_R} \pi \mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{v}} (J^{\mathbf{u}} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \cdot \nabla \delta \mathbf{u}) d\Gamma \\ &\quad + \frac{d}{d\epsilon} \langle \mathcal{M}_R(\mathbf{u}), (\hat{\mathbf{u}}) \rangle_{\Omega_R} \Big|_{\epsilon=0}. \end{aligned} \quad (1.138)$$

Luego, podemos devolver esta expresión a la configuración Ω_t

$$\begin{aligned}
& \left. \frac{d}{d\epsilon} \langle \mathcal{R}(\mathbf{v}^k + \epsilon \delta \mathbf{v}, p^k + \epsilon \delta p, \mathbf{u}^k + \epsilon \delta \mathbf{u}), (\hat{\mathbf{v}}, \hat{p}, \hat{\mathbf{u}}) \rangle \right|_{\epsilon=0} \\
&= \frac{\rho}{\Delta t} \int_{\Omega_t} \delta \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega + \frac{\rho}{\Delta t} \int_{\Omega_t} \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{v}} \operatorname{div} \delta \mathbf{u} \, d\Omega \\
&\quad + \theta \int_{\Omega_t} \rho \operatorname{div} (\delta \mathbf{v} \otimes (\mathbf{v} - \mathbf{v}_R)) \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega \\
&\quad + \theta \int_{\Omega_t} \rho \operatorname{div} (\mathbf{v} \otimes (\delta \mathbf{v} - \delta \mathbf{v}_R)) \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega \\
&\quad + \theta \int_{\Omega_t} \rho \operatorname{div} (\mathbf{v} \otimes (\mathbf{v} - \mathbf{v}_R)) \cdot \hat{\mathbf{v}} \operatorname{div} \delta \mathbf{u} \, d\Omega \\
&\quad + \theta \int_{\Omega_t} \rho (\nabla (\mathbf{v} \otimes (\mathbf{v} - \mathbf{v}_R)) \nabla \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{I}) \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega \\
&\quad + \theta \int_{\Omega_t} \sigma_{(\delta \mathbf{v}, \delta p)} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{v}}) \, d\Omega + \theta \int_{\Omega_t} \sigma_{(\hat{\mathbf{v}}, \hat{p})} \cdot (\nabla \mathbf{v} \nabla \delta \mathbf{u})^S \, d\Omega \\
&\quad + \theta \int_{\Omega_t} \sigma_{(\mathbf{v}, p)} \cdot (\nabla \hat{\mathbf{v}} \nabla \delta \mathbf{u})^S \, d\Omega + \theta \int_{\Omega_t} \sigma_{(\mathbf{v}, p)} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{v}}) \operatorname{div} \delta \mathbf{u} \, d\Omega \\
&\quad + \theta \int_{\Omega_t} \sigma_{(\hat{\mathbf{v}}, \hat{p})} \cdot (\nabla \mathbf{v} \nabla \delta \mathbf{u})^S \, d\Omega \\
&\quad - \theta \int_{\Omega_t} \hat{p} \operatorname{div} \delta \mathbf{v} \, d\Omega - \theta \int_{\Omega_t} \hat{p} \operatorname{div} \mathbf{v} \operatorname{div} \delta \mathbf{u} \, d\Omega \\
&\quad - \theta \int_{\Omega_t} \rho \mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{v}} \operatorname{div} \delta \mathbf{u} \, d\Omega \\
&\quad - \theta \int_{\Gamma_{N,t}} \pi \nabla \delta \mathbf{u}^T \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Gamma \\
&\quad + \theta \int_{\Gamma_{N,t}} \pi \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{v}} \operatorname{div} \delta \mathbf{u} \, d\Gamma \\
&\quad + \left. \frac{d}{d\epsilon} \langle \mathcal{M}(\mathbf{u}), (\hat{\mathbf{u}}) \rangle_{\Omega_t} \right|_{\epsilon=0}, \tag{1.139}
\end{aligned}$$

siendo $\sigma_{(\delta \mathbf{v}, \delta p)} = -\delta p \mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}(\delta \mathbf{v})$. El último término indica la linealización correspondiente al mapeo ALE y quedará determinado por la selección que se haga del mismo. Vale pena mencionar que la configuración Ω_t (de acuerdo con la omisión del índice k) es Ω_t^k cuyas coordenadas son $\mathbf{x}_t^k = \boldsymbol{\chi} + \mathbf{u}_t^k$. A cada iteración de Newton-Raphson se obtiene una nueva configuración Ω_t^{k+1} con coordenadas $\mathbf{x}_t^{k+1} = \boldsymbol{\chi} + \mathbf{u}_t^{k+1}$.

El problema linealizado resulta: hallar $(\delta \mathbf{v}, \delta p, \delta \mathbf{u}) \in \text{Var}_{\mathbf{v}}^* \times \mathcal{P} \times \text{Var}_{\mathbf{u}}$ tal que

$$\begin{aligned} & \langle \mathcal{R}(\mathbf{v}^k, p^k, \mathbf{u}^k), (\hat{\mathbf{v}}, \hat{p}, \hat{\mathbf{u}}) \rangle_{\Omega_t} \\ & + \frac{d}{d\epsilon} \langle \mathcal{R}(\mathbf{v}^k + \epsilon \delta \mathbf{v}, p^k + \epsilon \delta p, \mathbf{v}^k + \epsilon \delta \mathbf{u}), (\hat{\mathbf{v}}, \hat{p}, \hat{\mathbf{u}}) \rangle \Big|_{\epsilon=0} = 0 \\ & \forall (\hat{\mathbf{v}}, \hat{p}, \hat{\mathbf{u}}) \in \text{Var}_{\mathbf{v}}^* \times \mathcal{P} \times \text{Var}_{\mathbf{u}}, \end{aligned} \quad (1.140)$$

siendo el residuo \mathcal{R} y su tangente $\frac{d}{d\epsilon} \mathcal{R} \Big|_{\epsilon=0}$ de acuerdo a las expresiones (1.139) y (1.136), respectivamente.

$$\begin{aligned} & \langle \mathcal{R}(\mathbf{v}^k, p^k, \mathbf{u}^k), (\hat{\mathbf{v}}, \hat{p}, \hat{\mathbf{u}}) \rangle_{\Omega_t} \stackrel{def}{=} \\ & \frac{\rho}{\Delta t} \int_{\Omega_{t_{n+1}}} \mathbf{v}_{n+1} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega - \frac{\rho}{\Delta t} \int_{\Omega_{t_n}} \mathbf{v}_n \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega \\ & + \int_{\Omega_{t_{n+\theta}}} \rho \operatorname{div}(\mathbf{v} \otimes (\mathbf{v} - \mathbf{v}_R)) \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega \\ & + \int_{\Omega_{t_{n+\theta}}} 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{v}}) \, d\Omega \\ & - \int_{\Omega_{t_{n+\theta}}} p \operatorname{div} \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega + \int_{\Omega_{t_{n+\theta}}} \hat{p} \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\Omega \\ & + \langle \mathcal{M}(\mathbf{u}), (\hat{\mathbf{u}}) \rangle_{\Omega_{t_{n+\theta}}} = \int_{\Omega_{t_{n+\theta}}} \rho \mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega - \int_{\Gamma_{N,t_{n+\theta}}} \pi \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Gamma \\ & \forall (\hat{\mathbf{v}}, \hat{p}, \hat{\mathbf{u}}) \in \text{Var}_{\mathbf{v}}^* \times \mathcal{Q} \times \text{Var}_{\mathbf{u}}, \end{aligned} \quad (1.141)$$

y la tangente $\frac{d}{d\epsilon} \mathcal{R} \Big|_{\epsilon=0}$ dada por la expresión (1.139).

1.3.5. Discretización del problema

La discretización del problema de Navier-Stokes en dominios deformables en una descripción ALE es análoga a la de dominios fijos a través de una descripción *Euleriana*. En ese sentido, optamos por una discretización de igual orden para los campos de velocidad, presión y desplazamiento. Esta selección requiere de las estabilizaciones *Streamline Upwind/Petrov-Galerking* (SUPG) [9, 40] y *Pressure Stabilizing/Petrov-Galerking* (PSPG) [81, 88] para evitar inestabilidades por parte de los campos de velocidad y presión, respectivamente. Con respecto al campo de desplazamientos, no presenta estabilización por estar definido en forma implícita a través de la resolución de un problema variacional. Sin

embargo, una vez explicitada su formulación, podría requerir ser estabilizado.

Vale la pena mencionar que para el cálculo de los parámetros de estabilización τ_{SUPG} , ν_{LSIC} y τ_{PSPG} de las ecuaciones (1.89), (1.94) y (1.97), respectivamente, se debe considerar la velocidad del fluido respecto al marco referencial, esto es, $\mathbf{v} - \mathbf{v}_R$. Por ejemplo, el término τ_{S1} resulta

$$\tau_{S1} = \frac{h}{2\|\mathbf{v} - \mathbf{v}_R\|}, \quad (1.142)$$

siendo h una longitud característica del elemento definida como

$$h = 2 \left(\sum_i^N \|\mathbf{s} \cdot \nabla \hat{\mathbf{v}}_i\| \right)^{-1}, \quad (1.143)$$

siendo ahora \mathbf{s} un versor orientado según las dirección de las líneas del campo $\mathbf{v} - \mathbf{v}_R$, $\nabla \phi_i$ el gradiente de la función de forma ϕ asociada al nodo i y N el número de nodos del elemento.

1.3.6. Forma fuerte de las ecuaciones de equilibrio

La forma *fuerte* de las ecuaciones de Navier-Stokes para fluidos incompresibles en dominios deformables pueden obtenerse a partir de los problemas variacionales (1.111) y (1.119) en sus formato no conservativo y conservativo, respectivamente. El procedimiento es el mismo en ambos casos: se procede a la integración por partes del tensor de Cauchy $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{v}, p)$, se considera su simetría y se aplican condiciones de frontera definida por los espacios Var_v y Var_u . De la formulación no conservativa (1.111) se obtiene la siguiente forma *fuerte* del problema

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \Big|_x + \rho \nabla \mathbf{v} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_R) - \text{div}(2\mu \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v})) + \nabla p &= \rho \mathbf{f} & \text{en } \Omega_t, \\ \text{div } \mathbf{v} &= 0 & \text{en } \Omega_t, \\ -\pi \mathbf{n} &= \mathbf{t} & \text{en } \Gamma_{N,t}, \\ \mathbf{v} &= \bar{\mathbf{v}} & \text{en } \Gamma_{D,t}, \\ \mathcal{M}(\mathbf{u}) &= \mathbf{0} & \text{en } \Omega_t, \\ \mathbf{u} &= \bar{\mathbf{u}} & \text{en } \Gamma_t. \end{aligned} \quad (1.144)$$

Para el cálculo de la forma *fuerte* de las ecuaciones en forma conservativo es conve-

niente utilizar la siguiente identidad

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega_t} \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega \right) &= \frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega_R} \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, J^{\mathbf{u}} \, d\Omega \right) \\
&= \int_{\Omega_R} \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{v} \cdot J^{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{v}}) \Big|_{\mathbf{x}} \, d\Omega \\
&= \int_{\Omega_R} \frac{1}{J^{\mathbf{u}}} \frac{\partial (J^{\mathbf{u}} \mathbf{v})}{\partial t} \Big|_{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, J^{\mathbf{u}} \, d\Omega \\
&= \int_{\Omega_t} \frac{1}{J^{\mathbf{u}}} \frac{\partial (J^{\mathbf{u}} \mathbf{v})}{\partial t} \Big|_{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega,
\end{aligned} \tag{1.145}$$

la cual es válida dado que las funciones $\hat{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{v}}(\boldsymbol{\chi})$ no dependen del tiempo en la configuración de referencia Ω_R . Con esta identidad es simple obtener la forma *fuerte* de las ecuaciones en formato conservativo, con el mismo procedimiento al utilizado para la forma no conservativa. En ese sentido, la ecuación de cantidad de movimiento (primera de las ecuaciones en (1.144)) resulta de la siguiente manera

$$\rho \frac{1}{J^{\mathbf{u}}} \frac{\partial (J^{\mathbf{u}} \mathbf{v})}{\partial t} \Big|_{\mathbf{x}} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v} \otimes (\mathbf{v} - \mathbf{v}_R)) - \operatorname{div}(2\mu \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v})) + \nabla p = \rho \mathbf{f} \quad \text{en } \Omega_t. \tag{1.146}$$

El resto de las ecuaciones se mantienen iguales.

1.4. El problema de Interacción Fluido-Estructura (FSI)

En esta sección presentamos el problema de Interacción Fluido-Estructura (FSI) en el contexto de flujos incompresibles y sólidos en grandes deformaciones por intermedio de una metodología de *seguimiento de interfaces*.

Consideremos el dominio Ω_0 como el conjunto de los dominios de fluido y sólido en una configuración de referencia, como indica la Figura 1.9. El dominio Ω_0 admite la descomposición $\Omega_0 = \Omega_R^f \cup \Omega_0^s$, siendo Ω_R^f el subdominio correspondiente al fluido en una configuración de referencia convenientemente adoptada para formular el problema FSI y Ω_0^s el complemento correspondiente al subdominio de sólido, siendo esta descomposición de carácter disjunta⁸, es decir, $\Omega_R^f \cap \Omega_0^s = \emptyset$. Además, consideraremos Ω_0^s como la configuración *material* del sólido (libre de tensiones). En forma análoga, Ω_t representa la configuración espacial del sistema fluido-estructura al tiempo t y admite la descomposición

⁸Vale la pena notar que estos subdominios se tocan en una frontera que no aporta a las integrales de volumen.

$\Omega_t = \Omega_t^f \cup \Omega_t^s$ tal que $\Omega_t^f \cap \Omega_t^s = \emptyset$, siendo Ω_t^f y Ω_t^s las configuraciones espaciales correspondientes al subdominio de fluido y sólido, respectivamente. La interacción entre ambos subdominios tiene lugar en la superficie Γ^w , indicada según Γ_0^w en la configuración de referencia y Γ_t^w en la configuración espacial.

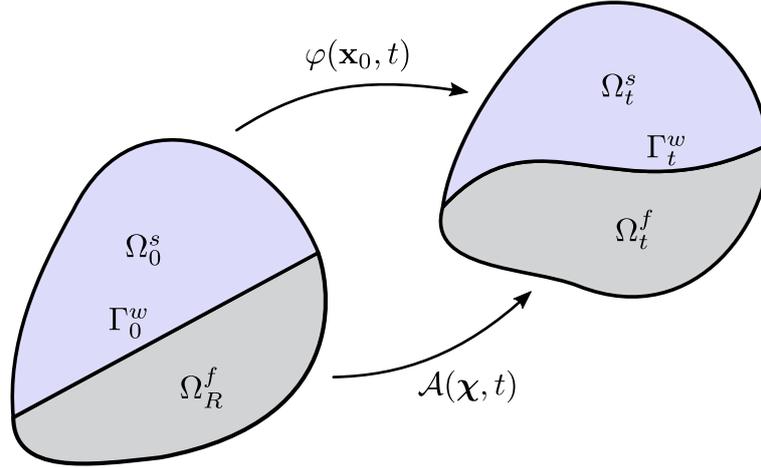


Figura 1.9: Configuraciones involucradas en el problema. El dominio Ω se descompone en los subdominios de fluido Ω^f y sólido Ω^s a través de la interfase Γ^w . Se muestra el dominio en sus configuraciones de referencia y en la configuración espacial al tiempo t . La configuración Ω_0^s es también considerada una configuración *material* (libre de tensiones).

De acuerdo con lo mencionado, el problema FSI consiste, por un lado, en obtener dominio Ω_t a medida que transcurre el tiempo. Por otro lado, en conjunto con el punto anterior, se deben obtener las presiones, velocidades del fluido y desplazamientos tanto del marco referencial ALE como del sólido. Por último, con estos campos resultantes, será posible el cálculo de tensiones tanto en el fluido como en el sólido.

A continuación enunciamos los mapeos utilizados para cada uno de los subdominios, de acuerdo con la formulación del problema de fluido en dominios deformables y sólidos en grandes deformaciones, vistos en las secciones 1.3 y 1.1, respectivamente.

Sea la aplicación \mathcal{A} que mapea un punto $\chi \in \Omega_R^f$ con un punto $\mathbf{x}_t \in \Omega_t^f$

$$\begin{aligned} \mathcal{A} : \Omega_R \rightarrow \Omega_t^f, \\ \chi \mapsto \mathbf{x}_t = \mathcal{A}(\chi, t). \end{aligned} \tag{1.147}$$

Esta aplicación puede ser caracterizada en forma equivalente por el campo de despla-

miento $\mathbf{u}^f = \mathbf{u}^f(\boldsymbol{\chi}, t)$ tal que

$$\mathbf{x}_t = \boldsymbol{\chi} + \mathbf{u}^f(\boldsymbol{\chi}, t) \quad \forall \boldsymbol{\chi} \in \Omega_0^f, \quad (1.148)$$

En forma análoga, para el subdominio de sólido se tiene la siguiente aplicación que mapea un punto $\mathbf{x}_0 \in \Omega_0^s$ con un punto $\mathbf{x}_t \in \Omega_t^s$

$$\begin{aligned} \varphi : \Omega_0 &\rightarrow \Omega_t^s, \\ \mathbf{x}_0 &\mapsto \mathbf{x}_t = \varphi(\mathbf{x}_0, t), \end{aligned} \quad (1.149)$$

la cual puede ser caracterizada por un campo de desplazamientos $\mathbf{u}^s = \mathbf{u}^s(\mathbf{x}_0, t)$ tal que

$$\mathbf{x}_t = \mathbf{x}_0 + \mathbf{u}^s(\mathbf{x}_0, t) \quad \forall \mathbf{x}_0 \in \Omega_0^s. \quad (1.150)$$

En problemas FSI, es usual asumir la adherencia del fluido sobre la pared del sólido. Esto, en el contexto de una metodología de *seguimiento de interfaces*, implica la siguiente condición sobre funciones de mapeo por parte de los subdominios de fluido y sólido

$$\mathcal{A}(\mathbf{y}, t) = \varphi(\mathbf{y}, t) \quad \forall \mathbf{y} \in \Gamma_0^w. \quad (1.151)$$

Como consecuencia, los campos de desplazamientos del subdominio de fluido y sólido son continuos sobre la frontera Γ^w . Vale la pena mencionar que el mapeo \mathcal{A} se trata de un mapeo ALE adecuado para la descripción de fluidos en dominios deformables mientras que el mapeo φ se trata de un mapeo Lagrangeano, apropiado para la descripción de sólidos. Hacemos notar que la ecuación (1.151) impone todas las componentes del desplazamiento asociado al mapeo ALE como condición de contorno sobre la interfase FSI. Sin embargo, una condición menos restrictiva es imponer sólo la componente normal para evitar que las superficies móviles se separen del dominio de fluido, permitiendo el deslizamiento entre ellas. La condición (1.151) es necesaria para mantener las discretizaciones de ambos subdominios sobre la interfase coincidentes mientras que en el caso de la condición menos restrictiva se pierde la continuidad de las funciones de peso, requiriendo, la utilización de multiplicadores de Lagrange.

Existen distintas estrategias de acoplamiento para problemas FSI. A efectos de simplificar la presentación, optaremos por una estrategia desagregada tipo *Dirichlet-to-Neumann* de desacople en subdominios [57], esto es, el subdominio de fluido hereda como condición de Dirichlet el campo de velocidades resultante por parte del sólido sobre la interfase

de acoplamiento Γ^w y luego el sólido recibe como condición de Neumann las fuerzas hidrodinámicas por parte del fluido sobre la misma interfase Γ^w . De esta manera, surgen los siguientes subproblemas: el problema de sólido y el problema de fluido, ambos presentados en las Secciones 1.1 y 1.3, respectivamente.

A continuación presentamos el problema de equilibrio correspondiente a cada subproblema a partir del PPV en la configuración espacial.

Formulación de equilibrio para el fluido

Hallar $(\mathbf{v}, p, \mathbf{u}^f) \in \text{Kin}_{\mathbf{v}} \times \mathcal{Q} \times \text{Kin}_{\mathbf{u}^f}$ tal que

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega_t} \rho \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega \right) + \int_{\Omega_t} \rho \operatorname{div}(\mathbf{v} \otimes (\mathbf{v} - \mathbf{v}_R)) \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega + \int_{\Omega_t} 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{v}}) \, d\Omega \\ & - \int_{\Omega_t} p \operatorname{div} \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega + \int_{\Omega_t} \hat{p} \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\Omega + \langle \mathcal{M}(\mathbf{u}^f), (\hat{\mathbf{u}}^f) \rangle_{\Omega_t} \\ & = \int_{\Omega_t} \rho \mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Omega - \int_{\Gamma_{N,t}} \pi \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, d\Gamma \quad \forall (\hat{\mathbf{v}}, \hat{p}, \hat{\mathbf{u}}^f) \in \text{Var}_{\mathbf{v}} \times \mathcal{Q} \times \text{Var}_{\mathbf{u}^f} \end{aligned} \quad (1.152)$$

Se asume que $\mathbf{u}^f = \bar{\mathbf{u}}^f$ y $\mathbf{v} = \mathbf{v}_R$ en Γ_t^w , siendo $\bar{\mathbf{u}}^f$ conocido en la frontera en función del tiempo. De igual modo, \mathbf{v}_R es la velocidad del marco referencial ALE que se calcula como la tasa de variación temporal de los desplazamientos \mathbf{u}^f , esto es, $\mathbf{v}_R = \frac{\partial \mathbf{u}^f}{\partial t}$. Estas condiciones definen la condición de no deslizamiento del fluido sobre la pared del sólido en Γ_t^w . Estos términos definirán la condición que el sólido impone sobre el subdominio de fluid cuando consideremos el acoplamiento FSI.

En cuanto a los espacios de soluciones cinemáticamente admisibles y su conjunto de variaciones quedan definidos

$$\text{Kin}_{\mathbf{v}} = \{ \mathbf{v} \in \mathbf{H}^1(\Omega_t) \mid \mathbf{v} = \mathbf{v}_R \text{ en } \Gamma_t^w \}, \quad (1.153)$$

$$\text{Kin}_{\mathbf{u}^f} = \{ \mathbf{u}^f \in \mathbf{H}^1(\Omega_t) \mid \mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \text{ en } \Gamma_t^w \}, \quad (1.154)$$

$$\text{Var}_{\mathbf{v}} = \{ \hat{\mathbf{v}} \in \mathbf{H}^1(\Omega_t) \mid \hat{\mathbf{v}} = \mathbf{0} \text{ en } \Gamma_t^w \}, \quad (1.155)$$

$$\text{Var}_{\mathbf{u}^f} = \{ \hat{\mathbf{u}}^f \in \mathbf{H}^1(\Omega_t) \mid \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{0} \text{ en } \Gamma_t^w \}, \quad (1.156)$$

$$\mathcal{Q} = \{ (p, \hat{p}) \in H^0(\Omega_t) \}. \quad (1.157)$$

Formulación de equilibrio para el sólido

Hallar $\mathbf{u} \in \text{Kin}_{\mathbf{u}}$ tal que

$$\int_{\Omega_t} \boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{u}} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}) d\Omega = \int_{\Omega_t} \rho \mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{u}} d\Omega + \int_{\Gamma_{N,t}} \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{u}} d\Gamma \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathbf{u}}, \quad (1.158)$$

En este caso consideramos una condición de Neumann sobre la frontera Γ_t^w correspondiente a una presión normal función del tiempo $\pi = \pi(t)$. Esta es la vía de acoplamiento con el fluido, siendo π la presión resultante del subproblema de fluido en la interfase de acoplamiento.

Los espacios de soluciones cinemáticamente admisibles y su conjunto de variaciones resultan

$$\text{Kin}_{\mathbf{u}^s} = \{\mathbf{u}^s \in \mathbf{H}^1(\Omega_t), \mathbf{u}^s = \bar{\mathbf{u}} \text{ en } \Gamma_{D,t}^s\}, \quad (1.159)$$

$$\text{Var}_{\mathbf{u}^s} = \{\hat{\mathbf{u}}^s \in \mathbf{H}^1(\Omega_t), \hat{\mathbf{u}}^s = \mathbf{0} \text{ en } \Gamma_{D,t}^s\}. \quad (1.160)$$

Acoplamiento Fluido-Estructura

Los subproblemas de fluido (1.152) y sólido (1.158) pueden acoplarse de acuerdo con las siguientes consideraciones: se reemplaza la condición de Neumann en el sólido $\pi(t)$ por la presión p resultante en Γ^w correspondiente al subdominio de fluido. Además, se reemplaza la condición de Dirichlet en el desplazamiento del marco referencial ALE ($\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}}$ en Γ^w) por otra, donde el desplazamiento del mapeo ALE se vincula al desplazamiento del sólido en la frontera de acoplamiento. De esta manera, se tiene para el problema de fluido la condición $\mathbf{u}^f = \mathbf{u}^s$ en Γ^w . Como consecuencia, el problema queda correctamente acoplado y en caso que se opte por un esquema desagregado de acoplamiento la implementación computacional se basa en la solución de cada subproblema por separado, debiéndose sólo acondicionar dichas variables en la interfase de acoplamiento.

Capítulo 2

Métodos de movimiento de malla

En este capítulo introducimos los Métodos de Movimiento de Malla. Estos surgen naturalmente como un componente clave al utilizar una descripción Arbitrariamente Lagrangeana-Euleriana (ALE), por ejemplo, en problemas de flujos incompresibles en dominios deformables.

En primer lugar, realizamos una breve introducción a modo de reseña bibliográfica acerca de la evolución de las distintas técnicas utilizadas en las últimas décadas en el contexto de los Métodos de Movimiento de Mallas.

Luego, presentamos uno de los métodos más generales basados en ecuaciones de la elasticidad lineal para el movimiento de mallas, el método *Mesh Jacobian-Based Stiffening* (MJBS). Esta estrategia de movimiento de mallas será utilizada en capítulos posteriores para contrastar resultados contra la metodología propuesta en este capítulo.

Finalmente, introducimos formalmente el principal aporte de esta tesis. El mismo consiste en una metodología biológicamente inspirada para la optimización y/o movimiento de mallas, la cual denominamos BIMO, según las siglas del término en inglés *Biologically-Inspired Mesh Optimizer*. En particular, se trata de un optimizador de mallas inspirado en la capacidad de adaptación de los tejidos biológicos. A su vez, dependiendo de las condiciones de borde del problema, la metodología puede tomar la función de método de movimiento de mallas en conjunto con la de optimizador.

2.1. Introducción

En los métodos de *seguimiento de interfaces* tales como las técnicas ALE [5, 20, 41] (ver Sección 1.3) y *Space-Time* [81, 82, 89, 90], a medida que el cálculo procede, la malla necesita ser actualizada para adaptarse a los cambios de la configuración espacial. Es de crucial importancia que este paso sea resuelto efectivamente. Dada la arbitrariedad de este tipo de estrategias, el modo en la que las mallas pueden ser actualizadas de forma óptima depende de varios factores, tales como la complejidad de la interfase y la geometría del dominio en términos generales, así como también la dinámica de este sistema (interfase y dominio general) y por último, de cómo la malla inicial es generada. En general, la actualización de mallas tiene dos componentes: mover la malla tanto como sea posible y remallar (es decir, generar un nuevo conjunto de elementos de manera parcial o completa) cuando se encuentra altamente distorsionada.

La mayoría de los problemas en ingeniería requieren modelos con geometrías complejas, para las cuales típicamente se requiere de un generador de mallas automático. Además, es deseable que el mismo cuente con aptitudes especiales, como la generación de estructuras de elementos tipo capa límite alrededor de interfaces donde se requiera capturar fuertes gradientes.

En los métodos de movimiento de malla en el contexto de fluidos, la única restricción que la malla debe cumplir es que en la interfase la velocidad normal de la malla debe coincidir con la velocidad normal del fluido¹. Luego, la malla puede moverse de cualquier manera deseada, con el principal objetivo de reducir la frecuencia de remallado. Principalmente en simulaciones 3D, si el remallado requiere el uso de un generador de mallas automático, el costo involucrado en esta etapa se vuelve una de las principales razones para tratar de reducir la frecuencia de remallado. Además del costo involucrado en la generación de la nueva malla, es necesario proyectar la solución de una malla a la otra. Naturalmente, esto involucra un proceso de búsqueda costoso, aunque factible de ser paralelizado eficazmente. Sin embargo, a este costo computacional hay que agregarle los errores inherentes a la proyección soluciones entre mallas, lo que resulta en incentivos necesarios para reducir las etapas de remallado.

A continuación comentamos brevemente algunas de las metodologías en el movimiento de mallas utilizadas en las últimas décadas. En Donea *et al.* [20], se colocaron resortes

¹Para el caso de mallas estrictamente conformes, es decir, a nivel discreto los nodos de los subdominios de fluido y sólido coinciden se suele requerir además que las velocidades tangenciales coincidan, es decir, la velocidad del fluido y la interfase coinciden tanto en su componente normal y tangencial.

lineales sobre las aristas de los elementos que componen la malla. Esquemas similares fueron desarrollados por Batina [3], en donde además se incluye un esquema predictor-corrector. En Farhat *et al.* [22], se propone la utilización de resortes torsionales para controlar el ángulo entre aristas de elementos. En problemas 3D, una versión más simple de este procedimiento se logra por intermedio de resortes semi-torsionales introducida por Zeng & Ethier [97], con los cuales se controla el ángulo del diedro formado en lugar del ángulo entre aristas. Vale destacar que todos los métodos mencionados hasta aquí están basados en algoritmos *locales*, es decir, el desplazamiento de los nodos se calcula uno por uno.

Otro tipo de técnicas de especial interés son aquellas basadas en métodos variacionales. Estos esquemas están motivados por la forma natural en la que se formulan sistemas variacionales elípticos, los cuales permiten incluir en forma natural e intuitiva controles de calidad de malla. Existen diversos esquemas para el denominado “suavizado” de mallas basado en problemas de optimización, teniendo como principal objetivo la mejora de los parámetros de calidad de la malla [60]. Además, los sistemas elípticos generalmente producen soluciones suaves, a diferencia de los algoritmos *locales* antes mencionados [93]. En ese sentido, Winslow [94] introduce primero estas ideas como parte de un problema potencial (es decir, como una ecuación de Laplace), en donde las aristas de las mallas juegan el rol de líneas equipotenciales. Luego, Saltzman & Brackbill [62] realiza modificaciones en el cálculo de las derivadas espaciales, lo cual puede interpretarse como el rol de una “conductividad” heterogénea en problemas térmicos. Siguiendo este esquema, Masud y Hughes [52] proponen una conductividad variable basada en parámetros de la malla, limitando de este modo el desplazamiento relativo entre nodos con el objetivo de impedir la inversión del Jacobiano de los elementos. Otra rama de problemas variacionales son aquellos basados en ecuaciones de elasticidad. Este esquema, en donde la malla de comporta como un material lineal elástico de propiedades mecánicas homogéneas, fue introducido por Lynch [51] en el contexto de la resolución de problemas con cambio de fase. Luego, Tezduyar *et al.* [80] mejora este enfoque al agregar endurecimiento selectivo “tirando”² el Jacobiano de la transformación del elemento *master* al elemento en el espacio físico. Este enfoque será denominado en trabajos posteriores como *Jacobian-based stiffening*. Tomando este método como punto de partida, el mismo fue sofisticado en [68] al incluir el parámetro *stiffening power* que regula el endurecimiento relativo entre ele-

²En el contexto de resolución de ecuaciones por FEM, entendemos por “tirar” a no considerar u omitir el Jacobiano de la transformación (o en todo caso, forzarlo a la unidad).

mentos de diferente tamaño. Recientemente en [76], este método fue renombrado a *Mesh Jacobian-Based Stiffening* (MJBS), para hacer énfasis en qué Jacobiano es utilizado para realizar el endurecimiento relativo³. En la misma línea, Tezduyar [77] introduce el método *Solid-Extension Mesh Moving Technique* (SEMMT). Esta técnica se focaliza en la captura de capas límites en problemas FSI que involucran grandes desplazamientos, separando el dominio de fluido en dos regiones bien diferenciadas una región con elementos de capa límite donde se quiere capturar fuertes gradientes en las cercanías al sólido y su complemento. La primera, utiliza propiedades de material para que se comporte de una manera más rígida y conserve la relación de aspecto de los elementos tipo capa límite en todo el movimiento, manteniendo control sobre la precisión con la cual se capturan las capas límites. La segunda, en cambio, se comporta de manera menos rígida con el objetivo de “absorber” grandes deformaciones, consecuencia de grandes desplazamientos de las interfases móviles. Además, se presentan dos opciones dentro de esta metodología: SEMMT-*Single Domain* (SD) y SEMMT-*Multiple Domain* (MD). En la primera se resuelve las ecuaciones de la elasticidad en todo el dominio en forma conjunta, mientras que en la segunda se resuelven las ecuaciones de elasticidad lineal en una estrategia de subdominios. En primer lugar se resuelve el dominio más rígido (cercano a la interfase móvil) con condiciones de Dirichlet dadas por el movimiento de la interfase y superficie de contacto entre ambos subdominios como tracción nula. En segundo lugar, se resuelve el dominio restante con las siguientes condiciones de Dirichlet: para la frontera común entre subdominios se impone el desplazamiento solución del primer paso de solución mientras que para la frontera externa de este subdominio las requeridas por el problema para abarcar convenientemente el dominio de solución.

Otro enfoque distinto propone Takizawa *et al.* [71], cuyo objetivo es “relajar” elementos distorsionados. En este procedimiento, denominado *Element Based Mesh Relaxation* (EBMR), los nodos se reubican para mejorar la calidad de algunos elementos sin alterar la topología de la malla. Esto se logra por intermedio de la resolución de ecuaciones en deformaciones finitas, en lugar del uso ecuaciones tradicionales de la elasticidad lineal en pequeños desplazamientos y deformaciones. Algunas de las principales fortalezas del EBMR son la versatilidad en el uso de diversas ecuaciones constitutivas para impulsar la relajación y la rigidización basada en aspectos geométricos al introducir una estrategia para seleccionar configuraciones libres de tensión ZSS incompatibles basadas por elementos.

³Como veremos más adelante, esta aclaración resulta necesaria en el contexto problemas que involucren grandes desplazamientos, en donde múltiples configuraciones surgen de manera natural, así como Jacobianos asociados a transformaciones entre ellas.

De esta manera, la relajación de mallas debe entenderse como la resolución de un problema de equilibrio mecánico con pretensiones (debido al apartamiento de los elementos de sus ZSS) que van disminuyendo a medida que la malla alcanza una configuración de autoequilibrio. Estas ideas fueron extendidas en una metodología de movimiento de mallas de baja distorsión [72], la cual se basa en un modelo constitutivo con refuerzo de fibras hiperelásticas y configuraciones ZSS optimizadas.

Durante el desarrollo de esta tesis compararemos resultados obtenidos entre las distintas variantes aportadas por el método de movimiento de mallas introducido y las técnicas “tradicionales”. En ese sentido, entenderemos por “tradicionales” aquellas basadas en ecuaciones de la elasticidad lineal, dado su amplio uso en la literatura [4, 44, 70, 70–72, 77–79, 85, 91]. En particular, consideramos la metodología MJBS la cual, dada su generalidad, contempla buena parte de todas las metodologías consideradas “tradicionales” y es un procedimiento estándar. Por esta razón, a efectos de integridad, presentamos el método de movimiento de mallas MJBS. Luego, presentamos formalmente el principal aporte en esta tesis, una metodología biológicamente inspirada para optimizar mallas que denominamos BIMO, según las siglas del término inglés *Biologically-Inspired Mesh Optimizer*.

2.2. *Mesh Jacobian-Based Method (MJBS)*

Consideremos el arreglo de configuraciones en la Figura 2.1. Definimos las siguientes configuraciones: la configuración inicial Ω_0 (con coordenadas \mathbf{x}_0) y la configuración de referencia—libre de tensiones— $\Omega_{\bar{t}}$ (con coordenadas $\mathbf{x}_{\bar{t}}$). Estas configuraciones se encuentran vinculadas a través de la aplicación \mathcal{A} quedando la *deformación* del dominio caracterizada por el tensor $\nabla_{\mathbf{x}_0}\mathcal{A}$ ⁴. Además, como la metodología MJBS hace uso de la discretización del problema para rigidizar en forma selectiva, adosamos un conjunto de elementos a estas configuraciones con el objetivo de mostrar el mecanismo que utiliza. La aplicación φ_m es el mapeo clásico de elementos finitos entre un elemento discreto en la configuración *master* (con coordenadas paramétricas ξ) y su contraparte en el espacio físico donde se realiza la integración de las ecuaciones, en este caso, la configuración $\Omega_{\bar{t}}$.

⁴Vale la pena reconocer que esta aplicación típicamente será la correspondiente al mapeo Arbitrariamente Lagrangeano-Euleriano (ALE), visto en la Sección 1.3, notando que las coordenadas \mathbf{x}_0 tienen el mismo rol que las coordenadas χ .

Estos elementos sufren una *deformación* caracterizada por el tensor

$$\nabla_{\xi} \varphi_m(\xi, \tilde{t}) = \frac{\partial \mathbf{x}_{\tilde{t}}}{\partial \xi}. \quad (2.1)$$

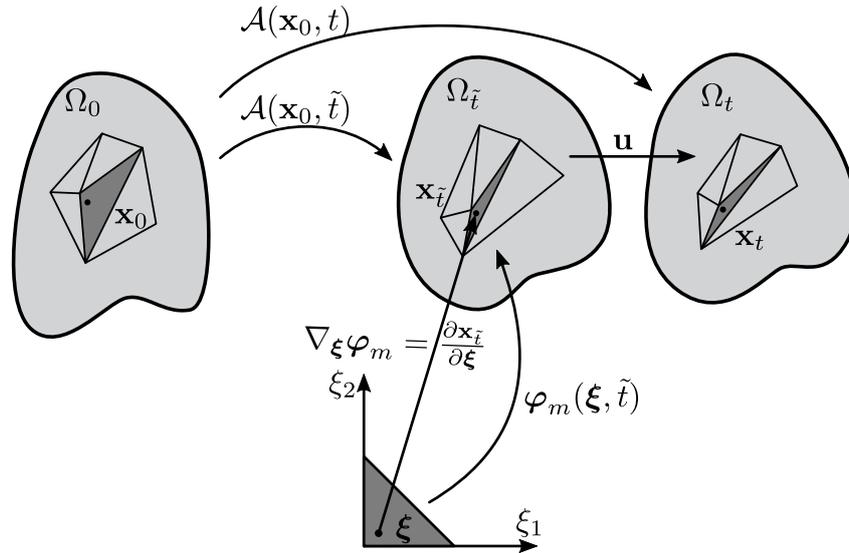


Figura 2.1: Configuraciones involucradas en la metodología MJBS. La configuración Ω_0 representa la configuración inicial del movimiento, $\Omega_{\tilde{t}}$ una configuración de equilibrio al instante de tiempo \tilde{t} y a su vez una libre de tensiones al tiempo t cuya configuración autoequilibrada está representada por Ω_t . Estas configuraciones se mapean a través de la aplicación \mathcal{A} . El desplazamiento \mathbf{u} se mide entre puntos $\mathbf{x}_{\tilde{t}}$ y \mathbf{x}_t según $\mathbf{u} = \mathbf{x}_t - \mathbf{x}_{\tilde{t}}$. Además, se adosa un conjunto de elementos sobre las mismas. En particular, se indica el mapeo entre un elemento en la configuración $\Omega_{\tilde{t}}$ con coordenadas $\mathbf{x}_{\tilde{t}}$ y su configuración *master* con coordenadas paramétricas ξ . El mecanismo de endurecimiento se basa en la deformación de este mapeo y queda caracterizada por el gradiente de la función de mapeo φ_m , es decir, $\nabla_{\xi} \varphi_m$.

Como ya fue mencionado, el MJBS utiliza la discretización del dominio para rigidizar selectivamente las ecuaciones. Por esta razón, a continuación introducimos el problema variacional del equilibrio mecánico asociado en un espacio de dimensión finita. El problema variacional se lee: encontrar $\mathbf{u}^h \in \text{Kin}_{\mathbf{u}}^h$ tal que

$$\int_{\Omega_{\tilde{t}}} \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}^h) \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{u},h} \left(\frac{J^R}{J^{M,h}} \right)^x d\Omega = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}}^h \in \text{Var}_{\mathbf{u}}^h, \quad (2.2)$$

indicando con el índice “h” aquellos campos que se encuentran definidos en la malla utilizando un espacio de dimensión finita de funciones. Así, se define el Jacobiano “de la

mallado” como el determinante de la expresión (2.1), esto es

$$J^{M,h} = \det \left(\frac{\partial \mathbf{x}_i^h}{\partial \boldsymbol{\xi}} \right). \quad (2.3)$$

Por otro lado, J^R es un parámetro global (arbitrario) para consistencia dimensional de las ecuaciones, χ es un parámetro denominado *stiffening power* que determina el endurecimiento relativo entre elementos de distinto volumen, $\boldsymbol{\varepsilon}(\cdot) = (\nabla(\cdot))^S$ el tensor gradiente simétrico, $\boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{u},h}$ el tensor de tensiones de Cauchy, el cual bajo la hipótesis de pequeños desplazamientos y deformaciones puede escribirse

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{u}} = \lambda \operatorname{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) \mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \quad (2.4)$$

siendo λ y μ las constantes de Lamé, \mathbf{I} el tensor identidad, y $\operatorname{tr}(\cdot) = (\cdot) \cdot \mathbf{I}$ el operador trazo. Por otro lado, los espacios de soluciones cinemáticamente admisibles junto a su espacio de variaciones admisibles resulta

$$\operatorname{Kin}_{\mathbf{u}}^h = \{ \mathbf{u}^h \in \mathbf{H}^{1,h}(\Omega_{\bar{i}}), \mathbf{u}^h = \bar{\mathbf{u}} \text{ en } \Gamma_{\bar{i}} \}, \quad (2.5)$$

$$\operatorname{Var}_{\mathbf{u}}^h = \{ \hat{\mathbf{u}}^h \in \mathbf{H}^{1,h}(\Omega_{\bar{i}}), \mathbf{u}^h = \mathbf{0} \text{ en } \Gamma_{\bar{i}} \}, \quad (2.6)$$

siendo $\mathbf{H}^{1h} \stackrel{\text{def}}{=} (H^{1h})^{n_{sd}}$ el espacio de dimensión finita de funciones vectoriales de n_{sd} dimensiones y H^{1h} el espacio de Hilbert de dimensión finita

$$H^{1h} = \{ \psi^h | \psi^h \in C^0(\Omega_{\bar{i}}), \psi^h|_{\Omega_e^e} \in \mathcal{P}^1, \forall \Omega_{\bar{i}}^e \in \mathcal{T}^h(\Omega_{\bar{i}}) \}, \quad (2.7)$$

siendo C^0 el espacio de funciones cuyas derivadas de orden 0 (esto es, la función en sí misma) son continuas entre las interfaces de los elementos, \mathcal{P}^1 el espacio de polinomios de interpolación lineal y $\mathcal{T}^h(\Omega_{\bar{i}})$ una triangulación de N_{el} elementos finitos que componen el dominio $\Omega_{\bar{i}}$, tal que $\Omega_{\bar{i}}^e \neq \emptyset, \forall e = 1, \dots, N_{el}$.

Como se verá más adelante en las secciones de casos resueltos, esta metodología presenta inconvenientes para conservar la calidad de malla en aquellas zonas que no se encuentran cercanas a las interfases móviles. Los mecanismos de rigidización por intermedio del Jacobiano de la transformación y el parámetro de endurecimiento χ , en conjunción, hace que aquellos elementos que no se encuentren en las cercanías de las interfases móviles y/o no sean rigidizados según el parámetro χ (mayor endurecimiento por χ) cumplen el rol de elementos de “sacrificio”, responsables de absorber altos niveles

de deformación. En el contexto de grandes desplazamientos, esta condición puede volverse prohibitiva por degradación de la malla en altos niveles e incluso inversión de Jacobianos. Por otro lado, esta metodología tiene como contra la falta de reversibilidad, esto es, una vez que los elementos alcanzan niveles elevados de deformación no tiene mecanismos de restauración. Esto implica que una vez se distorsionan no suelen recuperar una buena forma, lo cual, depende estrictamente del movimiento de las interfases móviles. En ese sentido, la metodología MJBS simplemente cuenta con mecanismos de protección de la forma de los elementos a través del Jacobiano de la transformación.

Esto nos llevó a repensar los aspectos fundamentales, teniendo en cuenta, los mecanismos de adaptación de los tejidos vivos, para mantener estructuras anatómicas con cierta integridad cuando actúan sobre ellos esfuerzos mecánicos debidos a las interacciones con el medio y con otros subsistemas del organismo. Como por ejemplo, la acción de las fibras de colágeno en las paredes arteriales que actúan como mecanismo de zuncho natural tendientes a limitar las dilataciones máximas de la pared arterial, a la vez que mantienen una gran distensibilidad dentro de un rango amplio de deformaciones tendientes a cumplir con las funciones de amortecimiento del pulso arterial en cuanto a limitar presiones pico alcanzadas en el interior de las mismas.

2.3. *Biologically-Inspired Mesh Optimizer (BIMO)*

Este metodología de optimización y/o movimiento de mallas se encuentra inspirada por la biomecánica de los tejidos vivos, en particular, aquellos en paredes arteriales. Por un lado, nos basamos en la mecánica de tejidos biológicos para proponer una formulación al problema de “relajación de mallas” [71]. Además, se encuentra en el marco de un método de movimiento de mallas basado en materiales hiperelásticos con fibras reforzadas y configuraciones de referencia libres de tensión (ZSS⁵) optimizadas [72]. Estas configuraciones ZSS deben entenderse como elementos con formas ideales arbitrariamente orientados, llamados elementos *objetivo*. Este esquema conduce a una configuración de referencia incompatible que introduce gran flexibilidad para definir formas de elementos “ideales”. Así, la relajación de mallas debe interpretarse como la resolución de un problema de equilibrio mecánico para la cual las pretensiones (debido al apartamiento de las formas ideales) se reducen a medida que la malla obtiene una configuración de autoequilibrio.

La metodología aquí propuesta, asume que el comportamiento constitutivo se corres-

⁵Siglas del término *Zero-Stress State*.

ponde con el de un modelo de doble constituyente compuesto de una sustancia de *ground* de carácter isótropo (similar a la elastina de la pared arterial) y fibras (similar al colágeno). Además, el diseño de este “pseudo-material” considera la predeformación que surge de una configuración libre de tensiones incompatible. Como novedades, consideramos la posibilidad de que las configuraciones libres de tensión sean, en general, distintas para cada constituyente. Además, se introduce un paradigma de crecimiento y remodelado (G&R⁶) [59] para definir el reclutamiento de las fibras y configuraciones libres de tensión función en una escala “pseudo-temporal”, potencialmente distinta a la escala de tiempo del problema de análisis.

Notablemente, consideramos este método como una técnica de propósito general de relajación de mallas, esto es, una técnica de movimiento y optimización de mallas al mismo tiempo. En ese sentido, modificamos apropiadamente las ecuaciones de equilibrio para considerar un balance de fuerzas nodales mediante la calidad de los elementos pertenecientes al entorno de dichos nodos, en lugar de su tamaño. Esto se logra a través de un endurecimiento selectivo de elementos para escalar fuerzas nodales considerando sólo la distorsión de los elementos. Con respecto a la configuración de referencia (libre de tensiones) del constituyente fibroso, seleccionamos la ZSS como el elemento de forma *objetivo* escalado en términos de un tamaño de arista característico en lugar del área o el volumen.

Vale la pena mencionar que la utilización de un marco mecanobiológico facilita la introducción de conceptos útiles, como pueden ser, movimientos con grandes desplazamientos y procesos de adaptación a las condiciones ambientales. Otra contribución de esta metodología está en reportar un conjunto de ideas conceptuales tomadas del campo de los tejidos vivos, con el objetivo de mejorar la robustez de los procedimientos de movimientos de mallas, los cuales se desempeñan razonablemente bien incluso en casos de muy alta deformación. Considerando la analogía mecánica del movimiento de mallas, notamos que tensiones elevadas surgen como consecuencia de elementos con mala forma. Esta condición puede ocurrir tanto en el contexto de optimización (por ejemplo, elementos con mala forma inicial) como en el contexto de movimiento de mallas (por ejemplo, durante movimientos que involucren grandes desplazamientos). Estas tensiones—sin límite—pueden resultar en inestabilidades y problemas de convergencia de los algoritmos propuestos. Los tejidos arteriales pueden encargarse de estas tensiones anómalas recurriendo al remodelado, en donde la configuración de reclutamiento de las fibras se adapta para limitar la deformación,

⁶Siglas del término *Growth and Remodeling*.

y por lo tanto las tensiones. En ese sentido, introducimos un procedimiento de adaptación pseudo-mecánico actuando como un algoritmo autoregulado que consistentemente tiene en cuenta las tensiones locales de un modo altamente selectivo, de acuerdo con la deformación local en donde fibras con altos niveles de deformación adaptan su configuración de referencia, de tal modo que las tensiones asociadas resulten limitadas. De esta manera, el esquema propuesto evita el uso aplicación de cargas en pasos y gana robustez.

En resumen, desde un punto de vista mecánico, la metodología propuesta se basa en la optimización de una dada discretización en el espacio Euclidiano representando a la malla como un pseudo-material reforzado con fibras en busca de un equilibrio mecánico debido a la existencia de tensiones internas desequilibradas. En primer lugar, definimos un problema en donde las fibras son depositadas en direcciones específicas, tal que la configuración inicial (es decir, la configuración—sin optimizar—asociada a la malla inicial) es desplazada del equilibrio mecánico. Las fibras crecen en una configuración ZSS desagregada denominada configuración virtual (incompatible) [45]. Luego, cada elemento en la configuración inicial es mapeado a una forma *objetivo* convenientemente seleccionada, es decir, elementos con la forma deseada. De esta manera, el tejido fibroso se pretensa en la configuración inicial y las tensiones internas intentan restaurar el elemento a su forma *objetivo* en la configuración virtual, esto es, su configuración ZSS. Al mismo tiempo, la substancia de *ground* tiene como configuración libre de tensiones tanto la configuración inicial (sin optimizar) como la configuración final autoequilibrada (como consecuencia del proceso de remodelado) y es responsable de estabilizar la fuerza impulsora de optimización determinada por el tejido fibroso.

2.3.1. Cinemática

Consideremos el arreglo de configuraciones de la Figura 2.2. La configuración virtual Ω_v (con coordenadas \mathbf{x}_v) representa una configuración hipotética de elementos libres de tensión en cuanto al material fibroso, que forman una red desagregada (cinemáticamente incompatible), la cual se asume como una configuración libre de tensiones (ZSS) del constituyente fibroso. Esta configuración virtual representa un conjunto de elementos *objetivo*, es decir, con la forma deseada para cada elemento de la malla. En este sentido, Takizawa *et al.* [71] presenta varias estrategias para seleccionar formas objetivo. En esta tesis postulamos una alternativa, la cual será desarrollada en la Sección 2.3.3.

La configuración inicial Ω_0 (con coordenadas \mathbf{x}_0) representa una configuración libre de cargas, la cual adquiere una *predeformación* debido a la deposición de fibras que se

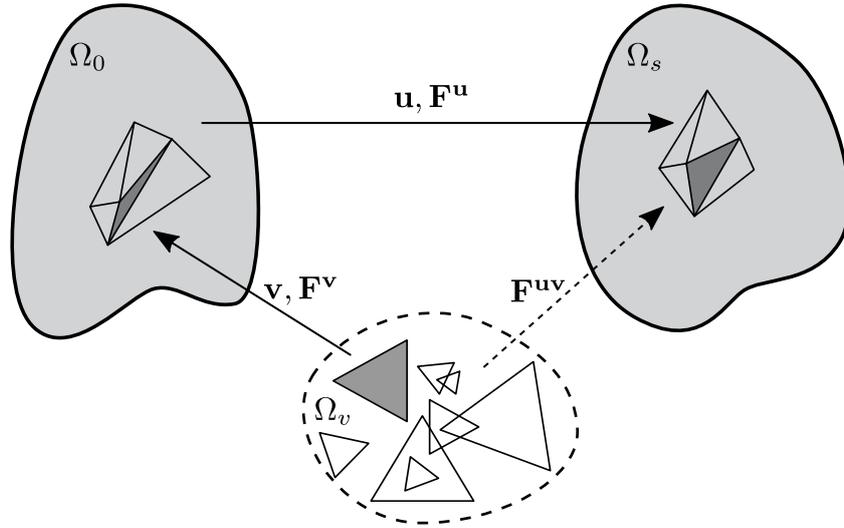


Figura 2.2: Configuraciones involucradas para el problema de optimización de la metodología BIMO. La configuración inicial Ω_0 se encuentra fuera de equilibrio mecánico debido a esfuerzos internos desarrollados por el tejido fibroso. La configuración Ω_0 es una configuración de referencia (libre de tensiones) para el *ground*. La configuración virtual Ω_v representa una configuración libre de tensiones incompatible para el tejido fibroso y se compone de elementos “objetivo”. La configuración de autoequilibrio Ω_s representa una configuración optimizada en términos de calidad de malla a nivel discreto. El campo de desplazamientos \mathbf{v} mapea cada punto del pseudo-material de la configuración Ω_v a la configuración inicial Ω_0 y el desplazamiento \mathbf{u} mapea la configuración Ω_0 a la configuración optimizada de autoequilibrio Ω_s . Los tensores \mathbf{F}^v y \mathbf{F}^u denotan los gradientes de deformación debido a los campos de desplazamientos \mathbf{v} y \mathbf{u} , respectivamente. Además, el tensor $\mathbf{F}^{uv} = \mathbf{F}^u \mathbf{F}^v$ representa la deformación total a la que se encuentran sujeta el tejido fibroso mientras que la deformación del *ground* es caracterizada por el tensor \mathbf{F}^u .

encuentran libres de tensión en la configuración virtual Ω_v . En consecuencia, el constituyente fibroso presenta cierto nivel de deformación en Ω_0 , el cual queda caracterizado para cada punto material por el tensor \mathbf{F}^v . De este modo, un segmento de fibra infinitesimal se mapea según

$$d\mathbf{x}_0 = \mathbf{F}^v d\mathbf{x}_v. \quad (2.8)$$

Este tensor caracteriza la deformación inicial (como consecuencia de la *predeformación* de las fibras) de la malla a ser optimizada (es decir, la configuración inicial Ω_0) respecto a la configuración óptima deseada Ω_v . Observar que esto resulta en una estrategia basada en elementos, como constituyentes de un continuo discretizado en subdominios, inicialmente representado por Ω_0 asociado a una malla inicial. Además, la configuración inicial

representa una configuración de referencia para el material de *ground* de tal manera que las tensiones de éste estarán asociadas al tensor \mathbf{F}^v que caracteriza las deformaciones de dicho material. Vale la pena mencionar que el desplazamiento \mathbf{v} se encuentra descrito en términos de una configuración definida *a priori*, por ejemplo, la configuración inicial Ω_0 . En la Sección 2.3.6 presentamos una estrategia para adaptar el desplazamiento virtual como parte de los pasos de optimización. En la Sección 2.3.6 presentamos una estrategia para redefinir adaptivamente configuraciones libres de tensión de ambos constituyentes, como una estrategia global de optimización.

La configuración espacial Ω_s (con coordenadas \mathbf{x}_s) es una configuración optimizada autoequilibrada. El tensor \mathbf{F}^u caracteriza la deformación espacial para cada punto material tal que cada segmento infinitesimal material se relaciona con su contraparte referencial según

$$d\mathbf{x}_s = \mathbf{F}^u d\mathbf{x}_0. \quad (2.9)$$

Las coordenadas materiales en las tres configuraciones mencionadas se mapean a través de los campos de desplazamientos \mathbf{u} y \mathbf{v} según

$$\mathbf{x}_s = \mathbf{x}_0 + \mathbf{u}(\mathbf{x}_0), \quad (2.10)$$

$$\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_v + \mathbf{v}(\mathbf{x}_0), \quad (2.11)$$

siendo el desplazamiento virtual \mathbf{v} un campo discontinuo, dado que mapea una configuración incompatible a una compatible, es decir, Ω_v a Ω_0 .

Vale la pena mencionar que el tensor \mathbf{F}^{uv} caracteriza la deformación total del constituyente fibroso, el cual además admite la descomposición $\mathbf{F}^{uv} = \mathbf{F}^u \mathbf{F}^v$.

2.3.2. Equilibrio Mecánico

El problema de equilibrio mecánico para el pseudo-material considerado en este método asume un régimen estático y ausencia de fuerzas externas. De este modo, las tensiones generadas en el pseudo-material adosado a la malla son de origen interno.

El problema variacional que caracteriza el autoequilibrio mecánico en la configuración espacial Ω_s surge en forma directa a partir del Principio de Potencia Virtual (PPV) y se lee:

encontrar $\mathbf{u} \in \text{Kin}_{\mathbf{u}}$ tal que

$$\int_{\Omega_s} (\boldsymbol{\sigma}_g^{\mathbf{u}} + \boldsymbol{\sigma}_f^{\mathbf{u}+\mathbf{v}}) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}) d\Omega = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathbf{u}}, \quad (2.12)$$

siendo $\boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}) = \frac{1}{2}(\nabla \hat{\mathbf{u}} + \nabla \hat{\mathbf{u}}^T)$ el tensor velocidad de deformación (∇ es el gradiente con respecto a las coordenadas \mathbf{x}_s), $\text{Kin}_{\mathbf{u}}$ es el espacio de soluciones cinemáticamente admisibles y $\text{Var}_{\mathbf{u}}$ su espacio de variaciones admisibles

$$\text{Kin}_{\mathbf{u}} = \{ \mathbf{u} \in \mathbf{H}^1(\Omega_s), \mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \text{ en } \Gamma_s \}, \quad (2.13)$$

$$\text{Var}_{\mathbf{u}} = \{ \hat{\mathbf{u}} \in \mathbf{H}^1(\Omega_s), \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{0} \text{ en } \Gamma_s \}. \quad (2.14)$$

siendo $\mathbf{H}^1(\Omega_s)$ el espacio de Hilbert usual (ver Sección 1.1) sobre el dominio Ω_s , cuya frontera es Γ_s .

Asumiendo comportamiento hiperelástico para ambos constituyentes, las tensiones asociadas al material de *ground* $\boldsymbol{\sigma}_g$ están relacionadas con el tensor de Piola-Kirchhoff de segunda especie \mathbf{S}_g según

$$\boldsymbol{\sigma}_g^{\mathbf{u}} = \frac{1}{J^{\mathbf{u}}} \mathbf{F}^{\mathbf{u}} \mathbf{S}_g(\mathbf{E}^{\mathbf{u}}) \mathbf{F}^{\mathbf{u}T}, \quad (2.15)$$

siendo el tensor Piola-Kirchhoff de segunda especie una función del tensor deformación de Green-Lagrange $\mathbf{E}^{\mathbf{u}} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^{\mathbf{u}T} \mathbf{F}^{\mathbf{u}} - \mathbf{I})$ a través de una ecuación constitutiva (ver Sección 2.3.4), y $J^{\mathbf{u}} = \det \mathbf{F}^{\mathbf{u}}$ es el Jacobiano asociado al campo de desplazamientos \mathbf{u} . En forma similar, las tensiones $\boldsymbol{\sigma}_f^{\mathbf{v}+\mathbf{u}}$ asociadas con el tejido fibroso se relacionan con el tensor de Piola-Kirchhoff de segunda especie \mathbf{S}_f mediante

$$\boldsymbol{\sigma}_f^{\mathbf{v}+\mathbf{u}} = \frac{1}{J^{\mathbf{u}\mathbf{v}}} \mathbf{F}^{\mathbf{u}\mathbf{v}} \mathbf{S}_f(\mathbf{E}^{\mathbf{u}\mathbf{v}}) \mathbf{F}^{\mathbf{u}\mathbf{v}T}, \quad (2.16)$$

siendo el tensor Piola-Kirchhoff de segunda especie una función del tensor deformación de Green-Lagrange $\mathbf{E}^{\mathbf{u}\mathbf{v}} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^{\mathbf{u}\mathbf{v}T} \mathbf{F}^{\mathbf{u}\mathbf{v}} - \mathbf{I})$ mediante un ecuación constitutiva convenientemente seleccionada (ver Sección 2.3.4), y $J^{\mathbf{u}\mathbf{v}} = \det \mathbf{F}^{\mathbf{u}\mathbf{v}}$ es el Jacobiano asociado al campo de desplazamientos $\mathbf{v} + \mathbf{u}$.

2.3.3. Configuración Virtual

Como ya mencionamos, concedemos a la malla de un pseudo-material inspirado por la mecanobiología de los tejidos vivos. En particular, hacemos uso de la mecánica de materiales hiperelásticos anisotrópicos pre-tensados compuestos por dos constituyentes, *ground* y fibras. Para el tejido fibroso, definimos formas objetivo “ideales” de elementos fibrosos como estados libres de tensión. Como consecuencia, el apartamiento de esta forma induce tensiones en las fibras que tienden a recuperar la forma ideal de la configuración libre de tensiones (ZSS). Además, esta configuración virtual es definida en forma análoga a la utilizada en la derivación de ecuaciones constitutivas para materiales elásticos con tensiones residuales [35, 45]. Siguiendo esta analogía, consideremos un conjunto de puntos materiales que forman la configuración Ω_0 del cuerpo. Esta configuración experimenta tensiones internas debido a la existencia de predeformación en diferentes partes del cuerpo. Consideremos ahora que la predeformación se relaja punto por punto para todo el conjunto de puntos materiales. Esta liberación de deformación produce así una configuración incompatible llamada “configuración virtual”, que denotaremos por Ω_v . Esta configuración resulta entonces compuesta por una forma material desagregada que asegura que cada punto esté libre de tensiones. Es importante mencionar, que la configuración virtual Ω_v es una configuración libre de tensiones (ZSS) para el tejido fibroso pero no para el material base.

En el contexto de optimización de mallas, consideramos que un conjunto finito de segmentos materiales (los elementos de la malla) son porciones desagregadas de tejido. Dentro de cada una de estas piezas de pseudo-material, el continuo es compatible en el sentido que un gradiente de deformación puede ser identificado. La incompatibilidad surge dado que cada una de ellas responde a una configuración ZSS elegida independientemente del resto.

Dado que partimos de un continuo discretizado, la configuración virtual Ω_v será función de la discretización de la malla. En ese sentido, en primera instancia nos concentraremos en mallas de tipo simplex lineales. Lo anterior no es limitativo ya que este procedimiento puede ser extendido a cualquier tipo de malla, por ejemplo, aquellas basadas en cuadriláteros y/o hexaedros, así como también elementos finitos de alto orden, con las consideraciones correspondientes para la selección de dicha configuración virtual. La Figura 2.3 muestra la configuración virtual para un elemento discreto y su entorno. Para un dado elemento simplex en Ω_0 (denotado por Ω_0^e), su contraparte virtual en Ω_v (denotado por Ω_v^e) se define

como el elemento simplex regular tal que Ω_0^e y Ω_v^e tengan la misma arista promedio. Vale la pena remarcar que esta selección podría variar dependiendo la aplicación, por ejemplo, la forma óptima podría ser seleccionada para que tenga un relación de aspecto determinada en el caso de elementos de capa límite.

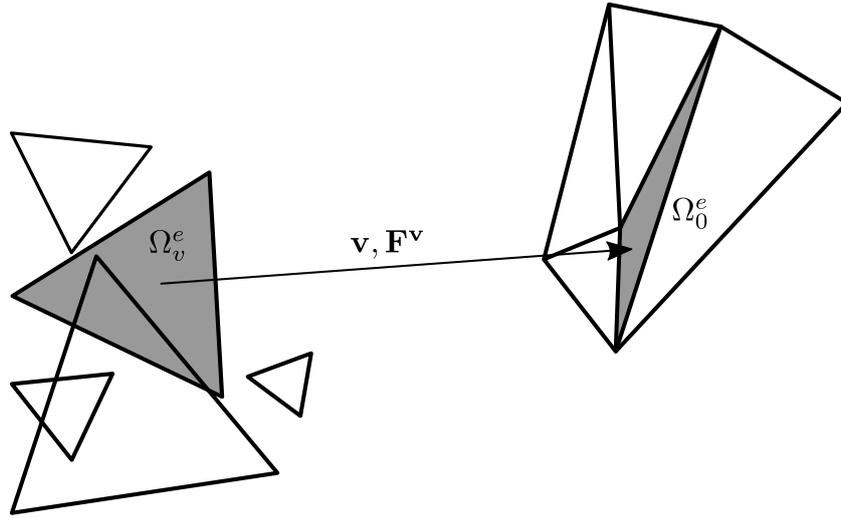


Figura 2.3: Proceso de ensamblaje para un elemento arbitrario Ω_0^e de la malla en Ω_0 mapeado desde su contraparte virtual Ω_v^e en Ω_v . El desplazamiento virtual Ω_v mapea una configuración incompatible Ω_v a Ω_0 y sus coordenadas están definidas elemento por elemento según $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_v + \mathbf{v}$, resultando la deformación correspondiente caracterizada por el tensor \mathbf{F}^v . El elemento e de la malla en Ω_v (es decir, Ω_v^e) es definido como el simplex regular tal que ambos Ω_v^e y Ω_0^e tengan la misma arista promedio.

2.3.4. Modelo constitutivo del pseudo-material

Uno de los modelos constitutivos más utilizados para representar tejidos biológicos reforzados con fibra viene dado por el *framework* presentado por Holzapfel *et al.* [39]. Para el problema mecánico expresado por la ecuación (2.12), proponemos un pseudo-material compuesto por dos fases, una substancia de *ground* (de carácter isotrópico) y otra substancia constituida por fibras convenientemente orientadas. Un aspecto singular de este pseudo-material es la configuración de referencia (libre de tensiones) adoptada para cada constituyente. Consideremos la disposición de cuatro configuraciones de la Figura 2.4. En esta figura, un elemento arbitrario con una única familia de fibras es situado en múltiples configuraciones, estas son, la inicial Ω_0 , la virtual Ω_v , la de autoequilibrio Ω_s , y finalmente, una nueva configuración introducida en este apartado, la de reclutamiento de fibras Ω_R (con coordenadas \mathbf{x}_R). Como ya fue mencionado, la configuración inicial Ω_0

sirve como configuración de referencia (libre de tensiones) para el *ground* mientras que la configuración—incompatible—virtual Ω_v sirve como referencia (libre de tensiones) para el constituyente fibroso. En Ω_s , el constituyente fibroso sufre una deformación caracterizada por el tensor $\mathbf{F}^{uv} = \mathbf{F}^u \mathbf{F}^v$. En ese sentido, vale la pena notar que el tensor \mathbf{F}^v puede no estar acotado por la falta de calidad de la malla inicial para la cual podrían existir elementos casi colapsados, lo cual podría conducir a tensiones iniciales sin límites o desproporcionadas frente a elementos de mejor calidad, causando inestabilidades y problemas de convergencia. Por esta razón, en esta tesis proponemos un proceso de reclutamiento [59, 92] diseñado para mitigar esta condición a través de la descomposición $\mathbf{F}^v = \mathbf{F}^{ve} \mathbf{F}^R$, siendo \mathbf{F}^{ve} la componente elástica del tensor \mathbf{F}^v (es decir, responsable de almacenar energía elástica), y la componente de reclutamiento \mathbf{F}^R (es decir, sin almacenamiento de energía elástica), siendo este último el responsable de caracterizar la deformación de la transformación de Ω_v a Ω_R , en donde las fibras están listas para tomar cargas.

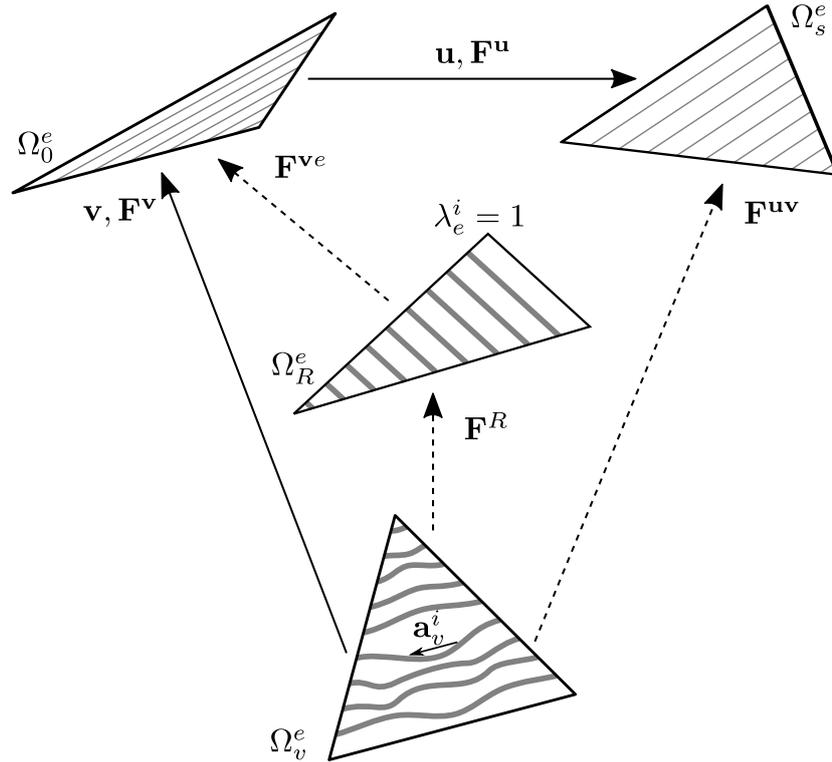


Figura 2.4: Modelo de reclutamiento de fibras. El elemento e de una dada malla en las configuraciones Ω_0 , Ω_v , Ω_s y Ω_R con una única familia de fibras (solo se indica la dirección \mathbf{a}_v^i en la configuración virtual para simplificar la presentación). El tensor gradiente de deformación se puede descomponer como $\mathbf{F}^v = \mathbf{F}^{ve} \mathbf{F}^R$, siendo \mathbf{F}^{ve} la componente elástica y \mathbf{F}^R la componente responsable del reclutamiento tal que cada fibra encuentra una configuración lista para tomar carga en Ω_R^e (es decir, $\lambda_e^i = 1$ en esta configuración).

Asumimos un modelo Neo-Hookean isotrópico para el constituyente de *ground*

$$\Psi_g = \frac{k_g}{2} (I_1^u - 3), \quad (2.17)$$

siendo k_g un parámetro del material que caracteriza la rigidez elástica y $I_1^u = \text{tr } \mathbf{C}$ es el primer invariante del tensor “derecho” de Cauchy-Green $\mathbf{C}^u = \mathbf{F}^{uT} \mathbf{F}^u$.

Para el constituyente fibroso, consideramos un modelo de N fibras

$$\Psi_f = \sum_{i=1}^N \frac{k_1^i}{2k_2^i} \left(e^{k_2^i((\bar{\lambda}_e^i)^2 - 1)} - 1 \right), \quad (2.18)$$

siendo k_1^i y k_2^i propiedades del material para la familia i de fibras y $\bar{\lambda}_e^i$ es el estiramiento elástico real de la familia i de fibras, el cual puede expresarse según

$$\bar{\lambda}_e^i = \frac{\bar{\lambda}^i}{\lambda_R^i}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (2.19)$$

siendo λ_R el estiramiento de reclutamiento y $\bar{\lambda}^i$ el estiramiento de la familia i de fibras, el cual puede medirse según

$$\bar{\lambda}^i = \sqrt{\mathbf{a}_v^i \cdot \bar{\mathbf{C}}^{uv} \mathbf{a}_v^i}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (2.20)$$

siendo $\bar{\mathbf{C}}^{uv} = (\det \mathbf{F}^{uv})^{-2/3} \mathbf{C}^{uv}$ el tensor derecho de Cauchy-Green isocorizado y $\mathbf{C}^{uv} = \mathbf{F}^{uvT} \mathbf{F}^{uv}$ el tensor derecho de Cauchy-Green para el tensor gradiente de deformación \mathbf{F}^{uv} . El estiramiento de reclutamiento λ_R es un parámetro heterogéneo que seleccionamos apropiadamente para prevenir altos valores de tensión debido a elevados niveles de deformación por parte de las fibras. En la Figura 2.5a se muestra el comportamiento bajo el cual las fibras son diseñadas, tal que el estiramiento λ_e se mantenga siempre dentro de un cierto rango, es decir, $[\lambda_{min}, \lambda_{max}]$, con el objetivo de acotar las tensiones iniciales.

De esta manera la función de reclutamiento propuesta $\lambda_R = \lambda_R(\lambda)$ para obtener el comportamiento deseado puede expresarse de la siguiente manera

$$\lambda_R^i = \begin{cases} \lambda^i / \lambda_{min} & \text{si } \lambda^i < \lambda_{min} \\ 1 & \text{si } \lambda_{min} \leq \lambda^i \leq \lambda_{max} \\ \lambda^i / \lambda_{max} & \text{si } \lambda^i > \lambda_{max} \end{cases} \quad i = 1, \dots, N, \quad (2.21)$$

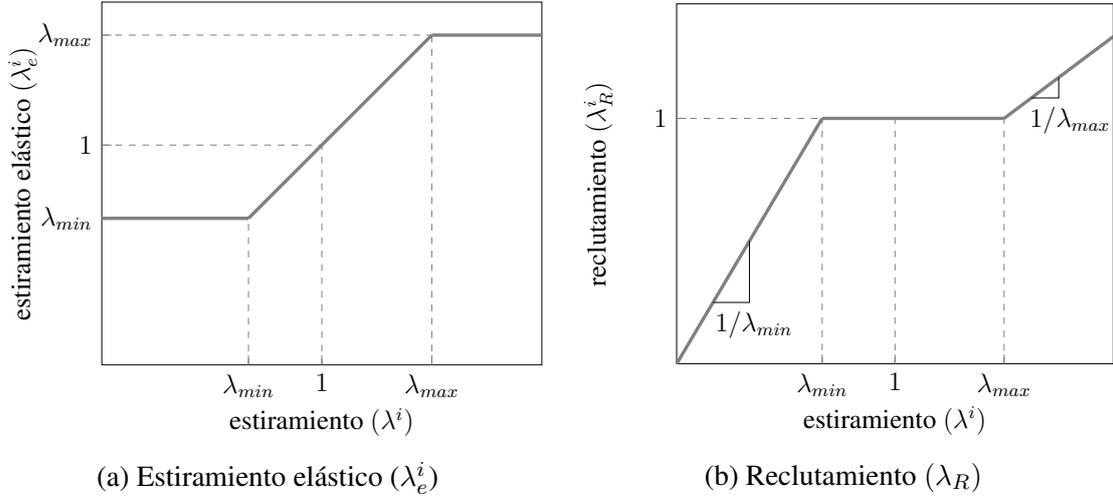


Figura 2.5: Modelo de reclutamiento de fibras como una función del estiramiento λ debido al mapeo entre las configuraciones Ω_v y Ω_s .

siendo parámetros λ_{min} y λ_{max} son tales que $\lambda_{min} = 1/\lambda_{max}$, siendo $\lambda_{max} \geq 1$.

La elección de la orientación de las fibras es otro parámetro del modelo. Por claridad de la presentación, la Figura 2.4 muestra una sola familia de fibras. Diferentes esquemas pueden obtenerse al considerar 2,3 y 6 distribuciones de fibras para mallas de elementos simples en 2D. Este criterio puede ser extendido con facilidad para geometrías 3D así como también para elementos finitos que no se correspondan con *simplices*. En particular, para problemas 2D se encuentra que un esquema basado en tres familias de fibras (orientadas según las aristas) se comporta de manera efectiva. Para problemas 3D, un modelo análogo de seis familias de fibras puede derivarse naturalmente, al igual que antes, con orientación de fibras según las direcciones de las aristas.

En este marco constitutivo, utilizamos los primeros dos términos de la expansión en serie de Taylor de la ecuación (2.18), esto es

$$\Psi_f = \sum_{i=1}^N \frac{k_1^i}{2} \left((\bar{\lambda}_e^i)^2 - 1 \right)^2 + \frac{k_1^i k_2^i}{4} \left((\bar{\lambda}_e^i)^2 - 1 \right)^4. \quad (2.22)$$

Para reducir el número de parámetros involucrados, asumimos propiedades de rigidez del material uniformes para las distintas familias de fibras, es decir

$$k_f = k_1^i, \quad i = 1, \dots, N, \quad (2.23)$$

mientras que para el parámetro de rigidez k_2^i se toma el valor de la literatura [37]

$$k_2^i = 0.5, \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.24)$$

Nótese que, como asumimos materiales hiperelásticos, las funciones de energía de deformación de las ecuaciones (2.17) y (2.18) se relacionan con el tensor de Piola-Kirchhoff de segunda especie de las ecuaciones (2.15) y (2.16), respectivamente, según

$$\mathbf{S}_g = \left. \frac{\partial \Psi_g}{\partial \mathbf{E}} \right|_{\mathbf{E}=\mathbf{E}^u}, \quad (2.25)$$

$$\mathbf{S}_f = \left. \frac{\partial \Psi_f}{\partial \mathbf{E}} \right|_{\mathbf{E}=\mathbf{E}^{uv}}. \quad (2.26)$$

Una particularidad a destacar, es que este pseudo-material introducido para el componente fibroso son fibras capaces de almacenar energía a la compresión, actuando como elementos de barras bidireccionales). De esta manera, se generan “fuerzas” restitutivas no sólo si las fibras se encuentran estiradas sino también “comprimidas” respecto de su longitud de referencia.

Por último, nótese que a mayores valores de λ_{max} , el pseudo-material se comportará más parecido a un esquema sin configuración de reclutamiento (es decir, $\mathbf{F}^R = \mathbf{I}$). Además, a medida que λ_{max} tiende a la unidad (es decir, $\lambda_{max} \rightarrow 1$) la deformación en las fibras desaparece y por lo tanto también su la fuerza impulsora asociada. Esto puede considerarse como un buen condicionamiento de los sistemas de ecuaciones y podría interpretarse como una metodología basada en elementos para mejorar la convergencia y robustez del método.

2.3.5. Endurecimiento basado en elementos

Para el problema mecánico formulado aquí, presentaremos un procedimiento estándar para endurecer elementos basado en el Jacobiano de la malla. En esta sección derivamos una estrategia de endurecimiento basada en elementos para optimizar y mover mallas de manera efectiva. En general, los mecanismos de endurecimiento de las técnicas tradicionales tienen la tendencia dejar sin efecto los mecanismos de optimización de la metodología propuesta. En contraste con el esquema convencional de preservar la forma de los elementos, en esta tesis proponemos un criterio para endurecer elementos que promueva el movimiento de los nodos considerando la medida de calidad de forma, en lugar del tamaño del elemento. Esto puede obtenerse a través de una selección apropiada de parámetros de endurecimiento, lo

cual nos permitirá obtener una metodología de optimización y movimiento de mallas que funcione en forma conjunta. Para realizar esto, utilizamos como punto de partida la técnica de endurecimiento por elementos introducida por Tezduyar *et al.* [79] y posteriormente generalizada por Stein *et al.* [68].

Con lo anterior en mente, consideremos la forma discreta del problema de equilibrio mecánico planteado en la ecuación (2.12), esto es

$$\int_{\Omega_s} \boldsymbol{\sigma}^h \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}^h) d\Omega = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}}^h \in \text{Var}_{\mathbf{u}}^h, \quad (2.27)$$

siendo $\boldsymbol{\sigma}^h = \boldsymbol{\sigma}_g^h + \boldsymbol{\sigma}_f^h$ la tensión asociada al pseudo-material introducido en la Sección 2.3.2. El índice “h” denota que el campo es definido en la malla, utilizando un espacio finito de funciones. En forma análoga a lo realizado por Stein *et al.* [68], la ecuación (2.27) se modifica de la siguiente manera

$$\int_{\Omega_s} \boldsymbol{\sigma}^h \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}^h) d\Omega \rightarrow \int_{\Omega_s} \boldsymbol{\sigma}^h \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}^h) \left(\frac{J^R}{J^{M,h}} \right)^\chi d\Omega, \quad (2.28)$$

forma que puede expandirse en una suma de integrales sobre los elementos, esto es

$$\int_{\Omega_s} \boldsymbol{\sigma}^h \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}^h) \left(\frac{J^R}{J^{M,h}} \right)^\chi d\Omega = \sum_e \int_{\Omega_s^e} \boldsymbol{\sigma}^h \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}^h) \left(\frac{J^R}{J_e^{M,h}} \right)^\chi. \quad (2.29)$$

Aquí, $J_e^{M,h} = \det(\partial \mathbf{x}_s^h / \partial \boldsymbol{\xi})$ es el Jacobiano de la malla correspondiente a la transformación del elemento e del dominio *master* (con coordenadas paramétricas $\boldsymbol{\xi}$) a Ω_s , J^R es un parámetro arbitrario global para consistencia dimensional de las ecuaciones, y χ es un parámetro de endurecimiento. De la expresión (2.29) se puede observar que las “fuerzas nodales” para el nodo I (en realidad, la fuerza dual asociada con la acción de movimiento de dicho nodo) queda determinada por la contribución de todos los elementos concurrentes a este nodo. Luego, estas fuerzas nodales no sólo dependen de la distorsión elástica, sino también de su tamaño⁷. Como estamos proponiendo un esquema para el que prevalezca la calidad de los elementos en lugar de su tamaño, es conveniente adoptar una estrategia de endurecimiento que no dependa del tamaño de los elementos para mover nodos. Esto puede lograrse a través de una selección adecuada del parámetro de endurecimiento χ . Sin pérdida de generalidad, en el siguiente desarrollo vamos a considerar funciones de forma lineales definidas en elementos tipo simplex en el espacio de dimensión finita Var^h . En

⁷Entenderemos por tamaño al área de los elementos en problemas 2D y a su volumen en el caso 3D.

este caso, es válida la siguiente expresión

$$\sum_e \int_{\Omega_e^e} \boldsymbol{\sigma}^h \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}^h) \left(\frac{J^R}{J_e^{M,h}} \right)^\chi d\Omega = \sum_e \boldsymbol{\sigma}_e \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\psi_I \mathbf{e}_r)_e \left(\frac{J^R}{J_e^{M,h}} \right)^\chi |\Omega_s|, \quad (2.30)$$

siendo ψ_I la función de forma asociada al nodo I , $\hat{\mathbf{u}} = \psi_I \mathbf{e}_r$ la acción de movimiento virtual asociada con \mathbf{e}_r la dirección espacial r en el espacio Euclidiano. Además, $|\Omega_s|$ es el tamaño del elemento e . Para elementos que no sean *simplices* pueden derivarse expresiones analíticas equivalentes. El estado tensional $\boldsymbol{\sigma}_e$ se define en términos de una función de energía que sólo depende de la calidad del elemento e (ver Sección 2.3.4). De este modo, es posible elegir χ tal que el balance de potencia virtual para el nodo I sea independiente del tamaño de los elementos asociados al soporte compacto de la función de forma ψ_I . Esta propiedad puede verificarse si se cumple que el integrando a nivel discreto \mathcal{I}^h , correspondiente a la expresión (2.30)

$$\mathcal{I}^h = \boldsymbol{\varepsilon}(\psi_I \mathbf{e}_r)_e \left(\frac{J^R}{J_e^{M,h}} \right)^\chi |\Omega_s|, \quad (2.31)$$

sea tal que

$$\mathcal{I}^h \approx \mathcal{O}(1). \quad (2.32)$$

Podemos aproximar el orden de magnitud de \mathcal{I}^h de la siguiente manera

$$\mathcal{I}^h = \boldsymbol{\varepsilon}(\psi_I \mathbf{e}_r)_e \left(\frac{J^R}{J_e^{M,h}} \right)^\chi |\Omega_s| \approx h^{-1} \left(\frac{1}{h^{n_{sd}}} \right)^\chi h^{n_{sd}} = h^{-1-\chi n_{sd}+n_{sd}}, \quad (2.33)$$

en donde se consideraron los siguientes órdenes de magnitud: $\boldsymbol{\varepsilon}(\psi_I \mathbf{e}_r)_e \approx h^{-1}$, $(J_e^M)^{-\chi} \approx h^{-\chi n_{sd}}$, y $|\Omega_s| \approx h^{n_{sd}}$, siendo h una longitud característica y n_{sd} la dimensión del espacio Euclidiano. Luego, para garantizar que el balance de potencia en los nodos no dependa del tamaño, se puede seleccionar

$$-1 - \chi n_{sd} + n_{sd} = 0. \quad (2.34)$$

En consecuencia, la ecuación variacional (2.27) se modifica de acuerdo con la expresión (2.28) tomando

$$\boldsymbol{\chi} = 1 - \frac{1}{n_{sd}}. \quad (2.35)$$

2.3.6. Remodelado del pseudo-material

A continuación describimos el proceso de remodelado considerado en esta tesis para ambos constituyentes del modelo constitutivo considerado para el pseudo-material. Al remodelar, damos a entender que la configuración de referencia (libre de tensiones) de cada componente se adapta en un proceso de relajación de tensiones. Observar que de otra manera la configuración autoequilibrada será subóptima ya que el material base estará impidiendo que las fibras puedan devolver los elementos a una configuración lo más cercana posible a la forma ideal. Consideremos ahora que las configuraciones Ω_0 y Ω_s varían según el tiempo, es decir, $\Omega_0(\tau)$ y $\Omega_s(\tau)$, siendo τ el pseudo-tiempo. Nótese que, como consecuencia del remodelado, la substancia de *ground* puede relajar el estado de tensiones resultante en la configuración de autoequilibrio $\Omega_s(\tau)$. Además, la adaptación de $\Omega_0(\tau)$ implica redefinir Ω_v , dado que esta última depende de la primera (ver Sección 2.3.3). Estos mecanismos son responsables de ajustar la fuerza impulsora de optimización, permitiendo al tejido fibroso continuar con el proceso de optimización. Observar que entre otras cosas, en la medida que la forma de los elementos mejora, el tensor \mathbf{F}^R tenderá a la unidad (es decir, $\mathbf{F}^R \rightarrow \mathbf{I}$).

Consideremos el proceso de adaptación discreto en el pseudo-tiempo de la Figura 2.6. Al tiempo t_{n+1} , la configuración Ω_{t_n} (con coordenadas \mathbf{x}_{t_n}) es una configuración de referencia (libre de tensiones) para la substancia de *ground*. La configuración virtual Ω_{v_n} (con coordenadas \mathbf{x}_{v_n}), definida elemento por elemento como se detalla en la Sección 2.3.3, representa una configuración de referencia (libre de tensiones) incompatible para las fibras. La configuración $\Omega_{t_{n+1}}$ es una configuración de autoequilibrio, es decir, la configuración óptima asociada a Ω_{t_n} . Nótese que las configuraciones Ω_{t_n} , $\Omega_{t_{n+1}}$, y Ω_{v_n} , para un dado paso de tiempo, tienen el mismo rol que aquellas definidas en la Sección 2.3.1, es decir, Ω_0 , Ω_s , y Ω_v , respectivamente, esquematizadas en la Figura 2.2.

El remodelado del pseudo-material se lleva a cabo a través de la estrategia descrita en el Algoritmo 1. Para cada paso de pseudo-tiempo se resuelve el problema de equilibrio mecánico no lineal (ver abajo). Aquí, las configuraciones Ω_t y Ω_{v_n} son conocidas y permanecen fijas. Como resultado de este paso, se obtiene la configuración de autoequilibrio $\Omega_{t_{n+1}}$ (con coordenadas $\mathbf{x}_{t_{n+1}} = \mathbf{x}_{t_n} + \mathbf{u}_{n+1}$). Luego, se procede con el remodelado de los constituyentes: la substancia de *ground* actualiza su configuración de referencia de Ω_{t_n} a $\Omega_{t_{n+1}}$ y el tejido fibroso de Ω_{v_n} a $\Omega_{v_{n+1}}$. Nótese que la configuración virtual $\Omega_{v_{n+1}}$ debe ser computada a través de la ya conocida $\Omega_{t_{n+1}}$, como se detalla en la Sección 2.3.3. Esta etapa

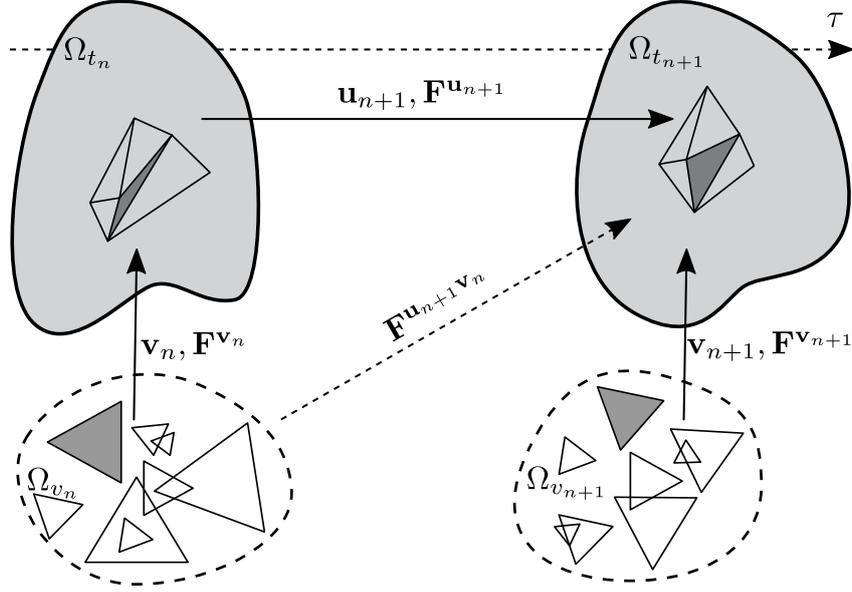


Figura 2.6: Configuraciones para el problema de optimización con remodelado de los constituyentes. Las configuraciones Ω_{t_n} , $\Omega_{t_{n+1}}$, y Ω_{v_n} tiene el mismo rol que las configuraciones Ω_0 , Ω_s , y Ω_v , respectivamente, de la Figura 2.2.

de remodelado se realiza de manera instantánea una vez que la configuración $\Omega_{t_{n+1}}$ es conocida. Luego, el algoritmo de remodelado se llama nuevamente en el siguiente paso de pseudo-tiempo (τ). Este proceso iterativo se lleva adelante hasta alcanzar la convergencia en el campo \mathbf{u}_{n+1} (es decir, $\mathbf{u}_{n+1} \rightarrow \mathbf{0}$).

El problema de equilibrio mecánico enunciado en la ecuación (2.27) con relajación del pseudo-material se lee: encontrar $\mathbf{u}_{n+1} \in \text{Kin}_{\mathbf{u}_{n+1}}$ tal que

$$\int_{\Omega_{t_{n+1}}} (\boldsymbol{\sigma}_g^{\mathbf{u}_{n+1}} + \boldsymbol{\sigma}_f^{\mathbf{v}_{n+1} + \mathbf{u}_{n+1}}) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}_{n+1}) \left(\frac{J^R}{J_{n+1}^M} \right)^x d\Omega = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}}_{n+1} \in \text{Var}_{\mathbf{u}_{n+1}}, \quad (2.36)$$

siendo $\boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}_{n+1}) = \frac{1}{2}(\nabla \hat{\mathbf{u}}_{n+1} + \nabla \hat{\mathbf{u}}_{n+1}^T)$ el tensor velocidad de deformación, $J_{n+1}^M = \det(\partial \mathbf{x}_{t_{n+1}} / \partial \boldsymbol{\xi})$ el Jacobiano de la malla del mapeo desde el dominio *master* (con coordenadas $\boldsymbol{\xi}$) a $\Omega_{t_{n+1}}$, J^R un parámetro global arbitrario para consistencia dimensional de las ecuaciones. Además, los espacios de acciones de movimiento cinemáticamente admisibles junto a su asociado de variaciones admisibles, resultan

$$\text{Kin}_{\mathbf{u}_{n+1}} = \{ \mathbf{u}_{n+1} \in \mathbf{H}^1(\Omega_{t_{n+1}}), \mathbf{u}_{n+1} = \bar{\mathbf{u}} \text{ en } \Gamma_{t_{n+1}} \}, \quad (2.37)$$

$$\text{Var}_{\mathbf{u}_{n+1}} = \{ \hat{\mathbf{u}}_{n+1} \in \mathbf{H}^1(\Omega_{t_{n+1}}), \hat{\mathbf{u}}_{n+1} = \mathbf{0} \text{ en } \Gamma_{t_{n+1}} \}, \quad (2.38)$$

Algoritmo 1: Algoritmo de remodelado.

Loop en pseudo-tiempo (τ)

Loop no lineal para el problema de equilibrio mecánico de la ecuación (2.36)

Etapas de remodelado. Adaptación de las configuraciones de referencia:

- material *ground*, $\Omega_{t_n} \rightarrow \Omega_{t_{n+1}}$
- pseudo-material (tejido fibroso), $\Omega_{v_n} \rightarrow \Omega_{v_{n+1}}(\Omega_{t_{n+1}})$

Chequeo de convergencia a través del campo \mathbf{u}_{n+1}

siendo $\mathbf{H}^1(\Omega_{t_{n+1}})$ el espacio de Hilbert usual (ver Sección 1.1) sobre el dominio $\Omega_{t_{n+1}}$, cuya frontera es $\Gamma_{t_{n+1}}$.

Las tensiones asociadas con el constituyente de *ground* resultan

$$\boldsymbol{\sigma}_g^{\mathbf{u}_{n+1}} = \frac{1}{J^{\mathbf{u}_{n+1}}} \mathbf{F}^{\mathbf{u}_{n+1}} \mathbf{S}_g(\mathbf{E}^{\mathbf{u}_{n+1}}) \mathbf{F}^{\mathbf{u}_{n+1}T}, \quad (2.39)$$

siendo $\mathbf{E}^{\mathbf{u}_{n+1}} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^{\mathbf{u}_{n+1}T} \mathbf{F}^{\mathbf{u}_{n+1}} - \mathbf{I})$ y $J^{\mathbf{u}_{n+1}} = \det \mathbf{F}^{\mathbf{u}_{n+1}}$. Por otro lado, las tensiones asociadas al componente fibroso son

$$\boldsymbol{\sigma}_f^{\mathbf{v}_n + \mathbf{u}_{n+1}} = \frac{1}{J^{\mathbf{u}_{n+1} \mathbf{v}_n}} \mathbf{F}^{\mathbf{u}_{n+1} \mathbf{v}_n} \mathbf{S}_g(\mathbf{E}^{\mathbf{u}_{n+1} \mathbf{v}_n}) \mathbf{F}^{\mathbf{u}_{n+1} \mathbf{v}_nT}, \quad (2.40)$$

en donde el tensor $\mathbf{F}^{\mathbf{u}_{n+1} \mathbf{v}_n}$ admite la descomposición $\mathbf{F}^{\mathbf{u}_{n+1} \mathbf{v}_n} = \mathbf{F}^{\mathbf{u}_{n+1}} \mathbf{F}^{\mathbf{v}_n}$, siendo $\mathbf{F}^{\mathbf{u}_{n+1}}$ el tensor gradiente de deformación que caracteriza el mapeo de Ω_{t_n} a $\Omega_{t_{n+1}}$, $\mathbf{F}^{\mathbf{v}_n}$ el tensor gradiente de deformación que caracteriza el mapeo de Ω_{v_n} a Ω_{t_n} , y $J^{\mathbf{u}_{n+1} \mathbf{v}_n} = \det \mathbf{F}^{\mathbf{u}_{n+1} \mathbf{v}_n}$. El tensor de Piola-Kirchhoff de segunda especie es una función del tensor de deformación de Green-Lagrange $\mathbf{E}^{\mathbf{u}_{n+1} \mathbf{v}_n} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^{\mathbf{u}_{n+1} \mathbf{v}_nT} \mathbf{F}^{\mathbf{u}_{n+1} \mathbf{v}_n} - \mathbf{I})$.

2.3.7. Proceso de linealización del problema mecánico

La linealización del problema variacional (2.36) se lleva a cabo escribiendo el problema en la configuración conocida Ω_{t_n} y luego aplicando un procedimiento estándar a través de la metodología de Newton-Raphson en base a las expresiones resultantes en Ω_{t_n} .

Consideremos ahora el problema de equilibrio de la ecuación (2.36) en la configuración Ω_{t_n} . Para mayor claridad en la notación, omitimos los índices $n + 1$ y n en los campos de desplazamientos \mathbf{u} y \mathbf{v} (así como también en las cantidades relacionadas a ellos, tales como $\mathbf{F}^{\mathbf{u}}$ y $\mathbf{F}^{\mathbf{v}}$), respectivamente. Así, el problema de equilibrio mecánico expresado en la

configuración Ω_{t_n} puede plantearse de la siguiente manera: encontrar $\mathbf{u} \in \text{Kin}_{\mathbf{u}_n}$ tal que

$$\int_{\Omega_{t_n}} \left(\mathbf{S}_g(\mathbf{E}^v) + \frac{1}{J^v} \mathbf{F}^v \mathbf{S}_f(\mathbf{E}^{uv}) \mathbf{F}^{vT} \right) \cdot \dot{\mathbf{E}}(\hat{\mathbf{u}}) \left(\frac{J^R}{J^M} \right)^x d\Omega = 0$$

$$\forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathbf{u}_n}, \quad (2.41)$$

siendo $\dot{\mathbf{E}}(\hat{\mathbf{u}}) = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^{uT} \nabla \hat{\mathbf{u}} + \nabla \hat{\mathbf{u}}^T \mathbf{F}^u)$ y $J^v = \det \mathbf{F}^v$. Además, los espacios de acciones de movimiento cinemáticamente admisibles $\text{Kin}_{\mathbf{u}_n}$ junto a su asociado de variaciones admisibles $\text{Var}_{\mathbf{u}_n}$ resultan

$$\text{Kin}_{\mathbf{u}_n} = \{ \mathbf{u}_n \in \mathbf{H}^1(\Omega_{t_n}), \mathbf{u}_n = \bar{\mathbf{u}} \text{ en } \Gamma_{t_n} \}, \quad (2.42)$$

$$\text{Var}_{\mathbf{u}_n} = \{ \hat{\mathbf{u}}_n \in \mathbf{H}^1(\Omega_{t_n}), \hat{\mathbf{u}}_n = \mathbf{0} \text{ en } \Gamma_{t_n} \}. \quad (2.43)$$

siendo $\mathbf{H}^1(\Omega_{t_n})$ el espacio de Hilbert usual (ver Sección 1.1) sobre el dominio Ω_{t_n} , cuya frontera es Γ_{t_n} .

El problema variacional (2.41) puede escribirse como la siguiente forma compacta: hallar $\mathbf{u} \in \text{Kin}_{\mathbf{u}_n}$ tal que

$$\langle \mathcal{R}_n(\mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle_{\Omega_n} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathbf{u}_n}. \quad (2.44)$$

La linealización por el método de Newton-Raphson para la expresión anterior alrededor de un punto $\mathbf{u}^k \in \text{Kin}_{\mathbf{u}_n}$ se lee: hallar $\delta \mathbf{u} \in \text{Var}_{\mathbf{u}_n}$ tal que

$$\langle \mathcal{R}_n(\mathbf{u}^k), \hat{\mathbf{u}} \rangle_{\Omega_n} + \left. \frac{d}{d\epsilon} \langle \mathcal{R}_n(\mathbf{u}^k + \epsilon \delta \mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle \right|_{\epsilon=0} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathbf{u}_n}, \quad (2.45)$$

siendo $\left. \frac{d}{d\epsilon} (\cdot) \right|_{\epsilon=0}$ el operador derivada de Gâteaux.

Al realizar la perturbación $\epsilon \delta \mathbf{u}$ en aquellos campos que dependen de \mathbf{u} , introducimos el índice ϵ a modo indicativo de campos perturbados. Por ejemplo, $\mathbf{F}_\epsilon^u = \mathbf{I} + \nabla (\mathbf{u} + \epsilon \delta \mathbf{u}) = \mathbf{F}^u + \epsilon \nabla \delta \mathbf{u}$. Para simplificar la notación, omitimos el índice k indicando campos evaluados en la iteración previa. Luego, el residuo perturbado (segundo termino de la ecuación (2.45))

resulta

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\epsilon} \langle \mathcal{R}_n(\mathbf{u}^k + \epsilon \delta \mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle \Big|_{\epsilon=0} &= \\ \int_{\Omega_{t_n}} \frac{d}{d\epsilon} \left[\left(\mathbf{S}_{g,\epsilon} + \frac{1}{J^v} \mathbf{F}^v \mathbf{S}_{f,\epsilon} \mathbf{F}^{vT} \right) \cdot \dot{\mathbf{E}}_\epsilon(\hat{\mathbf{u}}) \left(\frac{J^R}{J_\epsilon^M} \right)^\chi \right] \Big|_{\epsilon=0} d\Omega \\ \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathbf{u}_n}, \end{aligned} \quad (2.46)$$

siendo $\dot{\mathbf{E}}_\epsilon(\hat{\mathbf{u}}) = \frac{1}{2} (\mathbf{F}_\epsilon^u \nabla \hat{\mathbf{u}} + \nabla \hat{\mathbf{u}}^T \mathbf{F}_\epsilon^u)$. Denotamos con $\mathbf{S}_{g,\epsilon} = \mathbf{S}_g(\mathbf{E}_\epsilon^u)$ y $\mathbf{S}_{f,\epsilon} = \mathbf{S}_f(\mathbf{E}_\epsilon^{uv})$ a los tensores de Piola-Kirchhoff de segunda especie perturbados (ver ecuaciones (2.25) y (2.26)). Utilizando las expresiones del Apéndice A para el cálculo de las derivadas con respecto al parámetro ϵ y posterior evaluación en $\epsilon = 0$, se obtiene la siguiente expresión de la tangente del residuo

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\epsilon} \langle \mathcal{R}_n(\mathbf{u}^k + \epsilon \delta \mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle \Big|_{\epsilon=0} &= \\ &= \int_{\Omega_{t_n}} \left(\frac{\partial \mathbf{S}_g}{\partial \mathbf{E}^u} (\nabla \delta \mathbf{u}^T \mathbf{F}^u)^T \right) \cdot \dot{\mathbf{E}}(\hat{\mathbf{u}}) \left(\frac{J^R}{J^M} \right)^\chi d\Omega \\ &+ \int_{\Omega_{t_n}} \left(\frac{1}{J^v} \mathbf{F}^v \frac{\partial \mathbf{S}_f}{\partial \mathbf{E}^{uv}} (\mathbf{F}^{uvT} \nabla \delta \mathbf{u} \mathbf{F}^v)^S \mathbf{F}^{vT} \right) \cdot \dot{\mathbf{E}}(\hat{\mathbf{u}}) \left(\frac{J^R}{J^M} \right)^\chi d\Omega \\ &+ \int_{\Omega_{t_n}} \left(\mathbf{S}_g + \frac{1}{J^v} \mathbf{F}^v \mathbf{S}_f \mathbf{F}^{vT} \right) \cdot (\nabla \delta \mathbf{u}^T \nabla \hat{\mathbf{u}})^T \left(\frac{J^R}{J^M} \right)^\chi d\Omega \\ &- \int_{\Omega_{t_n}} \left(\mathbf{S}_g + \frac{1}{J^v} \mathbf{F}^v \mathbf{S}_f \mathbf{F}^{vT} \right) \cdot \dot{\mathbf{E}}(\hat{\mathbf{u}}) \chi (\mathbf{F}^{u-T} \cdot \nabla \delta \mathbf{u})^T \left(\frac{J^R}{J^M} \right)^\chi d\Omega \\ \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathbf{u}_n} \end{aligned} \quad (2.47)$$

Como resultado, en cada iteración de Newton-Raphson se obtiene una nueva configuración $\Omega_{t_{n+1}}^{k+1}$ cuyas coordenadas son $\mathbf{x}_{t_{n+1}}^{k+1} = \mathbf{x}_{t_n} + \mathbf{u}_{n+1}^{k+1}$, siendo $\mathbf{u}_{n+1}^{k+1} = \mathbf{u}_{n+1}^k + \delta \mathbf{u}$. A continuación, omitimos el índice k para simplificar la notación. Con esta consideración, el sistema lineal a resolver es: dado \mathbf{u} (desplazamiento en la iteración anterior) hallar $\delta \mathbf{u} \in \text{Var}_{\mathbf{u}_n}$ tal que

$$a(\delta \mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) = l(\hat{\mathbf{u}}) \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathbf{u}_n}, \quad (2.48)$$

siendo $a(\cdot, \cdot)$ y $l(\cdot)$ operadores bilineales y lineales, respectivamente. Estos operadores

toman la siguiente forma

$$\begin{aligned}
a(\delta \mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) &= \int_{\Omega_{t_n}} \left(\frac{\partial \mathbf{S}_g}{\partial \mathbf{E}^{\mathbf{u}}} (\nabla \delta \mathbf{u}^T \mathbf{F}^{\mathbf{u}})^T \right) \cdot \dot{\mathbf{E}}(\hat{\mathbf{u}}) \left(\frac{J^R}{J^M} \right)^{\mathbf{x}} d\Omega \\
&+ \int_{\Omega_{t_n}} \left(\frac{1}{J^{\mathbf{v}}} \mathbf{F}^{\mathbf{v}} \frac{\partial \mathbf{S}_f}{\partial \mathbf{E}^{\mathbf{uv}}} (\mathbf{F}^{\mathbf{uv}T} \nabla \delta \mathbf{u} \mathbf{F}^{\mathbf{v}})^S \mathbf{F}^{\mathbf{v}T} \right) \cdot \dot{\mathbf{E}}(\hat{\mathbf{u}}) \left(\frac{J^R}{J^M} \right)^{\mathbf{x}} d\Omega \\
&+ \int_{\Omega_{t_n}} \left(\mathbf{S}_g + \frac{1}{J^{\mathbf{v}}} \mathbf{F}^{\mathbf{v}} \mathbf{S}_f \mathbf{F}^{\mathbf{v}T} \right) \cdot (\nabla \delta \mathbf{u}^T \nabla \hat{\mathbf{u}})^T \left(\frac{J^R}{J^M} \right)^{\mathbf{x}} d\Omega \\
&- \int_{\Omega_{t_n}} \left(\mathbf{S}_g + \frac{1}{J^{\mathbf{v}}} \mathbf{F}^{\mathbf{v}} \mathbf{S}_f \mathbf{F}^{\mathbf{v}T} \right) \cdot \dot{\mathbf{E}}(\hat{\mathbf{u}}) \chi (\mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \cdot \nabla \delta \mathbf{u})^T \left(\frac{J^R}{J^M} \right)^{\mathbf{x}} d\Omega, \quad (2.49)
\end{aligned}$$

$$l(\hat{\mathbf{u}}) = - \int_{\Omega_{t_n}} \left(\mathbf{S}_g + \frac{1}{J^{\mathbf{v}}} \mathbf{F}^{\mathbf{v}} \mathbf{S}_f \mathbf{F}^{\mathbf{v}T} \right) \cdot \dot{\mathbf{E}}(\hat{\mathbf{u}}) \left(\frac{J^R}{J^M} \right)^{\mathbf{x}} d\Omega. \quad (2.50)$$

Optimización de mallas: ejemplos prácticos

En este capítulo, introducimos experimentos numéricos simples para investigar las características principales del método propuesto en esta tesis. En particular, analizaremos el comportamiento de BIMO para optimizar mallas. Con el objetivo de concentrarnos en las características del método, los experimentos numéricos propuestos pretenden ser los más simples posibles para minimizar los parámetros de estudio, dejando en evidencia las principales características del método. Para ello, resolveremos una serie de casos de prueba con el objeto de mostrar las potenciales del método para encontrar configuraciones óptimas como parte de la resolución del problema de equilibrio mecánico propuesto por BIMO. Las configuraciones óptimas se encuentran sujetas a la definición de la configuración virtual desagregada, esto es, las formas “ideales” (también denominadas objetivo).

Esta serie de casos de prueba muestra, en forma incremental, los siguientes mecanismos de adaptación propuestos en BIMO: el remodelado de los constituyentes (denominadas etapas de remodelado) y el reclutamiento de fibras. Como primera estrategia a estos mecanismos, consideramos el endurecimiento generalizado del tejido fibroso (fuerza impulsora de optimización) respecto del *ground*.

Los casos de prueba están basados en formas geométricas sencillas. En particular, consideramos hexágonos regulares y paralelogramos rectángulos para las pruebas 2D. Para las pruebas 3D, una extensión natural de los problemas 2D es utilizada, esto es, el icosaedro regular y el cuboide. Estas geometrías serán discretizadas con mallas tipo simplex y se analizará el movimiento de nodos internos en el proceso de optimización. En ese sentido, no consideramos la existencia de fronteras móviles, o en forma equivalente, todos los nodos sobre las fronteras están fijos.

3.1. Condiciones generales de prueba

Para simplificar el análisis, en esta primera instancia de pruebas numéricas, restringimos los desplazamientos sobre la frontera de Dirichlet, esto es, $\mathbf{u}|_{\Gamma_D} = \mathbf{0}$. Por otro lado, nótese que en ausencia de fuerzas externas, la relación de aspecto k_f/k_g (ver ecuaciones (2.17) y (2.22) a (2.24)) para las funciones de energía de deformación e hipótesis consideradas, determina la respuesta mecánica del pseudo-material. En este sentido, analizaremos el comportamiento de la metodología BIMO para diferentes valores de este *ratio* de rigidez, en el contexto de la optimización de pequeñas mallas de prueba. Como comentario final, para los problemas en geometrías 2D, consideramos un estado de deformación plano (ver Sección 1.1.6).

Medida de calidad de malla

Para cuantificar resultados, consideramos como medida de calidad la energía isocórica E_f asociada a la deformación del constituyente fibroso, esto es

$$E_f = \sum_e \int_{\Omega_v^e} \Psi_f d\Omega. \quad (3.1)$$

Vale la pena notar que E_f disminuye a medida que el proceso de optimización converge a Ω_s (es decir, la configuración óptima). En casos excepcionales, incluso podría ser posible obtener un configuración ZSS para el tejido fibroso, para la cual la configuración de equilibrio en Ω_s estaría formada exclusivamente de elementos con forma ideal (o cualquier otra forma utilizada como objetivo). Sin embargo, en general, el tejido fibroso no alcanzará un estado ZSS en la configuración óptima Ω_s .

3.1.1. Hexágono regular

La Figura 3.1 muestra un hexágono regular con una determinada malla inicial 2D (es decir, la configuración inicial Ω_0 discretizada) a optimizar. De acuerdo con los criterios ya mencionados para definir configuraciones ideales, es fácil reconocer que la configuración óptima es aquella compuesta de elementos triangulares equiláteros. En ese sentido, definimos el “desplazamiento óptimo” \mathbf{u}_0 como el desplazamiento medido desde el nodo interior A hacia el centro del hexágono, es decir, el baricentro.

Se lleva a cabo una serie de simulaciones para distintos valores de k_f/k_g cubriendo

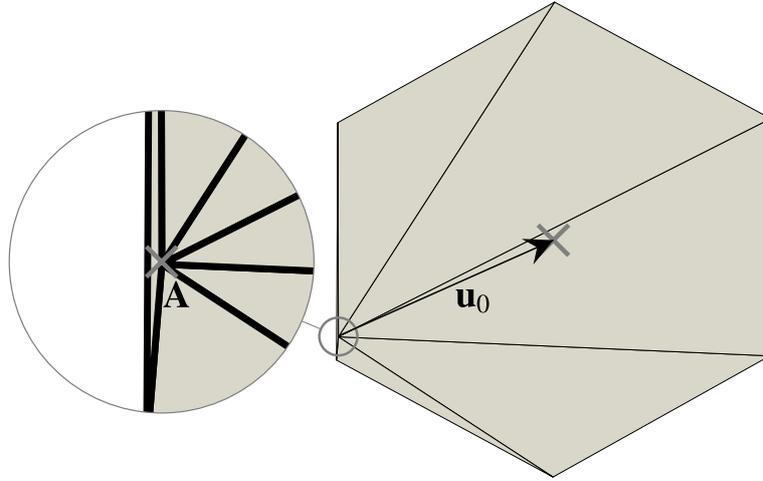


Figura 3.1: Optimización hexágono regular. Malla inicial en la configuración Ω_0 . Se define el “desplazamiento óptimo” \mathbf{u}_0 como la distancia desde el nodo interior \mathbf{A} hasta el baricentro del hexágono para obtener la configuración óptima de autoequilibrio Ω_s .

el rango $[10^{-1}, 10^4]$. Además, asumimos para este primer caso la no existencia de configuración de reclutamiento, esto es $\lambda_R = 1$, y tampoco se considera la relajación del pseudo-material. La Figura 3.2 muestra, para el escenario con $k_f/k_g = 1$, la configuración autoequilibrio Ω_s con líneas sólidas y la configuración óptima con líneas punteadas. Además, se muestra la diferencia entre el desplazamiento óptimo y el desplazamiento solución, es decir $\mathbf{u}_0 - \mathbf{u}$.

La Figura 3.3 muestra el *ratio* $\|\mathbf{u}\|/\|\mathbf{u}_0\|$ en términos del *ratio* de rigidez k_f/k_g , indicando con $\|\cdot\|$ la norma Euclidiana. Notamos de estos resultados que no es posible obtener una configuración óptima para ningún valor del *ratio* k_f/k_g . En este caso, la presencia de la substancia de *ground* funciona como “contrapeso” a la acción del tejido fibroso limitando el grado de optimización posible a obtener. Esta limitación en el procedimiento de optimización puede ser eludida por intermedio del procedimiento de relajación inspirado en tejidos biológicos introducido en la Sección 2.3.6. Probamos tres escenarios para distintos grados de rigidez según los valores de *ratio* $k_f/k_g \in \{0.1, 1, 10\}$.

La Figura 3.4a muestra la adaptación de la malla durante del proceso de adaptación de la misma medido en términos del *ratio* $\|\mathbf{U}\|/\|\mathbf{u}_0\|$, siendo $\mathbf{U} = \sum_n \mathbf{u}_n$. Además, la Figura 3.4b muestra la energía almacenada por el tejido fibroso E_f en términos de su valor inicial E_0 (es decir, energía de predeformación), calculados según la ecuación (3.1). De las Figuras 3.4a y 3.4b notamos que a mayores valores de k_f/k_g , más rápido se alcanza la configuración óptima, y por lo tanto menor cantidad etapas de remodelado se necesitan.

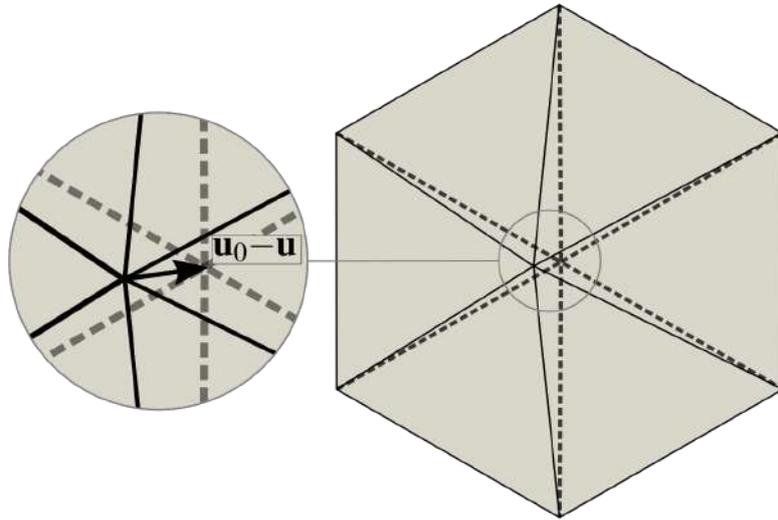


Figura 3.2: Optimización hexágono regular. Las líneas sólidas indican la configuración óptima. Las líneas punteadas denotan la configuración de autoequilibrio para $k_f/k_g = 1$, sin el remodelado del pseudo-material como mecanismo de adaptación. La vista en zoom indica el campo $\mathbf{u}_0 - \mathbf{u}$ para el nodo libre, siendo \mathbf{u} el vector desplazamiento y \mathbf{u}_0 el desplazamiento óptimo.

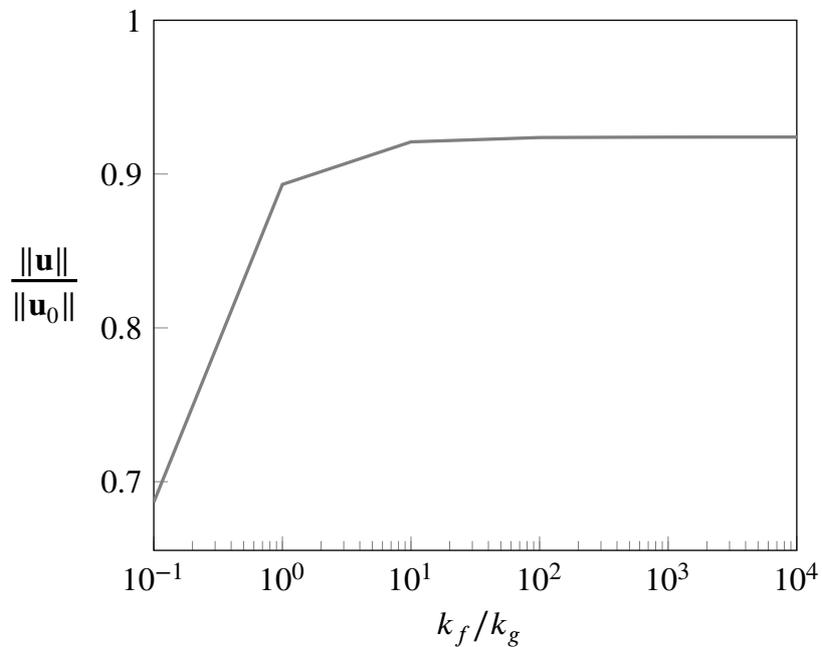


Figura 3.3: Optimización hexágono regular. *Ratio* de las normas de los desplazamientos $\|\mathbf{u}\|$ y desplazamiento óptimo $\|\mathbf{u}_0\|$ para distintos valores de k_f/k_g entre 10^{-1} y 10^4 .

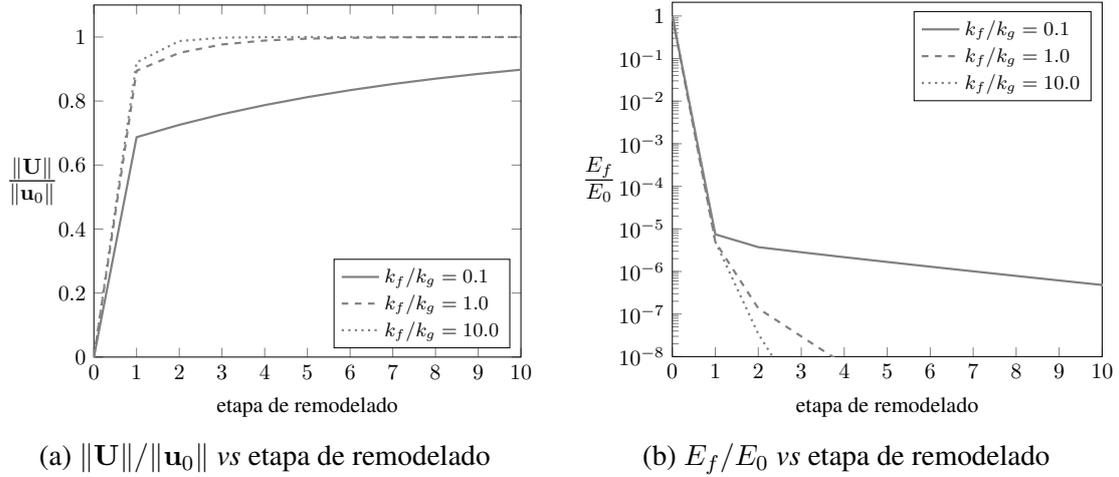


Figura 3.4: Optimización hexágono regular. Medidas $\|\mathbf{U}\|/\|\mathbf{u}_0\|$ (a) y E_f/E_0 (b) del proceso de adaptación en términos de la etapa de remodelado.

3.1.2. Paralelogramo rectangular

Los resultados presentados en la Sección 3.1.1 muestran que no siempre es posible incrementar el *ratio* k_f/k_g para mejorar la tasa de convergencia del método. A continuación, presentamos un caso de prueba en donde no existe ZSS para el tejido fibroso en Ω_t . Aquí, observaremos un comportamiento de la solución no deseable al tratar de incrementar la tasa de convergencia. La Figura 3.5 muestra el dominio rectangular y su discretización para la configuración inicial Ω_0 , esta consiste de cuatro elementos triangulares (lineales) y cinco nodos. Además, se muestra el desplazamiento óptimo \mathbf{u}_0 , el cual es definido utilizando el centro del dominio. Consideramos dos escenarios en términos de la rigidez relativa de los constituyentes, esto es $k_f/k_g \in \{0.01, 1\}$. Consideramos relajación del pseudo-material, sin embargo, no consideramos la predeformación de las fibras debido reclutamiento, es decir, no consideramos el reclutamiento de la fibras (esto es, $\lambda_R = 1$).

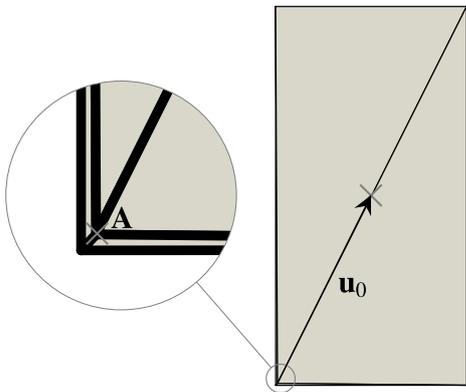


Figura 3.5: Optimización rectángulo. Malla inicial en la configuración Ω_0 . El desplazamiento óptimo se define como el vector Euclidiano desde el nodo A (ver zoom) al baricentro del dominio.

La Figura 3.6 muestra, para ambos escenarios propuestos, la optimización de la malla conforma procede la optimización convergiendo hacia la configuración Ω_t (es decir, $\mathbf{u} \rightarrow \mathbf{0}$) en términos del *ratio* $\|\mathbf{U}\|/\|\mathbf{u}_0\|$. Se observan fenómenos oscilatorios en la solución a medida que la rigidez relativa k_f/k_g aumenta. Esto es consecuencia de elementos muy distorsionados, los cuales se encuentran muy apartados de la forma ideal, pudiendo introducir valores de tensión excesivamente elevados dado que no hay límite en referencia a la mala calidad inicial de los elementos de la malla. En este sentido, dicho inconveniente puede ser mitigado a través de un endurecimiento generalizado de la sustancia de *ground*, es decir, disminuyendo el *ratio* k_f/k_g . Como efecto adverso, el número de etapas de remodelado para alcanzar convergencia se incrementa.

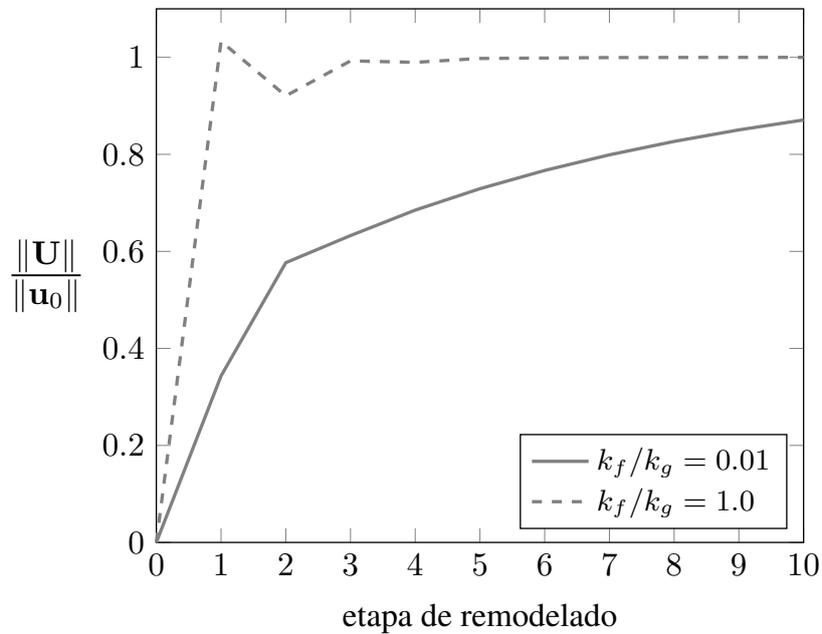


Figura 3.6: Optimización paralelogramo rectángulo. $\|\mathbf{U}\|/\|\mathbf{u}_0\|$ durante el proceso de adaptación en función de la etapa de remodelado.

3.1.3. Paralelogramo rectangular con reclutamiento de fibras

Este caso de prueba se corresponde—en términos geométricos—con el presentado en la Sección 3.1.2. Como característica distintiva, probamos aquí el mecanismo de reclutamiento de fibras presentado en la Sección 2.3.4. Consideramos dos escenarios en base a diferentes valores de máximo estiramiento de fibra λ_{max} y también consideramos la relajación del pseudo-material por intermedio de sucesivas etapas de remodelado.

La Figura 3.7a muestra, para los escenarios propuestos, el proceso de adaptación de la malla hacia la convergencia de la configuración óptima (es decir, $\mathbf{u} \rightarrow \mathbf{0}$) medido según $\|\mathbf{U}\|/\|\mathbf{u}_0\|$. Por otro lado, la Figura 3.7b muestra la energía almacenada en las fibras medida en unidades de la energía inicial, esto es, E_f/E_0 en función de la etapa de remodelado. A diferencia de los resultados presentados en la Sección 3.1.2, la energía almacenada por el tejido fibroso no converge a una configuración ZSS, dado que no existe para esta geometría una malla compuesta únicamente elementos ideales (también denominados objetivo). De este modo, no es posible alcanzar un estado ZSS en la configuración óptima Ω_t .

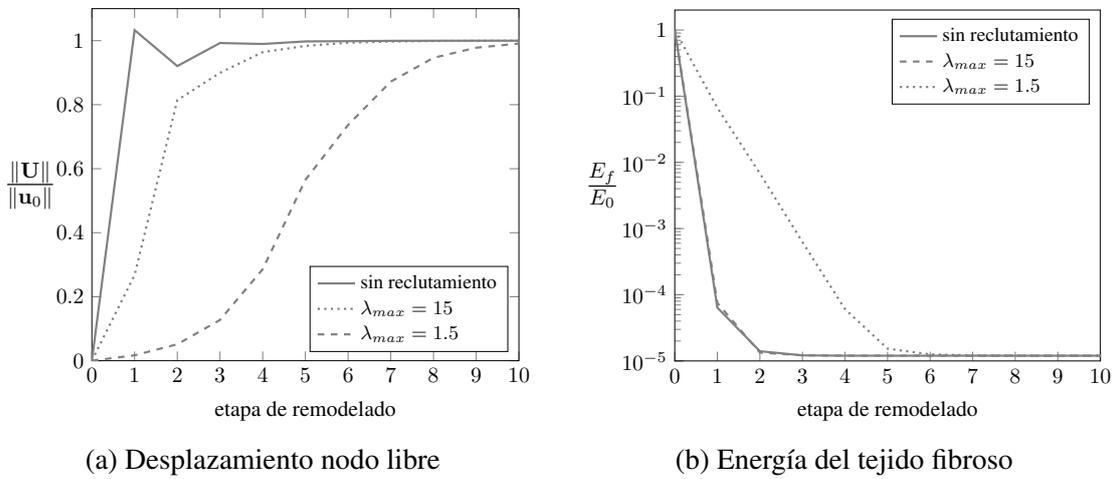


Figura 3.7: Optimización paralelogramo rectángulo. Medidas $\|\mathbf{U}\|/\|\mathbf{u}_0\|$ (a) y E_f/E_0 (b) del proceso de adaptación en términos de la etapa de remodelado.

La incorporación del reclutamiento de fibras mitiga los fenómenos de oscilaciones observados en el proceso de optimización, el cual es una alternativa a la estrategia de endurecimiento general por parte del constituyente de *ground*, como fue realizado en la Sección 3.1.1. Los resultados muestran que la metodología con reclutamiento es una mejor opción para mitigar fenómenos de oscilación. Al comparar los resultados reportados según la estrategia de endurecimiento general del constituyente de *ground* (ver Sección 3.1.2) y la estrategia con reclutamiento de fibras, para esta última, la tasa de convergencia hacia el estado óptimo se incrementa, requiriendo menor cantidad de iteraciones para un estado equivalente de optimización.

3.1.4. Icosaedro regular

Aquí mostramos la contraparte 3D del caso 2D reportado en la Sección 3.1.1 (optimización de un hexágono regular), es decir, la optimización de un icosaedro regular. La Figura

3.8 muestra la malla inicial para la configuración Ω_0 . La malla consiste de 20 tetraedros y 13 nodos, tal que 12 de ellos pertenecen a la frontera y el restante se encuentra libre de moverse en el seno del dominio. Además, la figura muestra un tetraedro arbitrario resaltado en color magenta. Claramente, la configuración óptima resultará del desplazamiento del nodo interno **A** (ver vista en zoom) hacia el baricentro, a través de un desplazamiento óptimo \mathbf{u}_0 . Para discretizaciones 3D, el criterio para construir la configuración virtual Ω_v (ver Sección 2.3.3) en una estrategia basada en elementos es el siguiente: el lado del tetraedro regular en Ω_v es igual al lado promedio del tetraedro “deformado” en la configuración Ω_0 . Al contrario que en el caso 2D, la malla óptima resultante no se compone de elementos ideales, en este caso, tetraedros regulares. Por lo tanto, la configuración Ω_t no se corresponderá a una configuración ZSS para el tejido fibroso.

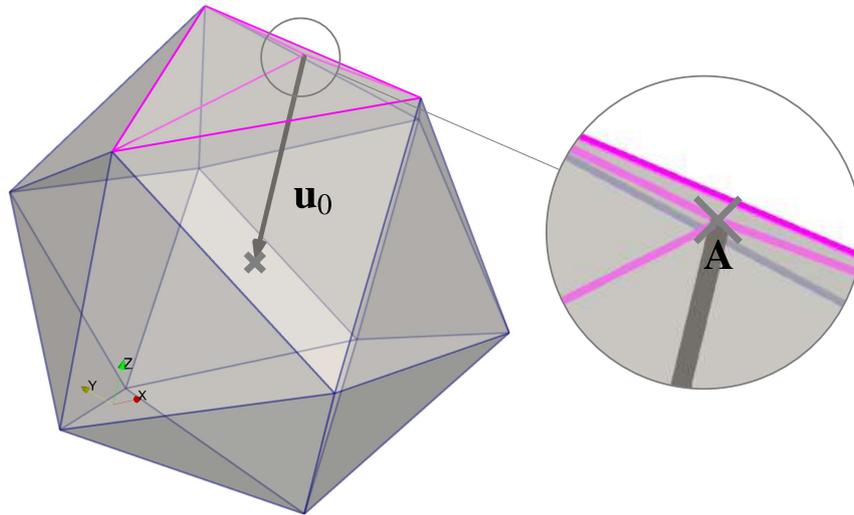


Figura 3.8: Optimización icosaedro. Malla inicial en la configuración Ω_0 . El desplazamiento óptimo se define como el vector Euclidiano desde el nodo **A** (ver zoom) al baricentro del dominio. En magenta, se indica un tetraedro arbitrario para mostrar la deformación a la cual se encuentran sujetos los elementos que componen la malla.

Ahora comparamos la estrategias con y sin reclutamiento de las fibras. Por motivos de brevedad, se utiliza un *ratio* $k_f/k_g = 1$ en ambos casos. Además, para la estrategia con reclutamiento, el estiramiento máximo permitido se limita a $\lambda_{max} = 1.1$.

La Figura 3.9a muestra, para ambos escenarios, la adaptación de la malla a medida que avanza el proceso de optimización en términos de la etapa de remodelado medido en unidades del *ratio* $\|\mathbf{U}\|/\|\mathbf{u}_0\|$. La Figura 3.9b muestra la energía almacenada por el tejido fibroso E_f en términos de su valor inicial E_0 .

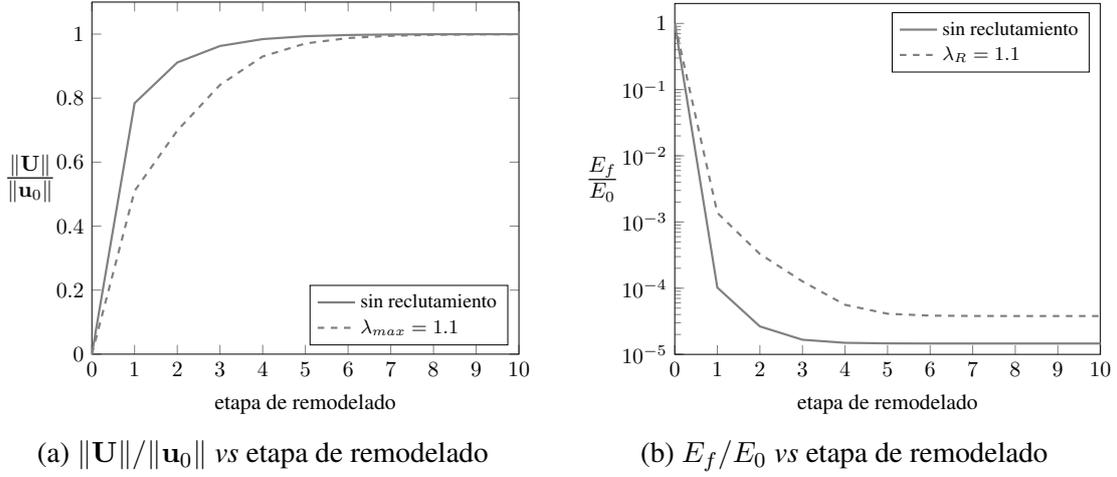


Figura 3.9: Optimización icosaedro regular. Medidas $\|U\|/\|u_0\|$ (a) y E_f/E_0 (b) del proceso de adaptación en términos de la etapa de remodelado.

Los resultados no evidencian muestras de oscilaciones no deseadas. Esto se debe al alto grado de simetría del problema, en forma análoga a los resultados obtenidos en la Sección 3.1.1. Sin embargo, a pesar que la estrategia de reclutamiento de fibras degrada la tasa de convergencia, en el siguiente caso de prueba veremos que aporta robustez al método previniendo la ocurrencia de oscilaciones no deseadas, que usualmente se desencadenan como consecuencia del estado inicial de la malla.

3.1.5. Cuboide

Ahora presentamos la contraparte 3D del problema 2D reportado en la Sección 3.1.2 (optimización de un paralelogramo rectangular), es decir, la optimización de un cuboide. La Figura 3.10 muestra la malla inicial situada en la configuración Ω_0 . La misma consiste de 12 tetraedros y 9 nodos de los cuales 8 pertenecen a la frontera y el restante se encuentra libre en el seno del dominio. Además, se resalta un tetraedro arbitrario en magenta para enfatizar la distorsión de la malla. La configuración óptima Ω_t resulta de mover el nodo interno **A** al baricentro del cuboide. Este desplazamiento es denotado por u_0 .

Comparamos las estrategias para mitigar oscilaciones no deseadas en el proceso de optimización, esto es, por intermedio de un endurecimiento generalizado del *ground* ($k_f/k_g \leq 1$) y por el reclutamiento de fibras. Para la estrategia de endurecimiento del *ground* proponemos tres escenarios, estos son $k_f/k_g \in \{0.01, 0.1, 1\}$ y ausencia de reclutamiento de fibras ($\lambda_R = 1$). Por otro lado, para la estrategia con reclutamiento de fibras se proponen dos escenarios, controlados por el parámetro λ_{max} , estos son $\lambda_{max} \in \{1.5, 3.0\}$.

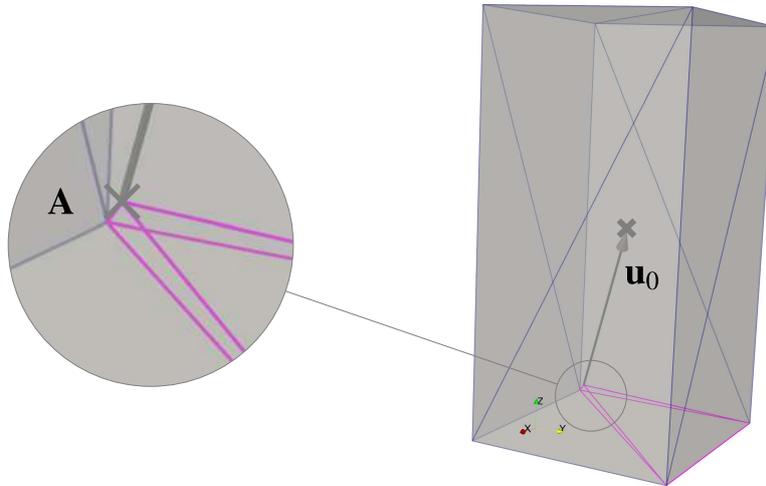


Figura 3.10: Optimización cuboide. Malla inicial en la configuración Ω_0 . El desplazamiento óptimo se define como el vector Euclidiano desde el nodo **A** (ver zoom) al baricentro del dominio. En magenta, se indica un tetraedro arbitrario para mostrar la deformación a la cual se encuentran sujetos los elementos que componen la malla.

Para todos los casos, se considera la relajación del tejido a través de etapas de remodelado.

La Figura 3.11 muestra, para los escenarios propuestos, la adaptación de la malla a medida que avanza el proceso de optimización en términos de etapas de remodelado medido en unidades del *ratio* $\|\mathbf{U}\|/\|\mathbf{u}_0\|$.

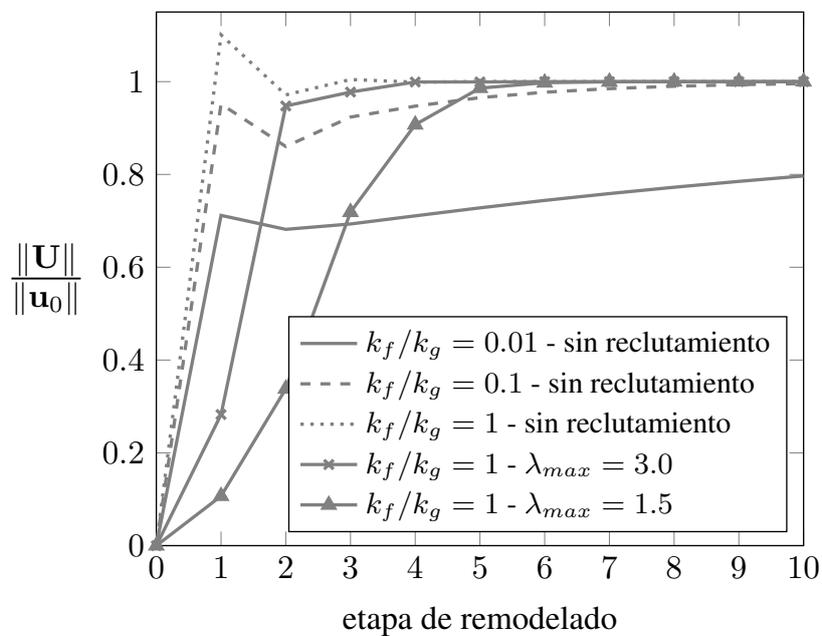


Figura 3.11: Optimización cuboide. $\|\mathbf{U}\|/\|\mathbf{u}_0\|$ durante el proceso de optimización en función de la etapa de remodelado.

Los resultados muestran, en concordancia con los casos de prueba 2D presentados, que la estrategia con reclutamiento se desempeña mejor que el endurecimiento generalizado del *ground* cuando es necesario mitigar oscilaciones en la solución, ganando robustez en el proceso de optimización.

3.2. Conclusiones

En este capítulo hemos resuelto una variedad de pequeños casos de prueba para mostrar la potencialidad del método BIMO para obtener configuraciones óptimas en un ambiente controlado. Se han presentado problemas 2D y 3D con mallas formadas por elementos triangulares y tetraédricos, respectivamente, de interpolación lineal en ambos casos. En todos los casos, los resultados han sido satisfactorios así como también se pone en evidencia la utilidad de los mecanismos de adaptación propuestos, mitigando oscilaciones espurias no deseadas y mejorando la robustez del método. El remodelado de los constituyentes, a través de la relajación de tensiones por parte del *ground*, la deposición de nuevas fibras y actualización de su ZSS, permite obtener configuraciones óptimas. Por otro lado, el reclutamiento de las fibras permite controlar el fenómeno de *overshooting* en los desplazamientos nodales, principalmente para aquellos elementos con muy mala forma en la malla inicial, induciendo altas tensiones por la predeformación de la fibras.

Capítulo 4

Movimiento de mallas: casos de prueba

En este capítulo presentamos una serie de problemas en geometrías 2D y 3D en el contexto de movimiento de mallas. Esta serie de problemas son usualmente reportados en la literatura y suelen ser utilizados por la comunidad científica para validar nuevas metodologías. En ese sentido, comparamos los resultados obtenidos con la metodología MJBS y BIMO, con el objetivo de validar la metodología BIMO y contrastar resultados. Además, utilizamos BIMO como método de movimiento de mallas y optimizar, sacando ventaja de su comportamiento dual y sus mecanismos de adaptación.

La primer serie de casos de prueba, denominados en la literatura según *2D Thin-Walled Beam*, consisten en un viga 2D embebida en el seno de un dominio cuadrado, la cual se encuentra sujeta a distintos modos de deformación: traslación, rotación y flexión. En cuanto a geometrías 3D, se presenta un problema que consiste en una viga embebida en un dominio en forma de cuboide sometida a la torsión, denominado en la literatura según *3D Hollow Beam*.

4.1. Condiciones generales

En la Tabla 4.1 reportamos los distintos valores de material que serán utilizados en este capítulo, tanto para el método MJBS como para BIMO.

Tabla 4.1: Propiedades de material utilizados con BIMO (a) y MJBS (b)

| (a) BIMO | | | (b) MJBS | | |
|----------|-----------|-----------------|----------|-------|--------|
| | k_f/k_g | λ_{max} | | ν | χ |
| BIMO1 | 1.0 | 1.50 | MJBS1 | 0.3 | 1 |
| BIMO2 | 10^{-6} | 1.50 | MJBS2 | 0.3 | 2 |
| BIMO3 | 10^{-6} | 1.05 | | | |

Vale la pena notar que, en ausencia de fuerzas externas, las ecuaciones lineales elásticas resueltas por el método MJBS están controladas por el *ratio* de las constantes de Lamé μ/λ . Una interpretación ingenieril de este *ratio* puede derivarse en términos de la constante de Poisson ν del siguiente modo

$$\frac{\mu}{\lambda} = \frac{1 - 2\nu}{2\nu}, \quad (4.1)$$

cuyos valores se encuentran en el rango $\nu \in [-1, 0.5]$, siendo 0.5 el límite para comportamiento incompresible del material (es decir, equivale a un módulo de compresibilidad volumétrica infinito). En términos prácticos, como estamos trabajando con cantidades adimensionales, a la hora de realizar los cálculos fijamos el valor $\lambda = 1$ y luego calculamos el valor de resistencia al corte μ de acuerdo con la ecuación (4.1) para un determinado valor de ν .

Con respecto a la resolución con la metodología BIMO, para problemas en geometrías 2D, consideramos un estado de deformación plano (ver Sección 1.1.6). Además, se utiliza cada paso de tiempo (de movimiento) como una etapa de remodelado.

Medida de calidad de malla

Como medida de calidad de malla, en este capítulo consideraremos la relación de aspecto AR tanto para los problemas 2D como 3D, en elementos triangulares y tetraédricos, respectivamente. Este parámetro se define de manera general para elementos simplex de la

siguiente manera

$$AR^e \propto \frac{(l_{max}^e)^{n_{sd}}}{|\Omega^e|}, \quad (4.2)$$

siendo l_{max}^e el tamaño máximo de arista del elemento e , n_{sd} la dimensión del espacio Euclidiano del simplex y $|\Omega^e|$ el volumen (área en el caso de problemas 2D) del elemento. La constante de proporcionalidad queda definida en función de la dimensión del espacio n_{sd} tal que el simplex de forma regular (todas las aristas de igual tamaño), resulte con valor mínimo $AR = 1$.

4.2. Casos de prueba

A continuación presentamos los siguientes casos de pruebas en geometrías 2D y 3D. Por el lado de los problemas 2D, presentamos el denominado *2D Thin-Walled Beam*. Por otro lado, para el caso 3D se resuelve el problema llamado en la literatura según *3D Hollow Beam*.

4.2.1. 2D Thin-Walled Beam

El caso de prueba presentado en esta sección está basado en casos de pruebas de movimiento de mallas con interfaces móviles sujetas a grandes desplazamientos y deformaciones [69]. El mismo consiste en una viga de espesor nulo inicialmente centrada en un dominio cuadrado, sujeta a distintos modos de deformación. La Figura 4.1 muestra un bosquejo de los modos de deformación que se imprimen a las estructura, estos son, traslación (a), rotación (b) y flexión (c). Las líneas sólidas indican la configuración inicial mientras que aquellas punteadas denotan la estructura al final del movimiento impuesto. Los primeros dos modos se corresponden con movimientos de cuerpo rígido. En el caso de flexión, la estructura se mapea de una línea recta a un arco circular, manteniendo la longitud de la viga (es decir, sin estiramiento neto) y sin desplazamiento neto vertical ni horizontal. Vale la mencionar que la viga no se modela sino que sólo su línea media es representada por Γ_b (según indica la Figura 4.2). Los modos de deformación se prescriben en una secuencia de 50 pasos uniformes. Además, el desplazamiento sobre la frontera externa (dominio cuadrado) está restringido sólo en la dirección normal, mientras que el desplazamiento de la viga es impuesto por el mapeo de la deformación correspondiente como condición de dirichlet.

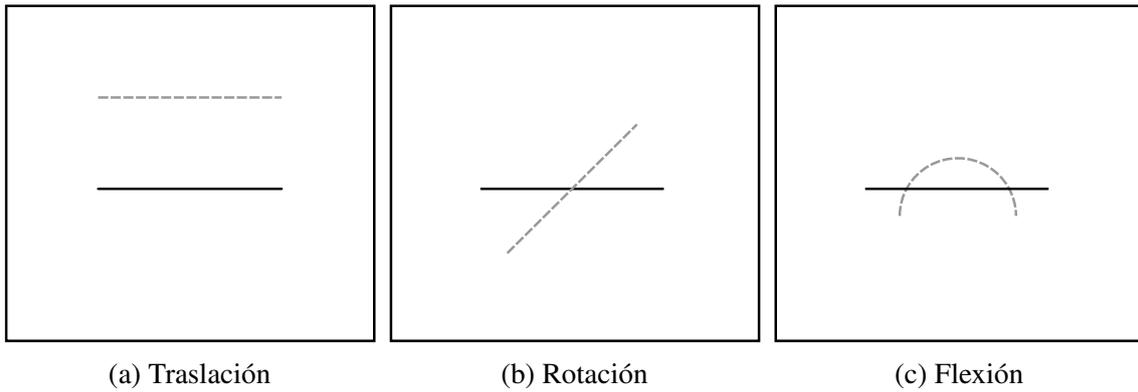


Figura 4.1: Viga de espesor delgado. Modos de deformación: traslación (a), rotación (b) y flexión (c). Líneas sólidas indican la configuración inicial y aquellas punteadas marcan la configuración al final del movimiento para la viga unidimensional.

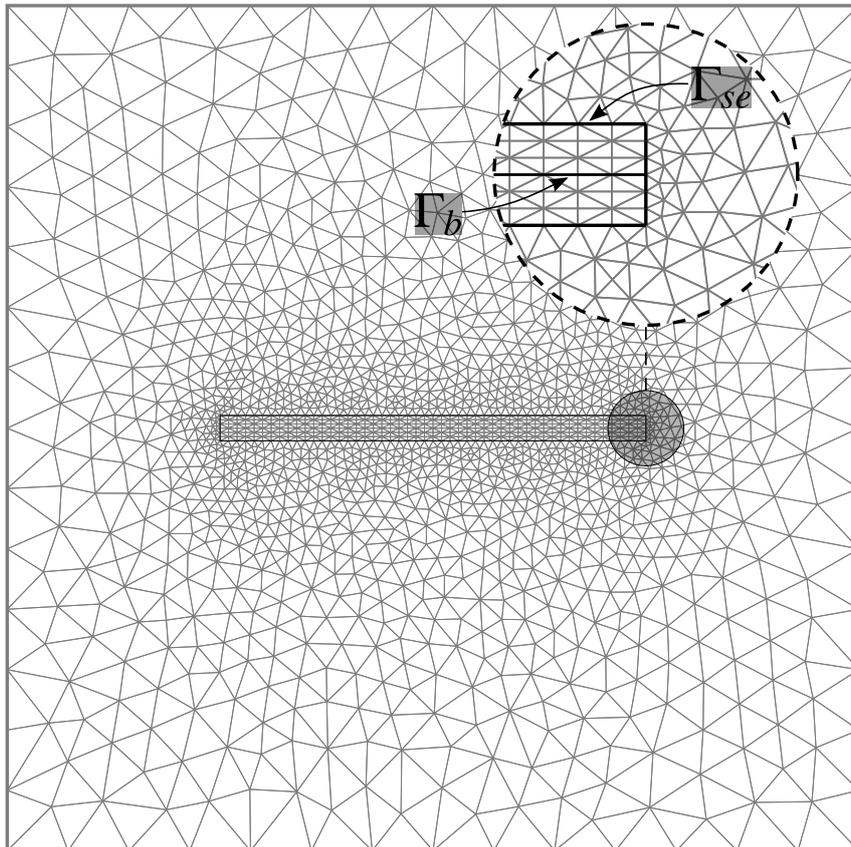


Figura 4.2: Viga de espesor delgado. Malla inicial y una vista en zoom sobre un extremo de la viga (denotada con Γ_b) y la zona de elementos tipo capa límite encerrada por la frontera Γ_{se} .

De acuerdo con la metodología *solid-extension* para la generación de mallas [69], tres capas de elementos delgados se colocan sobre cada lado de la viga unidimensional,

formando un dominio que resulta encerrado por la curva Γ_{se} (ver Figura 4.2). En este dominio se utilizan propiedades de material (MJBS2,BIMO2), mientras que para el resto del dominio se usa (MJBS1,BIMO1). La malla está conformada por 3316 elementos y 1687 nodos. La Figura 4.2 muestra una vista general de la malla y una vista en zoom alrededor de la delgada viga. Configuraciones similares fueron reportadas en [68–70].

La Figura 4.3 muestra la malla en la configuración para los distintos modos de deformación: (a) traslación ($\delta = 0.5$), (b) rotación ($\theta = \pi/4$), (c) flexión ($\theta = \pi$). En las Figuras 4.3a y 4.3b se observa cómo el conjunto de elementos tipo capa límite correspondiente a las propiedades de material (MJBS2,BIMO2) se mueven prácticamente como cuerpo rígido. Esta cinemática es una de las principales características del método MJBS en presencia de este tipo de mallas y heterogeneidad en las propiedades de material. Es importante mencionar que el método MJBS con propiedades de material heterogéneas como fue empleado por Takizawa *et al.* [72] es equivalente al ampliamente mencionado en la literatura SEMMT-SD, previo a su renombramiento por Terahara *et al.* [76].

La Figura 4.4a muestra un diagrama de violines asimétricos para la densidad de calidad de los elementos (AR) para los modos de traslación (arriba), rotación (medio), flexión (abajo). La calidad de malla se computa para aquellos elementos con propiedades de material (MJBS2,BIMO2), es decir, aquellos elementos contenidos por la frontera Γ_{se} . Vale la pena mencionar que para esta región es deseable preservar la calidad de malla inicial, es decir conservar la forma inicial y así preservar la relación de aspecto de la malla tipo capa límite. Los resultados muestran que ambos métodos resuelven de manera satisfactoria preservando la forma inicial de los elementos, en especial para movimientos rígidos (es decir, los modos de traslación y rotación). Para el caso de flexión, se observa que BIMO resuelve levemente mejor que MJBS.

En forma similar, la Figura 4.4b también muestra un diagrama de violines asimétricos para la densidad de calidad de los elementos (AR) para los modos de traslación (arriba), rotación (medio), flexión (abajo). Ahora, la calidad se computa para los elementos con propiedades de material (MJBS1,BIMO1), esto es, el complemento del grupo anterior. Vale la pena notar que ahora, para esta región, es deseable conservar la calidad de malla (incluso optimizar de ser posible) y cuando esto no sea viable, mantener la máxima distorsión de la malla lo más baja posible. Los resultados muestran una mejora sustancial de la calidad de malla al comienzo del movimiento al utilizar el método BIMO. Más aún, luego del proceso de optimización, la calidad de malla al resolver con BIMO permanece mejor que la inicial para una buena parte del movimiento total. Además, en forma notable, BIMO aprecia una

menor tasa de variación para la norma del máximo de AR , indicada por líneas sólidas.

A modo de resumen, se puede observar que ambos métodos resuelven satisfactoriamente en la cercanía a los alrededores de la estructura Γ_b y la frontera Γ_{se} , esto queda plasmado en forma cualitativa por la Figura 4.3 (vistas en zoom), así como de manera cuantitativa en la Figura 4.4a. Es para regiones más lejanas a la estructura donde BIMO toma ventaja de la versatilidad otorgada por el comportamiento del pseudo-material reforzado con fibras y su remodelado, lo cual queda claramente evidenciado por las métricas en la Figura 4.4b.

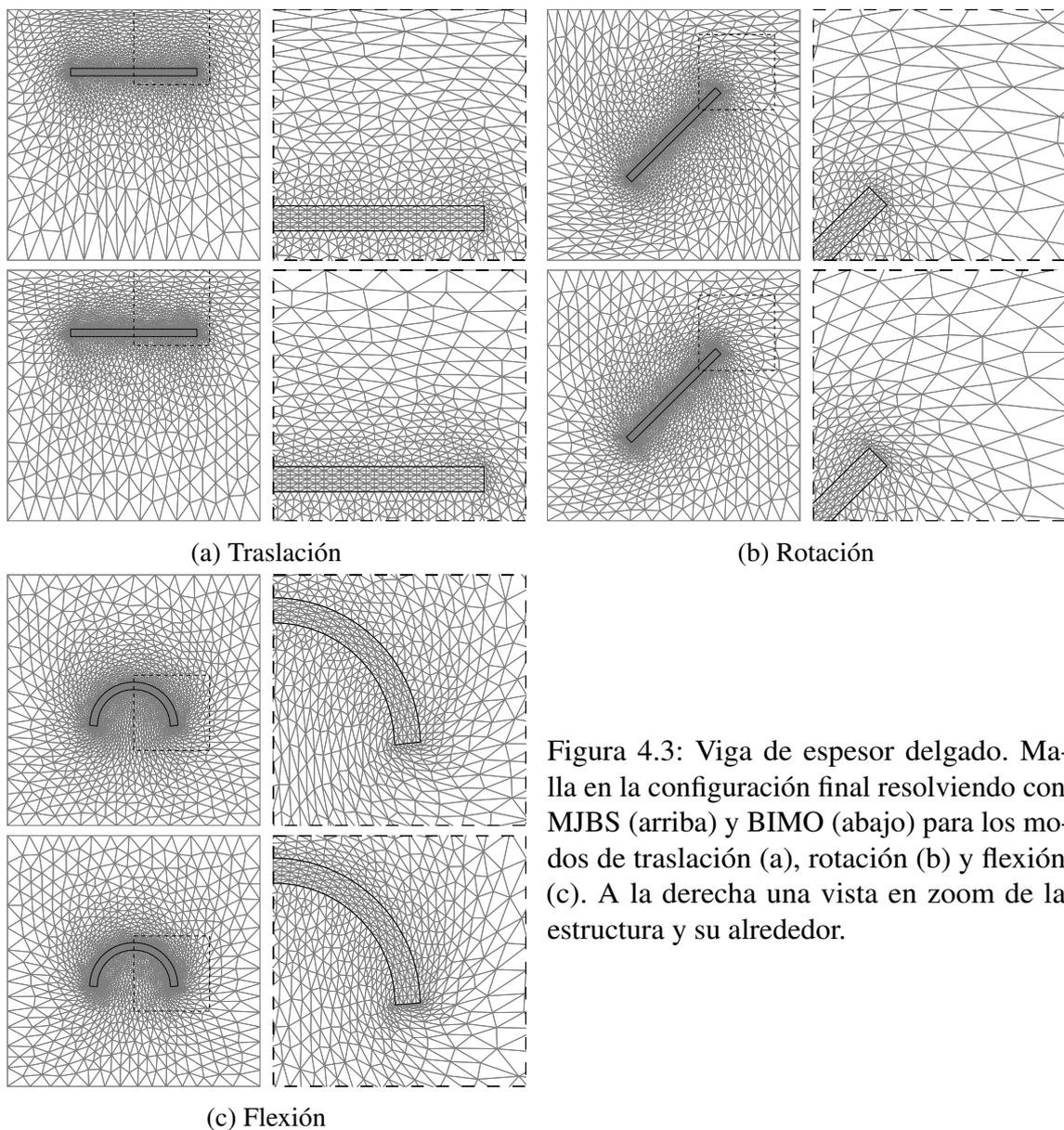
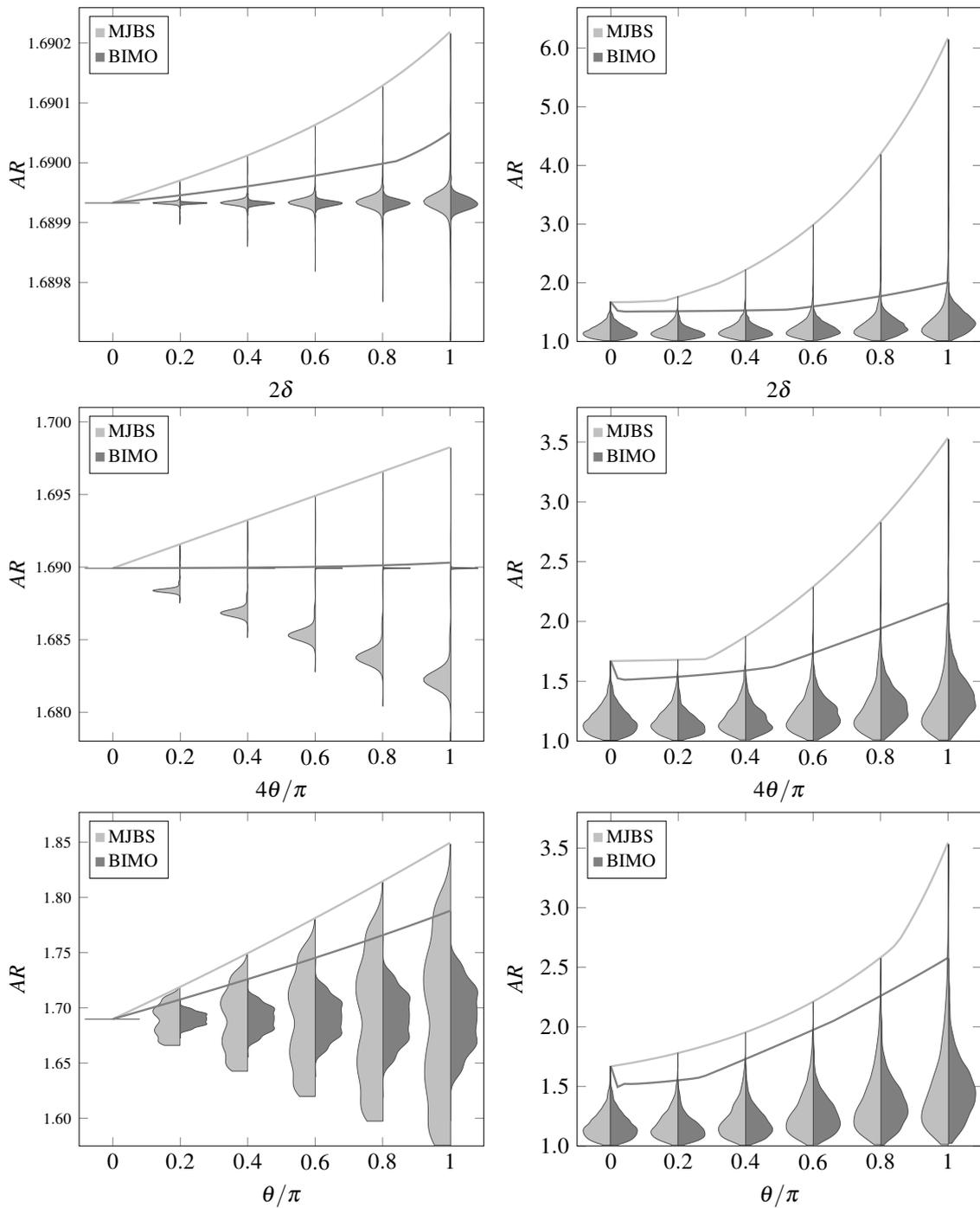


Figura 4.3: Viga de espesor delgado. Malla en la configuración final resolviendo con MJBS (arriba) y BIMO (abajo) para los modos de traslación (a), rotación (b) y flexión (c). A la derecha una vista en zoom de la estructura y su alrededor.



(a) Propiedades de material MJBS2 y BIMO2 (b) Propiedades de material MBJS1 y BIMO1

Figura 4.4: Viga de espesor nulo. Gráfico de violín para la densidad de calidad de malla (AR) definida en términos de los elementos con propiedades de material (MJBS2,BIMO2) (a) y (MJBS1,BIMO1) (b) para los modos de traslación (arriba), rotación (medio) y flexión (abajo) para los pasos de movimiento (0,0.2,0.4, 0.6, 0.8, 1) para los métodos MJBS (plata) y BIMO (gris). Las líneas sólidas indican la norma del máximo para cada incremento del movimiento para MJBS (plata) y BIMO (gris).

4.2.2. 3D Hollow Beam

Este caso de prueba está basado en el experimento numérico propuesto por Takizawa *et al.* [72], pero para una discretización basada en elementos finitos. La Figura 4.5 muestra la configuración del problema y el modo de deformación propuesto. Este modo de deformación consiste en la torsión de una viga de sección cuadrada con uno de sus extremos fijos. La torsión se genera a partir de una rotación $\theta = \pi/2$ a lo largo del eje de la viga. Las líneas en negro indican la configuración inicial y en gris se indica la configuración final luego de aplicar el desplazamiento correspondiente. Notar que la viga 3D no se modela, sino que sólo su superficie es representada dentro del dominio en forma de cuboide que la contiene. El movimiento se prescribe a través de 100 pasos uniformes. El campo de desplazamiento se impone como condición de borde (tipo Dirichlet) sobre la superficie de la viga. Además, el dominio exterior que contiene a la viga tiene restringido los desplazamientos en la dirección normal, quedando los nodos libres de movimiento en la dirección tangencial.

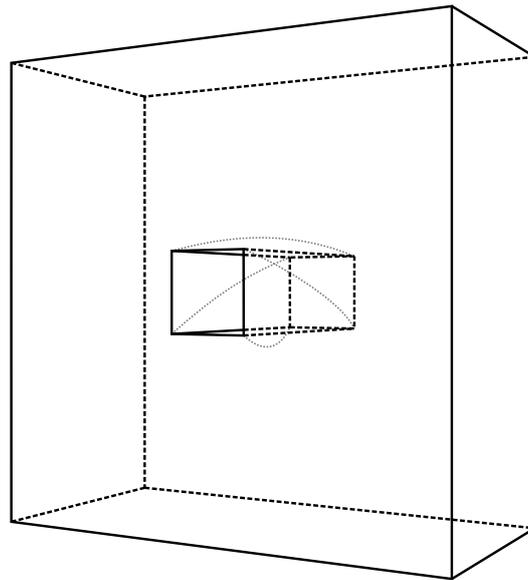


Figura 4.5: Torsión de una viga 3D. Configuración del problema. Líneas en negro indican la configuración inicial y en gris la configuración de la viga una vez finalizado el modo de deformación.

De acuerdo con los lineamientos descritos en [72], dos capas de elementos tipo capa límite se posicionan en forma de extensión sólida alrededor de la superficie que representa la viga. Para esta parte del dominio, las propiedades del material están dadas por (MJBS2,BIMO3), mientras que para el resto del dominio se utilizan las propiedades (MJBS1,BIMO1) (ver Tabla 4.1). La malla está compuesta de 15581 elementos y 3421

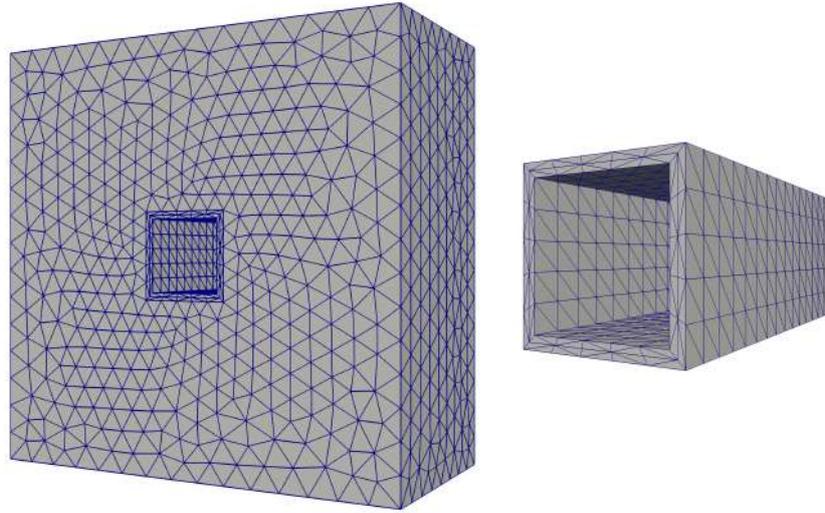


Figura 4.6: Torsión de una viga 3D. Discretización del problema. Malla completa del modelo (izquierda) y capa delgada de elementos (derecha) correspondientes a la configuración inicial.

nodos. La Figura 4.6 muestra la malla descrita y un detalle de la malla tipo capa límite como extensión sólida de la viga.

La Figura 4.7 muestra una porción de la malla (en una vista comparativa) en la configuración final luego de aplicar el modo de deformación, resolviendo con la metodologías MJBS (a) y BIMO (b).

La Figura 4.8a muestra un diagrama de violines asimétricos para la densidad de calidad de malla de los elementos a medida de la deformación procede. Aquí, la calidad se calcula considerando los elementos de capa límite, esto es, el conjunto de elementos con propiedades de material (MJBS2,BIMO3). De nuevo, nótese que para esta región el principal objetivo es mantener los elementos lo más “pegados” a la superficie de la viga posible, conservando su forma inicial como una extensión sólida, preservando la relación de aspecto. Los resultados muestran que ambos métodos resuelven satisfactoriamente y en forma equivalente el objetivo mencionado.

De manera análoga, la Figura 4.8b muestra un diagrama de violines asimétricos para la densidad de calidad de malla durante el movimiento. Ahora, la calidad de la malla se calcula considerando los elementos que no pertenecen a la extensión sólida, es decir, aquellos con propiedades de material MJBS1 y BIMO1. Los resultados muestran una mejora notable en términos de la norma del máximo (ver líneas sólida en la Figura 4.8b) con respecto al valor inicial durante una gran parte del movimiento al resolver con BIMO.

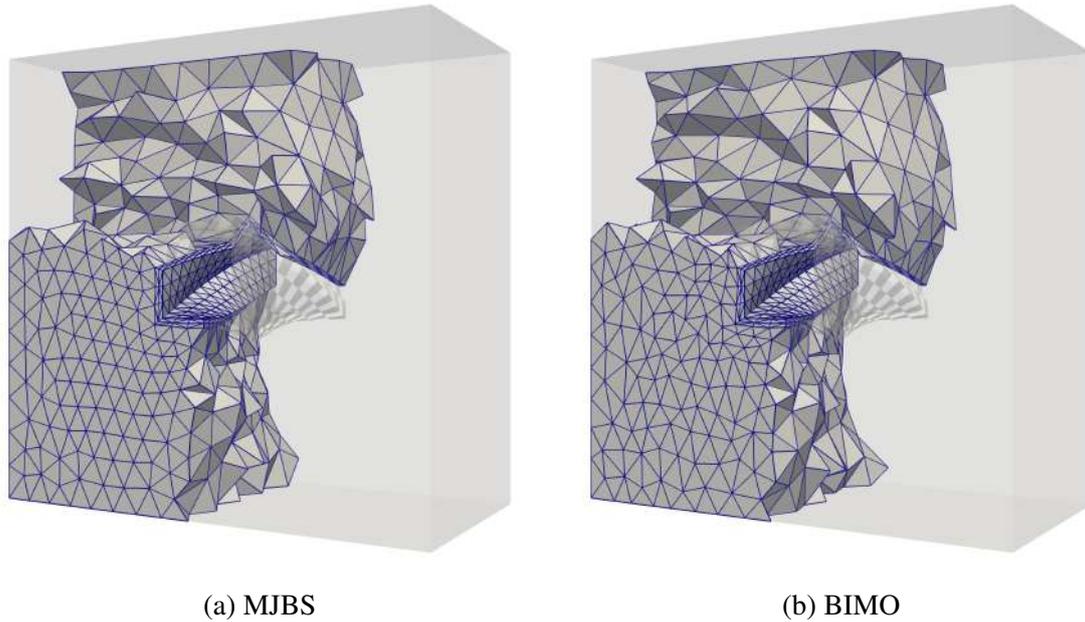


Figura 4.7: Torsión de una viga 3D. Vista en corte de la malla al final del movimiento para las metodologías MJBS (a) y BIMO (b).

Además, se observa una menor tasa de variación de la norma del máximo de AR (es decir, la pendiente con la que aumenta) al resolver con BIMO.

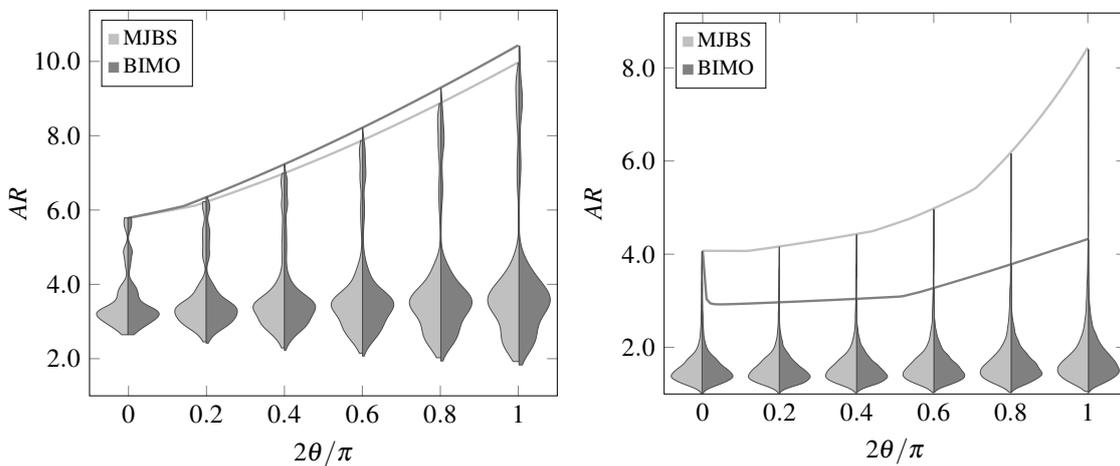


Figura 4.8: Torsión de una viga 3D. Diagrama de violines asimétricos para la densidad de calidad de malla (AR) definida en términos de los elementos tipo capa límite con propiedades de material (MJBS2,BIMO3) (a) y (MJBS1,BIMO1) (b) para los pasos de movimiento (0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1) medidos en términos de $2\theta/\pi$, para los métodos MJBS (plata) y BIMO (gris). Las líneas sólidas indican la norma del máximo para cada incremento del movimiento para MJBS (plata) y BIMO (gris).

4.3. Conclusiones

En este capítulo hemos resuelto una variedad de casos de prueba en 2D y 3D con interfases móviles sujetas a grandes deformaciones y desplazamientos. En ese sentido, todos los casos de prueba fueron resueltos en forma conjunta tanto con el método MJBS como BIMO, con el objetivo de comparar resultados. En todos los casos se han generado mallas con forma de extensión sólida alrededor de las interfases móviles. En ese sentido, al momento de comparar resultados, vale la pena discernir las métricas entre elementos que pertenezcan a esta extensión sólida y aquellos que no. Con respecto a este primer grupo, ambas metodologías resuelven de manera satisfactoria todos los casos de prueba propuestos. En cambio, para el segundo grupo (aquellos en el seno del dominio), la resolución con el método BIMO es sustancialmente mejor que aquella utilizando el método MJBS.

Es importante destacar que al resolver con BIMO se notan tres estadios: el primero muestra una rápida mejora de la calidad de malla (etapa de optimización), una segunda etapa en donde los valores de AR permanecen estables, y finalmente una tercera en donde los valores de AR crecen de manera casi lineal alcanzando valores de calidad de malla similares a la malla original sin optimizar.

Capítulo 5

Movimientos cíclicos

En este capítulo presentamos distintas estrategias para seleccionar configuraciones de referencia (libre de tensiones) en el contexto de movimientos cíclicos. Exhibiremos las características de cada una de ellas y pondremos a prueba el uso de la metodología BIMO, principal aporte de esta tesis, para este tipo de movimientos. De esta manera, presentamos casos de prueba en geometrías 2D y 3D de mallas sujetas a movimientos cíclicos y compararemos el desempeño entre una de las técnicas más utilizadas en la literatura (junto a la estrategia de selección de configuraciones libres de tensión más usual), MJBS, y BIMO, la metodología introducida en esta tesis. Los casos de prueba utilizados en este capítulo están basados en los propuestos en el capítulo anterior, estos son, los casos de prueba *2D Thin-Walled Beam* y *3D Hollow Beam*. En el caso del primero, utilizamos como modo de deformación una combinación lineal de los modos de traslación, rotación y flexión. Además, ahora los movimiento son de naturaleza cíclicos y las discretizaciones utilizadas no hacen uso de dominios en forma de extensión sólida alrededor de las interfases móviles, a fin de simplificar la presentación de los resultados y resaltar las características de la deformación en movimiento cíclicos. Las comparaciones se realizan en términos de dos parámetros de calidad de malla. El primero, la relación de aspecto de los elementos, el cual podemos interpretar como una distancia entre la forma del elemento y su forma *objetivo*¹. El segundo parámetro utilizado mide la acumulación de distorsión entre distintos ciclos en forma integral.

¹Siempre que se mantenga el criterio de construcción de la configuración virtual desarrollado en la Sección 2.3.3, basado en formas regulares para elementos tipo simplex.

5.1. Introducción

Los métodos de movimiento de mallas basados en ecuaciones de la elasticidad lineal [44, 78–80] han sido ampliamente utilizados en las últimas décadas en problemas con interfaces móviles, incluyendo problemas de Interacción Fluido Estructura (FSI). Entre estos métodos, se destaca el *Mesh Jacobian-based Stiffening* (MJBS) [68], el cual generaliza en buena parte los métodos basados en elasticidad lineal. En este método, el objetivo es endurecer los elementos más pequeños, típicamente situados en las cercanías de interfaces sólidas, respecto de los de mayor tamaño. Típicamente, esto se logra modificando la integración de las ecuaciones de balance a través del Jacobiano de la transformación entre dominio *master* y el dominio físico², usualmente utilizado como configuración de referencia (libre de tensiones). Naturalmente, varias opciones surgen a la hora de seleccionar esta configuración de referencia. Una de las opciones más utilizadas al resolver las ecuaciones de elasticidad lineal para resolver el movimiento de la malla en problemas transitorios es utilizar como configuración de referencia la configuración conocida del paso de tiempo anterior. Esta opción ha sido utilizada exitosamente en una gran variedad de problemas en el área de flujos con interfaces móviles, tales como problemas de superficie libre, flujos multifase, interacción fluido-estructura (FSI), entre otros [77, 82, 83, 87, 95]. Sin embargo, la misma es—por construcción—dependiente del camino y por lo tanto presenta síntomas de acumulación de distorsión de los elementos de la malla frente a movimientos cíclicos en analogía a un comportamiento de histéresis elástica. Los métodos de movimiento de malla basados en ecuaciones de grandes deformaciones son una buena opción para abordar este inconveniente. En este sentido, un método de movimiento de mallas basado en materiales con refuerzo de fibras hiperelásticas y un estado de configuraciones libre de tensiones optimizado fue introducido por Takizawa *et al.* [72]. En Biocca *et al.* [6], se introduce un nuevo *framework* biológicamente inspirado para la optimización y movimiento de mallas (BIMO), siguiendo de cerca los lineamientos planteados en [72]. En este *framework*, utilizamos como punto de partida el problema mecánico asociado a tejidos biológicos para proponer una formulación al problema de relajación de mallas [71, 72]. En particular, el problema de movimiento de mallas se pone en analogía con el equilibrio mecánico de la pared arterial, considerando las estrategias utilizadas en [72], estas son, la utilización de materiales reforzados con fibras hiperelásticas y el uso de configuraciones

²Nos tomamos aquí la libertad de no señalarlo explícitamente pues distintas estrategias surgirán entorno a la selección de este dominio en el contexto de grandes desplazamientos, en particular, aquellos que involucren movimientos cíclicos.

libres de tensiones (ZSS) optimizadas. El *framework* introducido en esta tesis considera la existencia de predeformación que surge como consecuencia de configuraciones ZSS incompatibles. Como novedades, consideramos que las configuraciones ZSS sean—en general—diferentes para los distintos constituyentes (estos son, fibras de colágeno y elastina) y también introducimos un paradigma de crecimiento y remodelado (G&R) [37, 39, 59] para definir el reclutamiento de fibras y configuraciones ZSS dependientes del tiempo o incluso múltiples escalas temporales asociadas a distintos fenómenos, tales como aquellas referidas a mecanismos de G&R y la escala temporal asociada a la dinámica de movimiento de las interfases móviles.

Por otro lado, Terahara *et al.* [76] introduce el método *Back-Cycle-Based Mesh Moving* (BCBMM) el cual consiste en seleccionar la configuración de referencia a partir del conjunto de configuraciones resultantes para un dado ciclo de referencia. De este modo, se elimina la acumulación de distorsión entre ciclos. Sin embargo, esta estrategia requiere guardar todas las configuraciones correspondientes a dicho ciclo, lo cual representa un costo computacional considerable en términos relativos a las estrategias antes mencionadas. En Tonon *et al.* [91], se presentan—por primera vez—casos de prueba para esta metodología y además se introduce el método *Half-Cycle-Based Mesh Moving* (HCBMM), especialmente diseñado para el movimiento de interfases móviles cuya segunda parte del ciclo consiste en recorrer el mismo camino correspondiente a la primer mitad del ciclo y se desea que la malla se comporte del mismo modo.

5.2. Configuración de referencia - estrategias de selección

Dentro del conjunto de técnicas basadas en ecuaciones de la elasticidad lineal, una de las metodologías más generales es la denominada *Mesh Jacobian-Based Stiffening* (MJBS)³ [68]. Esta metodología, descrita en la Sección 2.2, introduce el movimiento de malla como la parte del siguiente problema mecánico: encontrar $\mathbf{u} \in \text{Kin}_{\mathbf{u}}$ tal que

$$\int_{\Omega_{\bar{\tau}}} \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}) \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) \left(\frac{J^R}{J^M} \right)^x d\Omega = 0 \quad \forall \mathbf{u} \in \text{Var}_{\mathbf{u}}, \quad (5.1)$$

siendo $J^M = \det(\partial \mathbf{x}_{\bar{\tau}} / \partial \boldsymbol{\xi})$ el Jacobiano de la malla correspondiente de una transformación entre la configuración *master* (con coordenadas paramétricas $\boldsymbol{\xi}$) y la configuración de

³Esta metodología originalmente fue denominada *Jacobian-Based Stiffening* y renombrada como *Mesh Jacobian-Based Stiffening* en [76] para mayor claridad al indicar que se hace referencia al Jacobiano de la malla.

referencia $\Omega_{\tilde{t}}$ (con coordenadas $\mathbf{x}_{\tilde{t}}$) al tiempo de referencia \tilde{t} , J^R un parámetro de referencia global (arbitrario) para consistencia dimensional de las ecuaciones, χ es un parámetro de endurecimiento relativo entre elementos de distintos volumen, $\boldsymbol{\varepsilon}(\cdot) = (\nabla(\cdot))^S$ el tensor gradiente simétrico y $\boldsymbol{\sigma}$ las tensiones de Cauchy que, bajo hipótesis de elasticidad lineal, pueden relacionarse con los desplazamientos⁴ según la Ley de Hooke, es decir

$$\boldsymbol{\sigma} = \lambda \operatorname{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) \mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \quad (5.2)$$

siendo λ y μ las constantes de Lamé, \mathbf{I} el tensor identidad y $\operatorname{tr}(\cdot) = (\cdot) \cdot \mathbf{I}$ el operador trazo. Por otro lado, los espacios de soluciones cinemáticamente admisibles junto al espacio de variaciones admisibles es

$$\operatorname{Kin}_{\mathbf{u}} = \{ \mathbf{u} \in \mathbf{H}^1(\Omega_{\tilde{t}}), \mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \text{ en } \Gamma_{\tilde{t}} \}, \quad (5.3)$$

$$\operatorname{Var}_{\mathbf{u}} = \{ \hat{\mathbf{u}} \in \mathbf{H}^1(\Omega_{\tilde{t}}), \mathbf{u} = \mathbf{0} \text{ en } \Gamma_{\tilde{t}} \}, \quad (5.4)$$

siendo $\mathbf{H}^1 \stackrel{\text{def}}{=} (H^1)^{n_{sd}}$ el espacio de funciones vectoriales con n_{sd} componentes y $H^1(\Omega_{\tilde{t}})$ el espacio de Hilbert cuyos elementos son de cuadrado integrable hasta su primer derivada en el dominio $\Omega_{\tilde{t}}$, cuya frontera es $\Gamma_{\tilde{t}}$.

En esta sección presentamos las distintas opciones que surgen al momento seleccionar la configuración de referencia (libre de tensiones) $\Omega_{\tilde{t}}$, en el contexto de movimientos cíclicos. Estas resultan a partir de la selección del tiempo \tilde{t} al computar la malla para el tiempo t_{n+1} , es decir, seleccionar la configuración libre de tensiones $\Omega_{\tilde{t}}$ del material pseudo-elástico al tiempo t_{n+1} , cuya configuración de equilibrio será $\Omega_{t_{n+1}}$. El período del ciclo se denota con T y N indica la cantidad de pasos de tiempo que hay en un ciclo.

Estrategia TZ

La primera opción resulta de fijar la configuración de referencia como $\Omega_{\tilde{t}} = \Omega_{t_0}$. Algunos autores denominan esta estrategia TZ, indicando que la configuración de referencia adoptada se corresponde con la configuración a tiempo cero. La Figura 5.1 muestra un diagrama con el rol de las distintas configuraciones: arriba se muestra la configuración de referencia (libre de tensiones) correspondiente a cada una de las configuraciones de equilibrio conforme el sistema evoluciona en el tiempo. Con esta selección no hay acumulación de distorsión entre ciclos, pero dependiendo del tamaño de los desplazamientos

⁴Para ser precisos, por principio de objetividad de las tensiones y asumiendo desplazamientos y deformaciones pequeños, estas se relacionan con el gradiente simétrico de los desplazamientos $(\nabla \mathbf{u})^S$.

asociados a las interfaces móviles, la distorsión en términos de calidad de malla dentro de un ciclo puede alcanzar niveles inaceptables. Vale la pena mencionar que esta estrategia es una opción viable en el contexto de una formulación en grandes deformaciones.

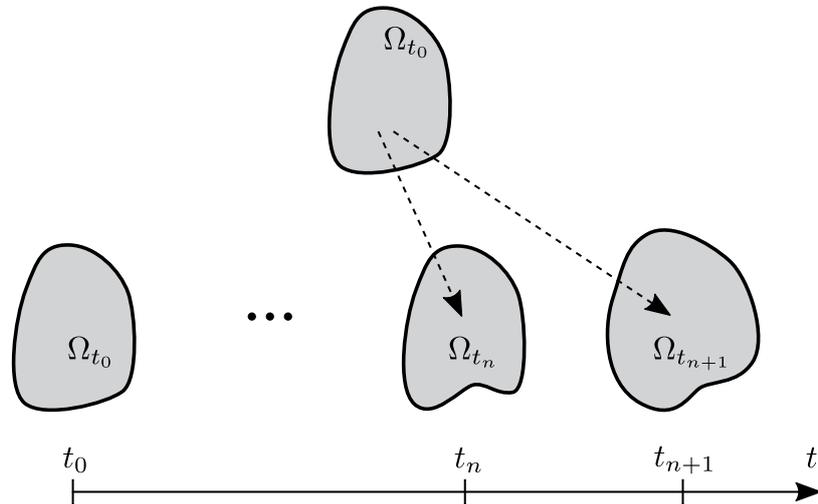


Figura 5.1: Estrategia TZ. Arriba, la configuración libre de tensiones seleccionada $\Omega_{\bar{t}} = \Omega_{t_0}$, constante en el tiempo. Abajo, se indican las configuraciones de equilibrio junto con la evolución dinámica del sistema.

Estrategia TN

Otra de las opciones es utilizar como configuración libre de tensiones $\Omega_{\bar{t}} = \Omega_{t_n}$. Esta es la más común de las opciones y ha demostrado resultados satisfactorios en una gran cantidad de problemas. Algunos autores la denominan TN, indicando que la configuración libre de tensiones correspondiente a la configuración de equilibrio $\Omega_{t_{n+1}}$, es la configuración Ω_{t_n} . La ventaja de esta técnica radica en calcular la configuración de equilibrio $\Omega_{t_{n+1}}$ a partir de una configuración cercana Ω_{t_n} (ver Figura 5.2), utilizando el endurecimiento relativo J_M como canal de retroalimentación para proteger elementos de altas distorsiones. A pesar que este método se desempeña bien para la mayoría de los problemas, al tratarse de un estrategia de solución que depende del camino, involucra acumulación de distorsión entre diferentes ciclos.

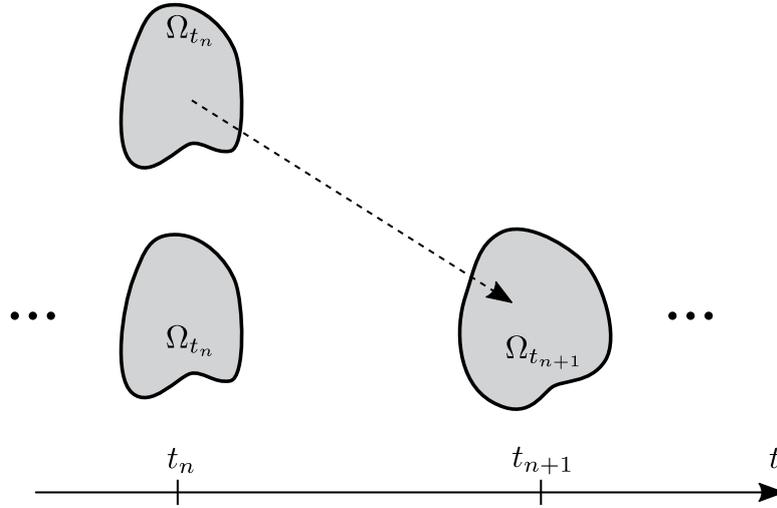


Figura 5.2: Estrategia TN. Arriba, la configuración libre de tensiones se elige tal que $\Omega_{\tilde{t}} = \Omega_{t_n}$. La misma se va actualizando con cada nueva configuración de equilibrio alcanzada $\Omega_{t_{n+1}}$. Abajo, la secuencia de configuraciones de equilibrio en función del tiempo.

Estrategia BCBMM

Con respecto a opciones que aseguran la no acumulación de distorsión entre ciclos, Terahara *et al.* [76] presenta una estrategia denominada *back-cycle-based mesh moving* (BCBMM). En esta estrategia, el cálculo de la configuración de equilibrio al tiempo t_{n+1}^k (siendo $n + 1$ el paso de tiempo dentro del ciclo k), es decir, $\Omega_{t_{n+1}^k}$ toma como configuración libre de tensiones la configuración $\Omega_{t_n^{ref}}$ correspondiente al paso de tiempo n de un ciclo de referencia (ver Figura 5.3). Esta técnica fue implementada por primera vez exitosamente por Tonon *et al.* [91] para problemas 2D y 3D en mallas de elementos finitos, eliminando por completo la acumulación de distorsión de la malla por ciclos. La elección de la configuración $\Omega_{\tilde{t}}$ puede realizarse seleccionando el tiempo \tilde{t} según

$$\tilde{t} = t_n - (k - k_{FORW} - 1)T, \quad (5.5)$$

siendo $k = \text{floor}(t_n/T) + 1$ el número del ciclo, la función $\text{floor}(x)$ aquella que devuelve el mayor número entero menor o igual que x y k_{FORW} un parámetro que indica el número de ciclo de referencia. Por ejemplo, usando $k_{FORW} = 0$, el movimiento de malla se calcula utilizando como configuraciones de referencia todas aquellas correspondientes al primer ciclo. Vale la pena mencionar que, para ciclos posteriores al primero, este parámetro puede modificarse en caso de ser necesario, para utilizar como configuración de referencia la

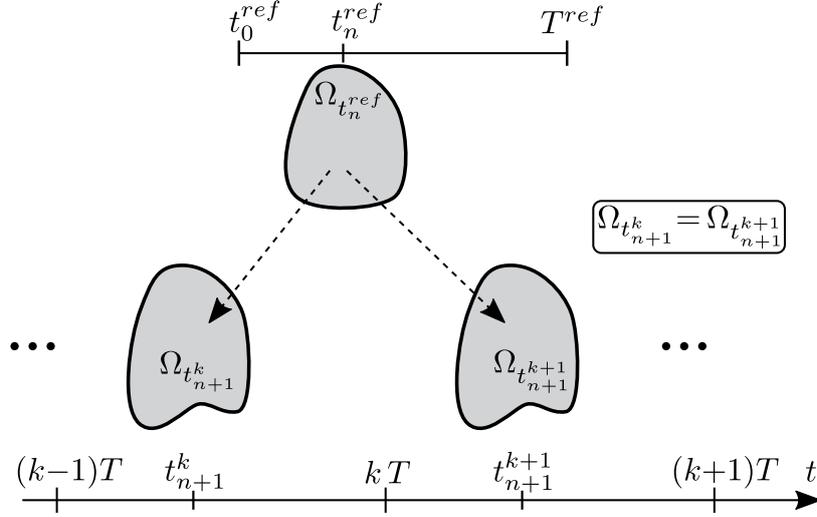


Figura 5.3: Estrategia BCBMM. En la parte superior, la configuración libre de tensiones $\Omega_{t_n^{ref}}$ correspondiente al ciclo de referencia T^{ref} . Esta configuración es la misma para todas las configuraciones de equilibrio $\Omega_{t_{n+1}^k}, \forall k \in \mathbb{Z}_{>0}$ indicadas en la parte inferior.

correspondiente ciclos más recientes. Esto podría ser una buena estrategia, por ejemplo, en caso de haber diferencias significativas entre las soluciones al problema FSI de distintos ciclos antes de que la solución se vuelva cíclica o un estado cercano. Como una variedad a esta técnica, también es posible, para ciclos $k \geq 2$, seleccionar \tilde{t} de acuerdo con la siguiente estrategia

$$\tilde{t} = t_{n+1} - (k - k_{FORW} - 1)T. \quad (5.6)$$

Estrategia HCBMM

Por otro lado, Tonon *et al.* [91] presenta la variante *half-cycle-based mesh moving* (HCBMM) para el caso particular en que el movimiento de las interfaces móviles consista en ciclos simétricos. En este caso, para la segunda parte del ciclo, el movimiento consiste en recorrer el mismo camino que el realizado durante la primera mitad del ciclo. Esto puede expresarse del siguiente modo en términos de la selección del tiempo de referencia \tilde{t}

$$\tilde{t} = \begin{cases} t_n & \text{si } t_n < T/2 \\ t_{N-(n+1)} & \text{en otro caso} \end{cases}, \quad (5.7)$$

siendo N el número de pasos de tiempo en un período T . En la Figura 5.4 se muestra un diagrama de esta estrategia para seleccionar configuraciones de equilibrio. Esta opción presenta la ventaja que requiere almacenar la mitad de configuraciones de referencia respecto la estrategia BCBMM, siempre y cuando la dinámica del ciclo lo permita, es decir, que sea simétrico.

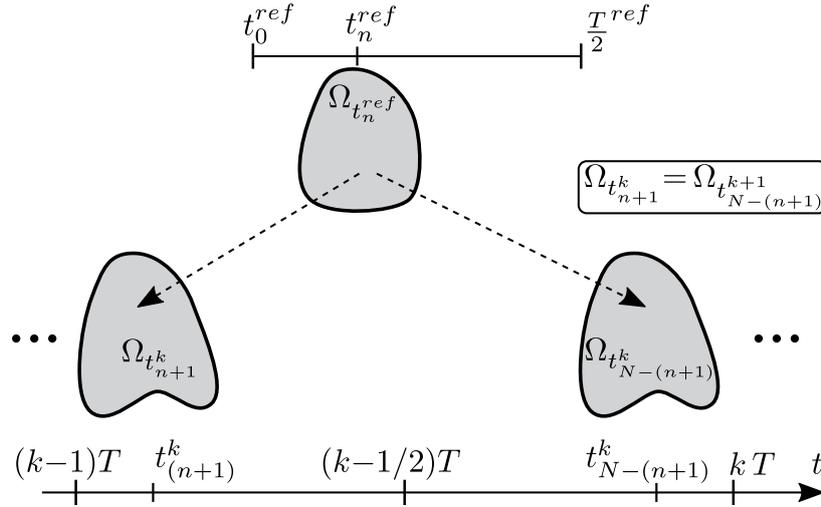


Figura 5.4: Estrategia HCBMM. En la parte superior se muestra la configuración libre de tensiones correspondiente al medio ciclo de referencia T^{ref} . Esta configuración es la misma para todas las configuraciones de equilibrio $\Omega_{t_{n+1}^k}$ y $\Omega_{t_{N-(n+1)}^k} \forall k \in \mathbb{Z}_{>0}$, siendo N el número de pasos de tiempo en un ciclo.

Costo computacional

Consideremos ahora el costo computacional asociado con las estrategias descriptas. Por un lado, las primeras dos estrategias mencionadas, es decir, aquella tal que la configuración de referencia es única (TZ) y aquella en donde la misma se actualiza con la configuración de equilibrio del paso de tiempo anterior (TN). Ambas son de bajo costo computacional en términos de memoria, ya sea porque la configuración libre de tensiones de tensiones es fija (TZ) o porque esta se actualiza con la misma solución del problema (TN). La estrategia TZ no sufre de acumulación de distorsión entre ciclos, sin embargo, al resolver un problema lineal elástico se encuentra restringida a la resolución de pequeños desplazamientos y deformaciones de las interfases móviles para no sufrir grandes distorsiones de malla dentro de un mismo ciclo. En cambio, la estrategia TN permite resolver problemas en grandes desplazamientos como una sucesión de pequeños desplazamientos a cada paso de tiempo, sin embargo, esta estrategia cuenta con acumulación de distorsión entre ciclos. Por último,

se encuentran las estrategias sin acumulación de distorsión de malla entre ciclos, estas son, BCBMM y HCBMM. Estas opciones resuelven satisfactoriamente el problema de acumulación de distorsión en grandes desplazamientos a través de la resolución de un problema elástico lineal (MJBS), sin embargo, traen asociado el siguiente costo computacional: su implementación requiere guardar el conjunto de todas las configuraciones asociadas a un ciclo de referencia, a diferencia de las estrategias TZ y TN que sólo requieren la inicial y la de un paso de tiempo anterior, respectivamente. Para poner en evidencia este aspecto, consideremos una reducción del tamaño de arista, por ejemplo, para realizar un análisis de convergencia de malla. Además, para simplificar el análisis, supongamos una reducción del tamaño de arista a la mitad. Esto implica un incremento en la cantidad de nodos de la malla en promedio de $2^{n_{sd}}$, siendo n_{sd} la dimensión de la malla. Más aún, en el caso de problemas FSI, para mantener el número de Courant de la simulación es necesario disminuir el paso de tiempo a la mitad, pues el Courant es inversamente proporcional al tamaño de las aristas. Aquí es donde se pone en evidencia el costo computacional asociado: no sólo la cantidad de nodos se incrementa en $2^{n_{sp}}$ sino que también se incrementa el número de configuraciones que hace falta almacenar, resultando un aumento asociado en memoria de las configuraciones de referencia de orden $2^{n_{sp}+1}$. Por último, vale la pena mencionar que la estrategia HCBMM reduce este costo a la mitad por requerir solo medio ciclo de referencia.

5.3. Casos de prueba

En esta sección compararemos las metodologías MJBS y BIMO en el contexto de movimientos cíclicos en problemas 2D y 3D. Todas las comparaciones aquí serán en el contexto de una estrategia TN tanto para la resolución por intermedio de la metodología MJBS como BIMO. Notamos aquí que la metodología BIMO utiliza inherentemente una estrategia tipo TN, no siendo así el caso del método MJBS (ver Sección 5.2).

Con respecto a la propiedades de material utilizadas, todos los casos resueltos con el método MJBS se utiliza como constante de endurecimiento $\chi = 1$ en todo el dominio y las constantes de Lamé λ y μ se calculan para un valor de coeficiente de Poisson $\nu = 0.3$, de acuerdo con la relación $\mu/\lambda = \frac{1-2\nu}{2\nu}$. Dado que en ausencia de esfuerzos externo el comportamiento está dado por el *ratio* μ/λ , asumimos $\lambda = 1$ y luego calculamos μ con la relación mencionada para un dado valor de ν requerido.

Por otro lado, los casos resueltos con la metodología BIMO difieren las propiedades

de material entre problemas 2D y 3D. Para el caso de problemas 2D se utiliza un *ratio* $k_f/k_g = 1$ y $\lambda_{max} = 1.5$ mientras que en problemas 3D utilizamos $k_f/k_g = 10$ y $\lambda_{max} = 1.05$. Vale la pena mencionar que en la resolución de problemas 2D, se considera un estado de deformación plano (ver Sección 1.1.6). Además, se utiliza cada paso de tiempo (de movimiento) como una etapa de remodelado.

Medidas de calidad de malla

Como medida de calidad en esta sección consideramos la relación de aspecto (AR), tanto en los casos de prueba para problemas 2D como 3D, asociados con elementos triangulares y tetraédricos lineales, respectivamente. Este parámetro se define en forma general para elementos tipo simplex del siguiente modo

$$AR^e \propto \frac{(l_{max}^e)^{n_{sp}}}{|\Omega^e|}, \quad (5.8)$$

siendo l_{max}^e el tamaño máximo de arista, n_{sp} el número dimensión del simplex y $|\Omega^e|$ el volumen (área en 2D) del elemento e . La constante de proporcionalidad se define en función de la dimensión n_{sp} del simplex de forma tal que la forma regular (es decir, aquella cuyas aristas sean todas iguales) tenga como valor mínimo $AR = 1$.

Por otro lado, para medir la acumulación de distorsión de las mallas se utiliza la norma L_2 de la posición relativa de las coordenadas de la malla, con respecto a un ciclo de referencia

$$\epsilon_{L_2}^h(t, t_{ref}) = \left(\frac{\int_{\Omega_{ref}} \|\mathbf{x}_t^h - \mathbf{x}_{ref}^h\|^2 d\Omega}{\int_{\Omega_{ref}} d\Omega} \right)^{1/2}, \quad (5.9)$$

siendo t_{ref} el tiempo correspondiente en el ciclo de referencia.

5.3.1. 2D Thin-Walled Beam

El caso de prueba presentado en esta sección se basa en el presentado en la Sección 4.2.1. Consiste en una viga de espesor delgado⁵ que se encuentra inicialmente centrada en un dominio cuadrado, sujeta a distintos modos de deformación, estos son, traslación, rotación y flexión (ver Figuras 5.5a–5.5c). Los primeros dos modos de deformación representan movimientos de cuerpos rígidos (en combinación, una rototraslación). En cuanto a la

⁵En rigor, la dimensión de la viga está reducida a la de una línea unidimensional.

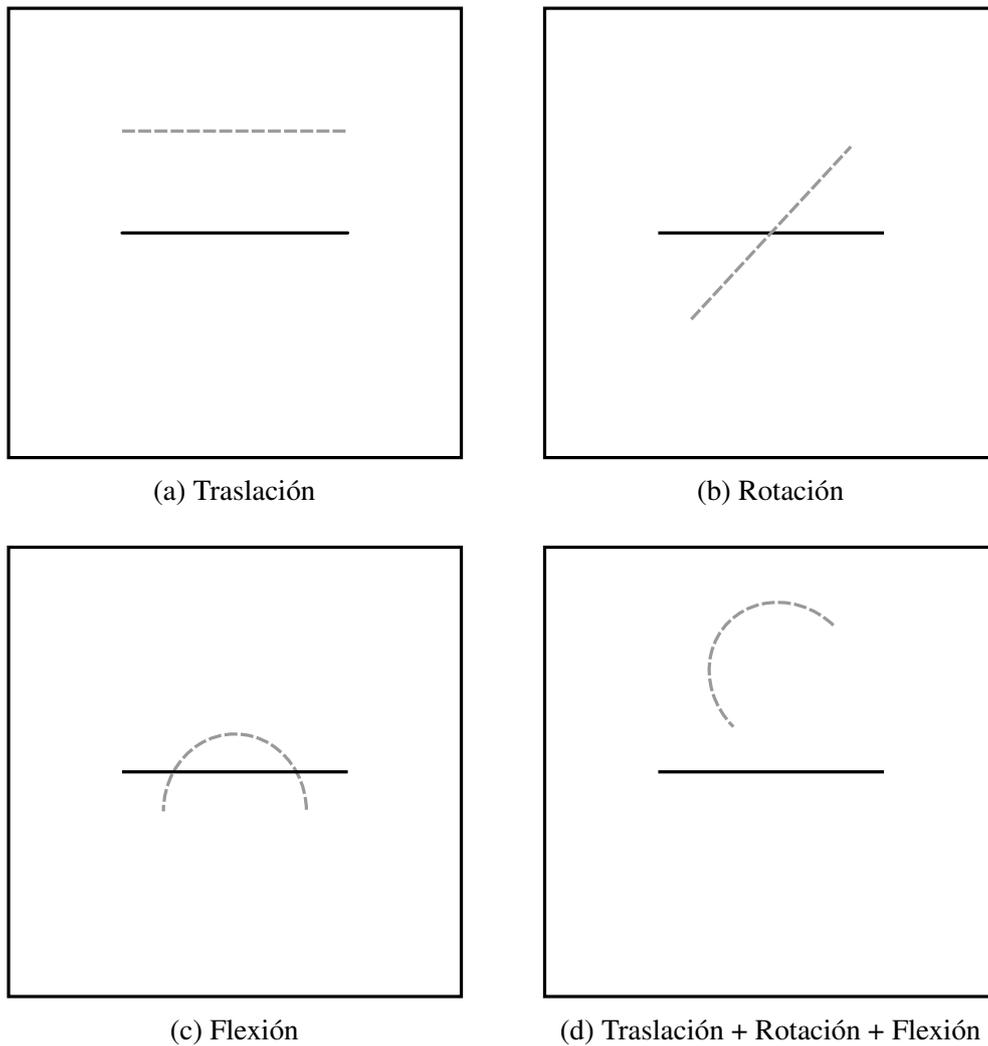


Figura 5.5: Viga 2D sin espesor. Modos de deformación de traslación (a), rotación (b), flexión (c) y la combinación de los anteriores (d). Las líneas sólidas indican la configuración inicial de la viga y una cota inferior de la misma como parte del movimiento cíclico. Las líneas punteadas indican la viga en la cota superior del movimiento (máximo desplazamiento).

flexión, la estructura se mapea de una línea recta a un arco circular, sin estiramiento neto y sin desplazamiento neto vertical ni horizontal. Vale la pena mencionar que no se modela la viga sino que su línea media queda representada por la frontera Γ_b (ver Figura 5.6).

La dinámica de los modos de deformación mencionados puede controlarse a través de un parámetro general $\alpha = \alpha(t)$. En particular, seleccionamos una dinámica cíclica caracterizada del siguiente modo

$$\alpha(t) = \frac{\alpha_{max}}{2} \left(1 - \cos \left(\frac{2\pi}{T} t \right) \right), \quad (5.10)$$

siendo T el período del ciclo y α_{max} la amplitud máxima del modo de deformación. Para los casos de prueba en estudio, la constante α_{max} , dependiendo del modo de deformación, toma los siguientes valores

$$\alpha_{max} = \begin{cases} \delta_{max} = 0.5 & \text{modo traslación,} \\ \theta_{max} = \pi/4 & \text{modo rotación,} \\ \theta_{max} = \pi & \text{modo flexión.} \end{cases} \quad (5.11)$$

En esta sección proponemos un modo de deformación determinado por la combinación de los modos de traslación, rotación y flexión. La Figura 5.5d muestra un esquema de la deformación resultante. Este modo de deformación se prescribe en pasos de tiempo uniformes tal que un ciclo se complete en 100 pasos, esto es, $\Delta t = T/100$. Además, los desplazamientos en la frontera externa están restringidos en la dirección normal, mientras que el desplazamiento de la viga queda impuesto por el mapeo resultante como condición de dirichlet.

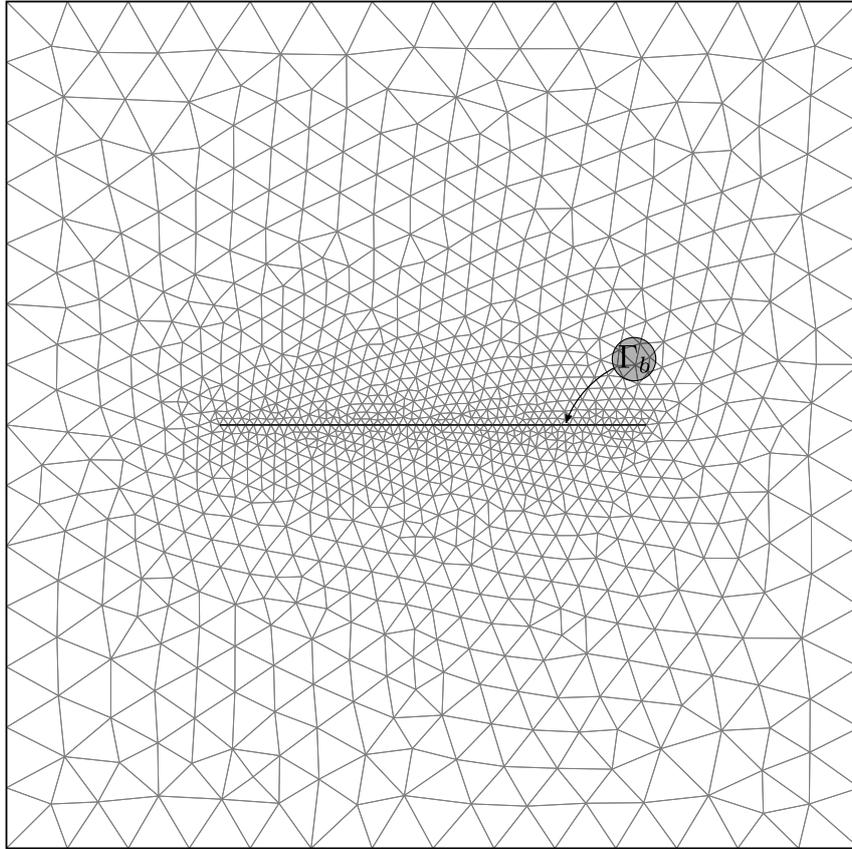


Figura 5.6: Viga 2D sin espesor. Malla en la configuración inicial Ω_0 . La viga en su estado inicial se encuentra indicada con Γ_b .

La Figura 5.6 muestra la configuración inicial de la malla, la misma cuenta con 2080 elementos triangulares lineales y 1069 nodos. En este capítulo, a diferencia de los casos resueltos en la Sección 4.2.1, no empleamos una estrategia de extensión sólida para la generación de la malla, a efectos de enfatizar el fenómeno de acumulación de distorsión de malla entre ciclos y simplificar la presentación de resultados.

La Figura 5.7 muestra la configuración de la malla para un instante de tiempo correspondiente con la máxima amplitud del movimiento, en donde se espera que la deformación de la malla sea máxima ($t = T/2$), resolviendo con MJBS (a) y BIMO (b).

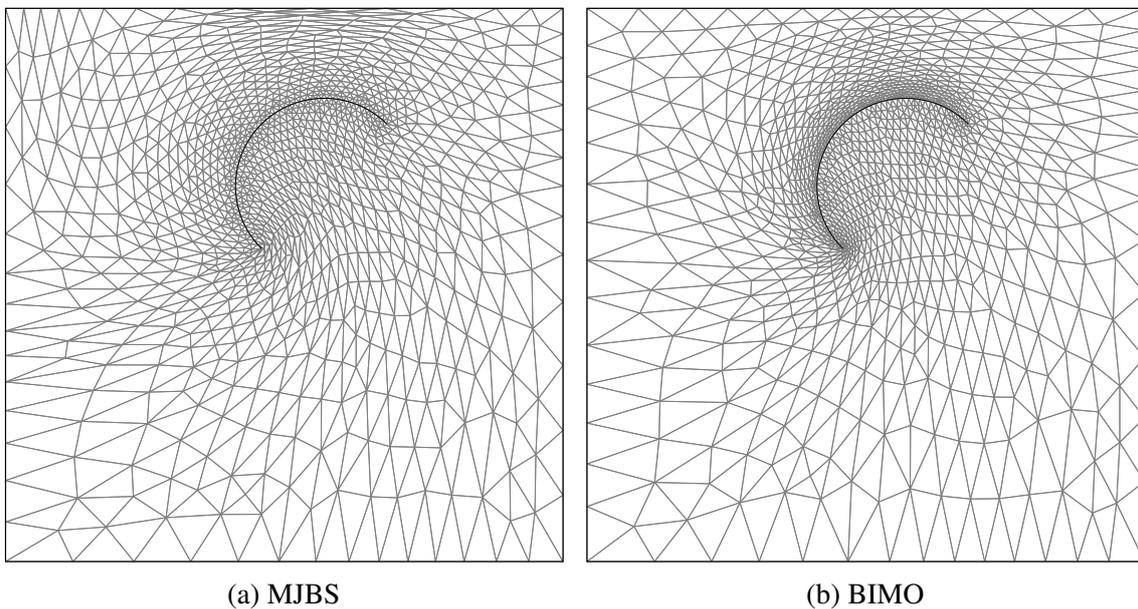


Figura 5.7: Viga 2D sin espesor. Configuración para el desplazamiento máximo resolviendo con MJBS (a) y BIMO (b).

En términos cuantitativos, la Figura 5.8 muestra un diagrama de violines asimétricos para la densidad de calidad de los elementos (AR) para los puntos de desplazamiento nulo y máximo de la interfase, resolviendo con las metodologías MJBS y BIMO, durante 5 ciclos del movimiento, medido en término de $2t/T$. De acuerdo con los resultados, se observa que ambos métodos resuelven de manera satisfactoria el problema de movimiento de mallas. Sin embargo, es posible apreciar a partir de las métricas utilizadas (violines asimétricos y norma del máximo) un mejor desempeño por parte de la metodología BIMO (gris) respecto a MJBS (plata). Por un lado, la densidad de calidad de malla otorga una perspectiva general de los resultados, aquí se puede observar que BIMO admite una mayor deformación de los elementos en general para no comprometer la integridad de unos pocos. En cambio, la metodología MJBS preserva una buena cantidad de elementos con su

forma inicial, sin embargo, permite que unos pocos elementos sufran grandes niveles de distorsión. Además, es posible inferir la falta de periodicidad en las soluciones al resolver con la metodología MJBS, observando la norma del máximo de la relación de aspecto (AR), representada por líneas sólidas, por ejemplo, al observar la diferencia entre los valores máximos de esta norma.

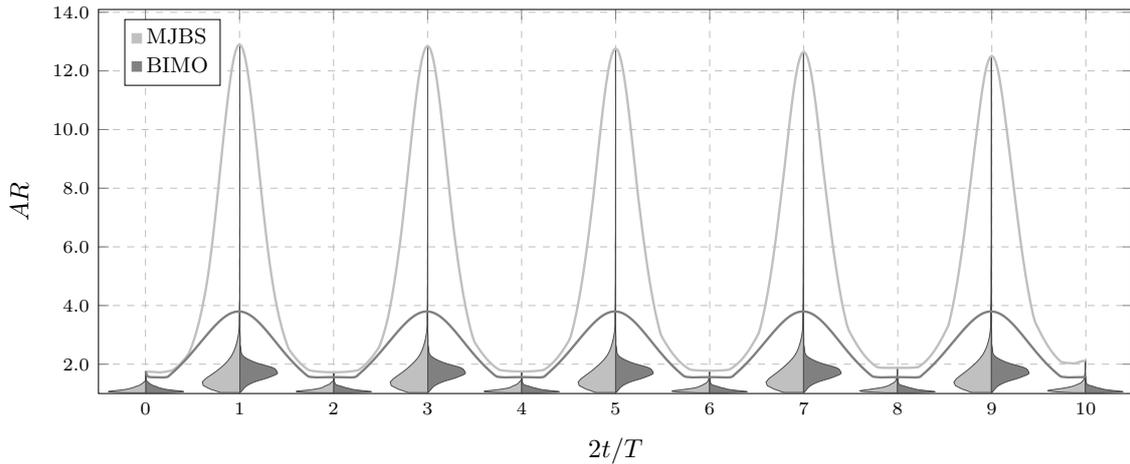


Figura 5.8: Viga de espesor delgado. Diagrama de violines asimétricos para la densidad de calidad de los elementos (AR) para las configuraciones de máxima distorsión e iniciales de los primeros cinco ciclos, resolviendo con las metodologías MJBS (plata) y BIMO (gris). Las líneas sólidas indican la norma del máximo de (AR) para cada paso de tiempo durante los primeros cinco ciclos.

La Figura 5.9 muestra la norma de la distorsión de la malla asociada entre ciclos $\epsilon_{L_2}^h$ utilizando el ciclo número 2 como ciclo de referencia, dada la capacidad de adaptación del método BIMO, en las primeros pasos de tiempo del primer ciclo se realiza una optimización general de la malla. A modo de resumen, la norma no se computa para el primer ciclo y para el segundo ciclo su valor es cero. Como puede observarse, el método MJBS acumula distorsión entre ciclos mientras que al resolver con BIMO este fenómeno es varios órdenes de magnitud menor y tampoco se observa el fenómeno de acumulación de distorsión.

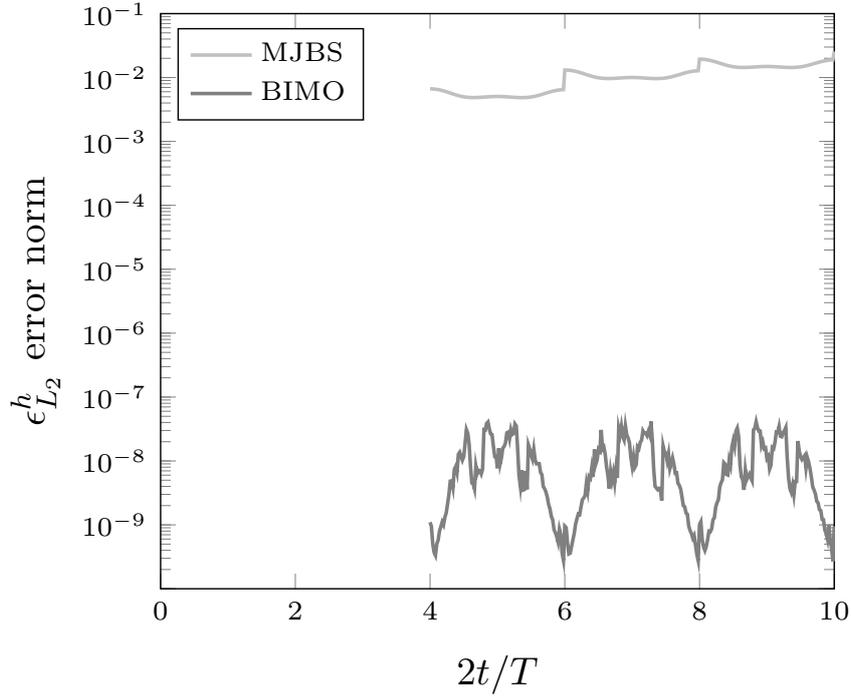


Figura 5.9: Viga 2D de espesor delgado. Norma de la distorsión de la malla entre ciclos tomando como referencia el segundo ciclo para cada paso de tiempo a partir del segundo ciclo resolviendo con la metodologías MJBS (plata) y BIMO (gris).

5.3.2. 3D Hollow Beam

En esta sección presentamos un caso de prueba basado en el presentado en la Sección 4.2.2, adaptado al contexto de movimiento cíclicos. El mismo consiste en un viga de sección cuadrada sujeta a torsión por uno de sus extremos y empotrada en el opuesto. La torsión surge de imponer un giro $\theta = \pi/2$ en la sección de uno de los extremos en la dirección del eje axial de la viga. La Figura 5.10 muestra la configuración del problema y el modo de deformación propuesto. Las líneas en negro indican la configuración inicial (posición de amplitud mínima del ciclo con giro nulo) y en gris se muestra la configuración de máxima amplitud y distorsión del movimiento. Vale la pena mencionar que la viga 3D no se modela sino que sólo su superficie es representada dentro del seno de un dominio en forma de cuboide. La dinámica del movimiento puede definirse según la siguiente ecuación

$$\theta(t) = \frac{\theta_{max}}{2} \left(1 - \cos \left(\frac{2\pi}{T} t \right) \right), \quad (5.12)$$

siendo T el período del ciclo y $\theta_{max} = \pi/2$ el giro máximo. El movimiento se prescribe en pasos de tiempo uniformes tal que un ciclo se completa en 100 pasos, es decir, $\Delta t = T/100$. Además, el desplazamiento de la frontera externa—del cuboide—se encuentran restringidos en la dirección normal, permitiendo el desplazamiento en la dirección tangencial.

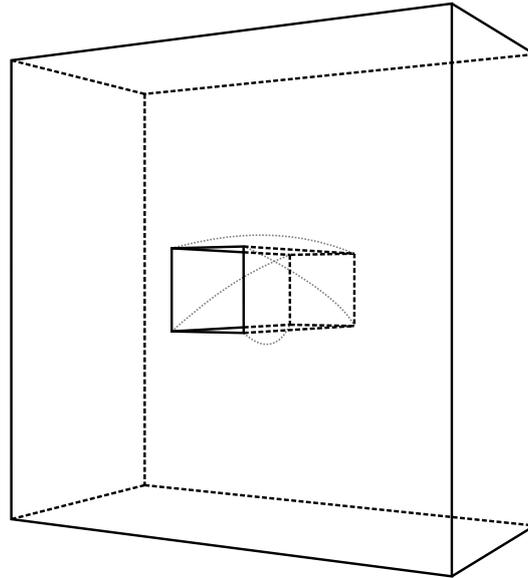


Figura 5.10: Viga 3D sujeta a torsión. Configuración del problema. Las líneas negras indican la configuración inicial (mínima amplitud del movimiento) y las líneas punteadas representan la configuración en su estado de máxima distorsión y amplitud del movimiento cíclico.

Con respecto a la discretización utilizada, en la Figura 5.11 se muestra la malla en su configuración inicial, la cual está compuesta por 33319 elementos tetraédricos lineales y 7046 nodos. Al igual que en el caso de estudio anterior (ver Sección 5.3.1), no utilizamos una estrategia de extensión sólida para la generación de la malla, a efectos enfatizar el fenómeno de acumulación de distorsión y simplificar la presentación de los resultados.

La Figura 5.12 muestra la malla en una configuración de máxima distorsión, en particular $t = T/2$ (primer ciclo), utilizando las metodologías MJBS (a) y BIMO (b).

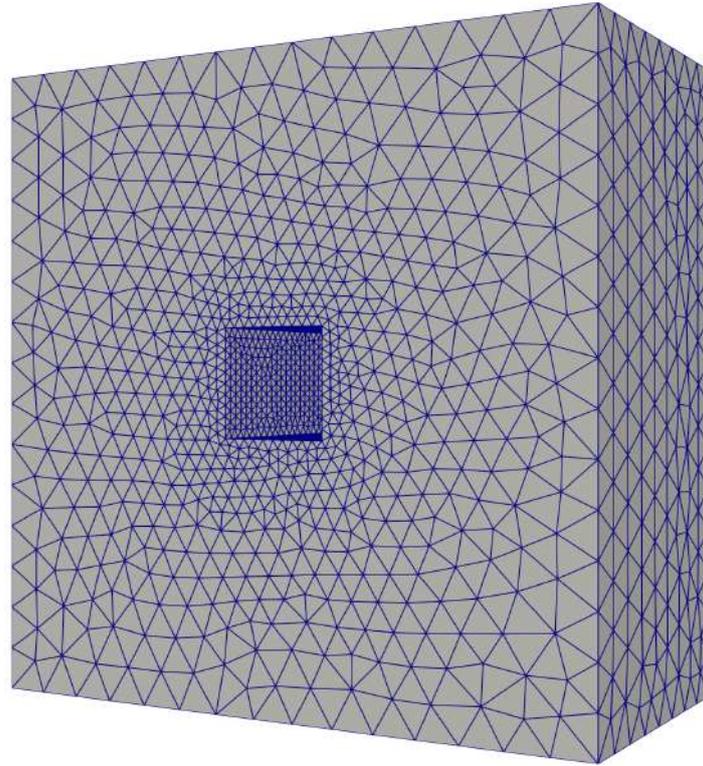


Figura 5.11: Viga 3D. Discretización del modelo en la configuración inicial por elementos tetraédricos lineales.

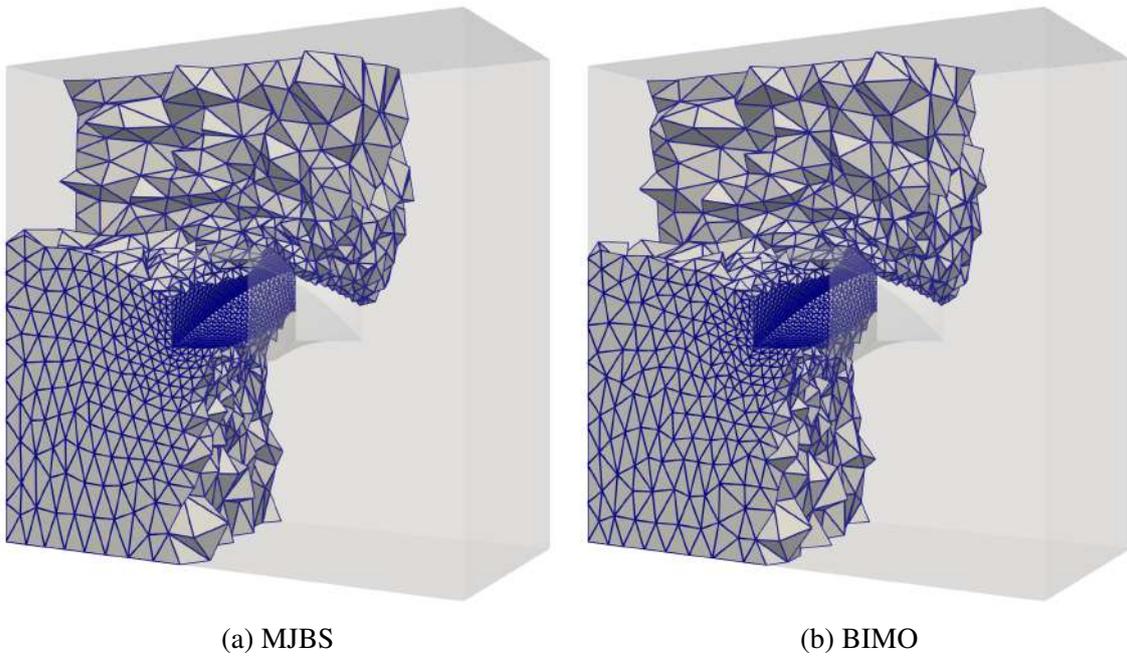


Figura 5.12: Viga 3D. Configuración para el desplazamiento máximo resolviendo con MJBS (a) y BIMO (b).

La Figura 5.13 muestra un diagrama de violines asimétricos para la densidad de calidad de los elementos (AR), resolviendo con las metodologías MJBS (plata) y BIMO (gris) durante los primeros 5 ciclos del movimiento. Los resultados muestran que ambos métodos resuelven de manera satisfactoria el problema de movimiento de la malla. Sin embargo, a partir de las métricas utilizadas (densidad de calidad AR y norma del máximo) se observa un mejor desempeño de BIMO frente a MJBS. De la densidad de calidad se puede apreciar que BIMO admite mayor deformación (en el sentido de pérdida de calidad) de los elementos en general para no comprometer la integridad de unos pocos. En cambio, la metodología MJBS se desempeña muy bien preservando las calidad de la malla inicial (en este caso, una malla con buena calidad), sin embargo, a partir de los resultados se observa que unos pocos elementos pueden sufrir niveles altos de distorsión. Además, se puede inferir la falta de periodicidad de esta metodología a partir de la norma del máximo, representada por líneas sólidas, la cual se va incrementando en forma cíclica.

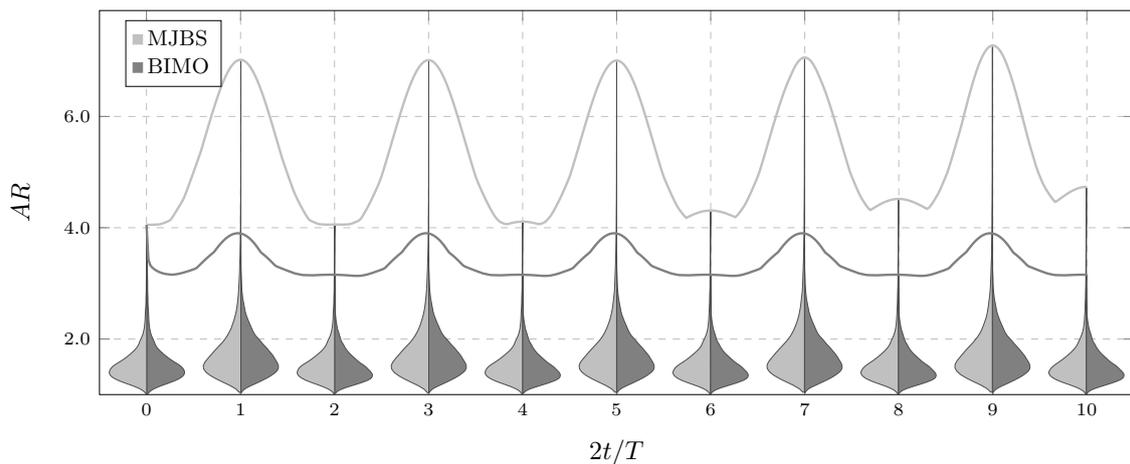


Figura 5.13: Viga 3D. Diagrama de violines asimétrico para la densidad de calidad de los elementos (AR) para las configuraciones de mínima y máxima distorsión de los primeros cinco ciclos, resolviendo con las metodologías MJBS (plata) y BIMO (gris). Las líneas sólidas indican la norma del máximo de AR para los primeros 5 ciclos del movimiento.

La Figura 5.14 muestra la norma de la distorsión de la malla asociada entre ciclos $\epsilon_{L_2}^h$ utilizando el segundo ciclo como referencia. Dada la capacidad de adaptación del método BIMO, en los primeros pasos de tiempo del primer ciclo se realiza una optimización general de la malla, por ende, el primer ciclo no es adecuado para cuantificar distorsión. De acuerdo con los resultados, se observa que el método MJBS acumula distorsión entre ciclos mientras que al resolver con BIMO este fenómeno es varios órdenes de magnitud menor y además no es acumulativo entre ciclos.

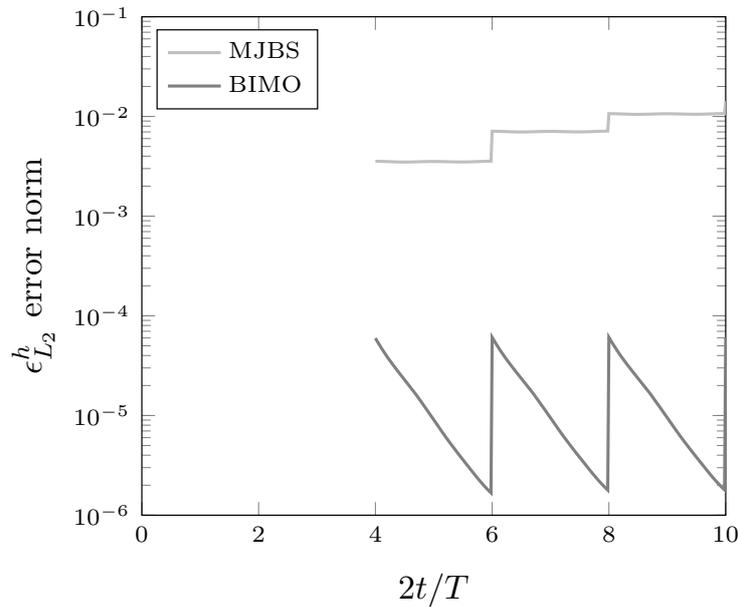


Figura 5.14: Viga 3D. Norma de la distorsión de la malla entre ciclos utilizando el segundo ciclo como referencia, según las metodologías MJBS (plata) y BIMO (gris).

5.4. Conclusiones

Los métodos de movimiento de malla basados en ecuaciones de la elasticidad lineal han sido ampliamente utilizados como parte fundamental de la resolución de problemas con interfases móviles por intermedio de técnicas de *seguimiento de interfases*. Por ejemplo, en la resolución de flujos en el contexto de problemas de interacción fluido-estructura, entre otros. Al resolver las ecuaciones de elasticidad como parte de la metodología MJBS junto con una estrategia tipo TN para la actualización de la configuración de libre de tensiones (la cual es una práctica muy común que ha dado muy buenos resultados), se induce un ciclo de histéresis en régimen elástico en el contexto de movimientos cíclicos. Por lo tanto, hay acumulación de distorsión de malla entre ciclos. Varias metodologías fueron introducidas en forma satisfactoria para remediar esta situación, por intermedio de una selección apropiada de la configuración libre de tensiones, estas estrategias incluyen los métodos BCBMM y HCBMM. Requiriendo para esta última opción que los ciclos sean simétricos, tal que la segunda mitad del ciclo del movimiento consiste en volver por el mismo camino de la primera. Sin embargo, estas estrategias traen asociado un costo computacional importante en términos de memoria, pues requieren todas las configuraciones asociadas a un ciclo de referencia (medio ciclo en el caso de HCBMM). Más aún, en el caso de análisis de

convergencia de malla para problemas FSI, el uso de recursos puede verse afectado también por el paso de tiempo a utilizar para mantener la estabilidad del modelo, por ejemplo, en términos del número de Courant.

Por las razones antes mencionadas, optamos por una estrategia de selección de configuraciones libre de tensiones del tipo TN. La metodología BIMO introducida en esta tesis se basa en este esquema, sin embargo, dada su capacidad de adaptación—en analogía con mecanismos homeostáticos—le permiten obtener configuraciones óptimas sin acumulación de distorsión frente a movimientos cíclicos.

En este capítulo se han presentado problemas 2D y 3D de este tipo de movimientos dinámicos con mallas de elementos finitos. Los resultados muestran que en todos los casos la calidad de malla general es superior al utilizar BIMO. De igual modo, todos los resultados muestran que BIMO no presentan acumulación de distorsión de malla frente a movimientos cíclicos.

Capítulo 6

Movimiento de mallas: aplicaciones

En este capítulo resolvemos una serie de problemas de aplicación en el contexto de problemas multifísicos. El principal objetivo de este capítulo no es hacer énfasis en la física involucrada de cada uno de los problemas la cual, será brevemente presentada, sino en el rol del componente asociado a los métodos de movimiento de malla y cómo se desempeñan en problemas que desafían los límites de aplicación de los métodos de *seguimiento de interfases*. En particular, compararemos soluciones—en términos de calidad de malla—resolviendo con la estrategia basada ecuaciones de elasticidad lineal utilizada como procedimiento estándar en esta tesis, esto es, la metodología MJBS, y la propuesta en esta tesis, BIMO.

En primer lugar, presentamos un test de flujo circulante a través de un canal sujeto a altos niveles de compresión. Se presta aquí especial atención al bloqueo de flujo. La importante de este caso radica en el análisis del contacto *húmedo* entre interfases móviles.

Luego, un problema de aplicación de soldadura por fricción (FSSW) en simetría de revolución. Aquí, hacemos énfasis en la resolución del movimiento de la malla ante grandes desplazamientos y deformaciones como parte de un modelo 2D, aunque la física del problema (comportamiento del flujo altamente viscoso con acoplamiento térmico) se resuelve como un problema 3D condensado (por hipótesis de simetría revolución del modelo).

Finalmente, presentamos un problema inspirado en válvulas cardíacas en geometrías 2D, usualmente utilizado en la literatura para comparar el desempeño de distintas estrategias de *seguimiento y captura de interfases*. Notablemente, este caso cuenta con buena parte de los componentes involucrados en la resolución de problemas de válvulas cardíacas en geometrías realistas.

6.1. Condiciones generales

En la Tabla 6.1 reportamos las propiedades de material que serán utilizadas para los problemas de aplicación en este capítulo. Diferenciamos propiedades de material para los elementos dispuestos de manera desestructura y/o con alta capacidad de adaptación respecto del conjunto de elementos dispuesto en forma de extensión sólida a las interfases móviles como elementos tipo capa límite. Para el primer conjunto utilizamos propiedades (MJBS1, BIMO1) mientras que para el segundo conjunto se emplean propiedades (MJBS2, BIMO2).

Tabla 6.1: Propiedades de material utilizados con BIMO (a) y MJBS (b)

| (a) BIMO | | | (b) MJBS | | |
|----------|-----------|-----------------|----------|-------|--------|
| | k_f/k_g | λ_{max} | | ν | χ |
| BIMO1 | 1.0 | 1.50 | MJBS1 | 0.3 | 1 |
| BIMO2 | 10^{-6} | 1.50 | MJBS2 | 0.3 | 2 |

Estas propiedades de material son utilizadas en el contexto de las metodologías MJBS y BIMO, presentadas en las secciones 2.2 y 2.3, respectivamente. Como estamos trabajando con magnitudes adimensionales hacemos la siguiente consideración para la selección de parámetros relativos a cada una de las estrategias utilizadas. Por el lado de la metodología MJBS, la selección de la constante de Poisson ν determina las constantes de Lamé considerando $\lambda = 1$ y $\mu = (1 - 2\nu) / 2\nu$. Por otro lado, la selección del *ratio* k_f/k_g en BIMO se determina considerando $k_f = 1$ y ajustando la constante k_g según corresponda. Vale la pena mencionar que en la resolución de problemas 2D, se considera un estado de deformación plano (ver Sección 1.1.6). Además, se utiliza cada paso de tiempo (de movimiento) como una etapa de remodelado.

6.2. Casos de aplicación

Los casos de aplicación presentados en este capítulo involucran problemas de distinta naturaleza: el problema de Navier-Stokes en dominios deformable propicios al colapso de volumen por la condición de contacto entre interfases móviles; el problema FSSW, el cual consiste en un modelo termomecánico de un flujo altamente viscoso y heterogéneo, no lineal, en dominios deformables y que considera el contacto con cuerpos rígidos a altas

velocidades de rotación; el problema FSI inspirado en válvulas cardíacas, cuyo principal atractivo es contar con buena parte de las dificultades de esta clase de problemas en un ambiente de prueba controlado, cuerpos sensibles a las fuerzas hidrodinámicas sujetos a grandes desplazamientos y deformaciones en un ambiente dinámico.

6.2.1. *Domain undergoing compression*

Este caso de aplicación está basado en el problema presentado por Takizawa *et al.* [72]. En dicho trabajo el problema está enfocado estrictamente en el desempeño del problema de movimiento de mallas, para un determinado modo de deformación, el cual incluye grandes desplazamientos cercanos al colapso de volumen entre interfases móviles. En esta presentación, incluimos esta dinámica de mallas como parte del problema de fluidos en dominios deformables. El principal objetivo es analizar los niveles de restricción de flujo, las fuerzas hidrodinámicas resultantes sobre las interfases móviles próximas a contacto y cómo responde la metodología BIMO frente a esta dinámica de mallas. Consideramos este problema de interés dado que, potencialmente, puede representar un punto de partida para la resolución de problemas que involucren contacto como parte de las estrategias denominadas de contacto *húmedo*, es decir, por intermedio de una película de fluido entre superficies, dando lugar a líneas de trabajo futuro.

La Figura 6.1 muestra un bosquejo del problema. Con líneas sólidas se indica la configuración inicial del dominio y con líneas punteadas una configuración arbitraria para un dado instante de tiempo t y nivel de deformación. El flujo queda determinado al imponer la tracción en la superficie de entrada Γ_{in} y tracción nula en la superficie de salida Γ_{out} , generando una diferencia de presiones ΔP entre las superficies de entrada y salida. Por otro lado, en las interfases móviles Γ_w el fluido se encuentra adherido, esto es, $\mathbf{v} = \mathbf{v}_R$, siendo \mathbf{v}_R la velocidad del marco referencial.

El problema de movimiento de mallas

El problema tiene las siguientes condiciones de borde: los desplazamientos en las superficies de entrada Γ_{in} y salida Γ_{out} se encuentran restringidos, esto es, $\mathbf{u} = \mathbf{0}$. Por otro lado, las interfases móviles Γ_w responden a la siguiente cinemática: la interfase (una línea) en su configuración espacial queda determinada por un polinomio de tercer orden cuyas constantes son tales que los extremos no sufran desplazamiento alguno, los desplazamientos sean sólo verticales, la interfase resulte simétrica respecto el plano medio

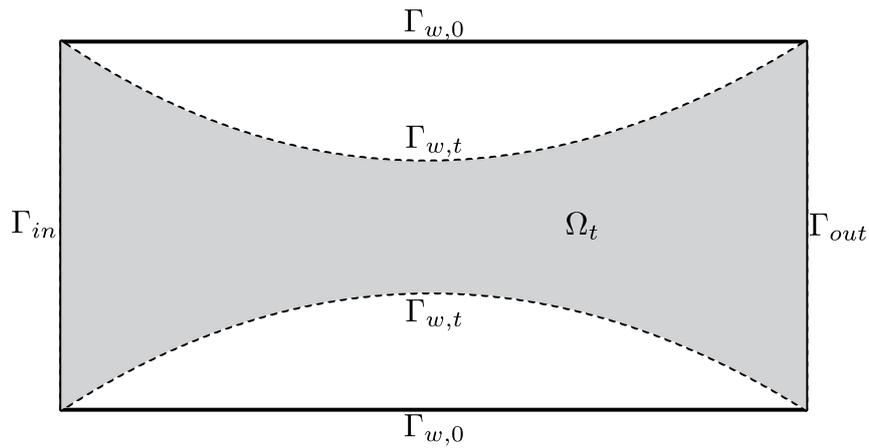


Figura 6.1: Test de compresión. Configuración del problema. Las líneas sólidas indican la configuración inicial del problema y las líneas punteadas una configuración con cierto nivel de deformación al instante de tiempo t . Las fronteras Γ_{in} y Γ_{out} permanecen fijas, siendo toda la deformación del dominio debida al movimiento de las paredes superior e inferior, denotadas según $\Gamma_{w,t}$ (la configuración inicial se denota según $\Gamma_{w,0}$).

y el nivel de deformación se controle según el máximo desplazamiento del punto medio.

La Figura 6.2 muestra la malla en su configuración inicial y una vista en zoom del conjunto de elementos tipo capa límite junto a las interfases móviles $\Gamma_{w,0}$, la cual consiste de dos capas de elementos dispuestas en forma de extensión sólida. La malla está compuesta de 1500 elementos triangulares lineales y 816 nodos.

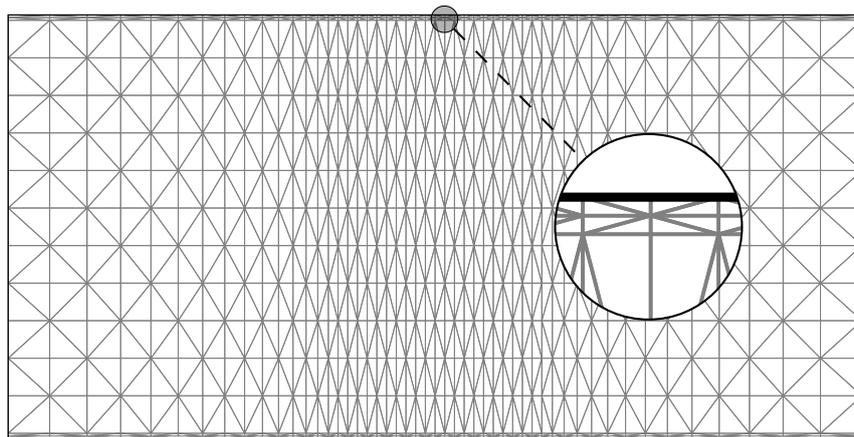


Figura 6.2: Test de compresión. Discretización del modelo en la configuración inicial por elementos triangulares lineales.

Resultados

La Figura 6.3 muestra la configuración de la malla para los niveles de deformación de 25 % (a), 50 % (b), 75 % (c) y 95 % (d), resolviendo con la metodología BIMO. De manera

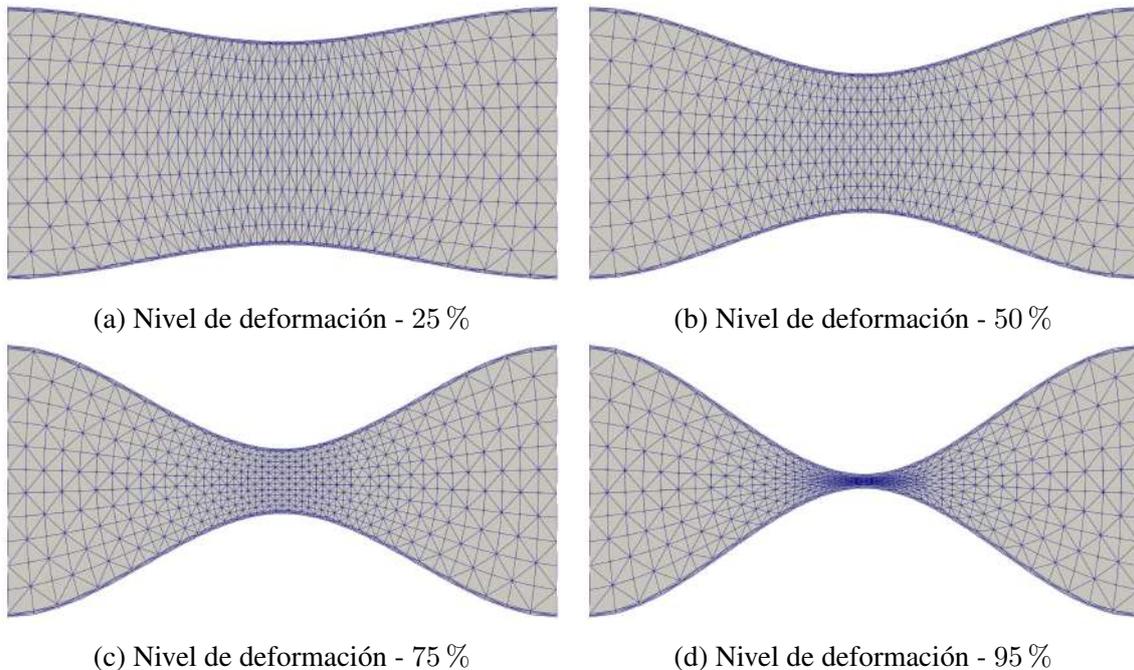


Figura 6.3: Test de compresión. Configuración de la malla para los niveles de deformación de 25 % (a), 50 % (b), 75 % (c) y 95 % (d).

análoga, la Figura 6.4 muestra, para distintos niveles de deformación, la configuración que adopta la malla junto al campo de velocidades (*quiver* en negro) y presiones (superficie 3D) resultante. Lo interesante de este resultado es el bloqueo del flujo, simulando una condición de contacto *húmedo*, esto es, el contacto entre interfases permitiendo la existencia de una película de flujo “estanco” entre ellas. Vale la pena notar que si bien el flujo no es completamente nulo, es varios órdenes de magnitud inferior al flujo de referencia, siendo el caudal en la superficie de salida prácticamente nulo.

En el caso de requerir mayor precisión en la condición de contacto, para evitar el colapso de los elementos de la malla en la zona de máxima deformación es necesario una etapa de remallado y posterior transferencia de soluciones entre la malla original y la nueva. La Figura 6.5 muestra, para la malla original (a) y nueva (b), el campo de presiones y el perfil de velocidades en el plano de menor de sección. Una vez realizada esta operación, es posible alcanzar niveles mayores de deformación y aproximación de interfases móviles. Vale la pena notar que el conjunto de elementos estructurado correspondiente a la extensión

sólida de las interfaces móviles no se remalla, dado que resulta pertinente fijar la precisión con la que se desea capturar las capas límite desde el comienzo de la simulación.

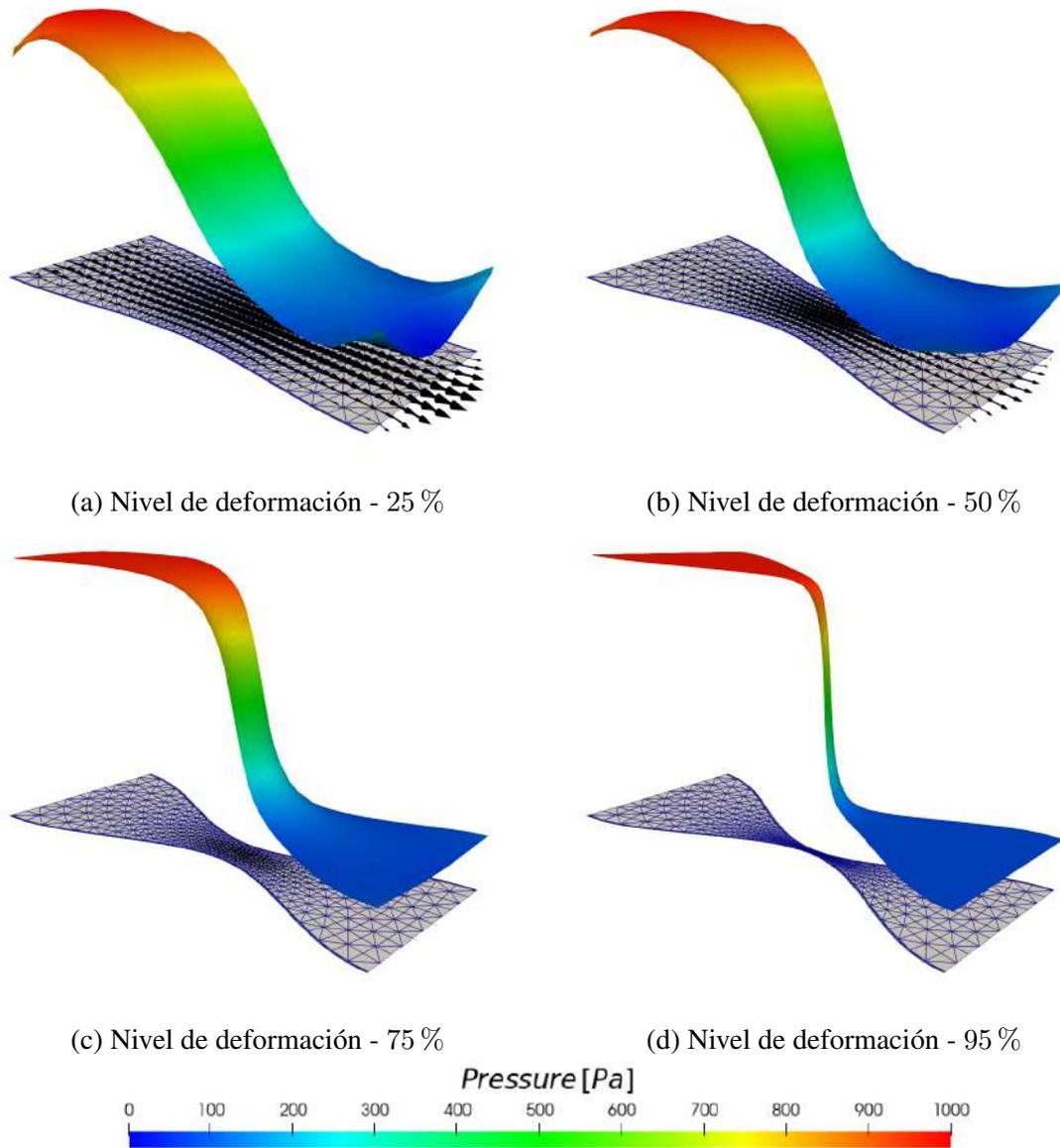
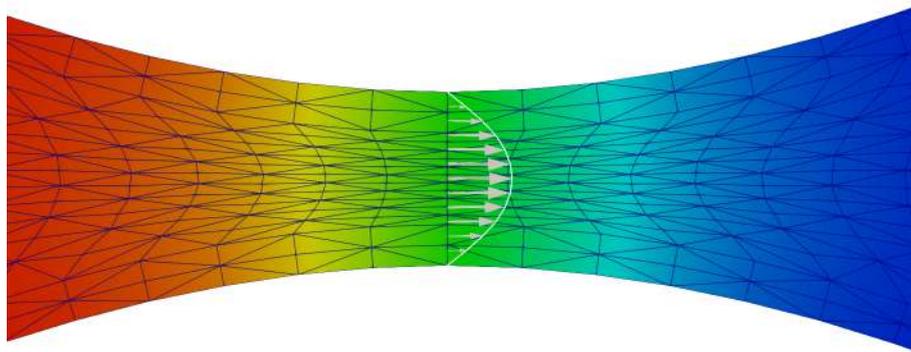
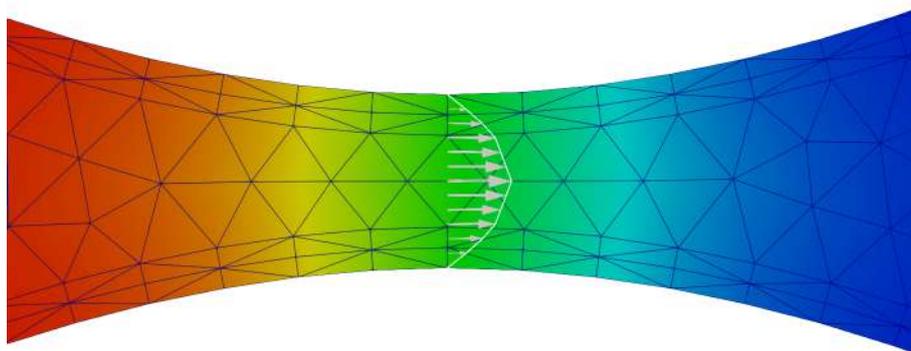


Figura 6.4: Test de compresión. Configuración de la malla para los niveles de deformación de 25 % (a), 50 % (b), 75 % (c) y 95 % (d) junto al campo de velocidades (*quiver* en negro) y presiones (superficie 3D).



(a) Malla original.



(b) Nueva malla.



Figura 6.5: Test de compresión. Vista en la zona de menor sección efectiva. Transferencia de soluciones entre mallas para un nivel de deformación de 95 %. Malla inicial deformada previa al remallado (a) y la nueva malla luego de una etapa de remallado y posterior interpolación de soluciones (b). En color plata, el campo de velocidades resultante en la sección de menor tamaño.

6.2.2. *Friction Stir Spot Welding (FSSW)*

El proceso de soldadura de punto por fricción (FSSW) es inventado por *The Welding Institute* en 1991 junto con la técnica de soldadura por fricción y agitación (FSW). Estas técnicas consisten en la unión de materiales por intermedio del calentamiento generado por la fricción y el trabajado mecánico que determina la mezcla de ambos componentes llevada a cabo a temperaturas por debajo del punto de fusión. La técnica se basa en la acción de una herramienta rotativa que es presionada en sentido axial sobre los materiales a unir.

El alto grado de deformación de la geometría es un gran desafío al momento de modelar este problema. Aquí, utilizamos una estrategia ALE y en este marco compararemos los resultados del movimiento de mallas resolviendo con las metodologías MJBS y BIMO. Es importante remarcar que nos concentraremos en el problema de movimiento de mallas, no así en las demás componentes del problema multifísico asociado. Este problema consiste en la deformación de un material altamente viscoso y heterogéneo, con múltiples fuentes de no linealidad. Entre estas fuentes encontramos: la geometría del dominio, las propiedades viscosas y térmica del fluido, resultando en un problema altamente desafiante en el que se deben considerar varios fenómenos físicos en simultáneo.

El problema en cuestión se encuentra en etapas de desarrollo por integrantes del grupo GIAC¹, ya habiendo resultados preliminares [13, 14]. Para más detalles en la estrategia de solución y detalles del modelo, se recomienda la lectura [13] y referencias allí.

El problema de movimiento de malla

Este problema queda bien determinado una vez conocidos los desplazamientos de la frontera de contacto con la herramienta y la superficie libre. La Figura 6.6 muestra un bosquejo del problema en simetría de revolución para una configuración arbitraria. El contacto entre la herramienta y el material (indicado con $\Gamma_{5,t}$) está determinado por la dinámica de la herramienta y el movimiento de la superficie libre (superficie representada por la curva $\Gamma_{4,t}$). Dada la alta viscosidad del material lejos de la Zona Afectada Térmicamente (HAZ²) (cercanía al punto de contacto entre material y herramienta) se asume que el dominio no se mueve en las superficies indicadas con $\Gamma_{1,t}$, $\Gamma_{2,t}$ y $\Gamma_{3,t}$, sin embargo, por tratarse de una descripción ALE, el mapeo sólo tiene restringidos los desplazamientos en la dirección normal. Un razonamiento análogo se sigue para el eje de simetría (es decir, $\Gamma_{6,t}$), sobre el

¹Grupo de Ingeniería Asistida por Computador (GIAC), Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Mar del Plata, Argentina.

²Siglas del término *Heat Affected Zone*.

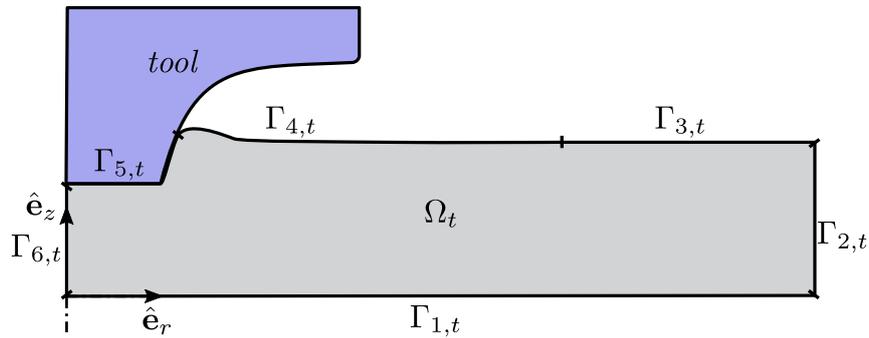


Figura 6.6: Problema FSSW. Bosquejo del modelo en simetría de revolución con respecto a la dirección \hat{e}_z , la dirección radial está indicada según \hat{e}_r . El dominio Ω_t . Las fronteras Γ_5 y Γ_6 son de carácter no lineal, las mismas dependen de la forma de la herramienta y de la solución del problema, es decir, si la interfase entra en contacto o no con la herramienta.

cual sólo se restringen desplazamientos en la dirección normal.

La Figura 6.7 muestra una vista general de la malla en su configuración inicial y una vista en zoom para mayor detalle de la discretización con elementos tipo capa límite sobre el frente de contacto del material con la herramienta. La malla está compuesta de 3634 elementos triangulares lineales y 1953 nodos. Además, se observa una zona compuesta de elementos tipo capa límite dispuestos de manera estructurada sobre la zona de contacto con la herramienta mientras que para el resto del dominio una densidad de elementos considerablemente menor dispuestos de manera desestructurada.

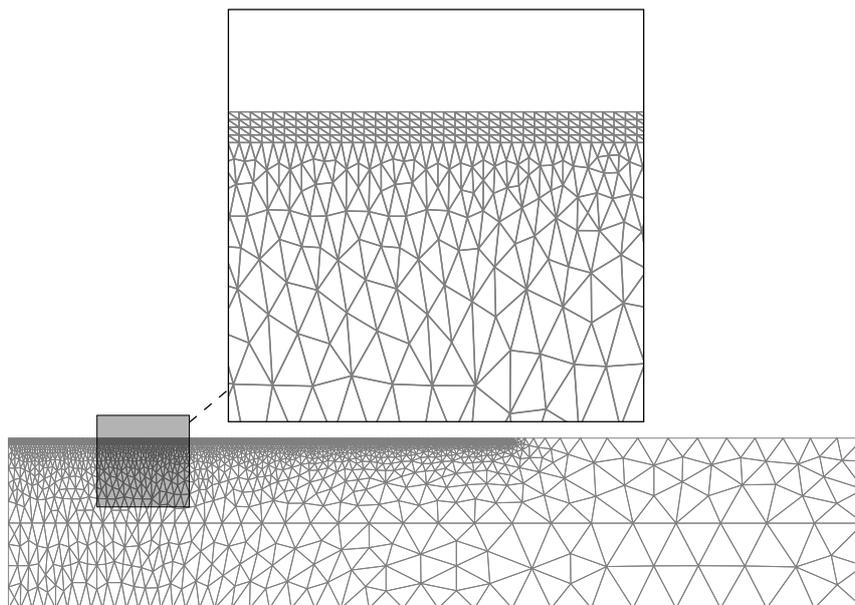
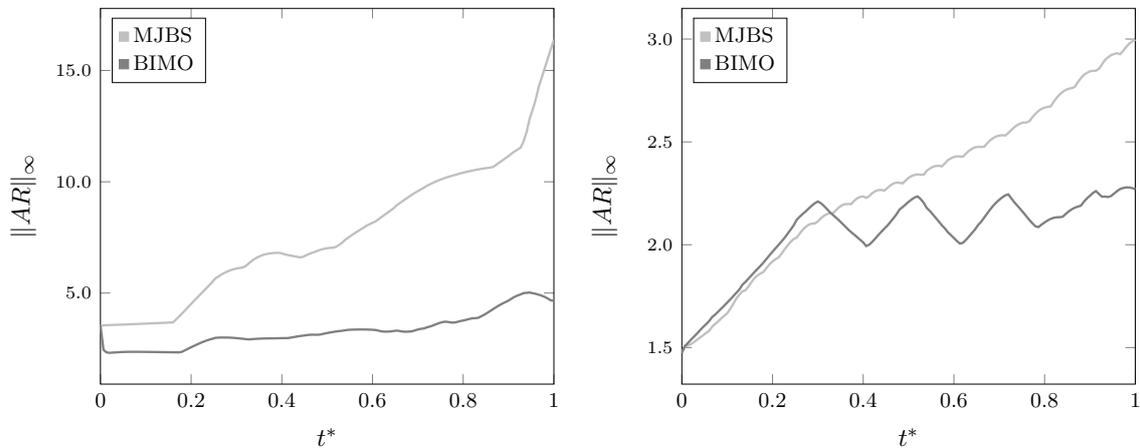


Figura 6.7: Problema FSSW. Discretización del modelo en la configuración inicial por elementos triangulares lineales.

Resultados

La Figura 6.8 muestra la norma del máximo para la calidad de malla (AR), indicada según $\|AR\|_\infty$ resolviendo con las metodologías MJBS (plata) y BIMO (gris) en función del tiempo adimensional t^* . Este tiempo adimensional mide el tiempo t en unidades de la duración temporal del modelo (0.75 segundos). Además, los resultados se computan considerando elementos libres de deformarse (es decir, aquellos que no se corresponden con elementos capa límite) (a) y elementos capa límite (b).

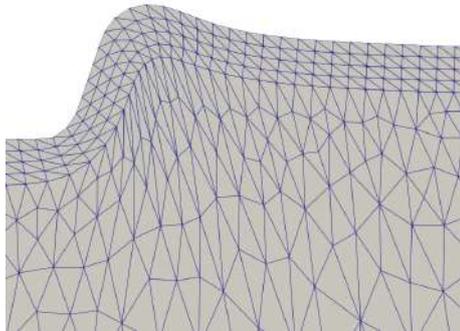


(a) conjunto de elementos no estructurado

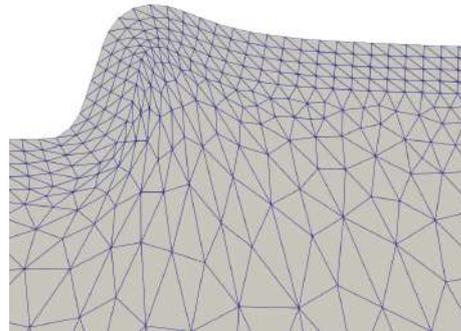
(b) conjunto de elementos tipo capa límite

Figura 6.8: Problema FSSW. Norma del máximo para la calidad de malla $\|AR\|_\infty$ resolviendo con los métodos MJBS (plata) y BIMO (gris) en función del tiempo adimensional t^* , considerando elementos del núcleo del dominio (conjunto no estructurado) (a) y elementos capa límite (b).

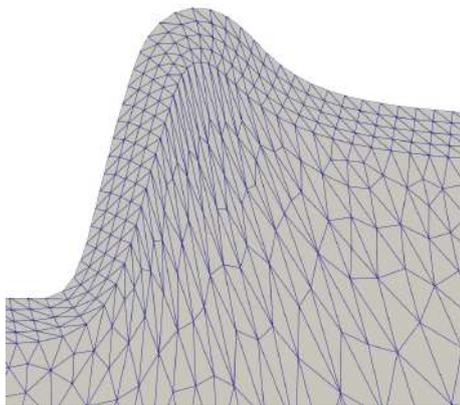
La Figura 6.9 muestra la malla resultante para los instantes de tiempo $t = (0.25, 0.5, 0.75)$ (medidas en segundos), esto es $t^* = (0, 1/3, 2/3, 1)$, resolviendo con las metodologías MJBS (izquierda) y BIMO (derecha), para la zona de interés (zoom de la Figura 6.7).



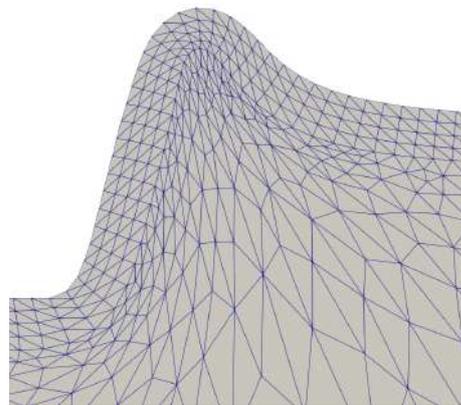
(a) MJBS - $t = 0.25$ s.



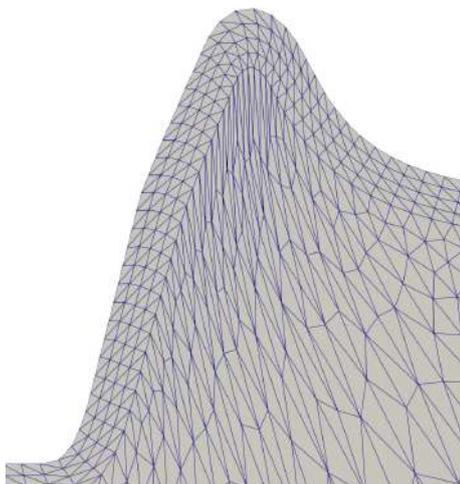
(b) BIMO - $t = 0.25$ s.



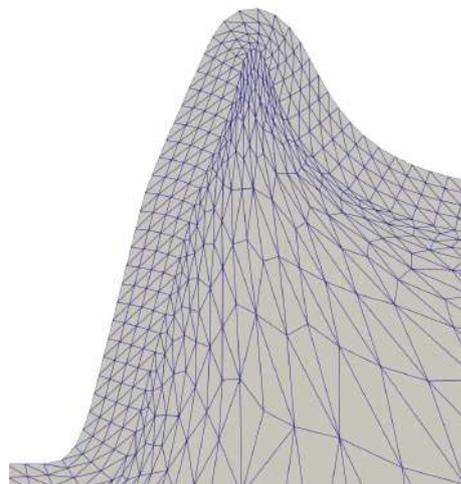
(c) MJBS - $t = 0.50$ s.



(d) BIMO - $t = 0.50$ s.



(e) MJBS - $t = 0.75$ s.



(f) BIMO - $t = 0.75$ s.

Figura 6.9: Problema FSSW. Configuración de la malla (en zona de interés, zoom de la Figura 6.7) para los instantes de tiempo $t = (0.25, 0.5, 0.75)$ segundos, resolviendo con MJBS (a la izquierda, imágenes a, c y e) y con BIMO (a la derecha, imágenes b, d y f).

6.2.3. *Heart-valve inspired benchmark*

El siguiente problema se encuentra inspirado en válvulas cardíacas [7, 25, 30]. Este caso, intenta simular la biomecánica de la apertura y cierre de válvulas (sin considerar el contacto), que consiste en una delicada interacción entre el torrente sanguíneo y las características geométricas y constitutivas de las valvas [10, 29]. En este problema haremos foco en la dinámica de malla involucrada en el contexto del mapeo ALE sujetos a grandes desplazamientos y deformaciones. En ese sentido, compararemos las soluciones (esto es, la malla resultante) al resolver con las metodologías MJBS y BIMO para distintos estadios del movimiento.

Dada la simetría del problema, es posible modelar sólo la mitad del dominio bajo condiciones de contorno adecuadas. De acuerdo con la Figura 6.10, el problema consiste en modelar un sólido hiperelástico dispuesto en forma de viga en voladizo, el cual se encuentra sumergido en el seno de un fluido newtoniano e incompresible. Las condiciones de borde para el problema de fluido son las siguientes: sobre la frontera Γ_{in} se impone un perfil de velocidades cíclico, a la salida Γ_{out} una condición de tracción nula (esto es, $P \approx 0$ para números de Reynolds suficientemente altos), sobre la frontera Γ_{top} se impone la simetría del flujo restringiendo el campo de velocidades en la dirección normal (es decir, $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$) y se asume condición de adherencia ($\mathbf{v} = \mathbf{0}$) sobre Γ_{bot} (superficie fija). El acoplamiento con el sólido es través de la frontera Γ_w , donde se impone la adherencia del flujo a través de la condición $\mathbf{v} = \mathbf{v}_s$, siendo \mathbf{v}_s la velocidad de la interfase (es decir, el sólido). Por el lado del sólido, la frontera Γ_{bot} correspondiente al sólido tiene sus desplazamientos restringidos y la frontera Γ_w es frontera de Neumann, es decir, se imprime la tracción resultante de las condiciones del flujo. Para más detalles acerca de las condiciones de borde, propiedades del fluido, sólido y distintos aspectos del modelo computacional del problema FSI se recomienda la lectura [7, 25, 30].

El problema de movimiento de malla

La Figura 6.10 muestra una bosquejo del problema. El problema de movimiento de malla esta sujeto a la siguientes condiciones de frontera: sobre las fronteras Γ_{in} , Γ_{out} , Γ_{top} y Γ_{bot} se restringe el desplazamiento en la dirección normal, esto es, $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$. Además, sobre la interfase Γ_{bot} , el desplazamiento tangencial se encuentra restringido. La frontera Γ_w correspondiente a la interfase móvil responde a la solución de los desplazamientos por parte del problema de sólido. A efectos de comparar las estrategias MJBS y BIMO, sobre

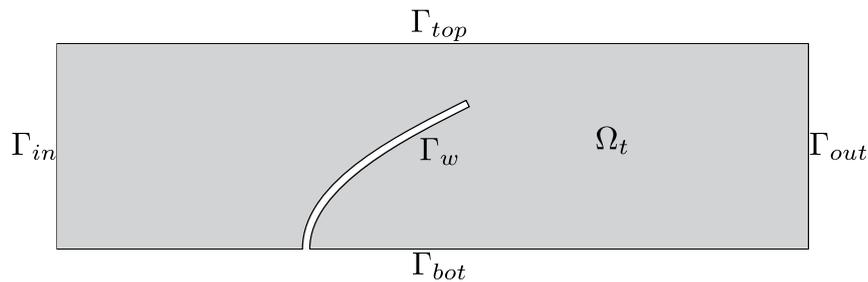


Figura 6.10: Modelo simplificado de válvula. Bosquejo del modelo 2D en una configuración arbitraria Ω_t para un instante de tiempo t . La frontera Γ_{in} es la frontera de flujo entrante, Γ_{out} flujo saliente, Γ_{top} indica el plano de simetría del problema, Γ_{bot} una superficie inmóvil y sin deslizamiento y Γ_w representa la superficie de contacto entre el fluido y sólido (interfase móvil), aquí se asume adherencia del flujo a la pared del sólido.

la frontera Γ_w imponemos el mismo campo de desplazamientos en ambos modelos. Esto último, implica resolver el problema FSI con sólo una de las metodologías como parte del subproblema de movimiento de mallas y una vez conocido el campo de desplazamientos sobre la frontera Γ_w para todo instante de tiempo, el mismo imponerse como condición de Dirichlet. De esta manera, evitamos el cálculo de un problema FSI y ponemos el foco en el de movimiento de malla.

La Figura 6.11 muestra una vista general de la malla en su configuración inicial y una vista en zoom sobre el extremo libre de la estructura dispuesta en forma de viga en voladizo. Sobre esta vista en zoom se puede observar la discretización con elementos tipo capa límite como una extensión del dominio de sólido. La malla está compuesta de 11290 elementos triangulares lineales y 6047 nodos.

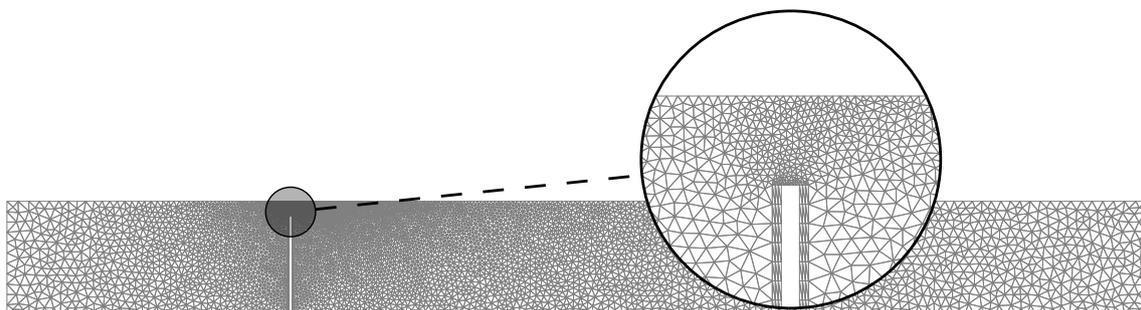


Figura 6.11: Modelo simplificado de válvula. Discretización del modelo en la configuración inicial por elementos triangulares lineales.

Resultados

La Figura 6.12 muestra la configuración de la malla para niveles de deformación bajo (arriba) y alto (abajo), resolviendo con las metodologías MJBS (izquierda) y BIMO (derecha). Las figuras muestran la configuración de la malla para la zona con mayor grado de deformación e interés a este análisis, esto es, entre el extremo libre de la interfase móvil Γ_w y el plano de simetría del modelo Γ_{top} .

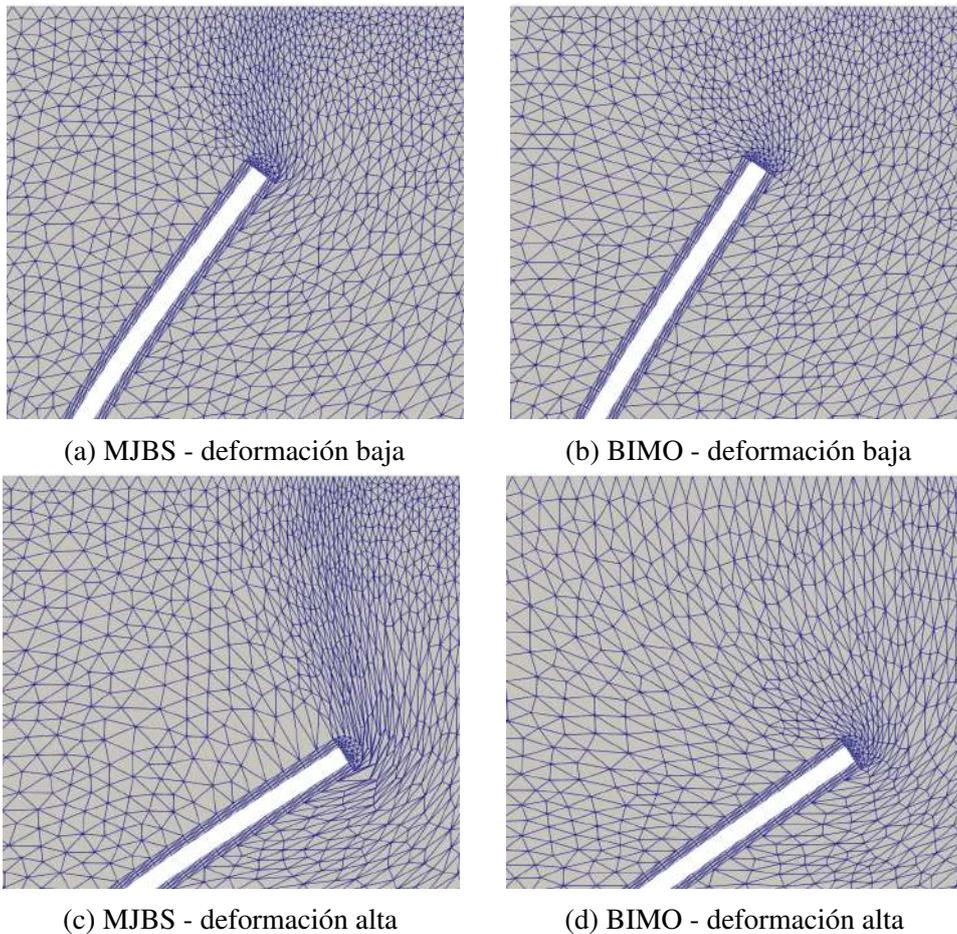


Figura 6.12: Modelo simplificado de válvula. Configuración de la malla para dos niveles de deformación bajo (arriba) y alto (abajo) resolviendo con MJBS (izquierda) y BIMO (derecha).

Los resultados muestran cualitativamente que ambos métodos resuelven de manera satisfactoria el conjunto de elementos tipo capa límite. Sin embargo, para la región de elementos no correspondiente a esta clase, se observan resultados considerablemente mejores al resolver con BIMO, especialmente en la zona de menor sección entre el extremo libre de la estructura y el plano de simetría.

6.3. Conclusiones

En este capítulo hemos resuelto problemas multifísicos de aplicación 2D. En ese sentido, se hizo énfasis en el movimiento de interfases móviles sujetas a grandes desplazamientos y deformaciones, incluso en condiciones de colapso de volumen entre ellas.

Se han obtenido resultados mostrando la potencial utilidad de las técnicas presentadas en esta tesis para el tratamiento de superficies bajo la condición de contacto *húmedo* y se han obtenido resultados satisfactorios con respecto a uno de los objetivos que se busca en este tipo de contacto, esto es, el bloqueo del flujo circulante. También presentamos una estrategia para generar mallas y, en caso de ser necesario, una etapa de remallado para conservar la precisión con la que se capturan capas límites, en caso de requerir mayores niveles de proximidad entre interfases móviles.

Por otro lado, hemos comparado las metodologías MJBS y BIMO integrándolas en el modelado del problema FSSW. Los resultados reportados muestran una considerable mejora en la calidad de malla conforme el movimiento transcurre, reduciendo drásticamente la cantidad de etapas de remallado necesarias e incluso evitarlas en su totalidad.

Finalmente, hemos comparado la dinámicas de mallas resultante para un problema inspirado en válvulas cardíacas que cuenta con buena parte de los componentes necesarios para resolver problemas en geometrías realistas en 3D. Los resultados aquí también muestran una considerable mejora en la calidad de malla conforme la marcha del movimiento al resolver con BIMO.

Conclusiones generales

7.1. Conclusiones y resultados obtenidos

Esta tesis introduce un *framework* para la optimización y/o movimiento de mallas inspirado en la biomecánica de los tejidos de la pared arterial. El desarrollo de esta metodología tiene aplicaciones inmediatas en múltiples áreas de la ingeniería, pudiendo ser integrado como parte de la resolución de problemas FSI, problemas de superficie libres, problemas termomecánicos acoplados como el problema de FSW y FSSW, entre otros. Por otro lado, este *framework* como optimizador puede utilizarse como una etapa de preprocesamiento de cualquier problema discretizado por elementos finitos tipo simplex para mejorar la relación de forma de los elementos en un proceso de relajación de mallas y de este modo mejorar el número de condición de los sistemas resultantes.

Se reseñan a continuación algunos los principales resultados y conclusiones del trabajo:

- Se implementaron métodos de movimiento de mallas, ampliamente utilizados por la comunidad científica, basados en ecuaciones de la elasticidad con endurecimiento selectivo basado en los Jacobianos de la transformación.
- Se pone en analogía el proceso de relajación de mallas con procesos homeostáticos en los tejidos vivos, permitiendo el desarrollo de métodos de movimiento de mallas biológicamente inspirados de manera intuitiva.
- Se presentó un método de movimiento de mallas inspirado en la capacidad de adaptación de los tejidos biológicos. Entre sus principales características se encuentran:
 - Diseño de un pseudo-material de doble constituyente, donde cada uno cuenta con diferentes configuraciones libres de tensión.

- Diseño de configuraciones libres de tensión ZSS incompatibles.
 - Mecanismos biológicos de G&R en el contexto de relajación de mallas.
 - Se introduce el reclutamiento de fibras para resolver el problema de tensiones singulares debido elementos inicialmente muy distorsionados.
 - Por intermedio de técnicas de análisis dimensional, el movimiento de los nodos debido a fuerzas nodales (esto es, la fuerza en dualidad a la acción de movimiento virtual) resultan proporcionales a la longitud característica de los elementos y no a su tamaño (área o volumen dependiendo la dimensión).
 - Se introduce un método de optimización y movimiento de mallas de elementos finitos en simultáneo.
- Se presentaron pequeños casos de prueba 2D y 3D con soluciones conocidas para optimizar con la metodología BIMO en el contexto de optimización de mallas, logrando en todos los casos obtener configuraciones óptimas.
 - Se presentaron casos de movimiento de mallas sujetos a diversos modos de deformación en 2D y 3D. Todos los casos fueron resueltos por técnicas de elasticidad tradicionales (MJBS) y BIMO. En todos los casos la metodología BIMO ha mostrado mejores resultados.
 - Se presentaron casos en 2D y 3D de movimiento de mallas en el contexto de movimientos cíclicos. Se compararon los resultados obtenidos mediante la metodología MJBS y BIMO. Los resultados muestran que BIMO se desempeña mejor y por su capacidad de adaptación no presenta acumulación de distorsión de mallas entre ciclos del movimiento. De esta manera, los resultados muestran que BIMO se desempeña en forma equivalente a técnicas de elasticidad lineal especialmente diseñadas para movimientos cíclicos, sin el costo computacional asociado por ellas.
 - Se presentaron problemas de movimiento de mallas asociados a problemas multifísicos en 2D. En todos los casos los resultados muestran que BIMO se desempeña satisfactoriamente y en las comparaciones realizadas junto a las técnicas tradicionales en ecuaciones de elasticidad lineal (MJBS) también muestra un mejor desempeño.

Como conclusión general, la metodología de optimización y movimiento de mallas presentada ha mostrado desempeñarse satisfactoriamente en una gran variedad de problemas sujetos a distintos modos de deformación tanto en problemas 2D y 3D que desafían

los límites de esta clase de métodos, esto es, movimientos con grandes desplazamientos y deformaciones e incluso en movimientos periódicos sin presentar acumulación de distorsión entre ciclos. Además, el método BIMO pensado como *framework*, se encuentra en analogía directa con los procesos homeostáticos en tejidos vivos, lo que permite una interpretación física del problema conveniente para el desarrollo de nuevos mecanismos de adaptación.

7.2. Trabajo futuro

Durante el desarrollo de este trabajo se han identificado varias direcciones posibles para el trabajo futuro:

- Extensión de la metodología BIMO a discretizaciones basadas en cuadriláteros y hexaedros, en el contexto de problemas 2D y 3D, respectivamente.
- Extensión de la metodología BIMO para discretizaciones de alto orden.
- Implementación de técnicas de optimización sobre nodos en la frontera de los dominios sin pérdida de precisión en la representación geométrica de las superficies.
- Integración de la metodología BIMO en *solvers* multifísicos dedicados a la resolución de problemas FSI en geometrías realistas, problemas de superficie libre sin salpicadura en el contexto de la hidrodinámica naval y problemas termomecánicos FSSW.
- Modelos de crecimiento de fibras como mecanismo de adaptación. Estudio de modelos de crecimiento de poblaciones.
- Análisis y estudio de estrategias alternativas para la disposición geométrica de fibras.
- Análisis y estudio de diferentes estrategias para la selección configuraciones virtuales desagregadas.
- Viscoelasticidad como mecanismo de relajación de mallas adicional.
- Estudio de diferentes modelos constitutivos para desacoplar distorsiones pura de deformaciones volumétricas.

Referencias

- [1] Babuška, I. 1971. Error-bounds for finite element method. *Numerische Mathematik*, **16**(4), 322–333.
- [2] Basombrío, Fernando G. 1995. *Notas de Mecánica del Continuo*. Instituto Balseiro. Universidad Nacional de Cuyo. Centro Atómico Bariloche - CNEA.
- [3] Batina, John T. 1990. Unsteady Euler airfoil solutions using unstructured dynamic meshes. *AIAA Journal*, **28**(8), 1381–1388.
- [4] Bazilevs, Yuri, Takizawa, Kenji, & Tezduyar, Tayfun E. 2013. *Computational fluid-structure interaction: methods and applications*. Chichester, West Sussex, United Kingdom: Wiley.
- [5] Belytschko, T., Kennedy, J. M., & Schoeberle, D. F. 1980. Quasi-Eulerian Finite Element Formulation for Fluid-Structure Interaction. *Journal of Pressure Vessel Technology*, **102**(1), 62–69.
- [6] Biocca, N., Blanco, P. J., Caballero, D. E., Gimenez, J. M., Carr, G. E., & Urquiza, S. A. 2021. A biologically-inspired mesh optimizer based on pseudo-material remodeling. *Computational Mechanics*, Oct.
- [7] Boilevin-Kayl, Ludovic, Fernández, Miguel A., & Gerbeau, Jean-Frédéric. 2019. Numerical methods for immersed FSI with thin-walled structures. *Computers & Fluids*, **179**, 744–763.
- [8] Brezzi, F. 1974. On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from lagrangian multipliers. *Revue française d'automatique, informatique, recherche opérationnelle. Analyse numérique*, **8**(R2), 129–151.

- [9] Brooks, Alexander N., & Hughes, Thomas J.R. 1982. Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **32**(1-3), 199–259.
- [10] Cacciola, G., Peters, G.W.M., & Baaijens, F.P.T. 2000. A synthetic fiber-reinforced stentless heart valve. *Journal of Biomechanics*, **33**(6), 653–658.
- [11] Cao, K., & Sucusky, P. 2016. Computational comparison of regional stress and deformation characteristics in tricuspid and bicuspid aortic valve leaflets. *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering*, **33**(3), e02798.
- [12] Cao, K., Bukač, M., & Sucusky, P. 2015. Three-dimensional macro-scale assessment of regional and temporal wall shear stress characteristics on aortic valve leaflets. *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*, **19**(6), 603–613.
- [13] Carr, G.E., Biocca, N., Urquiza, S.A., & Lombera, G. 2021. Modelado por elementos finitos del proceso de soldadura FSSW considerando inserción de la herramienta. *Mecánica computacional*, **XXXVIII**(Nov.), 443–456.
- [14] Carr, Gustavo, Santiago, Diego, Pelayo, Marcelo, Urquiza, Santiago, Lombera, Guillermo, & Pascal, Oscar. 2018. Study of friction stir spot welding on AA6063 aluminium alloy used in the ship building industry. *Matéria (Rio de Janeiro)*, **23**(2).
- [15] Chandra, Santanu, Rajamannan, Nalini M., & Sucusky, Philippe. 2012. Computational assessment of bicuspid aortic valve wall-shear stress: implications for calcific aortic valve disease. *Biomechanics and Modeling in Mechanobiology*, **11**(7), 1085–1096.
- [16] Chorin, Alexandre Joel. 1968. Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Mathematics of Computation*, **22**(104), 745–762.
- [17] Chorin, Alexandre Joel. 1969. On the convergence of discrete approximations to the Navier-Stokes equations. *Mathematics of Computation*, **23**, 341–353.
- [18] Codina, Ramon. 2000. On stabilized finite element methods for linear systems of convection–diffusion–reaction equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **188**(1-3), 61–82.
- [19] Curtiss, C. F., & Hirschfelder, J. O. 1952. Integration of Stiff Equations. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **38**(3), 235–243.

- [20] Donea, J., Giuliani, S., & Halleux, J.P. 1982. An arbitrary lagrangian-eulerian finite element method for transient dynamic fluid-structure interactions. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **33**(1-3), 689–723.
- [21] Donea, Jean, & Huerta, Antonio. 2003. *Finite Element Methods for Flow Problems*. Wiley.
- [22] Farhat, C., Degand, C., Koobus, B., & Lesoinne, M. 1998. Torsional springs for two-dimensional dynamic unstructured fluid meshes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **163**(1-4), 231–245.
- [23] Ge, Liang, & Sotiropoulos, Fotis. 2009. Direction and Magnitude of Blood Flow Shear Stresses on the Leaflets of Aortic Valves: Is There a Link With Valve Calcification? *Journal of Biomechanical Engineering*, **132**(1).
- [24] Germain, P. 1973. The Method of Virtual Power in Continuum Mechanics. Part 2: Microstructure. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, **25**(3), 556–575.
- [25] Gil, A.J., Arranz Carreño, A., Bonet, J., & Hassan, O. 2010. The Immersed Structural Potential Method for haemodynamic applications. *Journal of Computational Physics*, **229**(22), 8613–8641.
- [26] Grbic, Sasa, Easley, Thomas F., Mansi, Tommaso, Bloodworth, Charles H., Pierce, Eric L., Voigt, Ingmar, Neumann, Dominik, Krebs, Julian, Yuh, David D., Jensen, Morten O., Comaniciu, Dorin, & Yoganathan, Ajit P. 2017. Personalized mitral valve closure computation and uncertainty analysis from 3D echocardiography. *Medical Image Analysis*, **35**(Jan.), 238–249.
- [27] Gurtin, Morton E. 1981. *An introduction to continuum mechanics*. Mathematics in science and engineering, no. v. 158. New York: Academic Press.
- [28] Hammer, Peter E., Chen, Peter C., del Nido, Pedro J., & Howe, Robert D. 2012. Computational model of aortic valve surgical repair using grafted pericardium. *Journal of Biomechanics*, **45**(7), 1199–1204.
- [29] Hart, J.De, Cacciola, G, Schreurs, P.J.G, & Peters, G.W.M. 1998. A three-dimensional analysis of a fibre-reinforced aortic valve prosthesis. *Journal of Biomechanics*, **31**(7), 629–638.

- [30] Hesch, C., Gil, A.J., Carreño, A. Arranz, & Bonet, J. 2012. On continuum immersed strategies for Fluid–Structure Interaction. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **247-248**, 51–64.
- [31] Heywood, John G., & Rannacher, Rolf. 1982. Finite Element Approximation of the Nonstationary Navier-Stokes Problem. I. Regularity of Solutions and Second-Order Error Estimates for Spatial Discretization. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, **19**(2), 275–311.
- [32] Heywood, John G., & Rannacher, Rolf. 1986. Finite Element Approximation of the Nonstationary Navier-Stokes Problem, Part II: Stability of Solutions and Error Estimates Uniform in Time. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, **23**(4), 750–777.
- [33] Heywood, John G., & Rannacher, Rolf. 1988. Finite Element Approximation of the Nonstationary Navier-Stokes Problem, Part III. Smoothing Property and Higher Order Error Estimates for Spatial Discretization. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, **25**(3), 489–512.
- [34] Heywood, John G., & Rannacher, Rolf. 1990. Finite-Element Approximation of the Nonstationary Navier-Stokes Problem Part IV: Error Analysis for Second-Order Time Discretization. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, **27**(2), 353–384.
- [35] Hoger, Anne. 1997. *Journal of Elasticity*, **48**(2), 125–144.
- [36] Holzapfel, Gerhard A. 2002. *Nonlinear Solid Mechanics, a Continuum Approach for Engineering*. Wiley.
- [37] Holzapfel, Gerhard A., & Gasser, Thomas C. 2001. A viscoelastic model for fiber-reinforced composites at finite strains: Continuum basis, computational aspects and applications. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **190**(34), 4379–4403.
- [38] Holzapfel, Gerhard A., & Weizsäcker, Hans W. 1998. Biomechanical behavior of the arterial wall and its numerical characterization. *Computers in Biology and Medicine*, **28**(4), 377–392.
- [39] Holzapfel, Gerhard A., Gasser, Thomas C., & Ogden, Ray W. 2000. A New Constitutive Framework for Arterial Wall Mechanics and a Comparative Study of Material Models. *Journal of Elasticity*, **61**(1/3), 1–48.

- [40] Hughes, Thomas J.R., & Brooks, Alexander N. 1979. *Finite Element Methods for Convection Dominated Flows*. Vol. 34. ASME.
- [41] Hughes, Thomas J.R., Liu, Wing Kam, & Zimmermann, Thomas K. 1981. Lagrangian-Eulerian finite element formulation for incompressible viscous flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **29**(3), 329–349.
- [42] Humphrey, Jay D. 2002. *Cardiovascular Solid Mechanics*. Springer New York.
- [43] Jermihov, Paul N., Jia, Lu, Sacks, Michael S., Gorman, Robert C., Gorman, Joseph H., & Chandran, Krishnan B. 2011. Effect of Geometry on the Leaflet Stresses in Simulated Models of Congenital Bicuspid Aortic Valves. *Cardiovascular Engineering and Technology*, **2**(1), 48–56.
- [44] Johnson, A.A., & Tezduyar, T.E. 1994. Mesh update strategies in parallel finite element computations of flow problems with moving boundaries and interfaces. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **119**(1-2), 73–94.
- [45] Johnson, Byron E., & Hoger, Anne. 1995. The use of a virtual configuration in formulating constitutive equations for residually stressed elastic materials. *Journal of Elasticity*, **41**(3), 177–215.
- [46] Kitano, Hiroaki. 2002. Systems Biology: A Brief Overview. *Science*, **295**(5560), 1662–1664.
- [47] Knupp, Partick. 2008. Measurement and Impact of Mesh Quality (Invited). *In: 46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. American Institute of Aeronautics and Astronautics.
- [48] Ladyzhenskaya, O.A. 1969. *The mathematical theory of viscous incompressible flow*. Gordon and Breach.
- [49] Laney, Culbert B. 1998. *Computational Gasdynamics*. Cambridge University Press.
- [50] Levack, Melissa M., Jassar, Arminder S., Shang, Eric K., Vergnat, Mathieu, Woo, Y. Joseph, Acker, Michael A., Jackson, Benjamin M., Gorman, Joseph H., & Gorman, Robert C. 2012. Three-Dimensional Echocardiographic Analysis of Mitral Annular Dynamics. *Circulation*, **126**(11_suppl_1).

- [51] Lynch, Daniel R. 1982. Unified approach to simulation on deforming elements with application to phase change problems. *Journal of Computational Physics*, **47**(3), 387–411.
- [52] Masud, Arif, & Hughes, Thomas J.R. 1997. A space-time Galerkin/least-squares finite element formulation of the Navier-Stokes equations for moving domain problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **146**(1-2), 91–126.
- [53] Nobile, Fabio. 2001. *Numerical approximation of fluid-structure interaction problems with application to haemodynamics*. Ph.D. thesis, École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL).
- [54] Padala, Muralidhar, Hutchison, Ross A., Croft, Laura R., Jimenez, Jorge H., Gorman, Robert C., Gorman, Joseph H., Sacks, Michael S., & Yoganathan, Ajit P. 2009. Saddle Shape of the Mitral Annulus Reduces Systolic Strains on the P2 Segment of the Posterior Mitral Leaflet. *The Annals of Thoracic Surgery*, **88**(5), 1499–1504.
- [55] Pibarot, Philippe, & Dumesnil, Jean G. 2009. Prosthetic Heart Valves. *Circulation*, **119**(7), 1034–1048.
- [56] Pirola, S., Jarral, O. A., O'Regan, D. P., Asimakopoulos, G., Anderson, J. R., Pepper, J. R., Athanasiou, T., & Xu, X. Y. 2018. Computational study of aortic hemodynamics for patients with an abnormal aortic valve: The importance of secondary flow at the ascending aorta inlet. *APL Bioengineering*, **2**(2), 026101.
- [57] Quarteroni, Alfio, & Valli, A. 1999. *Domain decomposition methods for partial differential equations*. Numerical mathematics and scientific computation. Oxford ; New York: Clarendon Press.
- [58] Ranga, Adrian, Bouchot, Olivier, Mongrain, Rosaire, Ugolini, Patricia, & Cartier, Raymond. 2006. Computational simulations of the aortic valve validated by imaging data: evaluation of valve-sparing techniques. *Interactive CardioVascular and Thoracic Surgery*, **5**(4), 373–378.
- [59] Robertson, Anne M., & Watton, Paul N. 2013. Mechanobiology of the Arterial Wall. *Pages 275–347 of: Transport in Biological Media*. Elsevier.
- [60] Rumpf, M. 1996. A variational approach to optimal meshes. *Numerische Mathematik*, **72**(4), 523–540.

- [61] Salgo, Ivan S., Gorman, Joseph H., Gorman, Robert C., Jackson, Benjamin M., Bowen, Frank W., Plappert, Theodore, Sutton, Martin G. St John, & Edmunds, L. Henry. 2002. Effect of Annular Shape on Leaflet Curvature in Reducing Mitral Leaflet Stress. *Circulation*, **106**(6), 711–717.
- [62] Saltzman, J. S., & Brackbill, J. U. 1982. Applications and Generalization of Variational Methods for Generating Adaptive Meshes. *In: Applied Mathematics and Computation 10*.
- [63] Schoen, Frederick J., & Levy, Robert J. 2005. Calcification of Tissue Heart Valve Substitutes: Progress Toward Understanding and Prevention. *The Annals of Thoracic Surgery*, **79**(3), 1072–1080.
- [64] Shakib, Farzin, Hughes, Thomas J.R., & Johan, Zdeněk. 1991. A new finite element formulation for computational fluid dynamics: X. The compressible Euler and Navier-Stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **89**(1-3), 141–219.
- [65] Siddiqui, Raheela Fareed, Abraham, Johnathan Rajiv, & Butany, Jagdish. 2009. Bioprosthetic heart valves: modes of failure. *Histopathology*, **55**(2), 135–144.
- [66] Siefert, Andrew William, Rabbah, Jean-Pierre Michel, Saikrishnan, Neelakantan, Kunzelman, Karyn Susanne, & Yoganathan, Ajit Prithivaraj. 2013. Isolated effect of geometry on mitral valve function forin silicomodel development. *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*, **18**(6), 618–627.
- [67] Southern, James, Pitt-Francis, Joe, Whiteley, Jonathan, Stokeley, Daniel, Kobashi, Hiromichi, Nobes, Ross, Kadooka, Yoshimasa, & Gavaghan, David. 2008. Multi-scale computational modelling in biology and physiology. *Progress in Biophysics and Molecular Biology*, **96**(1-3), 60–89.
- [68] Stein, K., Tezduyar, T., & Benney, R. 2003. Mesh Moving Techniques for Fluid-Structure Interactions With Large Displacements. *Journal of Applied Mechanics*, **70**(1), 58–63.
- [69] Stein, Keith, & Tezduyar, Tayfun E. 2002. Advanced Mesh Update Techniques for Problems Involving Large Displacements. *Pages 1–15 of: Fifth World Congress on Computational Mechanics*, vol. 1-15.

- [70] Stein, Keith, Tezduyar, Tayfun E., & Benney, Richard. 2004. Automatic mesh update with the solid-extension mesh moving technique. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **193**(21-22), 2019–2032.
- [71] Takizawa, Kenji, Tezduyar, Tayfun E., Boben, Joseph, Kostov, Nikolay, Boswell, Cody, & Buscher, Austin. 2013. Fluid–structure interaction modeling of clusters of spacecraft parachutes with modified geometric porosity. *Computational Mechanics*, **52**(6), 1351–1364.
- [72] Takizawa, Kenji, Tezduyar, Tayfun E., & Avsar, Reha. 2020. A low-distortion mesh moving method based on fiber-reinforced hyperelasticity and optimized zero-stress state. *Computational Mechanics*, Mar.
- [73] Taroco, Edgardo O., Blanco, Pablo J., & Feijóo, Raúl A. 2019. *Introduction to the Variational Formulation in Mechanics*. Wiley.
- [74] Temam, Roger. 1969. Sur l’approximation de la solution des équations de Navier-Stokes par la méthode des pas fractionnaires (II). *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, **33**, 377–385.
- [75] Temam, Roger. 2001. *Navier–Stokes Equations*. American Mathematical Society.
- [76] Terahara, Takuya, Takizawa, Kenji, Tezduyar, Tayfun E., Tsushima, Atsushi, & Shiozaki, Kensuke. 2020. Ventricle-valve-aorta flow analysis with the Space–Time Isogeometric Discretization and Topology Change. *Computational Mechanics*, **65**(5), 1343–1363.
- [77] Tezduyar, T. 2001a. Finite element interface-tracking and interface-capturing techniques for flows with moving boundaries and interfaces. *Pages 105–114 of: American Society of Mechanical Engineers, Heat Transfer Division, (Publication) HTD*, vol. 369.
- [78] Tezduyar, T., Aliabadi, S., Behr, M., Johnson, A., & Mittal, S. 1993. Parallel finite-element computation of 3D flows. *Computer*, **26**(10), 27–36.
- [79] Tezduyar, T. E., Behr, M., Mittal, S., & Johnson, A. A. 1992a. Computation of unsteady incompressible flows with the stabilized finite element methods: Space-time formulations, iterative strategies and massively parallel implementations. *Pages 7–24 of: New Methods in Transient Analysis*. American Society of Mechanical Engineers, Pressure Vessels and Piping Division (Publication) PVP. Publ by ASME.

- [80] Tezduyar, T E, Behr, M, Mittal, S, & Johnson, A A. 1992b. Computation of unsteady incompressible flows and massively parallel implementations. *New Methods in Transient Analysis*, **246**, 7–24.
- [81] Tezduyar, Tayfun E. 1992. *Stabilized finite element formulations for incompressible flow computations*. Vol. 28.
- [82] Tezduyar, Tayfun E. 2001b. Finite element methods for flow problems with moving boundaries and interfaces. *Archives of Computational Methods in Engineering*, **8**(2), 83–130.
- [83] Tezduyar, Tayfun E. 2006. Interface-tracking and interface-capturing techniques for finite element computation of moving boundaries and interfaces. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **195**(23-24), 2983–3000.
- [84] Tezduyar, Tayfun E, & Osawa, Yasuo. 2000. Finite element stabilization parameters computed from element matrices and vectors. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **190**(3-4), 411–430.
- [85] Tezduyar, Tayfun E., Sathe, Sunil, Keedy, Ryan, & Stein, Keith. 2006. Space–time finite element techniques for computation of fluid–structure interactions. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **195**(17-18), 2002–2027.
- [86] Tezduyar, Tayfun E., Sathe, Sunil, Pausewang, Jason, Schwaab, Matthew, Christopher, Jason, & Crabtree, Jason. 2008. Interface projection techniques for fluid–structure interaction modeling with moving-mesh methods. *Computational Mechanics*, **43**(1), 39–49.
- [87] Tezduyar, Tayfun E., Takizawa, Kenji, & Bazilevs, Yuri. 2017. *Fluid–Structure Interaction and Flows with Moving Boundaries and Interfaces*. American Cancer Society. Pages 1–53.
- [88] Tezduyar, T.E., Mittal, S., Ray, S.E., & Shih, R. 1992c. Incompressible flow computations with stabilized bilinear and linear equal-order-interpolation velocity-pressure elements. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **95**(2), 221–242.
- [89] Tezduyar, T.E., Behr, M., & Liou, J. 1992d. A new strategy for finite element computations involving moving boundaries and interfaces—The deforming-spatial-

- domain/space-time procedure: I. The concept and the preliminary numerical tests. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **94**(3), 339–351.
- [90] Tezduyar, T.E., Behr, M., Mittal, S., & Liou, J. 1992e. A new strategy for finite element computations involving moving boundaries and interfaces—The deforming-spatial-domain/space-time procedure: II. Computation of free-surface flows, two-liquid flows, and flows with drifting cylinders. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **94**(3), 353–371.
- [91] Tonon, Patrícia, Sanches, Rodolfo André Kuche, Takizawa, Kenji, & Tezduyar, Tayfun E. 2021. A linear-elasticity-based mesh moving method with no cycle-to-cycle accumulated distortion. *Computational Mechanics*, **67**(2), 413–434.
- [92] Watton, P. N., Hill, N. A., & Heil, M. 2004. A mathematical model for the growth of the abdominal aortic aneurysm. *Biomechanics and Modeling in Mechanobiology*, **3**(2), 98–113.
- [93] Weizhang, Huang, & Russell, Robert D. 2011. *Adaptive Moving Mesh Methods*.
- [94] Winslow, Alan M. 1967. Numerical Solution of the Quasilinear Poisson Equation in a Nonuniform Triangle Mesh.
- [95] Yan, J., Deng, X., Korobenko, A., & Bazilevs, Y. 2017. Free-surface flow modeling and simulation of horizontal-axis tidal-stream turbines. *Computers & Fluids*, **158**(Nov.), 157–166.
- [96] Youssefi, Pouya, Gomez, Alberto, He, Taigang, Anderson, Lisa, Bunce, Nick, Sharma, Rajan, Figueroa, C. Alberto, & Jahangiri, Marjan. 2017. Patient-specific computational fluid dynamics—assessment of aortic hemodynamics in a spectrum of aortic valve pathologies. *The Journal of Thoracic and Cardiovascular Surgery*, **153**(1), 8–20.e3.
- [97] Zeng, Dehong, & Ethier, C. Ross. 2005. A semi-torsional spring analogy model for updating unstructured meshes in 3D moving domains. *Finite Elements in Analysis and Design*, **41**(11-12), 1118–1139.
- [98] Zienkiewicz, O.C. 1971. *The Finite Element Method In Engineering Science*. McGraw-Hill.

Apéndices

Derivada de Gâteaux - relaciones básicas

Considere un campo de desplazamientos $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}_0)$, el cual es perturbado tal que $\mathbf{u}_\epsilon = \mathbf{u} + \epsilon\delta\mathbf{u}$. Con esta perturbación, el tensor gradiente de deformación, originalmente dado por $\mathbf{F}^{\mathbf{u}} = \mathbf{I} + \nabla\mathbf{u}$, resulta $\mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}} = \mathbf{I} + \nabla\mathbf{u}_\epsilon = \mathbf{I} + \nabla(\mathbf{u} + \epsilon\delta\mathbf{u})$. Calcularemos ahora algunas expresiones que involucran $\mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}}$ con respecto a ϵ . De esta manera, las siguientes expresiones surgen

$$\left. \frac{d}{d\epsilon} \mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}} \right|_{\epsilon=0} = \nabla\delta\mathbf{u}, \quad (\text{A.1})$$

$$\left. \frac{d}{d\epsilon} \mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{uv}} \right|_{\epsilon=0} = \nabla\delta\mathbf{u} \mathbf{F}^{\mathbf{v}}, \quad (\text{A.2})$$

$$\left. \frac{d}{d\epsilon} (\mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}})^{-1} \right|_{\epsilon=0} = -\mathbf{F}^{\mathbf{u}-1} \nabla\delta\mathbf{u} \mathbf{F}^{\mathbf{u}-1}, \quad (\text{A.3})$$

$$\left. \frac{d}{d\epsilon} (\mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{uv}})^{-1} \right|_{\epsilon=0} = -\mathbf{F}^{\mathbf{uv}-1} \nabla\delta\mathbf{u} \mathbf{F}^{\mathbf{v}} \mathbf{F}^{\mathbf{uv}-1}, \quad (\text{A.4})$$

$$\left. \frac{d}{d\epsilon} J_\epsilon^{\mathbf{u}} \right|_{\epsilon=0} = J^{\mathbf{u}} (\mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \cdot \nabla\delta\mathbf{u}), \quad (\text{A.5})$$

$$\left. \frac{d}{d\epsilon} J_\epsilon^{\mathbf{uv}} \right|_{\epsilon=0} = J^{\mathbf{uv}} (\mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \cdot \nabla\delta\mathbf{u}), \quad (\text{A.6})$$

$$\left. \frac{d}{d\epsilon} \mathbf{E}_\epsilon^{\mathbf{u}} \right|_{\epsilon=0} = (\mathbf{F}^{\mathbf{u}T} \nabla\delta\mathbf{u})^S, \quad (\text{A.7})$$

$$\left. \frac{d}{d\epsilon} \mathbf{E}_\epsilon^{\mathbf{uv}} \right|_{\epsilon=0} = (\mathbf{F}^{\mathbf{uv}T} \nabla\delta\mathbf{u} \mathbf{F}^{\mathbf{v}})^S, \quad (\text{A.8})$$

$$\left. \frac{d}{d\epsilon} \left(\frac{J^R}{J_\epsilon^M} \right)^\chi \right|_{\epsilon=0} = -\chi \left(\frac{J^R}{J^M} \right)^\chi (\mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \cdot \nabla\delta\mathbf{u}). \quad (\text{A.9})$$

$$(\text{A.10})$$

$$\begin{aligned}
\left. \frac{d}{d\epsilon} |\mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}| \right|_{\epsilon=0} &= \left. \frac{d}{d\epsilon} \sqrt{\mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n} \cdot \mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}} \right|_{\epsilon=0} \\
&= \frac{1}{|\mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}|} (-\mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \nabla \delta \mathbf{u}^T \mathbf{F}^{\mathbf{u}-T}) \mathbf{n} \cdot \mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}
\end{aligned} \tag{A.11}$$

$$\left. \frac{d}{d\epsilon} |\mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}|^{-1} \right|_{\epsilon=0} = |\mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}|^{-3} (-\mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \nabla \delta \mathbf{u}^T \mathbf{F}^{\mathbf{u}-T}) \mathbf{n} \cdot \mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n} \tag{A.12}$$

$$\begin{aligned}
\left. \frac{d}{d\epsilon} \left(\frac{\mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}}{|\mathbf{F}_\epsilon^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}|} \right) \right|_{\epsilon=0} &= -\nabla \delta \mathbf{u}^T \frac{\mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}}{|\mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}|} \\
&\quad + \frac{\mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}}{|\mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}|^2} \frac{\nabla \delta \mathbf{u}^T \mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n} \cdot \mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}}{|\mathbf{F}^{\mathbf{u}-T} \mathbf{n}|}
\end{aligned} \tag{A.13}$$

Apéndice **B**

Estado de tensiones plano - cálculo del espesor

En problemas 2D, la hipótesis de tensión plana se puede escribir, por ejemplo, en una base cartesiana, del siguiente modo

$$(\boldsymbol{\sigma})_{iz} = 0 \quad \forall i = x, y, z, \quad (\text{B.1})$$

siendo $\boldsymbol{\sigma}$ el tensor de Cauchy que es una función a su vez del gradiente del campo de desplazamientos \mathbf{u} . Además, este desplazamiento y por la cinemática del problema asumida es el responsable de generar un estado de deformaciones caracterizado por el siguiente tensor gradiente de deformación

$$\mathbf{F}^{\mathbf{u}} = \begin{bmatrix} F_{xx} & F_{xy} & 0 \\ F_{yx} & F_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda \end{bmatrix}, \quad (\text{B.2})$$

siendo $\lambda = \frac{(\mathbf{u})_z}{H}$ el estiramiento en la dirección del espesor H . Por otro lado, el tensor de Cauchy se relaciona con el segundo tensor de Piola-Kirchhoff

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} &= \frac{1}{\det \mathbf{F}^{\mathbf{u}}} \mathbf{F}^{\mathbf{u}} \mathbf{S} \mathbf{F}^{\mathbf{u}T} \rightarrow (\boldsymbol{\sigma})_{zz} = \frac{1}{\det \mathbf{F}^{\mathbf{u}}} \lambda^2 (\mathbf{S})_{zz} \\ &= \frac{1}{\det \mathbf{F}_{2d}^{\mathbf{u}}} \lambda (\mathbf{S})_{zz}, \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

siendo $\det \mathbf{F}_{2d}^{\mathbf{u}} = \det \mathbf{F}^{\mathbf{u}} / \lambda$ el determinante del tensor gradiente de deformación correspondiente al tensor reducido en las componentes del plano xy . Notar que—por construcción— $\det \mathbf{F}_{2d}^{\mathbf{u}}$ no depende del estiramiento λ . De esta manera, se evidencia la naturaleza no lineal de la Ecuación B.3 a través del tensor de Piola-Kirchhoff de segunda especie \mathbf{S} , recordando

que este a su vez es función de la deformación dada por el tensor de Green-Lagrange \mathbf{E} y el estiramiento λ . Con lo anterior, procedemos a plantear el siguiente esquema de Newton-Rapshon para resolver la Ecuación (B.3): hallar $\lambda \in \mathbb{R}^+$ tal que

$$(\boldsymbol{\sigma})_{zz} + \frac{d(\boldsymbol{\sigma})_{zz}}{d\lambda} \delta\lambda = 0 \quad \forall \delta\lambda \in \mathbb{R}. \quad (\text{B.4})$$

De la Ecuación (B.3) se tiene que $(\boldsymbol{\sigma})_{zz} = (\boldsymbol{\sigma})_{zz}(\lambda, (\mathbf{S})_{zz})$, siendo $\mathbf{S} = \mathbf{S}(\mathbf{E})$ y considerando $(\mathbf{E})_{zz} = \frac{1}{2}(\lambda^2 - 1)$ se opera del siguiente modo

$$\begin{aligned} \frac{d(\boldsymbol{\sigma})_{zz}}{d\lambda} &= \frac{1}{\det \mathbf{F}_{2d}^u} \lambda (\mathbf{S})_{zz} \\ &= \frac{1}{\det \mathbf{F}_{2d}^u} (\mathbf{S})_{zz} + \frac{1}{\det \mathbf{F}_{2d}^u} \lambda \frac{d(\mathbf{S})_{zz}}{d\lambda} \\ &= \frac{(\boldsymbol{\sigma})_{zz}}{\lambda} + \frac{1}{\det \mathbf{F}_{2d}^u} \lambda \frac{d(\mathbf{S})_{zz}}{d(\mathbf{E})_{zz}} \frac{d(\mathbf{E})_{zz}}{d\lambda} \\ &= \frac{(\boldsymbol{\sigma})_{zz}}{\lambda} + \frac{1}{\det \mathbf{F}_{2d}^u} \lambda \frac{d(\mathbf{S})_{zz}}{d(\mathbf{E})_{zz}} \lambda \\ &= \frac{(\boldsymbol{\sigma})_{zz} + \frac{1}{\det \mathbf{F}^u} \lambda^4 \frac{d(\mathbf{S})_{zz}}{d(\mathbf{E})_{zz}}}{\lambda} \\ &= \frac{(\boldsymbol{\sigma})_{zz} + (\mathbf{D})_{zzzz}}{\lambda} \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

siendo $(\mathbf{D})_{zzzz} = \frac{1}{\det \mathbf{F}^u} \lambda^4 \frac{d(\mathbf{S})_{zz}}{d(\mathbf{E})_{zz}}$. Combinando las expresiones (B.4) y (B.5) se obtiene el siguiente problema lineal: Hallar $\delta\lambda \in \mathbb{R}$ tal que

$$\left(\frac{(\boldsymbol{\sigma})_{zz} + (\mathbf{D})_{zzzz}}{\lambda} \right) \delta\lambda = -(\boldsymbol{\sigma})_{zz} \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}^+. \quad (\text{B.6})$$

Notar la dependencia de $(\boldsymbol{\sigma})_{zz}$ y \mathbf{D}_{zzzz} con $\mathbf{F}^u = \mathbf{F}^u(\lambda)$ por intermedio de relaciones constitutivas. Cabe mencionar también que este problema no lineal debe ser resuelto para cada punto de gauss. En caso de resolución en mallas de elementos finitos triangulares lineales, los gradientes son constantes y por tanto basta con resolver la Ecuación (B.6) para cada elemento.

Derivada temporal del Jacobiano

Partiendo de la forma compacta para el cálculo del Jacobiano, su tasa de variación temporal puede escribirse según

$$\begin{aligned}
 \frac{dJ}{dt} &= \frac{d}{dt} \left(\varepsilon_{ijk} \frac{\partial x_1}{\partial X_i} \frac{\partial x_2}{\partial X_j} \frac{\partial x_3}{\partial X_k} \right) \\
 &= \varepsilon_{ijk} \left(\frac{\partial v_1}{\partial X_i} \frac{\partial x_2}{\partial X_j} \frac{\partial x_3}{\partial X_k} \right) + \varepsilon_{ijk} \left(\frac{\partial x_1}{\partial X_i} \frac{\partial v_2}{\partial X_j} \frac{\partial x_3}{\partial X_k} \right) + \varepsilon_{ijk} \left(\frac{\partial x_1}{\partial X_i} \frac{\partial x_2}{\partial X_j} \frac{\partial v_3}{\partial X_k} \right) \\
 &= \varepsilon_{ijk} \left(\frac{\partial v_1}{\partial x_m} \frac{\partial x_m}{\partial X_i} \frac{\partial x_2}{\partial X_j} \frac{\partial x_3}{\partial X_k} \right) + \varepsilon_{ijk} \left(\frac{\partial x_1}{\partial X_i} \frac{\partial v_2}{\partial x_m} \frac{\partial x_m}{\partial X_j} \frac{\partial x_3}{\partial X_k} \right) \\
 &\quad + \varepsilon_{ijk} \left(\frac{\partial x_1}{\partial X_i} \frac{\partial x_2}{\partial X_j} \frac{\partial v_3}{\partial x_m} \frac{\partial x_m}{\partial X_k} \right) \tag{C.1}
 \end{aligned}$$

El primer término de la expresión resultante en (C.1) puede expandirse del siguiente modo

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_{ijk} \left(\frac{\partial v_1}{\partial x_m} \frac{\partial x_m}{\partial X_i} \frac{\partial x_2}{\partial X_j} \frac{\partial x_3}{\partial X_k} \right) &= \frac{\partial v_1}{\partial x_m} \left(\varepsilon_{ijk} \frac{\partial x_m}{\partial X_i} \frac{\partial x_2}{\partial X_j} \frac{\partial x_3}{\partial X_k} \right) \\
 &= \frac{\partial v_1}{\partial x_m} \delta_{1m} J \\
 &= \frac{\partial v_1}{\partial x_1} J \tag{C.2}
 \end{aligned}$$

Este procedimiento puede realizarse para la demás componentes, resultando

$$\begin{aligned}
 \frac{dJ}{dt} &= \left(\frac{\partial v_1}{\partial x_1} + \frac{\partial v_2}{\partial x_2} + \frac{\partial v_3}{\partial x_3} \right) J \\
 &= \text{div}(\mathbf{v})J \tag{C.3}
 \end{aligned}$$