

HigFlow e Refinamento de malha adaptativo

Erick Rodrigues Canterle¹ Pedro Vinicius Souza Coimbra²
Thiago Ferreira de França e Queiroz³ Vinícius de Sá Ferreira⁴

¹²³⁴ICMC - Instituto De Ciências Matemáticas e de Computação
Universidade de São Paulo

14 de novembro de 2025





Índices

1. Introdução
2. Equações governantes
3. Procedimento Numérico
 - HiG-Tree e HiG-Flow
 - Reconstrução da Interface
 - Advecção da Interface
 - Tensão superficial e Curvatura
 - Restrições do Passo Temporal
4. Validação
5. Adaptatividade de malha
6. Referências



Disclaimer



Article

Validation of HiG-Flow Software for Simulating Two-Phase Flows with a 3D Geometric Volume of Fluid Algorithm

Aquissom T. G. da Silva ¹ , Célio Fernandes ^{2,3,*} , Juniormar Organista ¹ , Leandro Souza ¹ and Antonio Castelo ¹

¹ Institute of Mathematical and Computer Sciences (ICMC), University of São Paulo (USP), São Carlos 13566-590, SP, Brazil; aquissom@usp.br (A.T.G.d.S.); juniormarorganista@usp.br (J.O.); lefraso@icmc.usp.br (L.S.); castelo@icmc.usp.br (A.C.)

² Transport Phenomena Research Center (CEFT), Faculty of Engineering at University of Porto (FEUP), 4200-465 Porto, Portugal

³ Center of Mathematics (CMAT), School of Sciences at University of Minho, Campus of Gualtar, 4710-057 Braga, Portugal

* Correspondence: cbp@fe.up.pt

Abstract: This study reports the development of a numerical method to simulate two-phase flows of Newtonian fluids that are incompressible, immiscible, and isothermal. The interface in the simulation is located and reconstructed using the geometric volume of fluid (VOF) method. The implementation of the



Introdução



Contexto Geral

- Escoamentos multifásicos com interfaces têm papel central em diversos setores:
 - extração de petróleo e gás;
 - processos químicos;
 - indústria farmacêutica;
 - indústria alimentícia;
 - microfluídica.



Abordagens principais

- Método front-tracking:
 - interface é representada por uma malha que se move com o fluido;
 - capta com precisão a dinâmica da interface;
 - alto custo computacional;
 - dificuldade com deformações e quebras da interface.
- Método fixed mesh:
 - representa a interface implicitamente por um campo escalar em uma malha fixa;
 - volume of fluid (VOF), level-set e phase-field.

- Volume of fluid (VOF):
 - resolve-se uma equação de conservação de massa;
 - representa a fração volumétrica $f(x, t)$ de um fluido em cada célula;
 - interface é representada pelas células em que $0 < f < 1$;
 - boa conservação de massa;
 - boa captura da dinâmica da interface em grande escala.
- Phase-field:
 - interface é representada por um campo esclar;
 - interfaces muito largas.
- Level-set:
 - função de nível;
 - captura precisa da interface;
 - adequado para simular mudanças topológicas.





Equações governantes

Hipóteses



Características do Escoamento

- Não estacionário
- Escoamento laminar
- Escoamento isotérmico
- Fluidos incompressíveis
- Duas fases imiscíveis
- Sem transferência de massa através da interface

Conservação da Massa



Equação da Continuidade

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

- $\mathbf{u} = (u, v, w)$: campo de velocidade
- Condição de incompressibilidade
- Descreve a conservação da massa para fluidos incompressíveis



Balanço de Momentum Linear

Forma Dimensional

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u}(\nabla \cdot \mathbf{u}) \right] = -\nabla p + \nabla \cdot \left\{ \mu \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right] \right\} + \rho \mathbf{g} + \sigma \kappa \mathbf{n} \delta$$

- ρ : densidade
- p : pressão
- μ : viscosidade absoluta
- \mathbf{g} : campo gravitacional
- σ : coeficiente de tensão interfacial
- κ : curvatura da interface
- \mathbf{n} : vetor normal à interface
- δ : função delta (1 na interface, 0 fora)



Forma Adimensional

Equação do Momentum Adimensional

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u}(\nabla \cdot \mathbf{u}) \right] = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla \cdot \left\{ \mu \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right] \right\} + \rho \frac{\mathbf{g}}{g} + \frac{1}{Bo} \kappa \mathbf{n} \delta$$

- $Re = \frac{\rho_1 g^{1/2} L^{3/2}}{\mu_1}$: Número de Reynolds
- $Bo = \frac{\rho_1 g L^2}{\sigma}$: Número de Bond (Eötvös)
- L : comprimento característico
- $V = \sqrt{gL}$: velocidade característica

Transporte da Fase - Método VOF



Equação de Transporte da Fração Volumétrica

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}f) = 0$$

- f : fração volumétrica ($0 \leq f \leq 1$)
- Reconstrução geométrica da interface via método PLIC
- Algoritmo de advecção com passo fracionado (split)
 - Evita transporte duplo do mesmo fluido

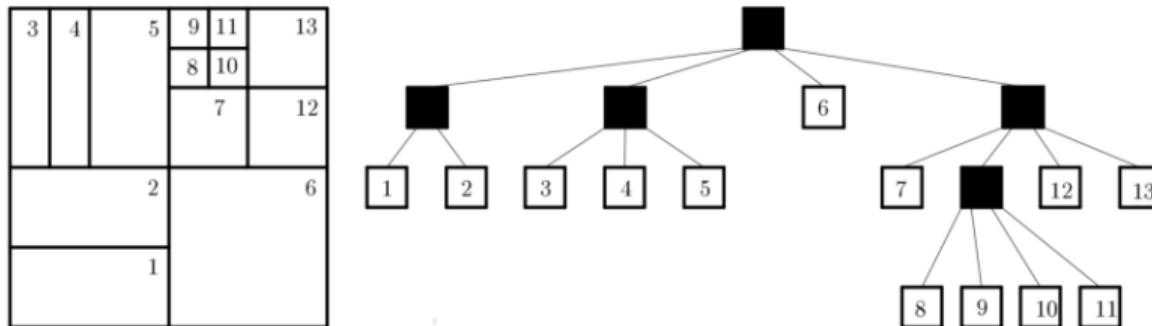


Procedimento Numérico



HiG-Tree e HiG-Flow Software - Estrutura de Dados

- **HiG-Tree**: estrutura de dados hierárquica em malha cartesiana
- Elementos de tamanhos variáveis com refinamento espacial recursivo
- Baseada em **m-tree** (Exemplo na figura)
- Malha não-estruturada com refinamento arbitrário
- Projetada para ser genérica e extensível a qualquer número de dimensões





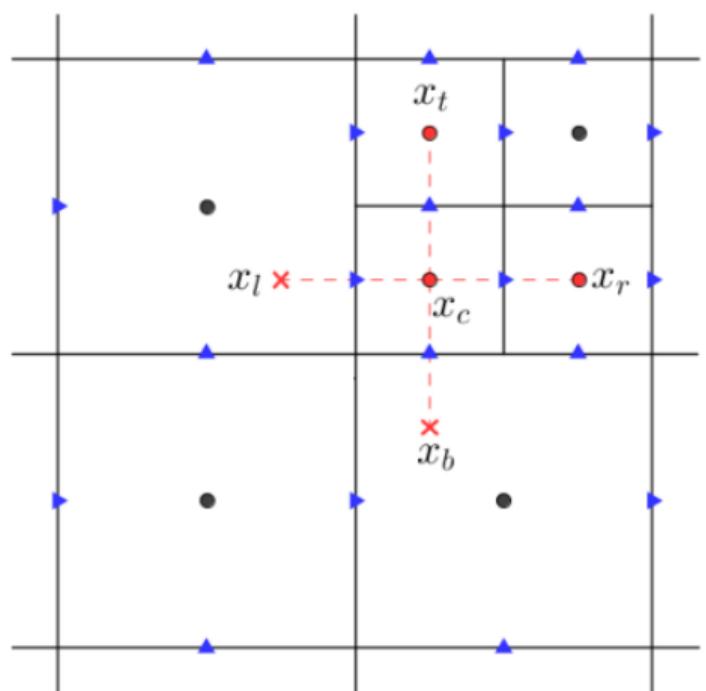
HiG-Tree - Particionamento de Domínio

- Domínios compostos por blocos para geometrias complexas
- Discretização usando estrutura HiG-Tree
- Particionamento com biblioteca **Zoltan-Trilinos**
 - Garante boa distribuição de carga entre processos
- Armazenamento e enumeração de propriedades em células e facetas
- Refinamento espacial apropriado para cada problema simulado



HiG-Tree - Aproximações e Interpolações

- Módulo para estimativa de propriedades em células e facetas
- Método dos **Mínimos Quadrados Móveis (MLS)**
- Seleção da ordem polinomial de aproximação
- Elimina dependência geométrica usando nuvem de pontos vizinhos
- Essencial para malhas com elementos de diferentes níveis de refinamento





Exemplo: Aproximação por Diferenças Finitas

Derivada Segunda com Interpolação MLS

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{1}{\Delta x^2} (u_l - 2u_c + u_r)$$

- Ponto u_l não coincide com a malha → requer interpolação
- Interpolação MLS:

$$u_l = \sum_{k \in \mathcal{I}_l} w_k^l u_k$$

- \mathcal{I}_l : conjunto de índices dos vizinhos de u_c
- w_k^l : pesos calculados pelo método MLS
- N_l : número de vizinhos para manter a ordem de precisão



HiG-Tree - Solução de Sistemas Lineares

- Duas bibliotecas poderosas para computação paralela:
 - **HYPRE**: High Performance Preconditioners
 - **PETSc**: Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation
- Otimizadas para arquiteturas de memória compartilhada e distribuída
- Rotinas de alto desempenho testadas em diversos códigos de CFD
- Tolerância de convergência tipicamente 1×10^{-7}



HiG-Flow - Capacidades de Simulação

- Simulação de escoamentos monofásicos:
 - Fluidos Newtonianos
 - Generalizados Newtonianos
 - Viscoelásticos
- Simulação de escoamentos bifásicos:
 - Método VOF para representação de interface
- Dimensão arbitrária (1D, 2D, 3D, ..., ND)
- Design modular para implementação fácil de novas técnicas

HiG-Flow - Esquemas Temporais



Métodos Explícitos

- Euler explícito
- Runge-Kutta TVD 2^a ordem (Euler modificado)
- Runge-Kutta TVD 3^a ordem

Métodos Implícitos

- Euler implícito
- Crank-Nicholson
- BDF 2^a ordem (Backward Differentiation Formula)

- Métodos de projeção para acoplamento pressão-velocidade:
 - Incremental (2^a ordem no tempo)
 - Não-incremental (1^a ordem no tempo)



PLIC-VOF: Interface como Plano Local

Equação da Interface

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{x} = \alpha$$

\mathbf{n} : vetor normal à interface \mathbf{x} : posição do ponto no plano α : distância do plano até a origem da célula

- O valor de α é ajustado para que o volume do fluido reconstruído seja igual à fração volumétrica f .

$$\bar{f}(\alpha, \mathbf{n}, \Delta) - f = 0$$



Cálculo da Normal da Interface

- O vetor normal \mathbf{n} é obtido como o gradiente da fração volumétrica.

Normal da Interface

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla f}{\|\nabla f\|}$$

- O gradiente é calculado com stencil $3 \times 3 \times 3$ ao redor da célula interfacial.
- Garantindo 2^a ordem de precisão na reconstrução da direção da interface.



Cálculo do Volume do Fluido Reconstruído

Volume do Fluido Abaixo do Plano

$$\begin{aligned} V = & \frac{1}{6|n_x||n_y||n_z|} \left[\alpha^3 \right. \\ & - R(\alpha - |n_x|\Delta x) \cdot (\alpha - |n_x|\Delta x)^3 \\ & - R(\alpha - |n_y|\Delta y) \cdot (\alpha - |n_y|\Delta y)^3 \\ & - R(\alpha - |n_z|\Delta z) \cdot (\alpha - |n_z|\Delta z)^3 \\ & + R(\alpha - |n_x|\Delta x - |n_y|\Delta y) \cdot (\alpha - |n_x|\Delta x - |n_y|\Delta y)^3 \\ & + R(\alpha - |n_x|\Delta x - |n_z|\Delta z) \cdot (\alpha - |n_x|\Delta x - |n_z|\Delta z)^3 \\ & \left. + R(\alpha - |n_y|\Delta y - |n_z|\Delta z) \cdot (\alpha - |n_y|\Delta y - |n_z|\Delta z)^3 \right] \end{aligned}$$

- A função $R(a)$ ativa termos apenas quando a interface cruza a célula:

$$R(a) = \begin{cases} 0, & a \leq 0 \\ 1, & a > 0 \end{cases}$$

- Essa expressão permite determinar α de modo que V reproduza a fração volumétrica f .

Advecção Fracionada por Dimensões



Equação de Transporte

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}f) = 0$$

f : fração volumétrica

\mathbf{u} : velocidade

$\nabla \cdot (\mathbf{u}f)$: divergente do fluxo da fração.

- A equação é resolvida sequencialmente nas direções x, y e z , com $\mathbf{u} = (u, v, w)$ e $\Phi = \mathbf{u}f = (F, G, H)$
- Atualizações sucessivas da fração de volume:

$$f^n \rightarrow f^* \rightarrow f^{**} \rightarrow f^{n+1}$$



Forma Discretizada - Direção x

$$f_{i,j,k}^* = \frac{f_{i,j,k}^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(F_{i-\frac{1}{2},j,k}^n - F_{i+\frac{1}{2},j,k}^n \right)}{1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(u_{i+\frac{1}{2},j,k}^n - u_{i-\frac{1}{2},j,k}^n \right)}$$

$f_{i,j,k}^n$: fração do volume na célula (i, j, k) , no tempo $t^n = n\Delta t$



Advecção Fracionada - Direção y

Atualização em y

$$f_{i,j,k}^{**} = \frac{f_{i,j,k}^* + \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(G_{i,j-\frac{1}{2},k}^* - G_{i,j+\frac{1}{2},k}^* \right)}{1 - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(v_{i,j+\frac{1}{2},k}^n - v_{i,j-\frac{1}{2},k}^n \right)}$$



Advecção Fracionada - Direção z

Atualização Final para f^{n+1}

$$f_{i,j,k}^{n+1} = f_{i,j,k}^{**} + \frac{\Delta t}{\Delta z} \left[f_{i,j,k}^{**} \left(w_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n - w_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n \right) - \left(H_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{**} - H_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{**} \right) \right]$$



Cálculo do Fluxo Transportado

- Supondo $u_{i+\frac{1}{2},j,k} > 0$, o fluxo volumétrico é:

Definição do Fluxo Transportado

$$F_{i+\frac{1}{2},j,k}^n = \frac{V_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\Delta t \Delta y \Delta z}$$



Força de Tensão Superficial - Modelo CSF

Força de Superfície Contínua

$$\mathbf{F}_\sigma = \sigma \kappa \nabla f$$

- σ : coeficiente de tensão interfacial
- κ : curvatura da interface
- ∇f : gradiente da fração volumétrica
- Modela a força capilar na interface



Cálculo da Curvatura - Método da Função Altura

- Stencil $7 \times 3 \times 3$ (ou $3 \times 7 \times 3, 3 \times 3 \times 7$)
- Funções altura na direção normal predominante:

$$h_{i,j} = \sum_{k=3}^{k+3} f_{i,j,k} \Delta z$$

- Cálculo da curvatura:

$$\kappa = \frac{h_{xx} + h_{yy} + h_{xx}h_y^2 + h_{yy}h_x^2 - 2h_{xy}h_xh_y}{(1 + h_x^2 + h_y^2)^{3/2}}$$

- Derivadas calculadas por diferenças finitas centradas



Restrições do Passo Temporal

- Advecção:

$$\Delta t < \frac{\Delta}{2|\mathbf{u}|} \equiv \Delta t_{\text{Advecção}}$$

- Tensão superficial:

$$\Delta t < \sqrt{\frac{(\rho_1 + \rho_2)\Delta^3}{4\pi\sigma}} \equiv \Delta t_\sigma$$

- Termo parabólico (viscosidade):

$$\Delta t < Re \cdot \Delta^2 \equiv \Delta t_{\text{Parabólico}}$$

- Termo hiperbólico (inércia):

$$\Delta t < \frac{\Delta}{\rho|\mathbf{u}|} \equiv \Delta t_{\text{Hiperbólico}}$$

- Passo final:

$$\Delta t = \min(\Delta t_{\text{Advecção}}, \Delta t_\sigma, \Delta t_{\text{Parabólico}}, \Delta t_{\text{Hiperbólico}})$$

$$\Delta = \min\{\Delta x, \Delta y, \Delta z\}, \rho = \max\{\rho_1, \rho_2\}$$



Validação



Os testes de validação empregam um campo de velocidade prescrito, de modo a isolar o desempenho do algoritmo de advecção dos efeitos da dissipação numérica do resolvedor de fluxo. A principal métrica quantitativa considerada é o Erro Absoluto de Volume (ϵ_{L_1}), o qual quantifica a conservação de massa por meio da diferença absoluta entre os volumes inicial e final ($|V_I - V_F|$). Assim:

$$\epsilon_{L_1} = |V_I - V_F|$$



Teste de Escoamento por Cisalhamento 3D

Configuração do Domínio

- Domínio cúbico tridimensional, $[0, 1] \times [0, 1] \times [0, 2]$;
- Bolha inicial esférica, raio $R = 0.15$ com centro em $(0.5, 0.75, 0.25)$;
- Campo de velocidade:

$$\vec{u} = \begin{cases} u = -\sin(\pi x)^2 \sin(2\pi y) \cos\left(\frac{\pi t}{T}\right) \\ v = \sin(\pi y)^2 \sin(2\pi x) \cos\left(\frac{\pi t}{T}\right) \\ w = u_{max} \left(1 - \frac{r}{R}\right)^2 \cos\left(\frac{\pi t}{T}\right) \end{cases} \quad (1)$$

- Tempo total $T = 6.0$
- Passo de tempo de $\Delta t = 1 \times 10^{-3}$

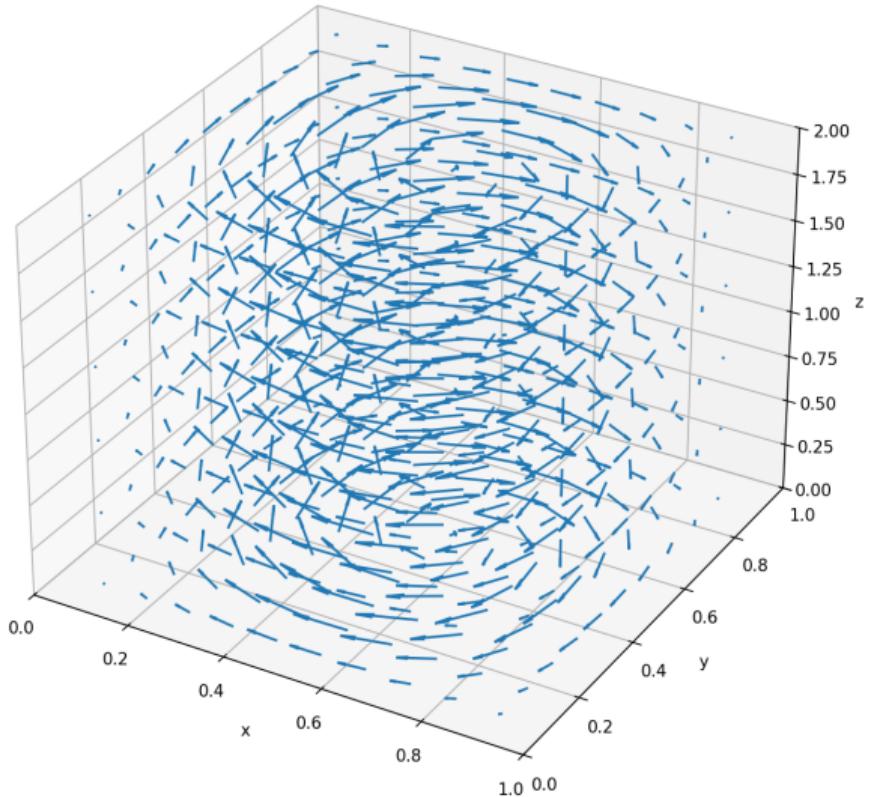
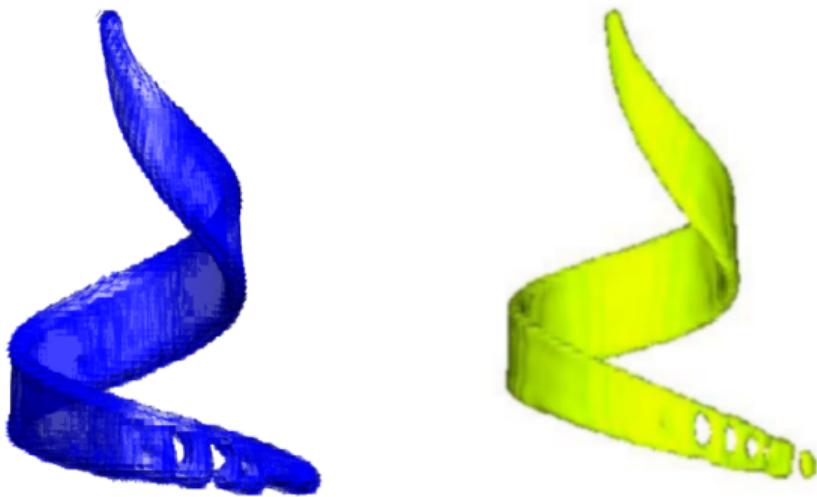


Figura 1: Gráfico do campo vetorial da Equação (1), instante $t = 0$



(a) HiG-Flow (this work).

(b) Liovic et al. 2006.

Figura 2: Comparação do formato da interface em $t = 3$ para o teste de escoamento cisalhante 3D. Resultados obtidos com (a) HiG-Flow e (b) o método PCFSC de [Liovic et al. 2006], ambos utilizando uma malha de $64 \times 64 \times 128$ elementos.

Fonte: [Silva et al. 2023]



Solver	Mesh	Error (ϵ_{L_1})
HiG-Flow	$50 \times 50 \times 100$	2.86×10^{-4}
HiG-Flow	$64 \times 64 \times 128$	4.48×10^{-5}
CVTNA + unsplit	$64 \times 64 \times 128$	3.64×10^{-3}
ELVIRA + COSMIC	$64 \times 64 \times 128$	3.97×10^{-3}
CLC-CBIR	$64 \times 64 \times 128$	3.27×10^{-3}

Tabela 1: Comparação dos erros L_1 na conservação da fração de volume no teste de escoamento cisalhante 3D em $t = 6$, incluindo os resultados do HiG-Flow e os reportados por [Liovic et al. 2006], [Duz et al. 2016], [López et al. 2008]

Fonte: [Silva et al. 2023]

Teste de Campo de Deformação 3D



Configuração do Domínio

- Domínio cúbico tridimensional, $[0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$;
- Bolha inicial esférica, raio $R = 0.15$ com centro em $(0.35, 0.35, 0.35)$;
- Campo de velocidade:

$$\vec{u} = \begin{cases} u = 2 \sin(\pi x)^2 \sin(2\pi y) \sin(2\pi z) \cos(\pi t/T) \\ v = -\sin(\pi y)^2 \sin(2\pi x) \sin(2\pi z) \cos(\pi t/T) \\ w = \sin(\pi z)^2 \sin(2\pi x) \sin(2\pi y) \cos(\pi t/T) \end{cases} \quad (2)$$

- Tempo total $T = 3.0$
- Passo de tempo de $\Delta t = 1 \times 10^{-3}$

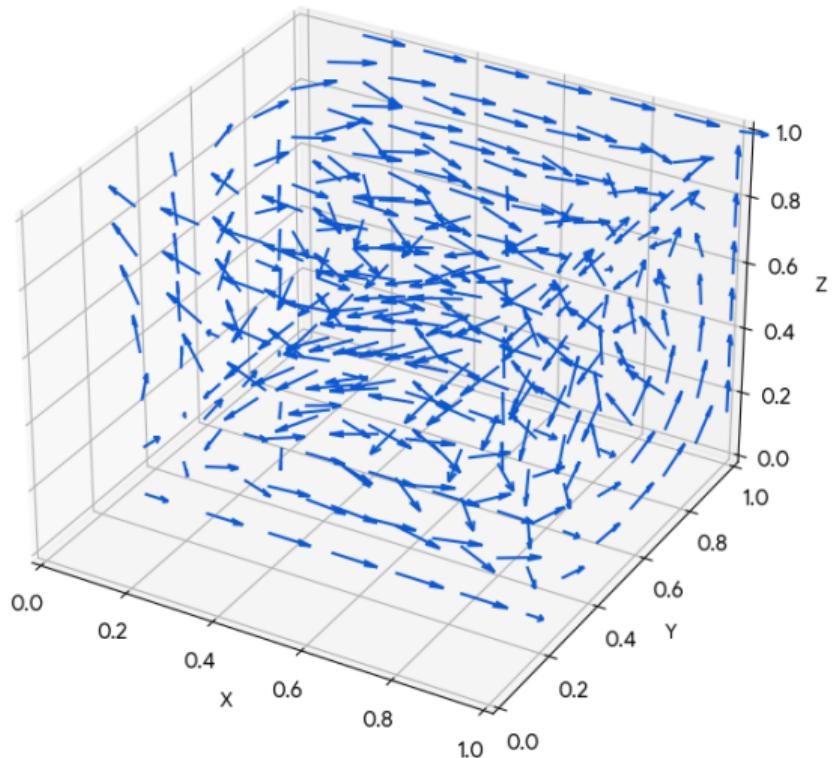
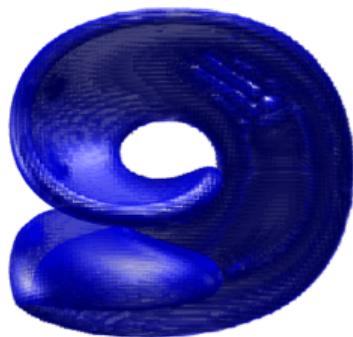


Figura 3: Gráfico do campo vetorial da Equação (2), instante $t = 0$



(a) HiG-Flow (this work).



(b) Liovic et al. 2006.

Figura 4: Comparação do formato da interface em $t = 3$ para o teste de campo de deformação 3D. Resultados obtidos com (a) HiG-Flow e (b) o método PCFSC de [Liovic et al. 2006], ambos utilizando uma malha com 128^3 elementos.

Fonte: [Silva et al. 2023]



Solver	Mesh	Error (ϵ_{L_1})
HiG-Flow	$50 \times 50 \times 50$	1.15×10^{-4}
HiG-Flow	$64 \times 64 \times 64$	2.19×10^{-5}
HiG-Flow	$128 \times 128 \times 128$	9.41×10^{-6}
CVTNA + PCFSC unsplit [Liovic et al. 2006]	$64 \times 64 \times 64$	1.99×10^{-3}
CVTNA + PCFSC unsplit [Liovic et al. 2006]	$128 \times 128 \times 128$	3.09×10^{-4}
CLC-CBIR [López et al. 2008]	$64 \times 64 \times 64$	2.09×10^{-3}
CLC-CBIR [López et al. 2008]	$128 \times 128 \times 128$	3.52×10^{-4}

Tabela 2: Comparação dos erros L_1 na conservação da fração de volume no teste de campo de deformação 3D, incluindo os resultados do HiG-Flow e os reportados por [Liovic et al. 2006] e [López et al. 2008].

Fonte: [Silva et al. 2023]



Bolha ascendente 3D por empuxo

Configuração do domínio

- Domínio cúbico tridimensional, $[0, 1] \times [0, 1] \times [0, 2]$;
- bolha inicial esférica, raio $R = 0.25$ com centro em $(0.5, 0.5, 0.5)$;
- condições de contorno $u = 0$ nas paredes;
- gravidade $g = 0.98$;
- malha de $50 \times 50 \times 100$ células; e
- intervalo de tempo $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$.



Casos simulados

Caso	ρ_1	ρ_2	μ_1	μ_2	g	σ	Re	Bo
1	1000	100	10	1	0.98	24.5	35	10
2	1000	1	10	0.1	0.98	1.96	35	125

O fluido externo tem densidade ρ_1 e viscosidade μ_1 , enquanto o fluido interno tem densidade ρ_2 e viscosidade μ_2 .

Caso	ρ_1/ρ_2	μ_1/μ_2	
1	10	10	bolha quase esférica
2	1000	100	bolha se achata

- Número de Reynolds mede a razão entre as forças iniciais e forças viscosas.
- Número de Bond mede a razão entre empuxo e forças de tensão superficial.



Resultados, caso 1

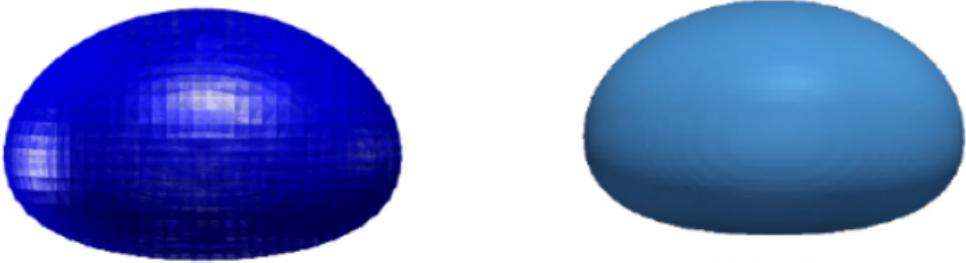


Figura 5: Comparação do formato da bolha em $t = 3$ com HiG-Flow (esq.) e OpenFOAM (dir.).

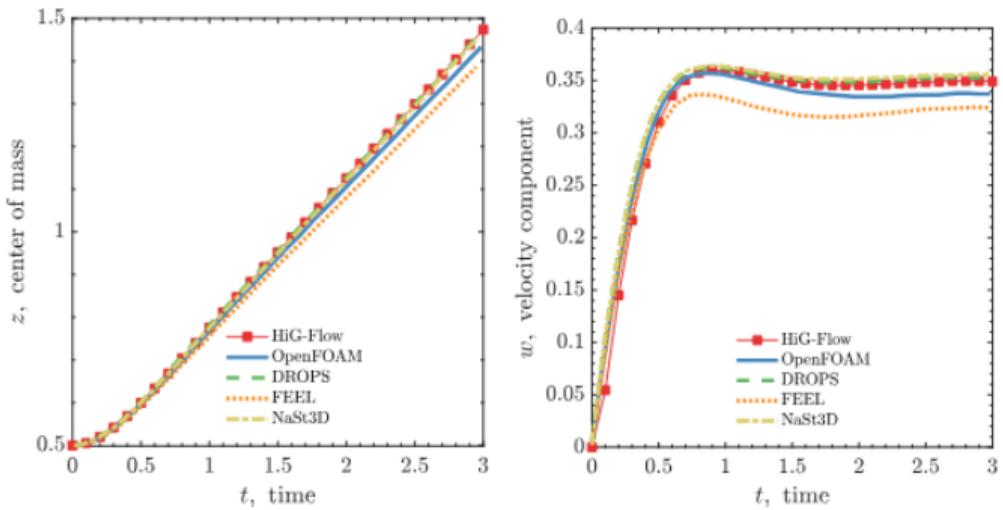


Figura 6: Evolução do centro de massa da bolha (esq.) e velocidade de ascensão da bolha (dir.).



Resultados, caso 2

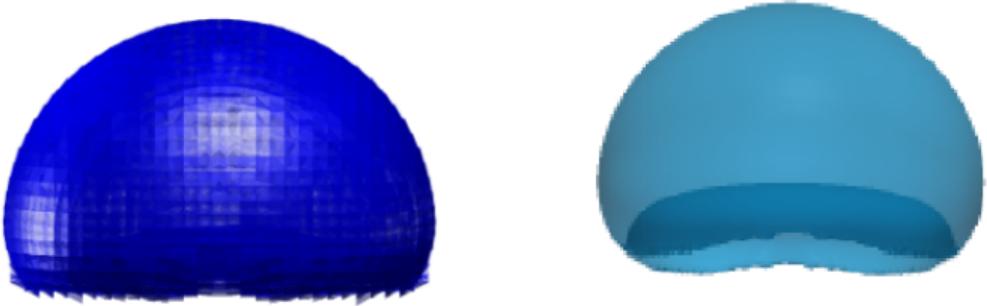


Figura 7: Comparação do formato da bolha em $t = 3$ com HiG-Flow (esq.) e OpenFOAM (dir.).

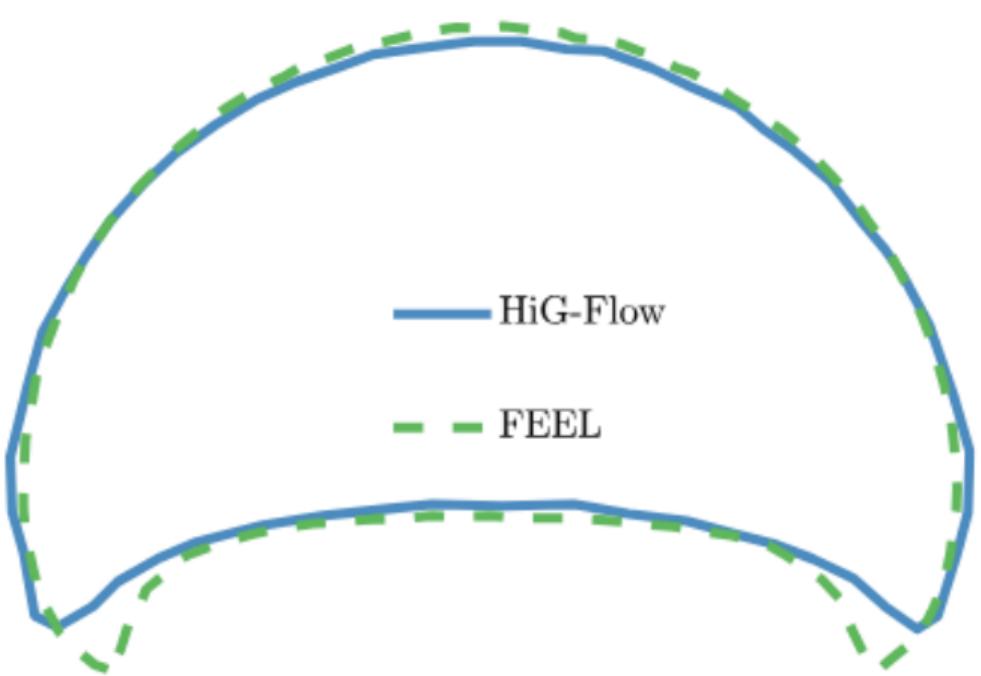


Figura 8: Comparação do formato da bolha em $t = 3$ com HiG-Flow (esq.) e FEEL (dir.).

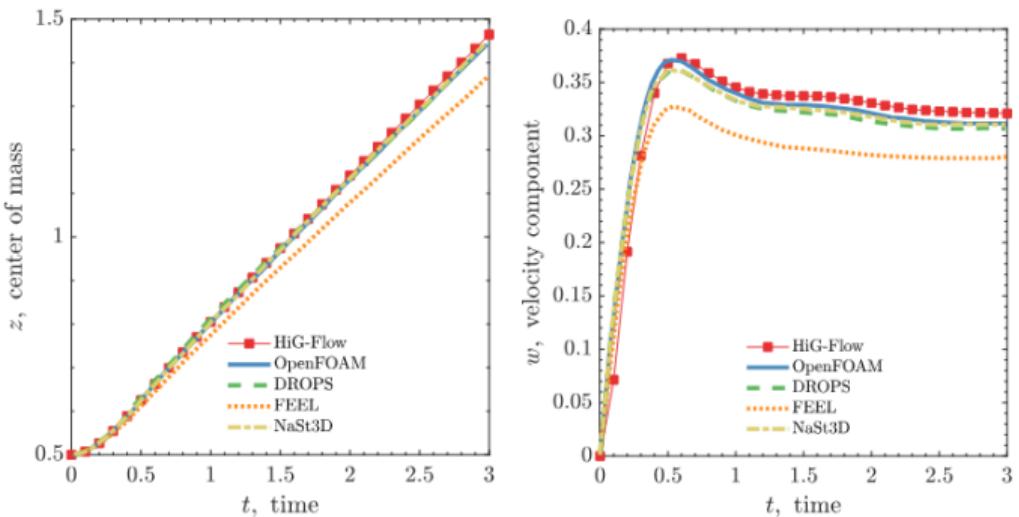


Figura 9: Evolução do centro de massa da bolha (esq.) e velocidade de ascensão da bolha (dir.).



Adaptatividade de malha



Introdução às Malhas Dinâmicas

- **Definição:** Malhas que se adaptam a mudanças na geometria durante simulações transientes
- **Objetivo:** Manter qualidade e validade da malha sem intervenção do usuário
- **Métodos Principais:**
 - **Método R:** Rearranjo de nós
 - **Método H:** Refinamento/desrefinamento
 - **Método P:** Enriquecimento polinomial
- **Aplicações:** Escoamentos com superfícies móveis, FSI, turbomáquinas

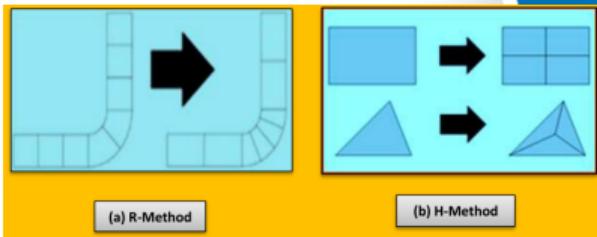


Figura 10: Tipos de refinamento adaptativo



Aplicações e Casos de Estudo

- **Cilindro em Canal:**
 - Comparação Laplaciano vs Pseudo-Sólido
 - Deslocamento máximo sem inversão
- **Turbina Eólica (VAWT):**
 - Malhas deslizantes para rotação
 - Domínio interno rotativo e externo fixo
- **Bomba Micro:**
 - Método ALE para FSI
 - Cantilevers como válvulas
- **Refinamento Adaptativo Dinâmico (AMR):**
 - Captura de gradientes elevados
 - Aplicação em indutor espiral
- Vídeo de exemplo:
<https://youtu.be/AiDFNevhJ98?si=Do-D2FmBH5UynQNJ>

Muito Obrigado Pela Atenção

Dúvidas e Sugestões

Erick Rodrigues Canterle,
pedro.coimbra@usp.br,
queiroztff@usp.br ou
desaferreira@usp.br

Referências I

- 📄 DUZ, B. et al. Efficient and accurate plic-vof techniques for numerical simulations of free surface water waves. In: *Proceedings of the 9th International Conference on Computational Fluid Dynamics - ICCFD9*. [S.I.: s.n.], 2016. ICCFD9: 9th International Conference on Computational Fluid Dynamics ; Conference date: 11-07-2016 Through 15-07-2016.
- 📄 LIOVIC, P. et al. A 3d unsplit-advection volume tracking algorithm with planarity-preserving interface reconstruction. *Computers & Fluids*, Elsevier BV, v. 35, n. 10, p. 1011–1032, dez. 2006. ISSN 0045-7930.
- 📄 LÓPEZ, J. et al. A new volume of fluid method in three dimensions—part ii: Piecewise-planar interface reconstruction with cubic-bézier fit. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Wiley, v. 58, n. 8, p. 923–944, mar. 2008. ISSN 1097-0363.
- 📄 SILVA, A. T. G. d. et al. Validation of hig-flow software for simulating two-phase flows with a 3d geometric volume of fluid algorithm. *Mathematics*, MDPI AG, v. 11, n. 18, p. 3900, set. 2023. ISSN 2227-7390.

