ANA CAROLINA DA SILVA FERNANDES

Um método computacional para modelagem de problemas de
fluidos carregados com partículas

São Paulo
2019

ANA CAROLINA DA SILVA FERNANDES

Um método computacional para modelagem de problemas de
fluidos carregados com partículas

Dissertação apresentada à Escola
Politécnica da Universidade de São
Paulo para obtenção do título de
Mestre em Ciências

São Paulo
2019

ANA CAROLINA DA SILVA FERNANDES

Um método computacional para modelagem de problemas de
fluidos carregados com partículas

Dissertação apresentada à Escola
Politécnica da Universidade de São
Paulo para obtenção do título de
Mestre em Ciências

Área de Concentração:
Engenharia de Estruturas

Orientador: Prof. Dr. Paulo de Mattos
Pimenta

São Paulo
2019

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

Este exemplar foi revisado e corrigido em relação à versão original, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo, _____ de _____ de _____

Assinatura do autor: _____

Assinatura do orientador: _____

Catálogo na publicação

Fernandes, Ana Carolina da Silva

Um método computacional para modelagem de problemas de fluidos carregados com partículas / A. C. S. Fernandes -- versão corr. -- São Paulo, 2019.

101 p.

Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia de Estruturas e Geotécnica.

1. Interação Fluido-Partículas 2. Método dos Elementos Finitos 3. Método dos Elementos Discretos 4. Fronteiras Imersas I. Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia de Estruturas e Geotécnica II. t.

DEDICATÓRIA

Aos meus pais Marisa e Orlando
Aos meus irmãos Priscila e André
Ao meu companheiro Caio

AGRADECIMENTOS

Ao professor e amigo Henrique Campelo Gomes que, nesses anos de convivência, muitas vezes me apoiou e muito me ensinou, realizando um trabalho impecável de orientação.

Ao professor Paulo de Mattos Pimenta pela confiança e pelos ensinamentos acadêmicos e extra-acadêmicos.

Ao professor Eduardo M. B. Campello pela ajuda, dedicação, ensinamentos e disponibilidade.

Ao PROAP - Programa de Apoio à Pós-Graduação da CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior), pelo suporte financeiro que permitiu minha participação no congresso CILAMCE 2017.

Ao amigo Henrique Curci pelo suporte de sempre e pelas boas conversas.

Aos amigos do LMC (Laboratório de Mecânica Computacional), em especial, à Debora, Cátia, Paulo e Tiago.

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO.....	1
1.1	INTERAÇÃO FLUIDO-PARTÍCULA	2
1.2	OBJETIVOS	7
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	9
3	O PROBLEMA DE FLUIDOS.....	13
3.1	ABORDAGEM EULERIANA DO PROBLEMA DE FLUIDOS	13
3.1.1	Conservação de massa	13
3.1.2	Conservação de momento linear	14
3.2	EQUAÇÕES DE NAVIER-STOKES	17
3.3	FORMA FRACA	18
3.4	MÉTODO DE NEWMARK PARA INTEGRAÇÃO NO TEMPO.....	20
3.5	ELEMENTOS FINITOS PARA DISCRETIZAÇÃO DO ESPAÇO	21
4	O PROBLEMA DE PARTÍCULAS.....	25
4.1	BREVE DESCRIÇÃO DO MODELO MED	27
5	O PROBLEMA DE INTERAÇÃO FLUIDO-PARTÍCULAS.....	34
5.1	INTERAÇÃO FLUIDO-ESTRUTURA	34
5.2	FRONTEIRAS IMERSAS	38
5.2.1	Condições na interface	39
5.2.2	Interface móvel	40
5.2.3	Discretização da interface.....	42
5.2.4	Células de integração nos elementos cortados	44
5.3	PROBLEMA MATRICIAL	45
5.4	CÁLCULO DAS FORÇAS E MOMENTOS EXERCIDOS PELO FLUIDO SOBRE AS PARTÍCULAS	47
5.5	RESUMO DO ALGORITMO DE SOLUÇÃO	48

6	SIMULAÇÕES E RESULTADOS.....	49
6.1	PROBLEMAS DE INTERAÇÃO PARTÍCULA-PARTÍCULA.....	50
6.1.1	Partícula arremessada horizontalmente sob ação da gravidade com anteparo.....	50
6.1.2	Choque entre duas partículas.....	51
6.1.3	Choque entre duas partículas (com velocidades em sentidos opostos).....	52
6.1.4	Choque entre duas partículas desalinhadas (com velocidades em sentidos opostos).....	52
6.1.5	Choque entre três partículas.....	54
6.1.6	Choque entre quatro partículas.....	56
6.1.7	Choque entre cinco partículas.....	58
6.2	ADAPTAÇÃO DO PROGRAMA DE FLUIDOS PARA O ACOPLAMENTO COM O PROGRAMA DE PARTÍCULAS.....	60
6.2.1	Escoamento em torno de n partículas.....	61
6.2.2	Partícula em movimento de translação prescrito.....	62
6.2.3	N partículas em movimento de translação e rotação prescritos....	63
6.3	EXEMPLOS DE INTERAÇÃO FLUIDO-PARTÍCULAS.....	64
6.3.1	Sedimentação de partícula isolada.....	64
6.3.2	Sedimentação de duas partículas posicionadas em coluna.....	69
6.3.3	Escoamento em torno de uma partícula.....	73
6.3.4	Escoamento de fluido carregado com partículas em canal.....	78
6.3.5	Escoamento de fluido carregado com partículas em canal com redução de seção.....	82
6.3.6	Escoamento de fluido carregado com partículas em funil.....	86
7	CONCLUSÕES.....	91
8	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	93

RESUMO

Neste trabalho, apresenta-se um estudo a respeito de problemas de interação Fluido-Partícula e dos métodos e formulações usados para resolvê-los. Além disso, propõe-se um novo método para resolver problemas acoplados de mecânica dos fluidos e mecânica das partículas. A ideia é baseada em trabalhos anteriores de (Gomes e Pimenta 2015) e (Campello 2016), e o objetivo é desenvolver um modelo computacional adequado e eficiente para simular problemas envolvendo fluidos carregados com partículas sólidas. O problema de fluido é resolvido por uma abordagem Euleriana de elementos finitos, usando elementos mistos locais de velocidade-pressão, os quais satisfazem a condição de compatibilidade LBB. O sistema de equações não linear obtido é resolvido iterativamente pelo método de Newton-Raphson. Uma característica importante é que a malha de fluidos permanece fixa durante a passagem do fluxo, assim como nas abordagens Eulerianas clássicas. O problema das partículas, por sua vez, é resolvido com uma abordagem Lagrangiana de elementos discretos, em que os contatos de partícula com partícula e partícula com paredes (limites fixos) são livremente permitidos e resolvidos. A influência do fluido no movimento das partículas é representada por meio de forças e momentos, que são calculados a partir do escoamento e impostos às partículas de maneira acoplada, iterativa e explícita. As interfaces entre o fluido e as partículas são tratadas por meio da técnica de fronteiras imersas, onde as condições de contorno do fluido nos contatos com partículas são impostas através da interpolação de funções descontínuas e constantes de multiplicadores de Lagrange ao longo das interfaces. É adotado um método explícito, iterativo e escalonado para conseguir a convergência dentro de cada passo de tempo do problema. Para ilustrar o potencial do método proposto, são apresentadas simulações de escoamentos carregados de partículas.

Palavras-chave: Interação Fluido-Partículas, Método dos Elementos Finitos, Método dos Elementos Discretos, Fronteiras Imersas

ABSTRACT

In this work, a study is presented on Fluid-Particle interaction problems and the methods and formulations used to solve them. In addition, is proposed a new method for solving coupled problems of fluid mechanics and particle mechanics. The idea is based on previous works by (Gomes e Pimenta 2015) and (Campello 2016), and the goal is to develop an efficient computational model suited to simulate problems involving flowing fluid media laden with solid particles. The fluid problem is resolved by an Eulerian finite element approach using local element velocity-pressure pairs satisfying the LBB compatibility condition, with the resulting nonlinear system of equations being iteratively solved by the Newton-Raphson method. As an important feature, the fluid mesh remains fixed during the flow, just as in classical Eulerian approaches. The particles' problem, in turn, is resolved in a Lagrangian discrete element approach, wherein both particle-to-particle and particle-to-wall (fixed boundaries) contacts are freely permitted and resolved. The influence of the fluid on the motion of the particles is represented by means of forces and moments, which are computed from the fluid flow and imposed on the particles in a coupled, iterative and explicit way. The fluid-particles' interfaces are treated by means of immersed boundary technique, in which the fluid interface conditions with the (nonmatching) particles' boundaries are imposed through discontinuous piecewise constant Lagrange multipliers interpolating functions along the interfaces. An explicit, staggered and interactive scheme is adopted to achieve convergence within each time step of the problem. In order to illustrate the potentialities of the proposed scheme, particle-laden fluid flow simulations are presented.

Keywords: Fluid-Particles Interaction, Finite Element Method, Discrete Element Method, Embedded Interfaces

1. INTRODUÇÃO

Desde as antigas civilizações, percebemos que modelar uma ideia de maneira simplificada antes de tentar, de fato, colocá-la em prática é uma forma eficiente de prever os possíveis resultados e dificuldades que serão encontrados no momento da execução e utilização da ideia. No entanto, nem sempre é fácil descobrir qual é o melhor modelo a ser utilizado em cada situação.

Avaliar se o modelo escolhido consegue reproduzir de maneira adequada a situação real exige muito estudo e experiência. Com o passar dos anos, a forma de se modelar evoluiu tanto na questão de escolha entre os tipos de modelos que podem ser utilizados em cada ocasião, gerando bons resultados, como também na qualidade e sofisticação dos modelos, que foram se tornando cada vez mais completos e mais representativos do que acontece no mundo físico.

Essa evolução se deu em grande parte devido ao avanço tecnológico dos computadores, que atualmente ocupam pequeno espaço físico e conseguem processar modelos bastante rebuscados com uma velocidade adequada às nossas necessidades. Dessa forma, a modelagem se torna mais acessível a um grande número de pessoas, o que facilita e acelera ainda mais seu processo de aprimoramento. O desenvolvimento tecnológico também permitiu que hipóteses e formulações matemáticas estudadas nas academias fossem implementadas nos programas e aplicadas aos modelos, levando a um cálculo bastante refinado dos resultados.

Existem diversas classes de problemas que, pela complexidade da física envolvida em sua resolução, necessitam de métodos numéricos e capacidade de processamento computacional avançados para se chegar às soluções, como é o caso, por exemplo, dos problemas de fluidos e de partículas.

Os problemas de interação fluido-partícula, por sua vez, podem ser chamados de sistemas acoplados pois necessitam de resolução simultânea de duas físicas interdependentes que são a Mecânica das Partículas e a Mecânica dos Fluidos. Ambas, isoladamente, já se mostram um problema de Dinâmica não Linear, sendo que a última, especificamente, envolve a resolução de Equações Diferenciais Parciais complexas. Ou seja, encontrar a solução de um sistema cujas condições de contorno da interface entre fluido e material particulado são móveis (e, portanto, em geral

desconhecidas e dependentes desta solução) é uma tarefa bastante difícil e, conseqüentemente, necessita de modelos sofisticados e otimizados para serem simulados com fidelidade, mas se torna cada dia mais possível graças ao desenvolvimento tecnológico citado.

1.1 INTERAÇÃO FLUIDO-PARTÍCULA

Os materiais particulados são abundantemente encontrados e empregados em diferentes ramos de atividades humanas. Podem estar em sua forma natural, como grãos de areia, flocos de neve e poeira atmosférica, ou então em classes de materiais produzidos especialmente para certa aplicação, como os *fillers* e agregados para concreto, alimentos em pó ou em grãos, e aglomerados compactos de grãos finos de alto valor agregado nas indústrias química, farmacêutica, microeletrônica e de mineração. Apesar disso, o conhecimento adquirido pelo homem sobre a física desses materiais ainda é restrito e pouco aplicado tecnologicamente.

Em muitos casos, o material particulado se encontra imerso em meios fluidos mais viscosos e pesados que os gases atmosféricos e, portanto, os efeitos que estes meios causam na movimentação das partículas, aplicando forças de atrito, arrasto e sustentação, se tornam notáveis e devem ser considerados nos estudos cinemáticos.

Alguns exemplos em que a interação fluido-partícula é significativa para o entendimento do fenômeno físico são: o transporte de sedimentos e poluentes ocasionado pelo escoamento de água em rios e oceanos (que é tema de grande interesse ambiental na atualidade), a perfuração de poços de petróleo em rochas submersas por meio de brocas rotativas (Figura 1), onde há desagregação e fragmentação de material rochoso, cujas partículas passam a interagir com os fluidos de perfuração (processo que pode causar danos ambientais, vide Figura 1), a percolação de fluidos através de meios porosos como o solo (Figura 3) por exemplo, que é um processo de extrema importância para obras de engenharia civil e até escoamentos biológicos como a circulação do sangue dentro de artérias e veias, que é constituído de plasma carregado com plaquetas, hemácias e leucócitos (Figura 2).

Figura 1 - Broca de perfuração de poços de petróleo (esquerda). Simulação numérica multifásica de fluido de perfuração em poço de petróleo (Teramoto et al. 2014) (direita).

Figura 2 - Partículas sólidas existentes no sangue humano (acima). Simulação do fluxo sanguíneo (Vargas e Argenta 2015) (abaixo).

Figura 3 - Ensaio laboratorial de percolação de fluido através de material poroso (solo).

Diversos processos industriais também utilizam os fenômenos de interação fluido-partícula, como exemplo a fluidização (Figura 4) e o transporte pneumático. Sabendo que o comportamento macroscópico dos materiais particulados é controlado pelas interações individuais entre partículas assim como interações com os fluidos envolventes, a simulação desses fenômenos é de grande interesse por parte do setor industrial para a melhoria e aprimoramento dos processos produtivos, na busca de tornar o produto final mais barato e melhor.

Figura 4 – Equipamento industrial (esquerda) e esquema gráfico (direita) de um granulador de leito fluidizado.

Como foi possível observar, existem diversas atividades caras, perigosas e de alta complexidade tecnológica envolvendo a interação fluido-partícula, o que torna de grande utilidade a simulação computacional desses problemas antes da execução real da operação.

Por serem de naturezas tão diversas, os problemas de Interação Fluido-Partícula (IFP) admitem inúmeras abordagens e fica fácil de entender que não existe uma única forma ou método que seja eficiente e apresente bons resultados para todos os tipos de problemas. Dependendo da escala do domínio espacial da simulação, da ordem de grandeza das velocidades e dos deslocamentos e da quantidade de partículas, da forma como são tratadas as interações partícula-partícula e a interface fluido-partícula, entre outras características peculiares de cada problema, é possível escolher um método numérico mais adequado à situação.

Iniciaremos aqui, dividindo os estudos em diferentes abordagens de acordo com a escala do problema. O escoamento de um fluido carregado com partículas já foi muito estudado no passado sob uma perspectiva na escala atômico-molecular relacionada à termodinâmica e cinemática (Zhu et al. 2007). Além dessa, as demais abordagens existentes podem ser classificadas em duas categorias.

A abordagem contínua consiste em analisar o fenômeno em escalas maiores, como é o caso do modelo de dois fluidos onde o comportamento macroscópico é descrito pelas Equações de Balanço de Massa e Momento, juntamente com relações constitutivas e condições iniciais e de contorno (Gidaspow 1994). As partículas suspensas são tratadas como um segundo fluido, sendo que o escoamento é considerado bifásico. A solução se dá através de um modelo Euleriano-Euleriano que fornece uma descrição contínua de ambas as fases do escoamento (Casagrande et al. 2017). Esta abordagem se mostra adequada, por exemplo, para avaliar a performance holística de uma unidade operacional de uma indústria química, que pode ser da ordem de grandeza de 10 metros e demanda resultados rápidos para controle de operação. Apesar da rapidez e da conveniência computacional, a integração entre as fases sólida e fluida se dá por meio de correlações da força de arrasto, o que pode não ser muito preciso, já que não representa detalhadamente as interações partícula-partícula e partícula-fluido.

Já a abordagem híbrida contínuo-discreta que vem se desenvolvendo expressivamente nos últimos anos, estuda os fenômenos no nível microscópico, onde o fluido é tratado como um meio contínuo e as partículas são tratadas individualmente considerando as forças de contato entre elas e as forças externas (incluindo as do fluido) atuantes sobre as mesmas. As translações e rotações de cada uma são determinadas pela integração das Equações de Movimento de Newton-Euler (Radjai e Dubois 2011).

Existem alguns modelos discretos de partículas que são utilizados para a resolução de problemas de interação fluido-partícula, como por exemplo, a Simulação Direta Monte Carlo (Yuu et al. 1997) (Tsuji, Tanaka, e Yonemura 1998). No entanto, a grande maioria dos métodos se baseia no Método dos Elementos Discretos (Cundall e Strack 1979) (Avci e Wriggers 2011).

Partindo agora para a forma como são tratadas as interações partícula-partícula, existem basicamente duas principais categorias: o modelo das esferas-rígidas, em que as partículas interagem por meio de colisões instantâneas e são

modeladas com corpos rígidos, e o modelo das esferas “macias” ou deformáveis, que requer a solução numérica das equações de movimento de cada partícula e um modelo de forças de contato (O’Sullivan 2011).

Por último, abordaremos os métodos que se destacam na resolução dos problemas de IFP, classificados em dois grupos de acordo com a forma como tratam a interface fluido-partícula. O método das fronteiras coincidentes é aquele em que a malha de elementos pertencentes ao fluido acaba onde começa o domínio das partículas, e os pontos localizados na interface pertencem a ambos os domínios. Este método usa em sua formulação uma abordagem ALE (*Arbitrary Lagrangian Eulerian*) em que o fluido é formulado e resolvido a partir da deformação que sua malha sofre ao acompanhar a movimentação das partículas carregadas (T. E. Tezduyar et al. 1992) (T. E. Tezduyar, Behr, e Liou 1992).

Esta abordagem ALE não se mostra competente em ocasiões onde a interface passa por transformações complexas, como quando as partículas não estão confinadas e se movimentam livremente, pois os elementos da malha do fluido ficam excessivamente distorcidos. Uma solução é gerar novamente a malha sempre que a atual se encontra muito distorcida, no entanto, esse processo demanda alto custo computacional.

O outro grupo é o dos métodos das fronteiras imersas. Neste caso, a malha do fluido é independente e superposta ao domínio das partículas. O fluido pode ser resolvido com uma abordagem Euleriana clássica em que a malha é fixa e indeformável, características bastante convenientes do ponto de vista computacional, e apropriadas, pois evitam a distorção exagerada dos elementos deste domínio. Já as partículas podem ser resolvidas de maneira habitual, com a abordagem Lagrangiana (Glowinski et al. 2000).

Apesar de resolver o problema da distorção dos elementos do fluido, o método das fronteiras imersas também possui desvantagens. Para utilizá-lo, é necessário implementar alguma técnica que imponha ao fluido os deslocamentos, velocidades e rotações das partículas nas regiões das interfaces, porque esses são condição de contorno para a resolução do fluido. No entanto, não existem nós pertencentes à malha do fluido nas regiões das interfaces. Por isso, os efeitos dos deslocamentos, velocidades e rotações das partículas não podem ser passados ao fluido de maneira trivial. A transferência de informação entre a descrição Euleriana (fluido) e Lagrangiana (partículas) acontece por meio da imposição de restrições ao

escoamento, que são as condições de contorno traduzidas como velocidades impostas, o que caracteriza uma condição de contorno do tipo Dirichlet (Avci e Wriggers 2011).

Existem alguns artifícios sendo desenvolvidos para a transferência de informações entre os domínios das partículas e dos fluidos, isto é, para a imposição das condições de contorno essenciais ao fluido em problemas de IFP, como por exemplo, o uso de um termo adicional *source/sink* (que pode ser interpretado como o momento total por unidade de volume transferido da partícula ao fluido) às equações de Navier-Stokes utilizadas para a solução do problema fluido (Casagrande et al. 2017). Outra maneira, é usar uma formulação que combine o Método dos Elementos Finitos com os Multiplicadores de Lagrange, que é a maneira seguida neste trabalho.

Outra desvantagem do método das fronteiras imersas aparece quando as partículas são exageradamente pequenas em comparação ao domínio do problema, pois, como se verá mais adiante, a malha do fluido deve ter seus elementos de tamanho comparável ao tamanho das partículas, necessitando assim, de maior refinamento quanto menores forem as partículas.

1.2 OBJETIVOS

Este trabalho de mestrado tem como foco principal o estudo de fenômenos envolvendo fluidos interagindo com partículas e o desenvolvimento de um modelo computacional apropriado para resolver problemas de Interação Fluido-Partícula. Para este propósito, serão aproveitados trabalhos já desenvolvidos por integrantes de nosso grupo de pesquisa no campo computacional da mecânica dos fluidos e das partículas. Estes trabalhos anteriores encontram-se num estágio de maturidade bastante avançado.

Inicialmente, parte-se do programa computacional desenvolvido por (Gomes 2013), capaz de resolver a interação entre fluido e estrutura de maneira robusta e eficaz, usando o Método dos Elementos Finitos com Fronteiras Imersas. A partir daí, utiliza-se a formulação desenvolvida por (Campello 2016), responsável por resolver eficientemente a dinâmica das partículas através do Método dos Elementos Discretos, para complementar e aprimorar o código de Interação Fluido-Estrutura existente,

transformando-o num programa que simula a interação Fluido-Partícula. A formulação resultante deste trabalho se restringe à problemas bidimensionais.

Num contexto mais geral, este trabalho também objetiva encorajar o desenvolvimento de pesquisa científica na área de Interação Fluido-Partícula, dentro do Laboratório de Mecânica Computacional (LMC) da Escola Politécnica da USP.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Como já apresentado na introdução, a resolução de problemas onde ocorre a interação entre fluido e partículas é de grande importância em diversas áreas. Muitos estudos foram feitos tanto em escalas atômico-moleculares, relacionados à termodinâmica e cinética, quanto em grandes escalas, referentes por exemplo ao desempenho macroscópico de escoamentos em unidades industriais. No entanto, ainda são poucos os conteúdos relacionados à compreensão quantitativa de fenômenos na microescala (isto é, na escala das interações individuais entre o fluido e as partículas e entre essas consigo mesmas) sobre o comportamento das partículas. A pesquisa focada na modelagem de fluidos carregados com partículas, abordado em microescala, tem se intensificado principalmente a partir dos anos 2000 e o Método dos Elementos Discretos desempenha papel relevante no avanço dessas pesquisas, como pode ser visto em (A. B. Yu e Xu 2003) e (A. B. Yu 2004).

Os primeiros estudos expressivos e tentativas de simulação em microescala de escoamentos carregados com partículas datam da década de 1990, sendo que o primeiro trabalho apresentando a solução através de elementos finitos em 3 dimensões foi (A. A. Johnson e Tezduyar 1996), o qual representa um marco para a comunidade científica a respeito desse tema. Nele, são apresentadas simulações de partículas (de 2 até 5 unidades) caindo em um tubo cheio de líquido.

Nos anos seguintes, os mesmos autores publicaram novos resultados aprimorando e expandindo as capacidades do programa computacional inicial. Em 1997, foi publicado (A. A. Johnson e Tezduyar 1997), artigo que apresenta a mesma simulação do tubo cheio de líquido, porém, com a quantidade de partículas em queda atingindo a marca de 100 unidades. O recorde foi quebrado logo na sequência, como é possível ver em (A. A. Johnson e Tezduyar 1999), onde pela primeira vez simulou-se a interação entre fluido e 1000 partículas em queda.

Estes três trabalhos iniciais citados utilizaram o método das fronteiras coincidentes, em que a malha do fluido acaba onde se inicia o domínio das partículas e os nós da malha do fluido que pertencem à interface, se movimentam acompanhando o movimento das partículas. Dessa forma, o aumento da quantidade de partículas exige que a malha do fluido seja representada com um maior número de nós para garantir a precisão dos resultados. Além disso, é preciso gerar novamente a

malha do fluido sempre que os elementos atingem um alto grau de deformação, o que demanda grande capacidade de processamento computacional. Portanto, a melhoria de performance dos códigos baseava-se principalmente em avançar nos métodos de geração e atualização de malhas em computação paralela.

A partir deste, outros grupos de pesquisa se engajaram a desenvolver diferentes métodos buscando abordagens numéricas mais eficientes que reduzissem o alto custo computacional envolvido nesse tipo de simulação. Para se ter uma visão geral de como progrediram os estudos ao longo dos anos, recomenda-se a leitura de (Zhu et al. 2007) e (Zohdi 2007).

Com relação ao estudo de materiais particulados e interação entre partículas, também existem diferentes métodos e abordagens. Porém, falaremos apenas do Método dos Elementos Discretos (MED), que vem sendo extensivamente utilizado nos últimos anos para o estudo de diversos fenômenos como solos e materiais granulares, fluidização e transporte pneumático, por meio da sua combinação com a computação dinâmica de fluidos (CDF) (Zhu et al. 2007), além de ter sido o método escolhido para o desenvolvimento deste trabalho.

No Método dos Elementos discretos as partículas são tratadas individualmente levando em consideração as forças de contato entre elas além das forças externas atuantes, e cujos movimentos podem ser determinados através da integração das equações de movimento de Newton-Euler. Historicamente, esta abordagem foi introduzida por (Cundall e Strack 1979).

Como já mencionado, existem basicamente duas maneiras de como simular a interação entre partículas e são classificadas em: modelo da esfera-rígida e modelo da esfera-deformável. A principal diferença entre elas é que, no primeiro modelo, as partículas são interpretadas como corpos rígidos que interagem através de colisões instantâneas, ao passo que, para as esferas-deformáveis aplica-se um modelo de força de contato que envolve a deformação das partículas (penetração), o tempo de duração e, eventualmente, o amortecimento deste contato.

Apesar da necessidade de ser resolvido numericamente e demandar maior processamento computacional, o modelo das esferas-deformáveis se mostra mais adequado quando há a possibilidade de contatos simultâneos numa mesma partícula, e também, quando as partículas são, de fato, relativamente deformáveis, ainda que apenas localmente (no ponto de contato), situação em que a duração do contato, ainda que curta, não pode ser admitida como instantânea.

Por último, abordaremos aqui a questão da integração entre o problema de fluidos e das partículas, ou seja, a forma como são tratadas as interfaces entre os dois domínios. Já sabemos que, para simulações onde as partículas não estão confinadas e podem se mover livremente no domínio do fluido, é desejável se dispor de métodos alternativos que não utilizem a abordagem ALE, já que estes exigem que a malha do fluido acompanhe a movimentação das partículas.

Neste trabalho, faremos uso de teorias e métodos já utilizados e reconhecidos no campo da Interação Fluido-Estrutura (IFE) para tratar as interfaces. Estes métodos alternativos são apresentados com diferentes nomes na literatura: fronteiras imersas (*immersed boundary*), interface imersa (*immersed interface*), domínio imerso (*embedded domain*) ou domínio fictício (*fictitious domain*), também conhecido como método dos volumes fictícios. É interessante notar que as referências (Peskin 1972) e (Peskin 1977), citadas como pioneiras em IFE, são também os primeiros trabalhos a utilizarem o conceito de volumes fictícios e a empregar a nomenclatura *immersed boundary*. Neste trabalho, a nomenclatura adotada para se referir a esses métodos será a de “fronteiras imersas”.

Apesar da vantagem de resolver o problema do fluido por meio de malhas simples, regulares e fixas, que se tem ao utilizar o conceito de fronteira imersa, cria-se a necessidade de que a imposição das condições de contorno na interface entre fluido e partícula seja feita de forma não trivial, o que pode ser visto como uma desvantagem desse método. Essa condição de contorno no problema fluido é do tipo *Dirichlet* e se traduz como velocidades impostas.

Diversas técnicas podem ser utilizadas para impor essa condição de contorno na interface do problema de IFP e, nesta dissertação, propõe-se uma formulação utilizando o Método dos Elementos Finitos com Fronteiras Imersas em conjunto com Multiplicadores de Lagrange descontínuos na interface Fluido-Partícula. Este método proposto, por sua vez, pode ser considerado uma variação do Método dos Elementos Finitos Generalizados (GFEM), o qual foi originalmente concebido para aplicação em problemas de mecânica da fratura, como pode ser visto em (Moës, Dolbow, e Belytschko 1999) e (Belytschko e Black 1999), porém, bons resultados também foram obtidos quando aplicado em problemas de IFE.

Diferentemente do que foi proposto em (Gomes e Pimenta 2015), os trabalhos (Axel Gerstenberger e Wall 2008b), (Axel Gerstenberger e Wall 2008a) e (Legay, Chessa, e Belytschko 2006) utilizaram o GFEM, porém, discretizando a interface

através dos próprios nós gerados pela intersecção entre a interface e os elementos da malha do fluido. Dessa forma, o subespaço de aproximação dos Multiplicadores de Lagrange gera problemas de instabilidade numérica por não satisfazer a condição LBB, conforme já havia sido mostrado em (Moës, Béchet, e Tourbier 2006), em que esta técnica de discretização da interface é classificada como “desavisada”.

Algumas outras técnicas de imposição das condições de contorno do tipo Dirichlet em conjunto com métodos de fronteiras imersas foram desenvolvidas na última década, dentre as quais estão: o método dos Multiplicadores de Lagrange Distribuídos (Z. Yu 2005) e (Zilian e Legay 2008), em que definem-se os Multiplicadores de Lagrange nos próprios nós dos elementos de fluido cortados pela interface, os métodos de Galerkin descontínuos (Lew e Buscaglia 2000), além das variações do método de Nitsche (Sanders, Laursen, e Puso 2012) e (Rüberg e Cirak 2012), e também, os métodos híbridos mistos nos quais utiliza-se um campo de tensões adicional para enriquecer os elementos de fluido intersectados pela interface, a fim de garantir a imposição da condição de Dirichlet (A. Gerstenberger e Wall 2009), (Zilian e Fries 2009) e (Baiges et al. 2012).

Semelhantemente à ideia apresentada em (Sawada e Tezuka 2011), a formulação proposta nesta dissertação, apresentada no item 5.2 do Capítulo 5, é a mesma apresentada em (Gomes 2013) e difere das referências citadas anteriormente por construir a malha dos Multiplicadores de Lagrange na interface de forma independente da malha do fluido. Além disso, propõe-se também que as funções de interpolação dos Multiplicadores de Lagrange sejam constantes dentro dos elementos de interface e descontínuas entre estes, de modo a melhorar ainda mais a estabilidade numérica do método e simplificar o cálculo das integrais ao longo da interface.

3 O PROBLEMA DE FLUIDOS

Este capítulo apresenta o problema da Mecânica dos Fluidos sob uma abordagem Euleriana utilizando as Equações de Navier-Stokes para descrever escoamentos incompressíveis. A solução do sistema de equações será obtida através do Método dos Elementos Finitos.

3.1 ABORDAGEM EULERIANA DO PROBLEMA DE FLUIDOS

Para iniciar o estudo do escoamento de fluidos, é preciso fazer algumas considerações de simplificação do problema físico real. Uma observação a ser feita é que, apesar de os fluidos serem compressíveis, é possível considerar o escoamento incompressível, desde que as velocidades envolvidas sejam suficientemente baixas.

Trataremos aqui, das equações básicas de conservação de massa e momento do fluido (Donea e Huerta 2003), nas formas diferenciais e integrais, que serão a base para o desenvolvimento matemático posterior.

3.1.1 Conservação de massa

Segundo as leis da mecânica clássica, a massa (m) de um determinado volume de material deve se conservar ao longo do tempo (t). Dessa maneira, temos a seguinte forma integral

$$\frac{dm}{dt} = 0 \Rightarrow \frac{d}{dt} \int_V \rho \, dV = 0, \quad (3.1)$$

onde ρ é a densidade e V é o volume de material em questão.

Aplicando o Teorema de Transporte de Reynolds, a equação (3.1) pode ser reescrita assim

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int_S \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS = 0, \quad (3.2)$$

onde S é uma superfície de controle que delimita o volume de material, $\mathbf{v}$ é a velocidade do material em pontos da superfície de controle e $\mathbf{n}$ é o vetor normal externo nesses pontos da superfície em determinado instante de tempo.

Utilizando o Teorema do Divergente, que relaciona o fluxo de um campo vetorial através de uma superfície com o comportamento deste campo na região interna à superfície de controle, chegamos à seguinte expressão

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int_V \operatorname{div} \rho \mathbf{v} dV = \int_V \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho \mathbf{v}) \right) dV = 0. \quad (3.3)$$

Sabendo que a equação (3.3) é válida para qualquer volume de material, então a equação de conservação de massa resulta em

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho \mathbf{v}) = 0. \quad (3.4)$$

Tratando apenas de escoamentos incompressíveis, em que a densidade do fluido não varia com o tempo nem no espaço, a equação de conservação de massa se resume a

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0. \quad (3.5)$$

3.1.2 Conservação de momento linear

A equação de momento é dada pela relação entre a variação do momento linear ($\mathbf{Q}$) de um determinado volume de material com o tempo e a soma das forças que agem sobre esse volume. A variação de momento no tempo pode ser escrita da seguinte forma

$$\frac{d\mathbf{Q}}{dt} = \frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{v} dV. \quad (3.6)$$

Aplicando o Teorema de Transporte de Reynolds e posteriormente, o Teorema do Divergente, temos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{v} dV &= \int_V \frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} dV + \int_S (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} dS \\ &= \int_V \frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} dV + \int_V \operatorname{div} (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) dV \\ &= \int_V \left(\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) \right) dV. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Fazendo algumas passagens matemáticas usando a equação (3.5) da conservação de massa, a expressão anterior pode ser simplificada para

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{v} dV = \int_V \underbrace{\frac{d\mathbf{v}}{dt}}_{\text{aceleração}} \overbrace{\rho dV}^{\text{massa}}. \quad (3.8)$$

A interpretação da equação (3.8) é a soma dos produtos das acelerações pelas massas de cada elemento dV do volume de controle.

Com relação às forças que agem sobre o volume de fluido, elas se dividem entre forças de volume e forças de superfície. Sendo $\mathbf{b}$ a força de volume dividida pela massa de fluido, a força de volume total atuante sobre um volume de controle é dada por

$$\int_V \rho \mathbf{b} dV. \quad (3.9)$$

Já a força de superfície total ($\mathbf{t}$) aplicada ao volume de material, pode ser escrita em função das Tensões de Cauchy $\mathbf{T}$ em cada elemento da superfície, com vetor normal $\mathbf{n}$, como mostra a expressão a seguir

$$\int_S \mathbf{t} dS = \int_S \mathbf{T} \cdot \mathbf{n} dS \xrightarrow{\text{Teorema do Divergente}} \int_V \text{div } \mathbf{T} dV. \quad (3.10)$$

Juntando a equação (3.8) de variação do momento no tempo com as equações (3.9) e (3.10) das forças aplicadas sobre o volume de controle, temos

$$\int_V \rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} dV = \overbrace{\int_V \rho \mathbf{b} dV}^{\text{forças de volume}} + \underbrace{\int_V \text{div } \mathbf{T} dV}_{\text{forças de superfície}}. \quad (3.11)$$

Sabendo que a equação (3.11) é válida para qualquer volume de material, então a equação de conservação de momento fica assim

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \rho \mathbf{b} + \text{div } \mathbf{T}. \quad (3.12)$$

Existe uma equação consagrada na literatura que relaciona as derivadas temporais do material e do espaço, cuja dedução pode ser encontrada em (Donea e Huerta 2003). Esta equação é dada por

$$\frac{df}{dt} = \underbrace{\frac{\partial f}{\partial t}}_{\text{variação local}} + \overbrace{\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}}^{\text{termo convectivo}} \quad (3.13)$$

e pode ser interpretada como: a variação de uma grandeza física f no tempo t para uma fração de material é a variação local somada a um termo convectivo levando em conta o movimento relativo entre material e espaço.

Aplicando a equação (3.13) em (3.12), a equação de conservação de momento se torna

$$\rho \underbrace{\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}}_{\text{aceleração local}} + \rho \overbrace{(\nabla \mathbf{v}) \mathbf{v}}^{\text{aceleração convectiva}} = \rho \mathbf{b} + \text{div } \mathbf{T}. \quad (3.14)$$

3.2 EQUAÇÕES DE NAVIER-STOKES

Para escoamentos incompressíveis de fluidos Newtonianos, o Tensor das Tensões de Cauchy é

$$\mathbf{T} = -\bar{p}\mathbf{I} + 2\mu\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}), \quad (3.15)$$

onde μ é a viscosidade dinâmica do fluido, $\bar{p}$ é a pressão e $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v})$ é o tensor taxa de deformação da velocidade, variáveis estas que estão definidas a seguir

$$\mu = \nu \rho, \quad \bar{p} = p \rho \quad \text{e} \quad \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}) = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T), \quad (3.16)$$

sendo ν é a viscosidade cinemática e p é a pressão cinemática.

O divergente do Tensor das Tensões de Cauchy é dado por

$$\operatorname{div} \mathbf{T} = -\nabla \bar{p} + 2\mu \operatorname{div}(\nabla^S \mathbf{v}), \quad (3.17)$$

onde $\nabla^S \mathbf{v}$ é o gradiente simétrico da velocidade, que é igual ao tensor taxa de deformação $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v})$.

Substituindo a expressão (3.17) de $\operatorname{div} \mathbf{T}$ na equação (3.12) de conservação de momento, temos

$$\dot{\mathbf{v}} + (\nabla \mathbf{v})\mathbf{v} - 2\nu \operatorname{div}(\nabla^S \mathbf{v}) + \nabla p = \mathbf{b}. \quad (3.18)$$

Para obter as Equações de Navier-Stokes de maneira completa, que são um sistema de equações diferenciais parciais, ainda é preciso impor as condições iniciais e de contorno essenciais (Dirichlet) e naturais (Neumann). Assim, as 5 equações que compõem as Equações de Navier-Stokes deduzidas no século XIX são

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\mathbf{v}} + (\nabla \mathbf{v})\mathbf{v} - 2\nu \operatorname{div}(\nabla^S \mathbf{v}) + \nabla p = \mathbf{b} \\ \operatorname{div} \mathbf{v} = 0 \\ \mathbf{v} = \mathbf{v}_0, \quad \text{em } t = 0 \\ \mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} \\ (2\nu \varepsilon(\mathbf{v}) - p\mathbf{I})\mathbf{n} = \bar{\mathbf{t}} \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{em } \Omega \\ \\ \\ \text{em } \Gamma_u \\ \text{em } \Gamma_t \end{array}, \quad (3.19)$$

onde $\bar{\mathbf{v}}$ é a velocidade prescrita, $\bar{\mathbf{t}}$ é o vetor das tensões cinemáticas prescritas, Ω é o domínio do problema, Γ_u é parte do contorno em que são impostas as condições de contorno essenciais (c.c.e.) e Γ_t é a parte onde são impostas as condições de contorno naturais (c.c.n.).

O vetor tensão aplicado na superfície é obtido por meio da expressão

$$\bar{\mathbf{t}}\rho = \mathbf{T} \cdot \mathbf{n} = [2\nu \varepsilon(\mathbf{v}) - p\mathbf{I}]\mathbf{n}. \quad (3.20)$$

3.3 FORMA FRACA

Para escrever a forma fraca das equações de Navier-Stokes é preciso utilizar funções de aproximação e teste do campo de velocidades, pertencentes a subespaços de Hilbert $\mathcal{S}$ e $\mathcal{V}$ respectivamente, descritas da seguinte forma:

$$\text{Subespaço das funções de aproximação} \rightarrow \mathcal{S} = \underbrace{\{\mathbf{v} \in \mathcal{H}_1(\Omega) | \mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} \text{ em } \Gamma_u\}}_{\text{satisfazem as C.C.Essenciais}}$$

$$\text{Subespaço das funções teste} \rightarrow \mathcal{V} = \mathcal{H}_1^{B=0} = \underbrace{\{\mathbf{w} \in \mathcal{H}_1(\Omega) | \mathbf{w} = 0 \text{ em } \Gamma_u\}}_{\substack{\text{são nulas na região do contorno onde} \\ \text{são impostas as C.C.Essenciais}}}$$

O espaço onde estão as funções de aproximação e teste da pressão, por sua vez, é o espaço das funções quadrado-integráveis $\mathcal{Q} = \mathbb{L}_2(\Omega)$. O sistema de equações diferenciais parciais de Navier-Stokes pode ser reescrito na forma integral usando funções teste arbitrárias $(\mathbf{w}, q) \in \mathcal{V} \times \mathcal{Q}$:

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \dot{\mathbf{v}} \, d\Omega + \underbrace{\int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot (\nabla \mathbf{v}) \mathbf{v} \, d\Omega}_{\text{termo convectivo}} - \underbrace{\int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot 2\nu \operatorname{div}(\nabla^S \mathbf{v}) \, d\Omega}_{\text{termo viscoso}} + \underbrace{\int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \nabla p \, d\Omega}_{\text{termo da pressão}} \\
= \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \mathbf{b} \, d\Omega
\end{aligned} \tag{3.21}$$

$$\int_{\Omega} q \cdot \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\Omega = 0.$$

Integrando por partes o termo viscoso e o termo da pressão, obtemos

$$-\int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot 2\nu \operatorname{div}(\nabla^S \mathbf{v}) \, d\Omega = \underbrace{\int_{\Omega} 2\nu \nabla^S \mathbf{w} : \nabla^S \mathbf{v} \, d\Omega}_{a(\mathbf{v}, \mathbf{w})_{\Omega}} - \int_{\Gamma} 2\nu \mathbf{w} \cdot [\nabla^S \mathbf{v}(\mathbf{n})] \, d\Gamma \tag{3.22}$$

$$\int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \nabla p \, d\Omega = - \int_{\Omega} (\operatorname{div} \mathbf{w}) p \, d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{w} \cdot p \mathbf{n} \, d\Gamma.$$

Usando uma notação compacta em que $\int_X Y \cdot Z \, dX = (Y, Z)_X$, a forma fraca do problema fica assim

$$\begin{aligned}
(\mathbf{w}, \dot{\mathbf{v}})_{\Omega} + c(\mathbf{v}; \mathbf{w}, \mathbf{v})_{\Omega} + a(\mathbf{v}, \mathbf{w})_{\Omega} - (\operatorname{div} \mathbf{w}, p)_{\Omega} + (q, \operatorname{div} \mathbf{v})_{\Omega} - (\mathbf{w}, \bar{\mathbf{t}})_{\Gamma_t} \\
= (\mathbf{w}, \mathbf{b})_{\Omega}
\end{aligned} \tag{3.23}$$

$$\forall (\mathbf{w}, q) \in \mathcal{V} \times \mathcal{Q}.$$

Para resolver o problema é preciso encontrar $\mathbf{v}(x, t) \in \mathcal{S} \times]0, T]$ e $p(x, t) \in \mathcal{Q} \times]0, T]$ que satisfaçam a forma fraca mostrada em (3.23).

3.4 MÉTODO DE NEWMARK PARA INTEGRAÇÃO NO TEMPO

Primeiramente, o tempo será discretizado em instantes t_i , com $t_i \in (t_0, t_1, t_2, \dots, t_n, t_{n+1}, \dots, t_f)$. Além disso, define-se o intervalo de tempo Δt como $\Delta t = t_{n+1} - t_n$.

Segundo o método de Newmark, é possível aproximar a aceleração do fluido no próximo instante de tempo t^{n+1} da seguinte forma

$$\dot{\mathbf{v}}^{n+1} = \frac{1}{\gamma} \frac{(\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}^n)}{\Delta t} - \frac{(1 - \gamma)}{\gamma} \dot{\mathbf{v}}^n, \quad (3.24)$$

onde $\dot{\mathbf{v}}^n$ é a aceleração no instante de tempo atual “ n ” e γ é o parâmetro de integração de Newmark.

O Método de Newmark é considerado implícito, ou seja, o valor da variável que se deseja encontrar no tempo $n + 1$ é dependente deste mesmo valor. O sistema de equações de Navier-Stokes discretizado no tempo por este método fica assim

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\mathbf{v}^{n+1}}{\gamma \Delta t} + (\nabla \mathbf{v}^{n+1}) \mathbf{v}^{n+1} - 2\nu \operatorname{div}(\nabla^S \mathbf{v}^{n+1}) + \\ \quad \nabla p^{n+1} = \frac{\mathbf{v}^n}{\gamma \Delta t} + \frac{(1 - \gamma)}{\gamma} \dot{\mathbf{v}}^n + \mathbf{b}^{n+1} \\ \operatorname{div} \mathbf{v}^{n+1} = 0 \\ \mathbf{v}^{n=0} = \mathbf{v}_0, \quad \text{em } t = 0 \\ \mathbf{v}^{n+1} = \bar{\mathbf{v}} \quad \text{em } \Gamma_u \\ (2\nu \varepsilon(\mathbf{v}^{n+1}) - p^{n+1} \mathbf{I}) \mathbf{n} = \bar{\mathbf{t}}^{n+1} \quad \text{em } \Gamma_t \end{array} \right\} \quad \begin{array}{l} \text{em } \Omega \\ \\ \\ \\ \end{array} \quad (3.25)$$

Já a forma fraca, por sua vez, resulta em

$$\begin{aligned} & \{(\mathbf{w}, \mathbf{v})_\Omega + \gamma \Delta t [c(\mathbf{v}; \mathbf{w}, \mathbf{v})_\Omega + a(\mathbf{v}, \mathbf{w})_\Omega - (\operatorname{div} \mathbf{w}, p)_\Omega + (q, \operatorname{div} \mathbf{v})_\Omega \\ & \quad - (\mathbf{w}, \mathbf{b})_\Omega - (\mathbf{w}, \bar{\mathbf{t}})_{\Gamma_t}]\}^{n+1} = (\mathbf{w}, \mathbf{v}^n)_\Omega + (1 - \gamma) \Delta t (\mathbf{w}, \dot{\mathbf{v}}^n)_\Omega \end{aligned} \quad (3.26)$$

$$\forall (\mathbf{w}, q) \in \mathcal{V} \times \mathcal{Q}.$$

3.5 ELEMENTOS FINITOS PARA DISCRETIZAÇÃO DO ESPAÇO

A resolução de problemas de escoamento incompressível (isto é, problemas governados pelas equações de Navier-Stokes) por elementos finitos pode apresentar instabilidades numéricas oriundas de duas fontes diferentes: o alto número de Reynolds e a violação das condições de compatibilidade “LBB”.

Quando um escoamento possui número de Reynolds elevado, e quando a convecção é o fenômeno dominante no problema, o método numérico corre risco de se tornar instável devido à não linearidade e falta de simetria do termo convectivo apresentado na equação (3.21). O código utilizado neste trabalho para a resolução do problema do fluido estabiliza a formulação acrescentando um termo SUPG às equações, método este que não será aqui tratado, mas que pode ser visto em (Gomes e Pimenta 2015). Além disso, os exemplos práticos simulados para esta dissertação possuem número de Reynolds relativamente baixos, o que já garante a estabilidade numérica para esta fonte de instabilidades.

Conhecendo as equações de Navier-Stokes, vemos que a velocidade e a pressão são variáveis primitivas do problema, o que nos leva a escolher um elemento finito misto para a discretização. Além disso, é possível interpretar o campo de pressões como Multiplicadores de Lagrange da condição de incompressibilidade e, por isso, se o elemento finito escolhido tiver muitos graus de liberdade de pressão e poucos de velocidade, certamente haverá problemas de instabilidade numérica por excesso de restrições ao campo de velocidades. Os livros de (Donea e Huerta 2003), (Brezzi e Fortin 1991) e (Hughes 1987), e a tese de (Gomes 2013) trazem abordagens mais profundas sobre este tema.

A fim de evitar este segundo grupo de instabilidades numéricas, é preciso que o elemento finito satisfaça a condição “LBB” de velocidade/pressão. Para isso, uma das condições necessárias é que o elemento finito misto adotado possua menos graus de liberdade para pressão e mais graus de liberdade para velocidade.

Neste trabalho, a formulação apresentada se restringe a problemas bidimensionais (2D) e, portanto, utilizaremos um elemento finito plano. Devido à simplicidade e versatilidade na geração de malhas para domínios complexos, adotaremos o elemento finito de formato triangular conhecido como P2P1 (Taylor-Hood), em que as velocidades são interpoladas por funções quadráticas e as

pressões, por funções lineares. Além disso, o elemento P2P1 é amplamente reconhecido na literatura por satisfazer a condição “LBB” de velocidade/pressão, como apresentado em (Donea e Huerta 2003), por exemplo. Na Figura 5 podemos ver que as pressões são calculadas apenas nos vértices do triângulo, enquanto as velocidades são calculadas nos pontos médios dos lados e nos vértices, respeitando assim, a condição de possuir mais graus de liberdade para velocidade do que para pressão.

Figura 5 - Elemento P2P1

Para fazer a discretização no espaço, é preciso substituir as funções de aproximação (v, p) e teste (w, q) por suas aproximações, descritas como

$$\begin{array}{l} \text{FUNÇÕES FINITAS} \\ \text{E DE SUPORTE} \\ \text{COMPACTO} \end{array} \left\{ \begin{array}{l} v^h(x) = \bigcup_{e=1}^{N_{el}} \mathbf{N}_v \mathbf{v}_e \\ p^h(x) = \bigcup_{e=1}^{N_{el}} \mathbf{N}_p \mathbf{p}_e \\ w^h(x) = \bigcup_{e=1}^{N_{el}} \mathbf{N}_v \mathbf{w}_e \\ q^h(x) = \bigcup_{e=1}^{N_{el}} \mathbf{N}_p \mathbf{q}_e \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{aproximações das} \\ \text{funções de aproximação} \\ \\ \text{aproximações das} \\ \text{funções teste} \end{array}, \quad (3.27)$$

onde N_{el} é o número de elementos finitos utilizado para discretização do domínio, h é a indicação de aproximação da função, e indica valores nodais da variável no domínio local do elemento finito e $\mathbf{N}_v$ e $\mathbf{N}_p$ são matrizes contendo funções de forma dadas por

$$\mathbf{N}_v = [\mathbf{N}_1^v \mathbf{I} \quad \mathbf{N}_2^v \mathbf{I} \quad \dots \quad \mathbf{N}_{n_v}^v \mathbf{I}] \text{ e } \mathbf{N}_p = [\mathbf{N}_1^p \mathbf{I} \quad \mathbf{N}_2^p \mathbf{I} \quad \dots \quad \mathbf{N}_{n_p}^p \mathbf{I}], \quad (3.28)$$

onde n_v e n_p são os números de nós de velocidade e pressão por elemento. Já os vetores de velocidade e pressão nodais são escritos da seguinte forma

$$\mathbf{v}_e = \begin{bmatrix} v_{x_1} & v_{y_1} & v_{z_1} & v_{x_2} & v_{y_2} & v_{z_2} & \dots & v_{x_{n_v}} & v_{y_{n_v}} & v_{z_{n_v}} \end{bmatrix}^T$$

$$\text{e } \mathbf{p}_e = \begin{bmatrix} p_1 & p_2 & \dots & p_{n_p} \end{bmatrix}^T, \quad (3.29)$$

sendo v_{x_i} , v_{y_i} e v_{z_i} as componentes da velocidade no nó i em cada direção ortogonal do sistema de referência.

Portanto, a forma fraca após a integração no tempo apresentada em (3.26), quando discretizada no espaço, pode ser escrita assim

$$\begin{cases} \left\{ (\mathbf{w}^h, \mathbf{v}^h)_\Omega + \gamma \Delta t \left[c(\mathbf{v}^h; \mathbf{w}^h, \mathbf{v}^h)_\Omega + a(\mathbf{v}^h, \mathbf{w}^h)_\Omega - (\operatorname{div} \mathbf{w}^h, p^h)_\Omega \right] \right\}^{n+1} = \\ \gamma \Delta t \{ (\mathbf{w}^h, \mathbf{b})_\Omega + (\mathbf{w}^h, \bar{\mathbf{t}})_{\Gamma_t} \}^{n+1} + (\mathbf{w}^h, \mathbf{v}^{h,n})_\Omega + (1 - \gamma) \Delta t (\mathbf{w}^h, \dot{\mathbf{v}}^{h,n})_\Omega \\ (q^h, \operatorname{div} \mathbf{v}^h)_\Omega^{n+1} = 0 \end{cases} \quad (3.30)$$

O problema então, passa a ser o seguinte: dados $\mathbf{b}$, $\bar{\mathbf{t}}$ e $\bar{\mathbf{v}}$, e conhecendo a solução no instante de tempo anterior n , encontrar $\mathbf{v}^h(x) \in \mathcal{S}^h$ e $p^h(x) \in \mathcal{Q}^h$ no próximo instante de tempo $n + 1$ para qualquer par $(\mathbf{w}^h, q^h) \in \mathcal{V}^h \times \mathcal{Q}^h$.

Substituindo as funções de aproximação e teste na expressão da forma fraca e após certo trabalho matemático, chega-se a

$$\begin{cases} \frac{1}{\gamma \Delta t} \mathbf{M} \mathbf{v}^{n+1} + \{ \mathbf{C}(\mathbf{v}^{n+1}) + \mathbf{K} \} \mathbf{v}^{n+1} + \mathbf{G} \mathbf{p}^{n+1} = \mathbf{f}^{n+1} + \frac{1}{\gamma \Delta t} \mathbf{M} \mathbf{v}^n + \frac{(1 - \gamma)}{\gamma} \mathbf{M} \dot{\mathbf{v}}^n \\ \mathbf{G}^T \mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{0} \end{cases} \quad (3.31)$$

O sistema de equações algébricas acima representa o problema do fluido de maneira global, onde $\mathbf{M}$ é a matriz de massa, $\mathbf{C}$ é a matriz convectiva, $\mathbf{K}$ é a matriz viscosa, $\mathbf{G}$ e $\mathbf{G}^T$ são os operadores gradiente e divergente, $\mathbf{f}$ é o vetor que contém as forças de volume e tensões aplicadas. Todos estes termos globais são resultado do espalhamento das contribuições locais, que não será aqui detalhado, mas pode ser

encontrado em (Gomes 2013). Outra forma de escrever o sistema é em forma matricial e ele fica expresso assim

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{\gamma\Delta t}\mathbf{M} + (\mathbf{C}(\mathbf{v}^{n+1}) + \mathbf{K}) & \mathbf{G} \\ \mathbf{G}^T & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{v}^{n+1} \\ \mathbf{p}^{n+1} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}^{n+1} + \frac{1}{\gamma\Delta t}\mathbf{M}\mathbf{v}^n + \frac{(1-\gamma)}{\gamma}\mathbf{M}\dot{\mathbf{v}}^n \\ 0 \end{Bmatrix}. \quad (3.32)$$

A presença da matriz convectiva torna o sistema não-linear, em que a obtenção da solução está vinculada à resolução do próprio sistema obtido, e exige, portanto, a utilização de métodos numéricos para sua solução. Neste trabalho, é usado o Método Iterativo de Newton-Raphson, que é um método eficiente para determinar aproximações de raízes de funções, com convergência quadrática. A aplicação deste método à formulação em questão está detalhada em (Gomes 2013).

4 O PROBLEMA DE PARTÍCULAS

Existem diversos tipos e escalas de tamanho de materiais constituídos de partículas, que vão desde pós finos e poeira atmosférica, passando por areia, grãos de alimentos armazenados em silos, rochas desagregadas, minérios, sínter, pós industriais, etc (Figura 6).

Figura 6 - Exemplos de materiais granulares, apresentando as distinções entre eles. Imagens: www.freeimages.com, Laura Mattos Fortes e Eduardo M. B. Campello.

Quando a escala do fenômeno físico objeto de estudo é muito maior do que as dimensões dos grãos ou partículas que compõem o material, é possível fazer uma aproximação física e tratar o conjunto particulado como um meio contínuo. É dessa forma que são estudados os problemas de engenharia geotécnica, por exemplo. No entanto, quando as escalas do fenômeno e das partículas se aproximam, é preciso tratar cada partícula ou grão individualmente, como um sólido elementar de massa, volume e formato definidos, formando assim, um meio discreto, constituído de um grande número de partículas.

Uma das grandes dificuldades em resolver problemas envolvendo materiais particulados ou granulares é a forma de como descrever o comportamento mecânico do conjunto de partículas, já que cada grão é diferente e único, formando um meio heterogêneo e, muitas vezes, multifásico, por estarem as partículas imersas em fluidos. Portanto, a física da interação partícula-partícula passou a ser simulada por métodos computacionais chamados de Métodos das Partículas, dentre os quais, os mais conhecidos são: método dos elementos discretos (MED), os métodos de

dinâmica molecular e o método da hidrodinâmica de partículas suavizado. Alguns trabalhos respeitados sobre o tema são de (Cundall e Strack 1979), (Gingold e Monaghan 1977) e (Alder e Wainwright 1959), além das valiosas contribuições de (Duran 1997), (Pöschel e Schwager 2005), (Crowe et al. 2011), (Zohdi 2007), (Bićanić 2004), (O'Sullivan 2011) e (Wellmann e Wriggers 2011).

Na abordagem do problema partícula-partícula pelo Método dos Elementos Discretos, é possível descrever o movimento finito de rotação tridimensional de uma partícula através de um tensor de rotação de segunda ordem. Este, por sua vez, pode ser parametrizado e, limitando a π a magnitude das rotações entre duas configurações consecutivas, o número de parâmetros independentes necessário se reduz a três, tornando a parametrização vetorial bastante adequada para o processamento computacional - além de tornar a descrição da rotação formalmente semelhante à já conhecida descrição do movimento de translação (Campello 2015), isto é, por meio de vetores.

Dentre diversas técnicas para realizar a parametrização vetorial, neste trabalho adota-se uma adaptação especial baseada no Vetor Rotação de Rodrigues ((Rodrigues 1840), (Campello 2000), (Paulo M. Pimenta e Campello 2001), (P. M. Pimenta, Campello, e Wriggers 2008), (Campello 2015), (Campello 2016), (Campello 2018)). Como resultado, obtém-se expressões com poucas funções trigonométricas referenciadas a eixos de rotação reais da descrição do movimento. Uma das desvantagens da parametrização é a impossibilidade de saber quantas voltas completas uma partícula desenvolveu em relação à posição inicial. No entanto, esta informação se torna irrelevante para simulações através do MED, já que se precisa apenas da rotação entre duas configurações consecutivas, podendo ser ajustadas de acordo com a velocidade de rotação para que não ocorram voltas completas no intervalo de tempo entre uma e outra.

Dessa forma, é possível obter uma parametrização com significado geométrico do movimento de rotação das partículas, com custos computacionais relativamente baixos e descrição do movimento formalmente similar à translação, isto é, por meio de vetores.

4.1 BREVE DESCRIÇÃO DO MODELO MED

Um conjunto de partículas interagindo entre si e com o meio em que estão imersas (paredes e fluido) pode ser tratado como um sistema dinâmico discreto utilizando a abordagem do Método dos Elementos Discretos. As partículas são submetidas a uma combinação de forças como gravidade, forças de sustentação e arrasto, forças de campo próximo (atração e repulsão), atrito e forças de contato, as quais são responsáveis por gerar movimentos de translação e rotação nas mesmas.

A dedução completa de uma das formulações desse método pode ser vista em (Campello 2015, 2016, 2018). Neste trabalho, são apresentadas basicamente as equações de movimento das partículas, além das forças e momentos atuantes e o método numérico de solução. Impondo as leis de Euler para cada partícula i a cada instante de tempo t , temos

$$m_i \dot{\mathbf{v}}_i = \mathbf{f}_i^{tot} \quad \text{e} \quad j_i \dot{\boldsymbol{\omega}}_i = \mathbf{m}_i^{tot}, \quad (4.1)$$

onde m_i é a massa da partícula, $\mathbf{v}_i$ é o vetor velocidade, j_i é a inércia à rotação, $\boldsymbol{\omega}_i$ é o vetor velocidade angular, $\mathbf{f}_i^{tot}$ e $\mathbf{m}_i^{tot}$ são os vetores de força e momento totais da partícula (em relação ao seu centro). Os pontos sobrescritos indicam derivadas em relação ao tempo. A evolução do movimento das partículas no tempo pode ser obtida pela integração numérica das equações de movimento (4.1) e é dada por

$$\begin{aligned} m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{f}_i^{tot} &\Rightarrow d\mathbf{v}_i = \frac{1}{m_i} \mathbf{f}_i^{tot} dt \Rightarrow \int_t^{t+\Delta t} d\mathbf{v}_i = \frac{1}{m_i} \int_t^{t+\Delta t} \mathbf{f}_i^{tot} dt \Rightarrow \\ \mathbf{v}_i(t + \Delta t) - \mathbf{v}_i(t) &= \frac{1}{m_i} \int_t^{t+\Delta t} \mathbf{f}_i^{tot} dt \end{aligned} \quad (4.2)$$

e

$$\begin{aligned} j_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \mathbf{m}_i^{tot} &\Rightarrow d\boldsymbol{\omega}_i = \frac{1}{j_i} \mathbf{m}_i^{tot} dt \Rightarrow \int_t^{t+\Delta t} d\boldsymbol{\omega}_i = \frac{1}{j_i} \int_t^{t+\Delta t} \mathbf{m}_i^{tot} dt \Rightarrow \\ \boldsymbol{\omega}_i(t + \Delta t) - \boldsymbol{\omega}_i(t) &= \frac{1}{j_i} \int_t^{t+\Delta t} \mathbf{m}_i^{tot} dt. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Neste trabalho, para a integração no tempo utilizamos o método de Euler explícito, em que $\int_a^b f(x)dx \cong f(a)(b-a)$, e obtemos as seguintes equações

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) - \mathbf{v}_i(t) = \frac{1}{m_i} [\mathbf{f}_i^{tot}(t)\Delta t] \Rightarrow \mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{m_i} [\mathbf{f}_i^{tot}(t)\Delta t] \quad (4.4)$$

e

$$\boldsymbol{\omega}_i(t + \Delta t) - \boldsymbol{\omega}_i(t) = \frac{1}{j_i} [\mathbf{m}_i^{tot}(t)\Delta t] \Rightarrow \boldsymbol{\omega}_i(t + \Delta t) = \boldsymbol{\omega}_i(t) + \frac{1}{j_i} [\mathbf{m}_i^{tot}(t)\Delta t]. \quad (4.5)$$

Os vetores posição $\mathbf{x}_i$ e rotação $\boldsymbol{\alpha}_i$ da partícula podem ser encontrados integrando a velocidade e a velocidade angular, respectivamente, e usando novamente o método de Euler explícito, como apresentado a seguir

$$\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \mathbf{v}_i(t) \Rightarrow \int_t^{t+\Delta t} d\mathbf{x}_i = \int_t^{t+\Delta t} \mathbf{v}_i(t)dt \Rightarrow \mathbf{x}_i(t + \Delta t) = \mathbf{x}_i(t) + [\mathbf{v}_i(t)\Delta t] \quad (4.6)$$

e

$$\frac{d\boldsymbol{\alpha}_i}{dt} = \boldsymbol{\omega}_i(t) \Rightarrow \int_t^{t+\Delta t} d\boldsymbol{\alpha}_i = \int_t^{t+\Delta t} \boldsymbol{\omega}_i(t)dt \Rightarrow \boldsymbol{\alpha}_i(t + \Delta t) = \boldsymbol{\alpha}_i(t) + [\boldsymbol{\omega}_i(t)\Delta t]. \quad (4.7)$$

Porém, visando melhorar a precisão do método numérico de solução, neste trabalho recorre-se a uma alternativa que é utilizar o método de Euler implícito para a integração no tempo das variáveis $\mathbf{x}_i$ e $\boldsymbol{\alpha}_i$, em que $\int_a^b f(x)dx \cong f(b)(b-a)$. Dessa forma, obtemos um método híbrido, onde as equações de movimento são integradas explicitamente enquanto $\mathbf{x}_i$ e $\boldsymbol{\alpha}_i$, implicitamente. As expressões de posição e rotação ficam assim

$$\mathbf{x}_i(t + \Delta t) = \mathbf{x}_i(t) + [\mathbf{v}_i(t + \Delta t)\Delta t] \quad (4.8)$$

e

$$\boldsymbol{\alpha}_i(t + \Delta t) = \boldsymbol{\alpha}_i(t) + [\boldsymbol{\omega}_i(t + \Delta t)\Delta t]. \quad (4.9)$$

Para ser possível encontrar as posições e velocidades da partícula no instante de tempo $t + \Delta t$, ainda é preciso obter as forças e momentos totais. O vetor da força total é constituído aqui por

$$\mathbf{f}_i^{tot} = m_i \mathbf{g} + \mathbf{f}_i^{nf} + \mathbf{f}_i^{con} + \mathbf{f}_i^{fric} + \mathbf{f}_i^{fluid}, \quad (4.10)$$

onde $\mathbf{g}$ é o vetor aceleração da gravidade, $\mathbf{f}_i^{nf}$ são as forças de campo próximo de interação com outras partículas, $\mathbf{f}_i^{con}$ são as forças devido aos contatos mecânicos, $\mathbf{f}_i^{fric}$ são as forças de atrito causadas por esses contatos e $\mathbf{f}_i^{fluid}$ são as forças atuantes decorrentes do fluido, como o arrasto e a sustentação.

Considera-se que as forças apresentadas atuam apenas no centro de cada partícula e, portanto, não contribuem para a composição do vetor momento total. As únicas exceções são as forças excêntricas de atrito e do fluido, originando a seguinte expressão

$$\mathbf{m}_i^{tot} = \mathbf{m}_i^{fric} + \mathbf{m}_i^{fluid}, \quad (4.11)$$

onde $\mathbf{m}_i^{fric}$ é o momento gerado pelas forças de atrito com outras partículas e/ou paredes e $\mathbf{m}_i^{fluid}$, o momento gerado pelas forças do fluido.

Discorrendo sobre as forças individualmente, neste trabalho as forças de campo próximo serão desprezadas. Uma justificativa para esta decisão é que estas forças têm origem nas interações eletromagnéticas entre as nuvens de elétrons dos átomos das partículas quando elas estão relativamente próximas, e são de magnitude irrelevante se comparadas com as demais forças quando a massa da partícula é suficientemente grande. Ou seja, as forças de campo próximo só são influentes na soma que compõe a força total quando as partículas são muito pequenas e com massas diminutas, diferente dos casos que serão aqui analisados.

Por sua vez, as forças de contato entre partículas e entre partículas e paredes serão descritas seguindo a teoria do contato elástico de Hertz (K. L. Johnson e Johnson 1987), segundo a qual a força de contato na partícula i causada pela partícula j , pode ser expressa como

$$\mathbf{f}_{ij}^{con} = \frac{4}{3} \sqrt{r^*} E^* |\delta_{ij}|^{\frac{3}{2}} \mathbf{n}_{ij} - d^{con} \dot{\delta}_{ij} \mathbf{n}_{ij}, \quad (4.12)$$

onde $\mathbf{n}_{ij}$ é o vetor unitário que aponta do centro da partícula i para o centro da j e δ_{ij} é a penetração entre elas, definida como a diferença entre a distância entre os centros C_i e C_j das partículas e a soma de seus raios r_i e r_j , como pode ser visto na Figura 7.

Figura 7 - Colisão entre duas partículas (Campello 2018).

A massa m^* , o raio r^* e o módulo de elasticidade E^* efetivos e a constante de amortecimento d^{con} , que introduz dissipação de energia quando há contato, são dados por

$$r^* = \frac{r_i r_j}{r_i + r_j}, \quad E^* = \frac{E_i E_j}{E_i(1 - \nu_j^2) + E_j(1 - \nu_i^2)}, \quad m^* = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}, \quad (4.13)$$

$$d^{con} = 2 \xi^{con} \sqrt{2 E^* m^* \sqrt{r^*} |\delta_{ij}|^{\frac{1}{4}}},$$

sendo ξ^{con} a taxa de amortecimento (que deve ser especificada), E_i e E_j os módulos de elasticidade e ν_i e ν_j os coeficientes de Poisson dos materiais que compõem as partículas i e j .

Quando o contato acontece entre a partícula e uma superfície, como uma parede ou um obstáculo, a formulação apresentada para a força de contato é a mesma, apenas acrescentando a hipótese de que a superfície possui raio, massa e

módulo de elasticidade infinitos. As expressões para a massa, raio e módulo de elasticidades efetivos passam a ser

$$r^* = r_i, \quad E^* = \frac{E_i}{(1 - \nu_i^2)} \quad \text{e} \quad m^* = m_i. \quad (4.14)$$

A força de contato total de uma partícula em um determinado instante t é a soma das forças de todos os contatos que ela faz nesse instante.

A força de atrito é sempre tangencial à partícula e surge quando existe contato devido à rugosidade das superfícies envolvidas. Fazendo a hipótese de deslizamento contínuo, isto é, desconsiderando a possibilidade de aderência entre as partículas (embora esta aderência seja possível, conforme mostrado em (Campello 2018)), a força de atrito na partícula i devido à partícula j é definida neste trabalho como

$$\mathbf{f}_{ij}^{fric} = -\mu_d |\mathbf{f}_{ij}^{con}| \frac{\mathbf{v}_{IJ}^{rel,tan}}{|\mathbf{v}_{IJ}^{rel,tan}|}, \quad (4.15)$$

onde μ_d é o coeficiente de atrito dinâmico e $\mathbf{v}_{IJ}^{rel,tan}$ é a velocidade relativa na direção tangente entre os pontos de contato I e J , que são definidos como o ponto material coincidente com a projeção ortogonal dos centros das partículas i e j , respectivamente, sobre o plano de contato tangente, como pode ser visto na Figura 8.

Neste trabalho, despreza-se a possibilidade de aderência entre as partículas durante o contato. Isso se justifica pela presença do fluido viscoso que envolve as partículas, o qual tende a agir como elemento lubrificante. O modelo de atrito expresso pela equação acima pode ser entendido, pois, como um modelo de deslizamento contínuo. A consideração da aderência pode ser feita conforme detalhado em (Campello 2018).

A velocidade relativa entre os pontos I e J e a velocidade relativa tangente são dadas por

$$\mathbf{v}_{IJ}^{rel} = \mathbf{v}_I - \mathbf{v}_J \quad \text{e} \quad \mathbf{v}_{IJ}^{rel,tan} = \mathbf{v}_{IJ}^{rel} - (\mathbf{v}_{IJ}^{rel} \cdot \mathbf{n}_{ij}) \mathbf{n}_{ij}. \quad (4.16)$$

Figura 8 - Esquema de forças envolvidas no contato entre duas partículas (Campello 2018)

Por ser uma força excêntrica ao centro da partícula, a força de atrito gera um momento que pode ser calculado através do produto vetorial entre o raio-vetor r_I (vetor que liga o centro da partícula i ao ponto de contato I) e o vetor força de atrito, como pode ser visto a seguir

$$\mathbf{m}_{ij}^{fric} = \mathbf{r}_I \times \mathbf{f}_{ij}^{fric}. \quad (4.17)$$

Por fim, temos as forças e momentos do fluido, que são resultantes do problema de interação fluido-partícula. São calculadas por meio da integração, na superfície da partícula, das tensões exercidas pelo fluido na interface distribuídos ao longo da superfície de contato, com seu respectivo momento, e aplicadas diretamente à partícula como uma força pontual e um momento em relação ao centro da partícula. A obtenção dessas tensões (que na verdade são Multiplicadores de Lagrange, como será visto mais adiante) e a discretização da interface estão melhor explicadas no Capítulo 5, item 5.2.

A escolha do Δt adequado a ser utilizado na solução numérica das equações de movimento segue um critério baseado na duração das colisões entre partículas e

entre partículas e limites do domínio (Campello 2018). Para garantir boa acurácia na integração das forças de contato, o Δt deve ser menor que um vigésimo do tempo de duração de um contato, portanto,

$$\Delta t \leq \Delta t_{con}/20 \quad \text{e} \quad \Delta t_{con} \cong 2.87 \left[\frac{(m^*)^2}{r^*(E^*)^2 v_{rel}} \right]^{1/5}, \quad (4.18)$$

onde, numa simulação com inúmeras partículas e contatos, Δt_{con} é a duração de uma colisão típica e v_{rel} é a velocidade relativa entre duas partículas envolvidas num contato imediatamente antes da colisão ser iniciada.

5 O PROBLEMA DE INTERAÇÃO FLUIDO-PARTÍCULAS

Com o problema de mecânica dos fluidos bem definido através de uma abordagem Euleriana e o problema de mecânica das partículas descrito por meio da abordagem Lagrangiana, chegamos ao ponto em que é necessário fazer a troca de informações, chamada de acoplamento, entre essas duas físicas distintas. Baseando-se no trabalho anterior de (Gomes 2013) que trata da mecânica dos fluidos e da interação fluido-estrutura (IFE), juntamente com o trabalho de (Campello 2016) que aborda a mecânica discreta das partículas, é possível desenvolver um novo método para resolver problemas acoplados de interação fluido-partícula.

A ideia é considerar as partículas sólidas como “estruturas” e usar as formulações amplamente estudadas e aplicadas em IFE, munidas de adaptações para abranger as formulações de física das partículas, nas simulações de problemas de interação fluido-partícula, como será visto nos capítulos a seguir. Para isso, discorreremos brevemente sobre as abordagens existentes e técnicas de acoplamento desenvolvidas para a IFE.

5.1 INTERAÇÃO FLUIDO-ESTRUTURA

Assim como foi dito em relação à IFP, os problemas de IFE são inúmeros e de natureza bastante diversificada. Nas imagens da Figura 9 e da Figura 10 podemos ver alguns exemplos desses problemas em 3 diferentes campos de estudo, mostrando a multidisciplinaridade dessa interação.

Figura 9 - Simulação computacional de um paraquedas (Tayfun E. Tezduyar et al. 2008) (esquerda). Tensões na artéria aorta de um paciente com aneurisma (Bazilevs et al. 2008) (direita).

Figura 10 - Resultados da simulação computacional do escoamento através de uma turbina eólica (Bazilevs, Hsu, e Scott 2012).

O desenvolvimento de formatos mais eficientes aerodinamicamente para uma determinada atividade é escopo de muitas pesquisas. Na Figura 9 temos o campo de velocidades do escoamento de ar ao redor de um paraquedas aberto simulado por um programa computacional.

A geração de energia através de fontes renováveis e de menores impactos ambientais é um tema de bastante preocupação para a sociedade atual e, portanto, estimulador de inúmeras pesquisas acadêmicas. Na Figura 10 observamos resultados computacionais do escoamento de ar através de uma turbina eólica em movimento e também a distribuição de tensões nas pás causadas pelo escoamento aerodinâmico.

No contexto da medicina e bioengenharia podemos citar como problema de IFE nosso sistema circulatório que basicamente é uma rede de distribuição de sangue (fluido) pelo organismo por meio das artérias e veias (estrutura), bombeado pelo coração. Devido ao escoamento não regular gerado pelas pulsadas descompassadas, pelo aumento e diminuição da pressão interna e do volume e pela viscosidade variável do sangue, as paredes das veias e artérias sofrem tensões e podem desenvolver doenças. Na Figura 9 temos o mapa de tensões em uma artéria aorta abdominal de um paciente com aneurisma (dilatação da artéria aumentando a chance de ruptura) simulada em computador na tentativa de avaliar o risco de ruptura e necessidade de intervenção cirúrgica, evitando assim procedimentos dispensáveis e óbito do paciente.

Como já foi possível perceber, os problemas de IFE são de naturezas diversas e, portanto, é fácil imaginar que não existe uma única forma ou método que seja eficiente e apresente bons resultados para todos os tipos de problemas. Dependendo da ordem de grandeza das deformações e deslocamentos, da complexidade da interface entre fluido-estrutura, do grau de transformação pelo qual a estrutura passa durante a simulação, entre outras características peculiares de cada projeto, é possível escolher um método numérico mais adequado à situação.

Atualmente, os métodos que se destacam na resolução dos problemas de IFE podem ser divididos em dois grupos, de acordo com a forma que tratam a interface entre sólido e fluido. O método das fronteiras coincidentes é aquele em que a malha de elementos pertencentes ao fluido acaba onde começa a malha dos elementos da estrutura, sendo que os pontos localizados na fronteira entre as duas malhas pertencem a ambos os domínios (Figura 11). Este método usa em sua formulação uma abordagem ALE (*Arbitrary Lagrangian Eulerian*) em que o fluido é formulado e resolvido a partir da deformação que sua malha sofre ao acompanhar a movimentação da malha da estrutura.

Figura 11 – Classificação dos métodos numéricos de solução de problemas de IFE quanto à descrição da interface: fronteira coincidente (esquerda); fronteira imersa (direita). (Gomes 2013)

Esta abordagem ALE não se mostra competente em ocasiões onde a interface tem geometria complicada ou passa por transformações complexas, pois os elementos da malha do fluido ficam excessivamente distorcidos.

O outro grupo é o dos métodos das fronteiras imersas. Neste caso as malhas do fluido e da estrutura são independentes e superpostas (Figura 11). O fluido pode ser resolvido com uma abordagem Euleriana clássica em que a malha é fixa e indeformável, características bastante convenientes (do ponto de vista computacional) e que evitam a distorção exagerada dos elementos deste domínio. Já o sólido é resolvido de maneira habitual, com a abordagem Lagrangiana. Uma aplicação desta técnica ao problema bidimensional (2D) de um bastão imerso em um escoamento e em rotação contínua, publicada em (Gomes e Pimenta 2015), pode ser visualizada na Figura 13. Na Figura 12, são mostradas as malhas do fluido e da estrutura usando a técnica de fronteiras imersas.

Figura 12 - Malhas do fluido e da estrutura no problema de um bastão em rotação contínua. (Gomes e Pimenta 2015)

Figura 13 – Mapa de cores do campo de velocidades. (Gomes e Pimenta 2015)

Apesar de resolver o problema da distorção dos elementos da malha do fluido, para usar o método das fronteiras imersas é necessário implementar alguma técnica que imponha ao fluido os deslocamentos vindos da estrutura na região da interface, porque esses deslocamentos são condição de contorno para resolução do fluido. Num problema clássico de elementos finitos, as c.c.e. são impostas diretamente como valores nodais, desde que existam nós da malha do fluido no contorno. No entanto,

no caso das fronteiras imersas, geralmente não existem nós pertencentes à malha do fluido na região da interface com o sólido. Então, os efeitos do deslocamento não podem ser passados ao fluido de maneira trivial e as condições de contorno do tipo Dirichlet devem ser traduzidas como velocidades impostas (Gomes 2013).

Alguns artifícios foram desenvolvidos na última década para a imposição das velocidades ao fluido em problemas de IFE com fronteira imersas. Um deles é usar uma formulação que combine o Método dos Elemento Finitos (FEM) com os Multiplicadores de Lagrange. A seguir, veremos a formulação utilizada neste trabalho para resolver o acoplamento, que é aquela desenvolvida por (Gomes 2013).

5.2 FRONTEIRAS IMERSAS

Neste trabalho, para resolver o problema acoplado de IFP será adotado o Método das Fronteiras Imersas, o qual permite que o fluido seja resolvido com uma malha Euleriana fixa através da formulação matemática mostrada no capítulo 3. Por definição, dividiremos o domínio do problema em duas partes: Ω^p é o domínio das partículas, limitado ao espaço ocupado por elas, e Ω^f é o domínio do fluido que, além do espaço preenchido por ele próprio, também abrange a região ocupada pelas partículas. Em linguagem matemática, podemos dizer que

$$\Omega^f \cap \Omega^p \neq \emptyset. \quad (5.1)$$

Na Figura 14 é possível visualizar os domínios definidos acima com seus vetores unitários $\mathbf{n}^f$ e $\mathbf{n}^p$ normais à interface Γ^i , também chamada de “superfície molhada”.

Figura 14 – Domínios formados pela decomposição do domínio do fluido (Gomes e Pimenta 2015).

A superfície molhada, por sua vez, divide o domínio do fluido em duas regiões. A primeira, chamada de Ω^+ é a região preenchida apenas pelo fluido. Já o subdomínio Ω^- é a região do fluido sobreposta pela partícula, ou seja, na "sombra" da partícula. Ω^- é usualmente denominada como domínio fictício, já que não possui significado físico no problema a ser resolvido. Em linguagem matemática, dizemos que

$$\Omega^+ \cup \Omega^- = \Omega^f \quad \text{e} \quad \Omega^+ \cap \Omega^- = \emptyset. \quad (5.2)$$

Para otimizar o processamento e o uso da memória computacional durante a solução numérica, os elementos finitos contidos inteiramente no domínio fictício do fluido são desativados durante a resolução do problema. A Figura 14 exemplifica a decomposição do Ω^f por meio de Γ^i .

5.2.1 Condições na interface

Existem duas condições que devem ser satisfeitas ao longo da interface entre fluido e partícula. A primeira delas está apresentada a seguir e é uma condição cinemática de aderência, em que as velocidades do fluido e da partícula devem ser iguais

$$\mathbf{v}^f = \mathbf{v}^p \quad \forall x \in \Gamma^i. \quad (5.3)$$

A segunda é uma condição dinâmica, que prevê o equilíbrio (dinâmico) de forças sobre Γ^i , o que pode ser interpretado como o equilíbrio (dinâmico) de tensões com orientações opostas devido aos vetores normais $\mathbf{n}^f$ e $\mathbf{n}^p$ de cada domínio

$$\mathbf{T}^f \mathbf{n}^f = -\mathbf{T}^p \mathbf{n}^p \quad \forall x \in \Gamma^i. \quad (5.4)$$

5.2.2 Interface móvel

Uma maneira de enxergar a interação entre o fluido e a partícula é admitindo que, se os deslocamentos da partícula são conhecidos, o problema se reduz a um fluido com interfaces móveis. Assim, as condições cinemática e dinâmica se transformam em Condições de Contorno Essencial e Natural, respectivamente, dadas por

$$\mathbf{v}^f = \bar{\mathbf{v}}^i \quad \forall x \in \Gamma^+ \quad (5.5)$$

e

$$\bar{\mathbf{t}}^f = \mathbf{0} \quad \forall x \in \Gamma^-, \quad (5.6)$$

onde $\bar{\mathbf{v}}^i$ é a velocidade da interface móvel e os sinais positivo (+) ou negativo (−) sobrescritos em Γ^+ e Γ^- referem-se ao sentido por onde nos aproximamos da interface Γ^i (se por Ω^+ ou Ω^-). Perceba que a c.c.e. é imposta apenas na aproximação da interface pelo domínio Ω^+ , enquanto que a c.c.n. é imposta na aproximação da interface pelo domínio fictício Ω^- .

Esta forma de impor as condições de contorno diferenciando Γ^+ de Γ^- é relativamente comum em problemas de fronteiras imersas, como pode ser visto em (Axel Gerstenberger e Wall 2008a). Em termos práticos da computação numérica, essa distinção não tem importância uma vez que o escoamento do fluido não será resolvido em Ω^- , como será visto adiante. As razões para apresentarmos a formulação do problema dessa maneira é de garantir um mínimo de rigor matemático para justificar a inexistência de escoamento em Ω^- e não incorrer na inconsistência de aplicar condições de contorno essenciais e naturais numa mesma fronteira.

Para garantir que não haja escoamento no domínio fictício durante o cálculo numérico, é preciso impor condições iniciais para a velocidade e pressão, conforme descrito abaixo

$$\begin{cases} \mathbf{v}(x, t = 0) = \mathbf{0} & \forall x \in \Omega^- \\ p(x, t = 0) = 0 & \forall x \in \Omega^- . \end{cases} \quad (5.7)$$

Neste trabalho, as c.c.e. (Dirichlet) serão impostas por meio de Multiplicadores de Lagrange (λ). Esta é uma técnica já utilizada por outros autores, como pode ser visto em (Axel Gerstenberger e Wall 2008b), (Legay, Chessa, e Belytschko 2006), (Moës, Béchet, e Tourbier 2006) e (Sawada e Tezuka 2010). Para isso, pode-se definir um funcional (π) e, posteriormente, calcular a variação desse funcional ($\delta\pi$) como se descreve a seguir

$$\pi = \int_{\Gamma^+} \lambda \cdot (\mathbf{v} - \bar{\mathbf{v}}^i) d\Gamma^+ \quad (5.8)$$

e

$$\delta\pi = \int_{\Gamma^+} \delta\lambda \cdot (\mathbf{v} - \bar{\mathbf{v}}^i) d\Gamma^+ + \int_{\Gamma^+} \lambda \cdot \delta\mathbf{v} d\Gamma^+ . \quad (5.9)$$

Na equação (5.8) fica claro o papel do multiplicador de Lagrange (λ) de impor a condição cinemática de aderência apresentada em (5.3).

É válido ressaltar que a interpretação física dos Multiplicadores de Lagrange, obtida através de análise dimensional, é uma tensão aplicada no fluido ao longo da interface Γ^+ que, em módulo, é igual à tensão exercida pelo fluido na superfície molhada, como já foi dito na condição dinâmica apresentada em (5.4). Além disso, λ passa a ser uma incógnita adicional do problema quando se utiliza desta técnica.

Finalmente, é possível introduzir a condição de contorno essencial na forma fraca das Equações de Navier-Stokes mostrada em (3.26), substituindo a variação das velocidades $\delta\mathbf{v}$ pela função teste $\mathbf{w}$ apenas para manter a notação anterior, e o resultado obtido é

$$\begin{aligned}
& \left\{ (\mathbf{w}, \mathbf{v})_{\Omega^f} + \gamma \Delta t \left[c(\mathbf{v}; \mathbf{w}, \mathbf{v})_{\Omega^f} + a(\mathbf{v}, \mathbf{w})_{\Omega^f} - (\operatorname{div} \mathbf{w}, p)_{\Omega^f} + (q, \operatorname{div} \mathbf{v})_{\Omega^f} \right. \right. \\
& \quad \left. \left. - (\mathbf{w}, \mathbf{b})_{\Omega^f} - (\mathbf{w}, \bar{\mathbf{t}})_{\Gamma_t} - (\mathbf{w}, \lambda)_{\Gamma^+} - (\delta \lambda, \mathbf{v} - \bar{\mathbf{v}}^i)_{\Gamma^+} \right] \right\}^{n+1} \\
& = (\mathbf{w}, \mathbf{v}^n)_{\Omega^f} + (1 - \gamma) \Delta t (\mathbf{w}, \dot{\mathbf{v}}^n)_{\Omega^f}.
\end{aligned} \tag{5.10}$$

5.2.3 Discretização da interface

Existem diversas maneiras de fazer a discretização dos Multiplicadores de Lagrange λ e sua função teste $\delta \lambda$ na interface Γ^i . Uma delas, sugerida por (Axel Gerstenberger e Wall 2008b), é utilizar a própria malha do fluido para gerar pontos sobre a interface, como pode ser visto na Figura 15. Assim, as funções de forma utilizam os nós (definidos pela intersecção da malha do fluido com a interface representados por triângulos) para fazer a interpolação e encontrar as aproximações de λ e $\delta \lambda$, dadas por

$$\lambda^h = \bigcup_{e=1}^{N_{el}} \mathbf{N}_\lambda \lambda_e \quad \text{e} \quad \delta \lambda^h = \bigcup_{e=1}^{N_{el}} \mathbf{N}_\lambda \delta \lambda_e, \tag{5.11}$$

onde $\mathbf{N}_\lambda$ é a matriz das funções de forma e λ_e é o valor nodal local.

Esta forma de discretizar a interface, contudo, pode gerar instabilidade numérica, principalmente quando são usados elementos finitos com funções de interpolação de baixa ordem na formulação do problema fluido. Esta instabilidade se dá devido à incompatibilidade entre o subespaço de aproximação dos Multiplicadores de Lagrange e os subespaços de aproximação da velocidade e pressão (LBB), e já foi evidenciada em (Axel Gerstenberger e Wall 2008b), (Moës, Béchet, e Tourbier 2006) e (Gomes e Pimenta 2015).

Figura 15 – Discretização da interface utilizando a malha do fluido (Gomes 2013).

Alternativamente, este trabalho utiliza a técnica indicada em (Sawada e Tezuka 2010), em que a superfície molhada é discretizada por uma malha independente das intersecções entre a interface e a malha do fluido e em conjunto com funções de aproximação descontínuas para a interpolação dos Multiplicadores de Lagrange. A Figura 16 ilustra a discretização da interface com os nós da malha novamente representados por triângulos. Além de facilitar o cálculo dos termos a serem integrados ao longo da superfície molhada, com esta técnica é possível ter uma maior flexibilidade na escolha da dimensão para o subespaço de aproximação de λ , porém, ainda respeitando um intervalo de valores dependente da quantidade de elementos de fluido cortados pela interface.

Segundo (Gomes e Pimenta 2015), a dimensão do subespaço dos multiplicadores de Lagrange deve ser menor que o subespaço obtido quando os nós são definidos pelas intersecções entre a interface e os lados dos elementos de fluido. Ou seja, a quantidade de elementos da malha de discretização da superfície molhada deve ser menor que a quantidade de elementos de fluido cortados pela interface. Para que os resultados das simulações estejam livres de instabilidades numéricas é preciso que se mantenha uma proporção próxima de 2:1 entre o tamanho dos elementos da interface e tamanho dos elementos de fluido. Não há limite superior para o tamanho dos elementos de malha da interface no que se refere às instabilidades numéricas. Ressalta-se apenas que, uma malha grosseiramente discretizada levará a uma

representação pobre das tensões na interface e, assim, as condições de contorno de Dirichlet (que são aplicadas na forma fraca) não serão devidamente impostas ao fluido.

Uma característica específica das malhas de discretização da interface adotadas para as simulações numéricas neste trabalho é que todos os elementos pertencentes à interface de uma mesma partícula possuem tamanhos iguais. Isto é, a discretização é feita através da divisão da superfície molhada em segmentos de mesmo comprimento.

Figura 16 – Discretização da interface independentemente da intersecção com a malha do fluido, usando funções descontínuas e constantes no interior dos elementos (Gomes e Pimenta 2015).

5.2.4 Células de integração nos elementos cortados

Para calcular as matrizes e vetores locais é preciso fazer a integração sobre os elementos de fluido, inclusive sobre aqueles cortados pela interface, isto é, sobre os elementos que estão parcialmente na “sombra” do domínio das partículas. Neste trabalho, será utilizada uma técnica conhecida como *Tessellation* para a divisão dos elementos cortados em células, a qual consiste em recobrir superfícies por meio de formatos geométricos (polígonos regulares) de forma a não possuir espaços vazios nem sobreposições entre eles. A região do elemento cortado de fluido que não está sobreposta ao domínio da partícula, isto é, Ω^+ é dividida em células de integração

triangulares, e a interface fluido-partícula é aproximada por uma linha reta, como mostrado na Figura 17.

Esta aproximação da interface é bastante comum no Método dos Elementos Finitos e o erro existente ao utilizá-la converge para zero quanto menor for o tamanho dos elementos da malha. Portanto, nos problemas de IFP, este erro não é preocupante, desde que a malha de fluido seja suficientemente bem discretizada próximo à interface.

Figura 17 – Elemento triangular de fluido subdividido em uma região pertencente a Ω^- (representada por cor azul) e duas células de integração triangulares (1 e 2) pertencentes a Ω^+ . Os pontos de Gauss estão representados pelos “X”. (Gomes e Pimenta 2015)

Existem outras técnicas possíveis para fazer essa integração, como por exemplo, a utilizada por (Couto 2016), em que não é necessário subdividir o elemento cortado, e a integração é realizada no domínio do polígono resultante do “corte” do elemento de fluido.

5.3 PROBLEMA MATRICIAL

Substituindo as funções de aproximação e teste na expressão da forma fraca (5.10), incorporando as condições de contorno e após certo trabalho matemático, chega-se a

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\gamma \Delta t} \mathbf{M} \mathbf{v}^{n+1} + \{\mathbf{C}(\mathbf{v}^{n+1}) + \mathbf{K}\} \mathbf{v}^{n+1} + \mathbf{G} \mathbf{p}^{n+1} - \mathbf{M}_\lambda^T \boldsymbol{\lambda}^{n+1} = \\ \mathbf{f}^{n+1} + \frac{1}{\gamma \Delta t} \mathbf{M} \mathbf{v}^n + \frac{(1-\gamma)}{\gamma} \mathbf{M} \dot{\mathbf{v}}^n \\ \mathbf{G}^T \mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{0} \\ -\mathbf{M}_\lambda \mathbf{v}^{n+1} = -\mathbf{M}_\lambda \bar{\mathbf{v}}^i \end{array} \right. . \quad (5.12)$$

O sistema de equações algébricas acima representa o problema de maneira global, onde o operador $\mathbf{M}_\lambda$ é a matriz dos Multiplicadores de Lagrange definida por

$$\mathbf{M}_\lambda = \sum_{\substack{\text{elementos} \\ \text{cortados}}} \mathbf{A}_e^T \mathbf{M}_{\lambda e} \mathbf{A}_e = \sum_{\substack{\text{elementos} \\ \text{cortados}}} \mathbf{A}_e^T \int_{\Gamma_e^+} \mathbf{N}_\lambda^T \mathbf{N}_v d\Gamma_e^+ \mathbf{A}_e , \quad (5.13)$$

onde $\mathbf{A}_e$ são as matrizes de espalhamento aqui apresentadas apenas didaticamente, já que não precisam ser definidas no código computacional.

Todos os demais termos globais também são resultado do espalhamento das contribuições locais e definidos de forma semelhante ao apresentado em (5.13). Esses termos não serão aqui detalhados, porém, podem ser encontrados em (Gomes 2013). Outra forma de escrever o sistema é em formato matricial, e ele fica expresso assim

$$\left[\begin{array}{ccc} \frac{1}{\gamma \Delta t} \mathbf{M} + (\mathbf{C}(\mathbf{v}^{n+1}) + \mathbf{K}) & \mathbf{G} & -\mathbf{M}_\lambda^T \\ \mathbf{G}^T & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{M}_\lambda & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{array} \right] \begin{Bmatrix} \mathbf{v}^{n+1} \\ \mathbf{p}^{n+1} \\ \boldsymbol{\lambda}^{n+1} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}^{n+1} + \frac{1}{\gamma \Delta t} \mathbf{M} \mathbf{v}^n + \frac{(1-\gamma)}{\gamma} \mathbf{M} \dot{\mathbf{v}}^n \\ \mathbf{0} \\ -\mathbf{M}_\lambda \bar{\mathbf{v}}^i \end{Bmatrix} . \quad (5.14)$$

5.4 CÁLCULO DAS FORÇAS E MOMENTOS EXERCIDOS PELO FLUIDO SOBRE AS PARTÍCULAS

Após a resolução do sistema apresentado em (5.14), obtemos um vetor λ em cada elemento da malha de discretização da superfície molhada de cada uma das partículas existentes no problema. Como já dito no item 5.2.2, esses multiplicadores de Lagrange têm o mesmo módulo e direção, porém sentido contrário, do vetor tensão aplicado pelo fluido na superfície molhada. Portanto, para calcular a força que o fluido aplica em uma partícula i individualmente, basta integrar os multiplicadores sobre a superfície da partícula, o que aqui, dado que os multiplicadores são constantes em cada elemento da interface, se resume a multiplicar cada vetor λ_k pelo comprimento do elemento de malha S_k a que ele se refere, e somar todos os produtos, obtendo-se assim um vetor força $\mathbf{f}_i^{fluid}$ que é aplicado no centro da partícula. A expressão matemática da força então fica

$$\mathbf{f}_i^{fluid} = - \sum_{k=1}^{n_{\lambda_i}} (\lambda_k \cdot S_k), \quad (5.15)$$

onde n_{λ_i} é o número total de multiplicadores de Lagrange existentes na partícula i .

De maneira semelhante, é possível calcular o momento que o fluido aplica em cada partícula $\mathbf{m}_i^{fluid}$, fazendo o somatório dos produtos vetoriais entre o raio-vetor $\mathbf{r}_k$ e o produto do vetor λ_k pelo comprimento do elemento S_k correspondente, como pode ser visto na expressão a seguir

$$\mathbf{m}_i^{fluid} = - \sum_{k=1}^{n_{\lambda_i}} [\mathbf{r}_k \times (\lambda_k \cdot S_k)]. \quad (5.16)$$

5.5 RESUMO DO ALGORITMO DE SOLUÇÃO

O fluxograma geral do algoritmo de solução está apresentado na Figura 18. Nele, podemos perceber que após a solução iterativa e implícita das equações de Navier-Stokes (Ciclo MEF ou fluido), as forças e momentos devido ao fluido são calculados para cada partícula, o que permite a solução do movimento das partículas (MED ou partículas).

Figura 18 – Fluxograma geral do algoritmo.

6 SIMULAÇÕES E RESULTADOS

A implementação computacional do modelo descrito nos capítulos anteriores envolveu, inicialmente, simulações independentes de fluido e de partículas, e somente depois que os dois algoritmos estavam prontos e devidamente validados, realizou-se o acoplamento entre eles, resultando num programa de resolução de problemas de interação Fluido-Partícula.

O algoritmo para a solução numérica do problema de fluidos, inclusive com a interação entre fluido e interface móvel por meio do método das Fronteiras Imersas, utilizado neste trabalho foi o mesmo desenvolvido por (Gomes 2013) em linguagem MATLAB. Ele, por sua vez, já se encontrava devidamente validado e, portanto, seus resultados e comparações com outros trabalhos não serão apresentados neste texto, mas podem ser consultados em (Gomes 2013), (Gomes e Pimenta 2015) e (Fernandes et al. 2017).

Paralelamente ao programa de fluidos, foi desenvolvido neste trabalho um programa simulador da física das partículas utilizando o Método dos Elementos Discretos, baseado na formulação desenvolvida por (Campello 2016), porém, com algumas simplificações e escrito em outra linguagem computacional. A validação deste programa aconteceu por meio de comparações dos resultados obtidos com outros resultados de vários exemplos disponíveis na literatura (ou com solução analítica conhecida). Também foram feitas comparações com resultados obtidos através do programa original PSY (desenvolvido por (Campello 2016)). As simulações escolhidas para a validação serão apresentadas na sequência de forma esquemática e somente alguns resultados serão mostrados.

Por fim, serão apresentados resultados obtidos com o programa acoplado de Interação Fluido-Partícula, sendo que alguns deles serviram para fazer a validação do método desenvolvido por meio de comparações com exemplos da literatura, e outros são mostrados apenas de forma qualitativa, a fim de mostrar ao leitor, alguns tipos de problemas que podem ser resolvidos pelo método ora proposto.

A ferramenta usada para auxiliar o pré-processamento, com a inserção de dados relativos à geometria e malha, e o pós-processamento, transformando os resultados obtidos para a forma gráfica, foi o programa GID (*GiD - The personal pre and post processor* (versão 9.0.6) 2008).

6.1 PROBLEMAS DE INTERAÇÃO PARTÍCULA-PARTÍCULA

Como explicado acima, serão apresentados aqui os exemplos simulados com o programa desenvolvido de Interação Partícula-Partícula. Vale ressaltar que em todos os exemplos foram testadas diferentes taxas de amortecimento e coeficientes de atrito dinâmico, tanto nos contatos entre partículas como entre partículas e anteparos, verificando sempre a influência que esses dados de entrada têm no resultado final, e sua coerência com o problema físico.

6.1.1 Partícula arremessada horizontalmente sob ação da gravidade com anteparo

Este exemplo trata de uma partícula com velocidade inicial imposta horizontalmente da esquerda para a direita caindo livremente sob a aceleração da gravidade. Existe uma superfície finita horizontal que serve de anteparo para o movimento da partícula em queda. Quando a partícula atinge uma posição x onde o anteparo finito já não existe, seu movimento volta a ser influenciado apenas pela ação da gravidade.

A posição inicial do centro da partícula 1 é $(0;3)$ m, o anteparo horizontal tem início no ponto $(0;0)$ m e final em $(2,5;0)$ m, sendo que a altura h de queda entre o centro da partícula e o anteparo é de 3 metros. A partícula possui diâmetro de 0,07 m, massa de 1,0 kg, módulo de elasticidade de 10^7 N/m² e coeficiente de Poisson igual a zero. O Δt adotado foi de 0,0002 s.

Figura 19 - Esquema gráfico da simulação onde a partícula 1 cai livremente sobre um anteparo, com velocidade inicial imposta.

A seguir, apresentamos um resultado da simulação onde o gráfico representa a trajetória da partícula, ou seja, as coordenadas x e y da posição de seu centro durante toda a simulação. Este exemplo foi validado com os resultados do programa original de (Campello 2016), obtendo-se solução idêntica.

Podemos observar que após cada contato da partícula com o anteparo, o alcance máximo (posição y) da trajetória da partícula diminui em relação ao anterior, situação que acontece quando existe perda de energia no contato da partícula com a superfície devido a uma taxa de amortecimento não nula ($\xi^{con} = 0,1$) adotada como dado de entrada. Também é interessante observar que, quando a posição x da partícula é maior que 2,5 m, não existe mais o anteparo e a trajetória da partícula pode atingir posições y menores que zero.

Figura 20 - Coordenadas x e y da posição do centro durante a simulação.

6.1.2 Choque entre duas partículas

A partir de agora, temos as simulações que envolvem duas ou mais partículas. A primeira delas trata de um choque entre uma partícula com velocidade inicial e outra inicialmente parada, ambas com mesmo diâmetro $D = 0,07$ m, como pode ser visto na

Figura 21. Foi adotada massa de 1,0 kg, módulo de elasticidade de 10^9 N/m², coeficiente de Poisson igual a zero e Δt de 0,00001 s. Foram simulados choques inelásticos, onde as duas partículas permanecem em movimento juntas após o choque, e choques elásticos, em que elas se separam após o choque. Essas variações se dão por meio de diferentes taxas de amortecimento nos dados de entrada.

Figura 21 - Esquema gráfico da simulação onde a partícula 1 atinge a partícula 2, inicialmente em repouso.

6.1.3 Choque entre duas partículas (com velocidades em sentidos opostos)

O mesmo problema anterior foi simulado, desta vez, com a partícula 2 também em movimento inicial, porém, com a velocidade no sentido contrário ao da velocidade da partícula 1. O esquema desta simulação pode ser visto na Figura 22.

Figura 22 - Esquema gráfico da simulação onde a partícula 1 se choca com a partícula 2, sendo que as velocidades possuem sentidos opostos.

6.1.4 Choque entre duas partículas desalinhadas (com velocidades em sentidos opostos)

Ainda usando as mesmas premissas do choque anteriormente apresentado, agora temos um desalinhamento $d = 0,06$ m entre as trajetórias iniciais das partículas, como pode ser visto no esquema da Figura 23. A posição inicial do centro da partícula

1 é $(-0,05;0)$ m e da partícula 2 é $(0,15;0,06)$ m. As velocidades v_1 e v_2 tem intensidade de 1,0 m/s.

Figura 23 - Esquema gráfico da simulação onde a partícula 1 se choca com a partícula 2, com um desalinhamento nas trajetórias.

O resultado dessa simulação é apresentado na Figura 24, mostrando as trajetórias dos centros das partículas. É evidenciado o ponto onde aconteceu o choque e fica visível a mudança de direção após a colisão. As trajetórias após o choque continuam paralelas entre si.

Figura 24 – Resultado da simulação mostrando a trajetória (coordenadas x e y) das duas partículas. Os vértices dos gráficos evidenciam o momento da colisão.

6.1.5 Choque entre três partículas

Inicia-se aqui uma sequência de simulações com choques entre múltiplas partículas acontecendo no mesmo instante de tempo. O primeiro problema apresentado é a colisão entre três partículas de mesmo diâmetro $D = 0,07$ m, sendo que a posição inicial do centro de cada uma é o vértice de um triângulo equilátero de lado $l = 0,2$ m. Foi adotada massa de $0,1$ kg, módulo de elasticidade de 10^9 N/m² e coeficiente de Poisson igual a zero para todas as partículas e Δt de $0,00005$ s. Elas se aproximam com velocidades de mesma intensidade igual a $1,0$ m/s, de forma a colidirem no mesmo instante. A Figura 25 explica graficamente a situação descrita.

Figura 25 – Esquema gráfico da simulação de três partículas colidindo no mesmo instante.

O resultado é apresentado na Figura 26, onde podemos ver o gráfico da trajetória das 3 partículas. Evidencia-se na figura o momento exato da colisão. Percebe-se que, após o choque, as partículas retornam pela mesma trajetória que fizeram antes da colisão, mas no sentido oposto.

Figura 26 - Resultado apresentando as coordenadas x e y das 3 partículas durante a simulação de colisão entre elas.

O mesmo problema foi simulado no PSY (programa original) e a comparação de resultados é apresentada em forma de gráfico na Figura 27. Percebe-se que os dois programas geraram resultados bastante semelhantes. A concordância no instante de tempo em que ocorre a colisão entre as partículas é boa, assim como a direção da trajetória da partícula após o contato. O ligeiro descolamento das duas séries de dados no instante da colisão se dá devido quantidade de pontos plotados, uma vez que os resultados do PSY estão apresentados a cada $1e-2$ s e os resultados deste trabalho, a cada $5e-6$ s.

Figura 27 - Comparação de resultados obtidos com resultados do PSY (programa original). Gráfico da posição x da partícula 2 em função do tempo da simulação.

6.1.6 Choque entre quatro partículas

Já na Figura 28, podemos ver a próxima simulação que trata de uma colisão entre quatro partículas de mesmo diâmetro $D = 0,07$ m acontecendo ao mesmo tempo. A configuração inicial é com o centro de cada partícula em um dos vértices de um quadrado de lado $l = 0,1$ m e suas velocidades têm intensidade igual a $1,0$ m/s, apontando nas direções das diagonais do quadrado. Foi adotada massa de $0,1$ kg, módulo de elasticidade de 10^9 N/m² e coeficiente de Poisson igual a zero para todas as partículas e Δt de $0,00001$ s.

O resultado é apresentado na Figura 29, onde podemos ver o gráfico da trajetória das 4 partículas. Evidencia-se na figura o momento exato da colisão. Percebe-se que, após o choque, as partículas retornam pela mesma trajetória que fizeram antes da colisão, mas no sentido oposto. Destaca-se que cada uma das partículas toca apenas em outras duas no momento da colisão, isto é, a partícula 1, por exemplo, toca nas partículas 2 e 4, mas não chega a colidir com a partícula 3.

Figura 28 – Esquema gráfico da simulação de quatro partículas colidindo no mesmo instante.

Figura 29 - Resultado apresentando as coordenadas x e y das 4 partículas durante a simulação de colisão entre elas.

6.1.7 Choque entre cinco partículas

O último exemplo aqui explorado é o choque entre 5 partículas, sendo quatro delas com diâmetro menor ($D = 0,06$ m), mas iguais entre si e uma com diâmetro maior ($D = 0,08$ m). Foi adotada massa de 0,1 kg, módulo de elasticidade de 10^9 N/m² e coeficiente de Poisson igual a zero para todas as partículas e Δt de $1e - 6$ s. As partículas menores estão posicionadas nos vértices de um quadrado de lado $l = 0,2$ m e suas velocidades têm intensidade igual a 1,414 m/s, apontando nas direções das diagonais do quadrado. A partícula maior está centralizada no encontro das diagonais (posição (0;0) m). Dessa forma, a partícula 5, inicialmente em repouso, toca em todas as demais no mesmo instante, porém, nenhuma das partículas menores se tocam entre si. A Figura 30 explica graficamente o problema descrito.

Figura 30 – Esquema gráfico do problema de colisão entre 5 partículas no mesmo instante de tempo.

O resultado é apresentado na Figura 31, onde podemos ver o gráfico da trajetória das 5 partículas. Evidencia-se na figura o momento exato da colisão. Percebe-se que, mesmo após o choque, a partícula 5 continua em repouso (veja que não existe um gráfico para sua trajetória, o que indica que sua posição permaneceu a mesma durante toda a simulação), pois a somatória de forças aplicadas durante a

colisão foi nula. Já as demais partículas retornam pela mesma trajetória que fizeram antes da colisão, mas no sentido oposto.

O mesmo problema foi simulado no PSY (programa original) e a comparação de resultados é apresentada em forma de gráfico na Figura 32. Percebe-se que os dois programas geraram resultados bastante semelhantes. A concordância no instante de tempo em que ocorre a colisão entre as partículas é boa, assim como a direção da trajetória da partícula após o contato. O ligeiro descolamento das duas séries de dados no instante da colisão se dá devido quantidade de pontos plotados, uma vez que os resultados do PSY estão apresentados a cada $1e-2$ s e os resultados deste trabalho, a cada $1e-6$ s.

Vale ressaltar que a partícula 5, também se manteve em repouso durante toda a simulação no programa PSY e que as rotações α de todas as partículas permaneceram zeradas em ambos os programas.

Figura 31 – Resultado apresentando as coordenadas x e y das 5 partículas durante a simulação de colisão entre elas.

Figura 32 – Comparação de resultados obtidos com resultados do PSY (programa original). Gráfico da posição x da partícula 4 em função do tempo da simulação.

6.2 ADAPTAÇÃO DO PROGRAMA DE FLUIDOS PARA O ACOPLAMENTO COM O PROGRAMA DE PARTÍCULAS

O programa original de resolução de interação de fluidos com interfaces móveis usando o Método das Fronteira Imersas desenvolvido por (Gomes 2013) precisou de algumas adaptações para receber as informações que chegam do programa de partículas, como posições e velocidades, e também para devolver os resultados calculados de forças e momentos a serem aplicados nas partículas. Essa troca de informações, que acontece através dos Multiplicadores de Lagrange, foi apresentada no Capítulo 5.

As adaptações foram realizadas por etapas. A primeira delas foi definir as partículas de forma analítica, para que o programa de fluidos possa fazer a divisão do domínio do problema em Ω^+ e Ω^- . Dessa forma, as partículas são descritas por meio de um centro, um diâmetro e a quantidade de partes na qual será dividida a superfície de contato com o fluido, gerando um multiplicador de Lagrange para cada segmento obtido.

As demais adaptações foram focadas nos seguintes passos:

- Simular problemas com n partículas fixas;

- Simular problemas com uma partícula com movimentação prescrita (translação e rotação);
- Simular problemas com n partículas com movimentação prescrita.

Os resultados de algumas simulações feitas em cada uma das etapas citadas estão apresentados a seguir apenas de forma qualitativa, para melhor entendimento do passo-a-passo seguido até obter-se o programa computacional acoplado, que será mostrado no item 6.3.

Destaca-se aqui que, nas simulações em que as partículas têm movimento de translação, os resultados de velocidade e pressão são sempre nulos naqueles elementos que se encontram na “sombra” das partículas em cada passo de tempo, ou seja, conforme as partículas se movimentam, suas projeções encobrem determinados elementos de fluido, cujos resultados serão nulos nesta iteração, e libera outros elementos que na iteração anterior estavam encobertos, mas nessa iteração serão resolvidos e terão resultados não nulos.

6.2.1 Escoamento em torno de n partículas

Este primeiro exemplo apresenta a primeira adaptação feita no programa de fluidos. Trata-se de um domínio quadrado com lado de 1 metro e origem do sistema de coordenadas no vértice esquerdo inferior, no qual existe um escoamento da esquerda para a direita, além de três partículas fixas com diâmetros D e centros C posicionados em:

- Partícula 1: $D = 0,05$ m e $C = (0,45; 0,6)$ m;
- Partícula 2: $D = 0,05$ m e $C = (0,5; 0,5)$ m;
- Partícula 3: $D = 0,06$ m e $C = (0,6; 0,4)$ m.

Nas paredes laterais do canal a velocidade do fluido é nula e a saída no canto direito é considerada uma fronteira aberta com tensão aplicada nula. A velocidade horizontal de entrada do escoamento no canal tem perfil parabólico.

A Figura 33 exibe os resultados por meio dos campos de velocidades e pressões no fluido em um determinado instante de tempo da simulação. As cores mais quentes indicam intensidades maiores das grandezas.

Figura 33 - Perfis de velocidades (esquerda) e pressões (direita) no escoamento ao redor de três partículas de posições fixas.

6.2.2 Partícula em movimento de translação prescrito

Este segundo exemplo utiliza o mesmo domínio e condições de contorno já apresentados em 6.2.1. Em contrapartida, existe apenas uma partícula com diâmetro de 0,05 m e posição inicial centralizada em (0,5;0,5) m. O escoamento da esquerda para a direita se inicia e, após sua estabilização, impõe-se um movimento de translação à partícula, a qual passa sequencialmente pelas posições (0,4;0,5) m, (0,5;0,4) m, (0,6;0,5) m, (0,5;0,6) m e finalmente retorna a (0,4;0,5) m, quando a simulação chega ao fim.

A Figura 34 mostra uma sequência de imagens com os resultados de campo de velocidades do escoamento em instantes de tempo progressivos durante a simulação.

Figura 34 – Campo de velocidades em instantes de tempo progressivos para escoamento passando por uma partícula com velocidade de translação prescrita.

6.2.3 N partículas em movimento de translação e rotação prescritos

Apresenta-se agora o terceiro exemplo que pode ser entendido como a junção dos dois exemplos anteriores, pois nele existem três partículas imersas no escoamento, com movimentos de translação e rotação prescritos. Trata-se de um escoamento, da esquerda para a direita, em canal estreito com comprimento $L = 2,2$ m, largura $H = 0,41$ m. Nas paredes laterais do canal a velocidade do fluido é nula e a saída no canto direito é considerada uma fronteira aberta com tensão aplicada nula. Novamente, a velocidade horizontal de entrada do escoamento no canal tem perfil parabólico. Duas das partículas possuem diâmetro de 0,05 m e a terceira possui diâmetro de 0,06 m.

Na Figura 35, é possível observar os resultados do campo de velocidades do escoamento para um determinado instante de tempo da simulação. Sobreposto ao campo, foram geradas linhas de fluxo a fim de evidenciar a formação de vórtices no escoamento influenciados pelos movimentos das partículas.

Figura 35 – Resultados de campo de velocidades do fluido escoando ao redor de três partículas com linhas de fluxo evidenciando a formação de diversos vórtices.

6.3 EXEMPLOS DE INTERAÇÃO FLUIDO-PARTÍCULAS

O último passo no desenvolvimento do algoritmo proposto por este trabalho foi justamente a integração do programa simulador de fluidos com o programa simulador da interação entre partículas, fazendo com que os esforços gerados pelo fluido sobre as partículas, obtidos como resultado do primeiro código, se tornassem dados de entrada para o segundo. Assim, o programa de partículas resolve um passo de tempo e devolve para o programa de fluidos os resultados de esforços gerados pelas partículas sobre o fluido, que servem como dados de entrada para uma nova iteração no tempo. E assim sucessivamente, até o final da simulação.

Nestes próximos problemas, por utilizarem o método das fronteiras imersas, o domínio inteiro é discretizado com elementos finitos de fluido, inclusive a região ocupada pelas partículas. Para todas as simulações, foram usados os elementos finitos triangulares P2P1, já apresentado anteriormente no item 3.5. A discretização da superfície molhada foi feita de maneira independente da malha do fluido e com funções de forma descontínuas e constantes no interior de cada elemento da interface, a fim de evitar as instabilidades numéricas evidenciadas em (Gomes 2013).

Alguns exemplos foram simulados e os resultados serão apresentados a seguir.

6.3.1 Sedimentação de partícula isolada

Este exemplo serve como uma validação da capacidade do programa desenvolvido de simular um experimento físico real já bastante estudado na literatura, como pode ser visto em (Brown e Lawler 2003), (Clift et al. 1978) e (Cheng 2009). Os dados experimentais mostram que a partícula em queda livre imersa em um fluido, partindo do repouso, tem sua velocidade aumentada até atingir a velocidade terminal, que é a velocidade máxima e constante no momento em que a força resultante se torna nula, ou seja, as forças de resistência do fluido contrárias ao movimento se igualam à força da gravidade.

A geometria adotada para as três simulações processadas foi um tubo de 1,6 metros de altura e 20 centímetros de largura preenchido com um fluido de densidade $\rho[\text{kg/m}^3] = 1$. Todo o domínio do fluido foi discretizado em elementos finitos, num total de 29236 elementos triangulares. O parâmetro γ de Newmark utilizado foi de 0,5. Foram adotadas três viscosidades cinemáticas diferentes:

- Simulação 1 - $\nu[\text{m}^2/\text{s}] = 1 \times 10^{-2}$;
- Simulação 2 - $\nu[\text{m}^2/\text{s}] = 5 \times 10^{-3}$;
- Simulação 3 - $\nu[\text{m}^2/\text{s}] = 1 \times 10^{-3}$.

Uma partícula de 5 centímetros de diâmetro e 2 gramas de massa é posicionada com o centro no ponto (0,10;1,55) m e solta apenas sob a ação da força de aceleração da gravidade.

A Figura 36 mostra os resultados gráficos do campo de velocidades da Simulação 2, com $\nu[\text{m}^2/\text{s}] = 5 \times 10^{-3}$, em 4 instantes de tempo progressivos. Veja que a velocidade máxima do fluido nos três primeiros instantes de tempo apresentados foi aumentando em relação ao instante anterior. No entanto, o último instante de tempo exposto tem praticamente a mesma velocidade máxima de fluido que o penúltimo. Isso mostra que a partícula atingiu a velocidade terminal e que o instante de tempo em que esse fato aconteceu está entre o segundo e o terceiro instantes apresentados na imagem.

Figura 36 – Campo de velocidades para $\nu[m^2/s] = 5 \times 10^{-3}$ em instantes de tempo progressivos.

Os resultados de velocidade da partícula na direção da gravidade, em m/s, em cada instante de tempo para as três simulações foram plotados no gráfico da Figura 37. Observando-o, podemos perceber que a velocidade realmente atingiu um limite máximo, isto é, a velocidade terminal. Para cada simulação, o tempo t_t necessário para atingir a velocidade terminal é diferente, aumentando à medida que se reduz a viscosidade do fluido. Para a Simulação 1, o tempo $t_t[s] \cong 0,5$, para a Simulação 2, $t_t[s] \cong 0,65$ e para a Simulação 3, $t_t[s] \cong 0,75$. Após atingir o instante t_t a velocidade permanece constante até a partícula chegar ao fundo do tubo.

Figura 37 – Histórico de velocidade na direção da gravidade por tempo para três simulações de partícula sedimentando em fluido com viscosidades cinemáticas diferentes.

A fim de validar os resultados encontrados, a velocidade terminal obtida em cada simulação foi comparada com valores oriundos de formulações baseadas em dados experimentais da literatura. Existem equações de correlação experimental bastante precisas que podem ser usadas de forma comparativa, como é o caso por exemplo, das equações presentes em (Brown e Lawler 2003), e que foram adotadas neste trabalho com o propósito de comparação com o resultado numérico. Os gráficos das figuras Figura 38, Figura 39 e Figura 40 apresentam os valores de velocidade na direção da gravidade ao longo de todo o tempo das simulações juntamente com a curva de referência do valor estimado para a velocidade terminal de uma esfera em sedimentação, considerando problemas com número de Reynolds baixos a moderados, segundo (Brown e Lawler 2003).

Analisando os resultados, percebe-se um certo distanciamento do valor da velocidade terminal, obtido através da simulação numérica, em relação ao valor esperado, vindo da formulação experimental. Esta diferença pode ser advinda da utilização de uma formulação destinada para problemas em 3 dimensões (baseada em experimentos físicos reais) adaptada para prever a velocidade terminal de um problema simulado em apenas 2 dimensões.

Apesar da diferença apresentada quando se trata do valor da velocidade terminal, em se tratando do aspecto final do gráfico (velocidade na direção da

gravidade por tempo), percebe-se grande semelhança com curvas apresentadas em outros trabalhos de simulação tridimensional de partículas em sedimentação, como em (Avci e Wriggers 2011), por exemplo.

Figura 38 - Histórico de velocidade na direção da gravidade por tempo para a Simulação 1 de partícula sedimentando em fluido e a comparação com a velocidade terminal obtida por correlações experimentais.

Figura 39 - Histórico de velocidade na direção da gravidade por tempo para a Simulação 2 de partícula sedimentando em fluido e a comparação com a velocidade terminal obtida por correlações experimentais.

Figura 40 - Histórico de velocidade na direção da gravidade por tempo para a Simulação 3 de partícula sedimentando em fluido e a comparação com a velocidade terminal obtida por correlações experimentais.

6.3.2 Sedimentação de duas partículas posicionadas em coluna

Continuando na linha de simular computacionalmente experimentos físicos reais, este segundo exemplo nos permite observar fenômenos fluidodinâmicos conhecidos como “*drafting-kissing-tumbling*”. Outros trabalhos que tratam desse tema são (Fortes, Joseph, e Lundgren 1987) e (Diaz-Goano, Minev, e Nandakumar 2003).

Drafting é o termo utilizado quando dois objetos se movimentam imersos em um fluido, separados por uma pequena distância e alinhados na mesma direção do movimento, de forma que o objeto à frente diminui a força de arrasto que atua no objeto de trás. Isso acaba facilitando a movimentação do segundo objeto que, tende a aumentar sua velocidade em relação ao primeiro, e a distância entre eles vai diminuindo, até que ocorra o contato, ou *kissing*. O *tumbling* por sua vez, é simplesmente o fenômeno de queda de um corpo num meio fluido.

Para esta simulação foram utilizadas a mesma geometria e parâmetros de fluido da Simulação 2 do exemplo anterior. Duas partículas são posicionadas alinhadas verticalmente e separadas por uma distância de centro a centro de 0,15 metros. As posições iniciais de cada centro são:

- Partícula 1: (0,10;1,35) m;
- Partícula 2: (0,10;1,50) m.

Ambas partículas possuem 5 centímetros de diâmetro e 2 gramas de massa, e são soltas no fluido, partindo do repouso, sendo influenciadas apenas pela ação da força de aceleração da gravidade. A Figura 41 ilustra esquematicamente a geometria inicial do problema a ser resolvido

Figura 41 – Geometria da configuração inicial do problema.

Como podemos ver na Figura 42, que apresenta graficamente os resultados do campo de velocidades do fluido em instantes de tempo progressivos, o fenômeno de fluxo *drafting* observado nos experimentos reais é claramente reproduzido pela solução computacional. Perceba que a distância entre as partículas diminui conforme o tempo avança, indicando que a velocidade da Partícula 2 (protegida das forças de arrasto) é maior que da Partícula 1.

Figura 42 – Campo de velocidades para $v[m^2/s] = 5 \times 10^{-3}$ em instantes de tempo progressivos.

Os resultados de velocidade na direção da gravidade foram plotados no gráfico da Figura 43 para as duas partículas, a fim de evidenciar a maior velocidade (em módulo) da Partícula 2, que ficou parcialmente protegida das forças de arrasto, se comparada com a velocidade da Partícula 1, à frente do movimento e que recebe as forças de resistência do fluido integralmente. Na Figura 44, temos um gráfico com as curvas de posição y (vertical) do centro das partículas em função do tempo de simulação, onde é possível perceber a aproximação das duas partículas com a passagem do tempo. Por último, na Figura 45 há um gráfico da distância entre os centros das duas partículas em função do tempo, evidenciando não só a redução dessa distância, como também o aumento progressivo da velocidade com que a distância diminui, dado pela inclinação da curva.

Figura 43 - Histórico de velocidades na direção da gravidade por tempo para as duas partículas sedimentando em fluido.

Figura 44 – Curva da posição vertical (y) dos centros das partículas pelo tempo de simulação.

Figura 45 – Distância entre os centros das partículas com a passagem do tempo durante a simulação.

6.3.3 Escoamento em torno de uma partícula

O problema de escoamento em torno de um cilindro é um clássico da literatura, podendo ser encontrado em (Brooks e Hughes 1982), (Tayfun E Tezduyar e Osawa 2000), (Zienkiewicz, Taylor, e Nithiarasu 2013) e (Schäfer et al. 1996). Um estudo bastante completo a respeito desse problema, onde foram simulados escoamentos estacionários e transientes com diferentes tipos de elementos finitos pode ser consultado em (Gomes 2013). Neste trabalho, reproduzimos o problema com os mesmos parâmetros de referência lá especificados, substituindo o cilindro por uma partícula com posição fixa e de mesmo diâmetro, à fim de verificar a formulação desenvolvida através da comparação de resultados de coeficientes de arrasto e sustentação calculados para um escoamento transiente.

Num canal estreito com comprimento $L = 2,2$ m, largura $H = 0,41$ m e origem do sistema de coordenadas no vértice esquerdo inferior, simula-se um escoamento da esquerda para a direita, passando por uma partícula fixa de raio $r = 0,05$ m e centro $C = (0,2; 0,2)$ m que funciona como um obstáculo para o fluido (Figura 46). Nas paredes laterais do canal a velocidade do fluido é nula e a saída no canto direito é considerada uma fronteira aberta com tensão aplicada nula.

Figura 46 – Esquema da geometria do problema de escoamento em torno de uma partícula.

A velocidade horizontal do escoamento na entrada do canal é parabólica e descrita como

$$v(0, x_2) = \left[\frac{4U_m x_2 (H - x_2)}{H^2} \quad 0 \right]^T, \quad (6.1)$$

com o vetor posição $x = x_i e_i$, largura do canal H e velocidade máxima de entrada U_m . Dessa forma, a velocidade média, o número de Reynolds e o número de Strouhal são dados por

$$\bar{U} = \frac{2v\left(0, \frac{H}{2}\right)}{3}, \quad Re = \frac{\bar{U}D}{\nu} \quad e \quad St = \frac{fD}{\bar{U}}, \quad (6.2)$$

onde D é o diâmetro da partícula, ν é a viscosidade cinemática do fluido e f é a frequência de desprendimento de vórtices [s⁻¹].

Os parâmetros adotados para este problema foram:

$$\rho[\text{kg/m}^3] = 1, \quad \nu[\text{m}^2/\text{s}] = 1 \times 10^{-3}, \quad U_m[\text{m/s}] = 1,5, \quad Re = 100$$

A simulação é composta por 1100 passos de tempo $\Delta t = 0,01\text{s}$, totalizando 11 segundos de escoamento. O parâmetro γ de Newmark adotado é 0,5 para obter convergência de segunda ordem.

Na Figura 47 é apresentada a malha de elementos triangulares do fluido, composta por 24118 elementos. Observa-se que ela discretiza todo o domínio do problema, inclusive a região que intersecciona o domínio da partícula, assim como determina o método das fronteiras imersas. Além disso, é possível perceber que na

região onde a partícula ficará fixa, a malha do fluido foi discretizada em elementos de tamanhos bem menores (da ordem de 10 vezes) do que no restante do domínio, a fim de que a interface da partícula seja bem discretizada (já que a quantidade de elementos da malha da interface está diretamente relacionada com a quantidade de elementos de fluido cortados por ela), gerando resultados melhores. Neste exemplo em específico, a malha da interface foi discretizada em 110 elementos de mesmo comprimento, nos quais foram calculados os vetores λ (Multiplicadores de Lagrange), como pode ser visto na Figura 48. Já na Figura 49, são apresentados os resultados gráficos de campo de velocidades e pressão do escoamento transiente após o desprendimento alternado de vórtices se estabilizar e assumir um comportamento periódico.

Figura 47 - Malha de elementos triangulares de fluido, com grande refinamento na região onde a partícula está localizada.

Figura 48 – Vetores dos Multiplicadores de Lagrange distribuídos ao longo da interface fluido-partícula, representando as tensões que a partícula aplica no fluido.

Figura 49 - Perfis de velocidades (acima) e pressões (abaixo) no escoamento ao redor da partícula.

Para melhor observação do desprendimento de vórtices formados após a passagem do escoamento pela partícula, a Figura 50 mostra os vetores de velocidade do escoamento próximos a ela. Já a Figura 51, exibe linhas de fluxo igualmente espaçadas na seção inicial do canal sobrepostas ao campo de velocidades

Figura 50 – Vetores de velocidade do escoamento próximos à partícula.

Figura 51 - Campo de velocidades com linhas de fluxo evidenciando a formação de vórtice após a passagem pela partícula.

Foram computados os coeficientes de arrasto C_D e de sustentação C_L , expressos por

$$C_D = \frac{2F_h}{\rho \bar{U}^2 D} \quad \text{e} \quad C_L = \frac{2F_v}{\rho \bar{U}^2 D}, \quad (6.3)$$

onde F_h e F_v são a resultante horizontal e vertical da força que atua na partícula, respectivamente. Dessa forma, é possível fazer a comparação de valores entre o presente trabalho e os trabalhos de referência (Gomes 2013) e (Schäfer et al. 1996). Os resultados dos coeficientes ao longo do tempo de simulação, plotados em forma de gráficos, podem ser consultados na Figura 52.

Figura 52 - Coeficientes de arrasto e sustentação em função do tempo.

A Tabela 1 apresenta uma comparação entre os valores máximos de coeficiente de arrasto e de sustentação obtidos por meio da simulação com os valores encontrados nos trabalhos de referência. Também foi comparado o número de Strouhal, que depende da frequência de desprendimento de vórtices, como foi apresentado na equação (6.2).

	C_{Dmax}	C_{Lmax}	St
<i>Presente trabalho</i>	3,2394	0,9996	0,3030
<i>Referência (Gomes 2013)</i>	3,2450	1,0369	0,3008
<i>Referência (R.Rannacher, S. Turek 1996)</i>	3,2300	1,0000	0,3000

Tabela 1 - Comparação dos resultados de coeficientes de arrasto e sustentação e número de Strouhal obtidos com resultados publicados por outras referências.

6.3.4 Escoamento de fluido carregado com partículas em canal

A partir deste, iniciam-se os exemplos que foram simulados sem a preocupação de validação da formulação, mas com a intenção de explorar tipos de problemas que por ela podem ser tratados. O primeiro exemplo apresentado será o de escoamento carregado com partículas em canal. Foram feitas simulações com canais de 0,41 m de largura e comprimento variando de 1,1 m até 2,2 m. O número de elementos finitos utilizados para discretizar o domínio do fluido variou de aproximadamente 50000 a 80000, dependendo das dimensões do canal. A quantidade de partículas imersas variou de 2 até 5, com diâmetros entre 0,07 m e 0,09 m e posição inicial aleatória dentro do domínio do problema. A massa das partículas varia de 0,5 kg à 1,0 kg e o módulo de elasticidade do material do qual são compostas vai de 10^7 N/m² à 10^9 N/m².

O escoamento acontece da esquerda para a direita e sua velocidade horizontal na entrada do canal é parabólica, descrita pela equação (6.1). Nas paredes laterais, a velocidade do fluido é nula. A saída do canal é considerada uma fronteira aberta para o fluido, com tensão aplicada nula, porém, para as partículas, é considerada uma fronteira fechada, impedindo que elas alcancem posições externas ao domínio do problema.

As propriedades adotadas para o fluido são:

$$\rho[\text{kg/m}^3] = 1 \quad , \quad \nu[\text{m}^2/\text{s}] = 1 \times 10^{-3} \quad , \quad U_m[\text{m/s}] = 1,5$$

O passo de tempo Δt adotado varia de 0,01 s até 0,05 s enquanto as partículas estão suficientemente afastadas entre si e das paredes que definem o contorno do domínio, garantindo que não haja contato. A partir do momento que esse afastamento se reduz, indicando que uma colisão está próxima de acontecer, o Δt é reduzido para valores compatíveis com a expressão (4.18) apresentada no Capítulo 4, para garantir boa acurácia na integração das forças de contato. O parâmetro γ de Newmark adotado é de 0,5.

A Figura 53 mostra um conjunto de imagens com os resultados de campo de velocidades em instantes de tempo progressivos durante a simulação do escoamento carregado com 5 partículas. Na primeira imagem, temos o início do escoamento, quando as partículas ainda estão nas posições originais definidas nos dados de entrada da simulação. Na segunda imagem, uma peculiaridade a ser observada é a colisão entre as duas partículas localizadas mais à direita do escoamento. Diversas outras colisões, tanto entre partículas, quanto entre partícula e fronteira, ocorrem durante simulação, como por exemplo, pode ser visto na última imagem ainda na Figura 53, onde a partícula mais à direita do escoamento tem contato com a fronteira de saída do canal.

Outra forma de perceber as colisões entre as partículas e entre partículas e paredes é por meio da Figura 54, que apresenta um gráfico com as trajetórias (posições ocupadas pelos centros das partículas durante a simulação) de duas das cinco partículas existentes no escoamento. As mudanças abruptas na direção das trajetórias indicam a ocorrência de colisões, inclusive com a fronteira de saída do canal, evidenciando a condição desta ser uma fronteira aberta para o fluido, porém fechada para as partículas.

Figura 53 – Imagens do campo de velocidades em instantes de tempo progressivos para o escoamento carregado com 5 partículas em canal.

Figura 54 – Resultado apresentando as coordenadas x e y dos centros de duas partículas durante a simulação

A Figura 55, por sua vez, mostra o resultado de campo de pressões no fluido para o mesmo instante de tempo adotado na terceira imagem da Figura 53. Percebe-se que existe uma concentração de pressões mais altas na região do domínio do fluido que está à esquerda das partículas. Ou seja, o escoamento que tem sua trajetória natural dificultada ou impedida pelas partículas, tende a desviar dos obstáculos, sendo forçado a passar por espaços menores e, conseqüentemente, gerando regiões de maior pressão no fluido. A Figura 56 exibe esta situação de passagem do escoamento por entre partículas próximas. São mostrados os vetores de velocidade do fluido evidenciando a formação de vórtices no escoamento logo após a passagem pelas partículas.

Figura 55 – Campo de pressões para escoamento carregado com 5 partículas em canal.

Figura 56 – Vetores de velocidade próximos às partículas.

6.3.5 Escoamento de fluido carregado com partículas em canal com redução de seção

Desta vez, um canal de 0,41 m de largura e 1,2 m de comprimento possui uma redução progressiva em sua seção transversal, passando a ter apenas 0,21 m de largura nas seções finais. A Figura 57 mostra a geometria do problema com a malha de 32047 elementos finitos triangulares utilizada para a discretização do domínio. Seis partículas são dispostas inicialmente de forma aleatória na região mais à esquerda do canal, como pode ser visto na primeira imagem da Figura 58. Os diâmetros das partículas variam de 0,07 m e 0,09 m, as massas, de 0,5 kg à 1,0 kg e o módulo de elasticidade do material é de 10^7 N/m².

Figura 57 – Geometria do problema de escoamento com redução de seção junto com a malha do fluido de elementos finitos triangulares.

O escoamento acontece da esquerda para a direita, com velocidade horizontal na entrada do canal parabólica, assim como no problema anterior (item 6.3.4) e, inclusive, com as mesmas propriedades e condições de contorno lá descritos. Novamente, a saída do canal é considerada uma fronteira aberta para o fluido, porém, uma fronteira fechada para as partículas, impedindo que elas alcancem posições externas ao domínio do problema.

O passo de tempo Δt adotado foi de 0,05 s enquanto as partículas estão suficientemente afastadas entre si e das paredes que definem o contorno do domínio, sendo reduzido para valores compatíveis com a expressão (4.18), apresentada no Capítulo 4, quando o afastamento se reduz, indicando que há a possibilidade de colisão. O parâmetro γ de Newmark adotado foi de 0,5.

A Figura 58 mostra um conjunto de imagens com os resultados de campo de velocidades em instantes de tempo progressivos durante a simulação do escoamento carregado com 6 partículas. Na primeira imagem, temos o início do escoamento, quando as partículas ainda estão nas posições originais definidas nos dados de entrada. Nesta simulação, percebe-se que o número de vezes em que ocorrem contatos partícula-partícula e partícula-parede aumenta em relação ao exemplo anterior. Isto se deve ao aumento da quantidade de partículas e à diminuição da seção do canal, que faz o domínio do problema ficar menor. Ou seja, com o espaço reduzido, aumenta a probabilidade de ocorrerem as colisões.

Uma amostra de contato entre partícula e fronteira pode ser observada na segunda imagem da Figura 58, onde a partícula de posição mais baixa colide com a parede inclinada. Já a colisão entre uma partícula e a fronteira de saída do canal fica evidenciada na Figura 59, que apresenta a trajetória dessa partícula por meio das posições x e y de seu centro ao longo da simulação. As colisões são caracterizadas pelas mudanças abruptas na direção da trajetória da partícula. É possível perceber a ocorrência de duas colisões com a fronteira de saída do canal, provando a condição de fronteira fechada para as partículas e aberta para o fluido.

Figura 58 - Imagens do campo de velocidades em instantes de tempo progressivos para o escoamento carregado com 6 partículas em canal com redução de seção.

Figura 59 - Resultado apresentando as coordenadas x e y do centro de uma partícula durante a simulação

Já a Figura 60, mostra o resultado de campo de pressões no fluido para o mesmo instante de tempo adotado na terceira imagem da Figura 58. Novamente, percebe-se a concentração de pressões mais altas na região do domínio do fluido que está à esquerda das partículas, devido à dificuldade que o escoamento tem de contornar as partículas, que funcionam como obstáculos.

Figura 60 - Campo de pressões para escoamento carregado com 6 partículas em canal com redução de seção.

Ainda apresentando os resultados para o mesmo instante de tempo adotado na imagem da Figura 60, a Figura 61 mostra o campo de velocidades do fluido com linhas de fluxo igualmente espaçadas em suas origens na entrada do canal. Estas linhas de fluxo permitem observar mais claramente os desvios que o escoamento faz para contornar as partículas, sendo forçado a passar por entre elas em estreitos espaços, causando aumento de velocidade. Este aumento fica evidenciado pelas cores mais quentes (avermelhadas) e pela proximidade entre as linhas de fluxo nesses estreitamentos.

Figura 61 - Campo de velocidades com linhas de fluxo evidenciando os desvios na trajetória natural do escoamento.

6.3.6 Escoamento de fluido carregado com partículas em funil

O último exemplo aqui apresentado se trata de um canal afunilado com escoamento carregado com partículas no sentido da esquerda para a direita. O afunilamento do canal se dá de tal forma que a seção transversal na região de início do escoamento possui largura de 0,41 m e, após sofrer o estrangulamento, passa a ter apenas 0,17 m de largura na seção de saída. A geometria completa do problema, juntamente com a malha de 23906 elementos triangulares utilizada para discretizar o domínio do fluido, estão mostradas na Figura 62.

Figura 62 - Geometria do problema de escoamento em canal afunilado junto com a malha do fluido de elementos finitos triangulares.

Sete partículas com diâmetros variando entre 0,06 m e 0,08 m foram posicionadas na região de maior seção transversal, distribuídas em três linhas sendo que, a primeira e a segunda linhas possuem três partículas cada e a última linha possui apenas uma partícula. Esta configuração inicial pode ser vista na primeira imagem da Figura 63. A massa das partículas varia de 0,5 kg à 1,0 kg e o módulo de elasticidade do material do qual são compostas é de 10^7 N/m².

A velocidade horizontal do escoamento na entrada do canal é parabólica e descrita pela equação (6.1). Nas paredes laterais, a velocidade do fluido é nula. A saída do canal é considerada uma fronteira aberta para o fluido, com tensão aplicada nula. Apenas para as partículas, existe uma fronteira fechada na seção imediatamente após o fim do afunilamento do canal, como pode ser visto na Figura 62, destacada por uma linha tracejada. Esta fronteira então, impede que as partículas cheguem à região final do canal com menor largura.

As propriedades adotadas para o fluido são:

$$\rho[\text{kg/m}^3] = 1 \quad , \quad \nu[\text{m}^2/\text{s}] = 1 \times 10^{-3} \quad , \quad U_m[\text{m/s}] = 1,5$$

O passo de tempo Δt adotado foi de 0,05 s enquanto existe o afastamento necessário para garantir que não haja contatos e, a partir do momento que esse afastamento se reduz, o Δt é reduzido para valores compatíveis com a expressão (4.18) apresentada no Capítulo 4, para garantir boa acurácia na integração das forças de contato. O parâmetro γ de Newmark adotado foi de 0,5.

A Figura 63 apresenta quatro imagens com os resultados de campo de velocidades em instantes de tempo progressivos durante a simulação do escoamento carregado com as 7 partículas. Observando a sequência de imagens percebe-se que o alinhamento inicial das partículas (3 linhas) vai deixando de existir nos instantes de tempo mais avançados da simulação. Isso acontece devido às diferenças de massa, diâmetro e posição entre as partículas, as quais recebem e reagem diferentemente às forças que o fluido aplica sobre elas. Conforme as velocidades das partículas vão se alterando de maneira desigual, começam a ocorrer as colisões, que são as maiores responsáveis pelo desalinhamento ao longo do tempo.

Figura 63 - Imagens do campo de velocidades em instantes de tempo progressivos para o escoamento carregado com 7 partículas em canal com afunilamento.

Percebe-se também uma tendência de acúmulo das partículas na região próxima à fronteira vertical (linha tracejada da Figura 62) localizada na seção final do afunilamento. Esta fronteira pode ser entendida como um filtro, que permite apenas a passagem do fluido pelo funil, barrando as partículas sólidas.

A Figura 64, mostra o resultado de campo de pressões no fluido para o mesmo instante de tempo adotado na terceira imagem da Figura 63. Mais uma vez, temos uma concentração de pressões mais altas na região do domínio do fluido que está à esquerda das partículas, devido à dificuldade que o escoamento tem de permear por entre elas. Ao contrário, nas regiões finais do canal onde não existem mais partículas sendo carregadas e nem reduções na largura da seção, o escoamento apresenta resultados de pressão mais baixos.

Figura 64 - Campo de pressões para escoamento carregado com 7 partículas em canal com afunilamento.

O alinhamento inicial das partículas nos permite observar a ocorrência do fenômeno *drafting*, explicado neste mesmo capítulo no exemplo do item 6.3.2. Na Figura 65, onde são mostrados em detalhe os vetores de velocidade do escoamento ao redor de três partículas alinhadas, percebe-se que as duas partículas à direita ficam protegidas pela partícula da esquerda, a qual aparece cercada por vetores de maior intensidade. Isso significa que as forças de fluido agindo sobre a partícula da esquerda são maiores que nas outras duas partículas.

Figura 65 - Vetores de velocidade próximos às partículas alinhadas.

Apresentando novamente os resultados de campo de velocidades do fluido já mostrados na terceira imagem da Figura 63, mas agora com a sobreposição de linhas de fluxo igualmente espaçadas em suas origens na entrada do canal, a Figura 66 mostra mais claramente o fluido permeando entre as partículas, as quais estão impedidas de chegar à região mais estreita do canal. A necessidade de passar por espaços estreitos existentes entre partículas causa um aumento de velocidade ao escoamento, que fica evidenciado pelas cores mais quentes (avermelhadas) e pela proximidade entre as linhas de fluxo nesses estreitamentos.

Figura 66 - Campo de velocidades com linhas de fluxo evidenciando as variações de velocidade no escoamento.

7 CONCLUSÕES

Chegando ao final trabalho e levando em conta todo o conteúdo teórico e prático apresentado ao longo dos capítulos, conclui-se que esta dissertação de mestrado teve seus objetivos atingidos.

De forma mais geral, o andamento deste trabalho propiciou o desenvolvimento de pesquisa científica na área de Interação Fluido-Partícula, dentro do Laboratório de Mecânica Computacional (LMC) da Escola Politécnica da USP, servindo como uma “fagulha de ignição” para projetos futuros que, inclusive, já estão em andamento dentro do mesmo grupo de pesquisa.

Num contexto mais específico, os exemplos numéricos resolvidos comprovaram que a formulação e a implementação do modelo computacional para resolver problemas de Interação Fluido-Partícula usando elementos finitos com fronteiras imersas, desenvolvidas neste trabalho, são capazes de:

- Solucionar problemas de partículas nos quais as interações partícula-partícula e partícula-parede são permitidas e resolvidas, apresentando resultados satisfatórios;
- Resolver problemas de escoamentos 2D de fluidos descritos pela Equação de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis;
- Simular problemas acoplados de IFP usando o conceito de fronteiras imersas em duas dimensões, incluindo exemplos com múltiplas partículas e grandes deslocamentos.

Pode-se observar que a formulação foi desenvolvida e apresentada para o caso geral em três dimensões, tanto para o fluido, quanto para as partículas. Porém a implementação do método foi realizado em apenas duas dimensões, partindo do princípio de que se utilizou como base um programa computacional robusto e eficaz já desenvolvido em 2D por (Gomes 2013) para a solução do fluido com fronteiras imersas. O código computacional desenvolvido neste trabalho, mas baseado em (Campello 2016), para a solução de problemas de partículas já se encontra pronto para ser aplicado em três dimensões. Por isso, acredita-se que o aprimoramento do

algoritmo para permitir a solução de problemas em 3D seja possível, apesar de exigir uma maior eficiência computacional comparada com a eficiência que possui hoje. O código computacional foi desenvolvido em MATLAB, com algumas sub-rotinas em C++ e algum paralelismo, porém num estágio incipiente.

Existem algumas melhorias que podem ser incorporadas neste trabalho que aumentariam a eficiência do código computacional, possibilitando a execução de simulações mais longas. A primeira delas a ser destacada é a implementação da resolução de alguns passos de tempo do problema de interação das partículas sem a necessidade de resolver também o sistema de equações do fluido. Isso possibilitaria que os passos de tempo, quando reduzidos para obtenção de boa acurácia nos instantes de contato entre partículas e partículas-fronteiras (como apresentado na equação (4.18), no Capítulo 4), fossem utilizados apenas para a solução do sistema de equações das partículas. Dessa forma, a solução do problema de fluido, que é iterativa e, portanto, mais lenta que a solução do problema de partículas, continuaria a ser executada apenas nos passos de tempo maiores, reduzindo relevantemente o tempo total da simulação. Outra melhoria que pode ser considerada é com relação ao algoritmo geométrico de identificação dos elementos cortados pelas interfaces com as partículas e o cálculo de suas contribuições ao sistema (5.14). Em simulações longas, eventualmente acontecem singularidades relacionadas à posição da fronteira imersa sobreposta à malha de elementos do fluido. Atualmente, foi implementada a alteração do passo de tempo na tentativa de solucionar esta singularidade, porém, o aperfeiçoamento do algoritmo geométrico seria mais apropriado.

Por fim, acredita-se ter colaborado para a introdução do tema Interação Fluido-Partícula dentro da gama de pesquisas atualmente desenvolvidas pelo grupo de cientistas do LMC. Como sugestão, no Capítulo 8 são apontadas possíveis continuidades a esta pesquisa a serem desenvolvidas por trabalhos futuros.

8 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Como prosseguimento aos estudos aqui iniciados, a autora propõe os seguintes temas a serem abordados em trabalhos futuros:

- Aplicação do código desenvolvido na simulação do fluxo de percolação através de meios porosos;
- Implementação da formulação em uma linguagem de programação mais eficiente que o MATLAB e utilizando computação paralela, a fim de melhorar a velocidade de processamento;
- Extensão da formulação desenvolvida para o caso tridimensional (já em andamento no grupo de pesquisa do LMC);
- Incorporação da superfície livre do fluido, buscando ampliar a abrangência dos problemas possíveis de serem tratados.

REFERÊNCIAS

- Alder, B. J., e T. E. Wainwright. 1959. "Studies in Molecular Dynamics. I. General Method". *The Journal of Chemical Physics* 31 (2): 459–66. <https://doi.org/10.1063/1.1730376>.
- Avci, B., e P. Wriggers. 2011. "A DEM-FEM Coupling Approach for the Direct Numerical Simulation of 3D Particulate Flows". *Journal of Applied Mechanics* 79 (1): 010901-010901–7. <https://doi.org/10.1115/1.4005093>.
- Baiges, Joan, Ramon Codina, Florian Henke, Shadan Shahmiri, e Wolfgang A. Wall. 2012. "A symmetric method for weakly imposing Dirichlet boundary conditions in embedded finite element meshes". *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 90 (5): 636–58. <https://doi.org/10.1002/nme.3339>.
- Bazilevs, Y., V. M. Calo, T. J. R. Hughes, e Y. Zhang. 2008. "Isogeometric Fluid-Structure Interaction: Theory, Algorithms, and Computations". *Computational Mechanics* 43 (1): 3–37. <https://doi.org/10.1007/s00466-008-0315-x>.
- Bazilevs, Y., M. -C. Hsu, e M. A. Scott. 2012. "Isogeometric fluid–structure interaction analysis with emphasis on non-matching discretizations, and with application to wind turbines". *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Higher Order Finite Element and Isogeometric Methods, 249–252 (dezembro): 28–41. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2012.03.028>.
- Belytschko, T., e T. Black. 1999. "Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing". *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 45 (junho): 601–20. [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-0207\(19990620\)45:5<601::AID-NME598>3.0.CO;2-S](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0207(19990620)45:5<601::AID-NME598>3.0.CO;2-S).
- Bićanić, Nenad. 2004. "Discrete Element Methods". In *Encyclopedia of Computational Mechanics*. John Wiley & Sons, Ltd. <https://doi.org/10.1002/0470091355.ecm006.pub2>.
- Brezzi, F., e M. Fortin. 1991. *Mixed and Hybrid Finite Element Methods*. New York. <https://www.springer.com/la/book/9781461278245>.
- Brooks, Alexander N., e Thomas J. R. Hughes. 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): 199–259. [https://doi.org/10.1016/0045-7825\(82\)90071-8](https://doi.org/10.1016/0045-7825(82)90071-8).

- Brown, Phillip P., e Desmond F. Lawler. 2003. "Sphere Drag and Settling Velocity Revisited". *Journal of Environmental Engineering* 129 (3): 222–31. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0733-9372\(2003\)129:3\(222\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9372(2003)129:3(222)).
- Campello, E. M. B. 2000. "Análise não-linear de perfis metálicos conformados a frio". Mestrado, São Paulo: Universidade de São Paulo.
- . 2015. "A Description of Rotations for DEM Models of Particle Systems". *Computational Particle Mechanics* 2 (2): 109–25. <https://doi.org/10.1007/s40571-015-0041-z>.
- . 2016. "Um modelo computacional para o estudo de materiais granulares". http://www.bdpi.usp.br/single.php?_id=002798009.
- . 2018. "A computational model for the simulation of dry granular materials". *International Journal of Non-Linear Mechanics* 106 (novembro): 89–107. <https://doi.org/10.1016/j.ijnonlinmec.2018.08.010>.
- Casagrande, Marcus V. S., José L. D. Alves, Carlos E. Silva, Fábio T. Alves, Renato N. Elias, e Alvaro L. G. A. Coutinho. 2017. "A hybrid FEM-DEM approach to the simulation of fluid flow laden with many particles". *Computational Particle Mechanics* 4 (abril): 213–27. <https://doi.org/10.1007/s40571-016-0102-y>.
- Cheng, Nian-Sheng. 2009. "Comparison of formulas for drag coefficient and settling velocity of spherical particles". *Powder Technology* 189 (3): 395–98. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2008.07.006>.
- Clift, Roland, John R. Grace, Martin E. Weber, e Martin F. Weber. 1978. *Bubbles, Drops, and Particles*. Academic Press.
- Couto, Luiz Felipe Marchetti do. 2016. "Arquitetura de computação paralela para resolução de problemas de dinâmica dos fluidos e interação fluido-estrutura." Text, Universidade de São Paulo. <https://doi.org/10.11606/D.3.2017.tde-21062017-113038>.
- Crowe, Clayton T., John D. Schwarzkopf, Martin Sommerfeld, e Yutaka Tsuji. 2011. *Multiphase Flows with Droplets and Particles, Second Edition*. CRC Press.
- Cundall, P. A., e O. D. L. Strack. 1979. "A discrete numerical model for granular assemblies". *Géotechnique* 29 (1): 47–65. <https://doi.org/10.1680/geot.1979.29.1.47>.
- Diaz-Goano, C., P. D. Minev, e K. Nandakumar. 2003. "A fictitious domain/finite element method for particulate flows". *Journal of Computational Physics* 192 (1): 105–23. [https://doi.org/10.1016/S0021-9991\(03\)00349-8](https://doi.org/10.1016/S0021-9991(03)00349-8).

- Donea, Jean, e Antonio Huerta. 2003. *Finite Element Methods for Flow Problems*. John Wiley & Sons.
- Duran, Jacques. 1997. *Sands, Powders, and Grains - An Introduction to the Physics of granulas matter*. New York: Springer Science & Business Media. <http://www.springer.com/cn/book/9780387986562>.
- Fernandes, A. C. S., H. C. Gomes, E. M. B. Campello, e P. M. Pimenta. 2017. "A Fluid-Particle Interaction Method for the Simulation of Particle-Laden Fluid Problems". In . Santa Catarina. https://www.researchgate.net/publication/321503938_A_Fluid-Particle_Interaction_Method_for_the_Simulation_of_Particle-Laden_Fluid_Problems.
- Fortes, A. F., D. D. Joseph, e T. S. Lundgren. 1987. "Nonlinear Mechanics of Fluidization of Beds of Spherical Particles". *Journal of Fluid Mechanics* 177 (abril): 467–83. <https://doi.org/10.1017/S0022112087001046>.
- Gerstenberger, A., e W. A. Wall. 2009. "An Embedded Dirichlet Formulation for 3D Continua". *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, n/a-n/a. <https://doi.org/10.1002/nme.2755>.
- Gerstenberger, Axel, e Wolfgang A. Wall. 2008a. "Enhancement of Fixed-Grid Methods towards Complex Fluid–Structure Interaction Applications". *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 57 (9): 1227–48. <https://doi.org/10.1002/fld.1782>.
- . 2008b. "An eXtended Finite Element Method/Lagrange multiplier based approach for fluid–structure interaction". *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Computational Methods in Fluid–Structure Interaction, 197 (19): 1699–1714. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2007.07.002>.
- GiD - *The personal pre and post processor* (versão 9.0.6). 2008. International Center for Numerical Methods in Engineering CIMNE. [//www.gidhome.com](http://www.gidhome.com).
- Gidaspow, Dimitri. 1994. *Multiphase Flow and Fluidization: Continuum and Kinetic Theory Descriptions*. Academic Press.
- Gingold, R. A., e J. J. Monaghan. 1977. "Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars | Monthly Notices of the Royal Astronomical Society | Oxford Academic". 1977. <https://academic.oup.com/mnras/article/181/3/375/988212/Smoothed-particle-hydrodynamics-theory-and>.

- Glowinski, Roland, Tsorng-Whay Pan, Todd I. Hesla, Daniel D. Joseph, e Jacques Periaux. 2000. "A distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method for the simulation of flow around moving rigid bodies: application to particulate flow". *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 184 (2): 241–67. [https://doi.org/10.1016/S0045-7825\(99\)00230-3](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(99)00230-3).
- Gomes, H. C. 2013. "Método dos elementos finitos com fronteiras imersas aplicado a problemas de dinâmica dos fluidos e interação fluido-estrutura." Text, Universidade de São Paulo. <http://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/3/3144/tde-26122013-150059/>.
- Gomes, H. C., e P. M. Pimenta. 2015. "Embedded Interface with Discontinuous Lagrange Multipliers for Fluid–Structure Interaction Analysis". *International Journal for Computational Methods in Engineering Science and Mechanics* 16 (2): 98–111. <https://doi.org/10.1080/15502287.2015.1009579>.
- Hughes, T. J. R. 1987. *The Finite Element Method: Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis*. New Jersey. <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1111/j.1467-8667.1989.tb00025.x>.
- Johnson, A. A., e T. E. Tezduyar. 1996. "Simulation of multiple spheres falling in a liquid-filled tube". *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 134 (3): 351–73. [https://doi.org/10.1016/0045-7825\(95\)00988-4](https://doi.org/10.1016/0045-7825(95)00988-4).
- Johnson, A. A., e T. E. Tezduyar. 1997. "3D Simulation of fluid-particle interactions with the number of particles reaching 100". *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 145 (3): 301–21. [https://doi.org/10.1016/S0045-7825\(96\)01223-6](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(96)01223-6).
- Johnson, A. A., e T. E. Tezduyar. 1999. "Advanced Mesh Generation and Update Methods for 3D Flow Simulations". *Computational Mechanics* 23 (2): 130–43. <https://doi.org/10.1007/s004660050393>.
- Johnson, K. L., e Kenneth Langstreth Johnson. 1987. *Contact Mechanics*. Cambridge University Press.
- Legay, A., J. Chessa, e T. Belytschko. 2006. "An Eulerian–Lagrangian method for fluid–structure interaction based on level sets". *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Fluid-Structure Interaction, 195 (17): 2070–87. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2005.02.025>.
- Lew, Adrian J, e Gustavo C Buscaglia. 2000. "A Discontinuous-Galerkin-Based Immersed Boundary Method", 30.

- Moës, Nicolas, Eric Béchet, e Matthieu Tourbier. 2006. "Imposing Dirichlet Boundary Conditions in the Extended Finite Element Method". *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 67 (12): 1641–69. <https://doi.org/10.1002/nme.1675>.
- Moës, Nicolas, John Dolbow, e Ted Belytschko. 1999. "A finite element method for crack growth without remeshing". *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 46 (setembro): 131–50. [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-0207\(19990910\)46:1<131::AID-NME726>3.0.CO;2-J](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0207(19990910)46:1<131::AID-NME726>3.0.CO;2-J).
- O'Sullivan, Catherine. 2011. *Particulate Discrete Element Modelling: A Geomechanics Perspective*. London ; New York: CRC Press.
- Peskin, Charles S. 1972. "Flow patterns around heart valves: A numerical method". *Journal of Computational Physics* 10 (2): 252–71. [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(72\)90065-4](https://doi.org/10.1016/0021-9991(72)90065-4).
- . 1977. "Numerical analysis of blood flow in the heart". *Journal of Computational Physics* 25 (3): 220–52. [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(77\)90100-0](https://doi.org/10.1016/0021-9991(77)90100-0).
- Pimenta, P. M., E. M. B. Campello, e P. Wriggers. 2008. "An Exact Conserving Algorithm for Nonlinear Dynamics with Rotational DOFs and General Hyperelasticity. Part 1: Rods". *Computational Mechanics* 42 (5): 715–32. <https://doi.org/10.1007/s00466-008-0271-5>.
- Pimenta, Paulo M., e Eduardo MB Campello. 2001. "Geometrically nonlinear analysis of thin-walled space frames". In *Proceedings of the Second European Conference on Computational Mechanics, II ECCM, Cracow, Poland*.
- Pöschel, Thorsten, e T. Schwager. 2005. *Computational Granular Dynamics: Models and Algorithms*. Springer Science & Business Media.
- Radjai, Farhang, e Frédéric Dubois. 2011. *Discrete-element modeling of granular materials*. Wiley-Iste. <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00691805>.
- Rodrigues, Olinde. 1840. "Des lois géométriques qui régissent les déplacements d'un système solid dans l'espace, et de la variation des coordonnées provenant de ces déplacements consideres indépendamment des causes qui peuvent les produire". *Journal de mathématiques pures et appliquées*, 1840, 5 edição.
- Rüberg, T., e F. Cirak. 2012. "Subdivision-stabilised immersed b-spline finite elements for moving boundary flows". *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 209–212 (fevereiro): 266–83. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2011.10.007>.

- Sanders, Jessica D., Tod A. Laursen, e Michael A. Puso. 2012. "A Nitsche Embedded Mesh Method". *Computational Mechanics* 49 (2): 243–57. <https://doi.org/10.1007/s00466-011-0641-2>.
- Sawada, Tomohiro, e Akira Tezuka. 2010. "High-Order Gaussian Quadrature in X-FEM with the Lagrange-Multiplier for Fluid–Structure Coupling". *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 64 (10–12): 1219–39. <https://doi.org/10.1002/fld.2343>.
- . 2011. "LLM and X-FEM Based Interface Modeling of Fluid–Thin Structure Interactions on a Non-Interface-Fitted Mesh". *Computational Mechanics* 48 (3): 319–32. <https://doi.org/10.1007/s00466-011-0600-y>.
- Schäfer, M., S. Turek, F. Durst, E. Krause, e R. Rannacher. 1996. "Benchmark Computations of Laminar Flow Around a Cylinder". In *Flow Simulation with High-Performance Computers II*, organizado por Ernst Heinrich Hirschel, 48:547–66. Wiesbaden: Vieweg+Teubner Verlag. https://doi.org/10.1007/978-3-322-89849-4_39.
- Teramoto, Elias Hideo, Everton de Oliveira, Chang Hung Kiang, Alex Tadeu de Almeida Waldmann, Ricardo Luiz de Campos Vaqueiro, e Helder Soares Bittencourt Santos. 2014. "Simulação Numérica Multifásica de Fluido de Perfuração e de Transporte de Benzeno em Poço de Petróleo na Bahia, Brasil". *Águas Subterrâneas* 28 (1). <https://doi.org/10.14295/ras.v28i1.27431>.
- Tezduyar, T. E., M. Behr, e J. Liou. 1992. "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): 339–51. [https://doi.org/10.1016/0045-7825\(92\)90059-S](https://doi.org/10.1016/0045-7825(92)90059-S).
- Tezduyar, T. E., M. Behr, S. Mittal, e J. Liou. 1992. "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): 353–71. [https://doi.org/10.1016/0045-7825\(92\)90060-W](https://doi.org/10.1016/0045-7825(92)90060-W).
- Tezduyar, Tayfun E, e Yasuo Osawa. 2000. "Finite element stabilization parameters computed from element matrices and vectors". *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 190 (3): 411–30. [https://doi.org/10.1016/S0045-7825\(00\)00211-5](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(00)00211-5).
- Tezduyar, Tayfun E., Sunil Sathe, Matthew Schwaab, Jason Pausewang, Jason Christopher, e Jason Crabtree. 2008. "Fluid–Structure Interaction Modeling of

- Ringsail Parachutes". *Computational Mechanics* 43 (1): 133–42. <https://doi.org/10.1007/s00466-008-0260-8>.
- Tsuji, Y., T. Tanaka, e S. Yonemura. 1998. "Cluster patterns in circulating fluidized beds predicted by numerical simulation (discrete particle model versus two-fluid model)". *Powder Technology* 95 (3): 254–64. [https://doi.org/10.1016/S0032-5910\(97\)03349-4](https://doi.org/10.1016/S0032-5910(97)03349-4).
- Vargas, Marina, e Marco André Argenta. 2015. "Uma representação do fluxo sanguíneo pulsátil em artérias ou veias usando lattice Boltzmann". *Revista Brasileira de Ensino de Física* 37 (4): 4304-1-4304–12. <https://doi.org/10.1590/S1806-11173741959>.
- Wellmann, Christian, e P. Wriggers. 2011. *A Two-Scale Model of Granular Materials Using a Coupled DE-FE Approach*. Univ., Inst. für Kontinuumsmechanik.
- Yu, A. B., e B. H. Xu. 2003. "Particle-scale Modelling of Gas–Solid Flow in Fluidisation". *Journal of Chemical Technology & Biotechnology* 78 (2-3): 111–21. <https://doi.org/10.1002/jctb.788>.
- Yu, A.B. 2004. "Discrete Element Method: An Effective Way for Particle Scale Research of Particulate Matter". *Engineering Computations* 21 (2/3/4): 205–14. <https://doi.org/10.1108/02644400410519749>.
- Yu, Zhaosheng. 2005. "A DLM/FD method for fluid/flexible-body interactions". *Journal of Computational Physics* 207 (1): 1–27. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2004.12.026>.
- Yuu, S., K. Nohara, D. Futai, e T. Umekage. 1997. "Numerical simulation of air and particle motions in turbulent fluidized bed using DSMC method". *KAGAKU KOGAKU RONBUNSHU* 23 (6): 811–19.
- Zhu, H. P., Z. Y. Zhou, R. Y. Yang, e A. B. Yu. 2007. "Discrete particle simulation of particulate systems: Theoretical developments". *Chemical Engineering Science*, Frontier of Chemical Engineering - Multi-scale Bridge between Reductionism and Holism, 62 (13): 3378–96. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2006.12.089>.
- Zienkiewicz, Olek C., Robert L. Taylor, e P. Nithiarasu. 2013. *The Finite Element Method for Fluid Dynamics*. 7 edition. Oxford: Butterworth-Heinemann.
- Zilian, A., e T.-P. Fries. 2009. "A Localized Mixed-Hybrid Method for Imposing Interfacial Constraints in the Extended Finite Element Method (XFEM)". *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 79 (6): 733–52. <https://doi.org/10.1002/nme.2596>.

- Zilian, A., e A. Legay. 2008. "The enriched space-time finite element method (EST) for simultaneous solution of fluid-structure interaction". *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 75 (julho): 305–34. <https://doi.org/10.1002/nme.2258>.
- Zohdi, T. I. 2007. *An Introduction to Modeling and Simulation of Particulate Flows*. Berkeley: SIAM.