FABIO KENJI MOTEZUKI

Desenvolvimento de um sistema para simulação do escoamento fluidos
não-newtonianos na engenharia civil por meio do método de partículas
Moving Particle Semi-implicit (MPS)

São Paulo
2019

FABIO KENJI MOTEZUKI

Desenvolvimento de um sistema para simulação do escoamento fluidos
não-newtonianos na engenharia civil por meio do método de partículas
Moving Particle Semi-implicit (MPS)

Tese apresentada à Escola Politécnica
da Universidade de São Paulo para
obtenção do título de Doutor em
Ciências

Orientador: Prof. Dr. Cheng Liang-Yee

São Paulo
2019

FABIO KENJI MOTEZUKI

Desenvolvimento de um sistema para simulação do escoamento fluidos
não-newtonianos na engenharia civil por meio do método de partículas
Moving Particle Semi-implicit (MPS)

Versão Corrigida

(Versão original encontra-se na unidade que aloja
o Programa de Pós-graduação)

Tese apresentada à Escola Politécnica
da Universidade de São Paulo para
obtenção do título de Doutor em
Ciências

Área de concentração: Modelagem e
Simulação Computacional

Orientador: Prof. Dr. Cheng Liang-Yee

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

Motezuki, Fabio Kenji

Desenvolvimento de um sistema para simulação do escoamento fluidos não-newtonianos na engenharia civil por meio do método de partículas Moving Particle Semi-implicit (MPS) / F. K. Motezuki -- versão corr. -- São Paulo, 2019. 110 p.

Tese (Doutorado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia de Construção Civil.

1.MECÂNICA DOS FLUÍDOS COMPUTACIONAL 2.DINÂMICA DOS FLUÍDOS 3.HIDRODINÂMICA 4.TRANSFERÊNCIA DE CALOR I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia de Construção Civil II.t.

RESUMO

O concreto é um dos materiais de construção civil mais versáteis, podendo se adaptar a formas diversas quando em seu estado fresco e resistindo a grandes cargas de compressão em seu estado rígido. No entanto, em estruturas mais densamente armadas ou com geometrias mais complexas, pode-se apresentar dificuldades para a moldagem, causando falhas no preenchimento da forma, o que reduz a capacidade resistente da peça e sua vida útil. Neste trabalho foi utilizado o método de partículas lagrangeanas *Moving Particle Semi-Implicit* (MPS) como base para um simulador para o estudo do comportamento do escoamento de pastas e argamassas cujo comportamento pode se aproximado por modelos reológicos como Bingham e Herschel-Bulkley. Foram propostos módulos para a simulação da viscosidade não-newtoniana, variação térmica no processo de cura e modelagem de turbulência. Para modelar a variação de viscosidade de um fluido não-newtoniano foi utilizado o modelo de Herschel-Bulkley. O modelo de Herschel-Bulkley possui uma singularidade para taxas de deformação muito pequenas, que resulta em valores de viscosidade infinitas, dificuldade contornada pela solução proposta por Papanastasiou (1987). Na modelagem térmica foram analisados dois modelos de dissipação, sendo um original do método e outro calculado por meio do divergente do gradiente utilizando os modelos de partículas e que teria melhores resultados para o cálculo da dissipação térmica. Também foi modelada a convecção térmica, utilizando para isso a hipótese de Boussinesq. A reação de hidratação do concreto foi modelada utilizando uma equação do tipo Hill para representar a elevação de temperatura obtida por meio um ensaio adiabático. Para complementar as simulações, foi utilizado o modelo de turbulência *Detached Eddy Simulation* (DES), baseado no método *Large Eddy Simulation* (LES), que utiliza um modelo de parede para simular a interação do fluido. Para a implementação deste modelo de turbulência foi proposto um algoritmo para o cálculo da distância da partícula de fluido à parede. Este algoritmo utiliza estruturas de dados já existentes no método de partículas de modo que sua execução requer muito menos recursos que a busca binária. Apesar do trabalho ter se guiado pela simulação do concreto fresco, que é um material particularmente complexo, outros escoamentos encontrados na engenharia civil também podem ser beneficiados pelo método, como os estudos do

escoamento em sistemas prediais de água e esgoto, do escoamento e prevenção de erosão em rios e córregos, do escorregamento de encostas, dos reatores para depuração de esgotos, entre outros.

Palavras-Chave: CFD. Simulação numérica. Método de partículas. Moving Particle Semi-implicit (MPS). Fluidos não-Newtonianos. Difusão térmica. Escoamento turbulento.

ABSTRACT

The concrete is one of the more versatile civil construction materials, it can adapt to various forms when in its fresh state while resisting to high compression loads in its rigid state. However, in some cases like densely reinforced concrete structures and complex geometry concrete structures can present issues to the casting, and failure in proper form filling can occur. These failures can reduce the resistance and the lifetime of the structure. This work used a simulator based on the lagrangean particle method called Moving Particle Semi-Implicit (MPS) to study the concrete behavior in its distinctive characteristics. Also, this work proposed modules to simulate the non-Newtonian viscosity, the thermal process of concrete cure and to model the turbulent flow. To model the variation of viscosity of a non-Newtonian fluid, the Herschel-Bulkley model, which relates the shear stress with the strain rate, was applied. The Herschel-Bulkley model has a singularity at low strain rates, which results in infinite viscosities. To overcome this issue, Papanastasiou (1987) proposed a modification in the model in order to eliminate the singularity. For the thermal modeling, two models for thermal dissipation were compared, the original method and other calculated from the divergence of gradient using the differential operators for the particle model and that could present improved results for the thermal dissipation calculation. Also, the thermal convection was modeled using the Boussinesq hypothesis. The hydration reaction of the concrete was modeled using a Hill type equation to reproduce the temperature elevation. In addition, a Detached Eddy Simulation (DES) based turbulence model with a simple wall model in the interaction of wall and fluid was applied in the simulations. To improve the turbulence model, an algorithm to calculate the distance between fluid and the nearest wall particle was proposed. The algorithm uses already calculated information from particles so that the execution requires much less resources than a binary search. Although the work has been focused on to the modeling of fresh concrete simulation, which is a particularly complex material, other flows found in civil engineering can also be benefited by the method, such as studies of drainage in water and sewage systems, drainage and prevention of erosion into rivers and streams, prevention and damage mitigation of landslides, reactors for sewage treatment among many others.

Keywords: CFD. Numerical Simulation. Particle methods. Moving Particle Semi-Implicit (MPS). Non-Newtonian Fluids. Thermal diffusion. Turbulent Flow.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Fluxograma do método MPS.....	24
Figura 2 – Um exemplo do histórico do valor do pnd_{avg} obtido da simulação de um caso de escoamento em uma cavidade quadrada impulsionado pela tampa.....	26
Figura 3 – Distribuição das partículas próxima da parede, destacando o raio efetivo da partícula de parede i	27
Figura 4 – Processo de espelhamento mostrando a partícula <i>dummy</i> i e a partícula virtual i'	27
Figura 5 – Etapas do influxo de partículas no domínio computacional. As partículas brancas representam as <i>dummies</i> , as partículas amarelas representam as partículas de influxo e as azuis as partículas de fluido.....	28
Figura 6 – Detalhes da condição de contorno periódica representada pela linha tracejada e a aplicação de um operador diferencial discreto para a partícula selecionada.....	31
Figura 7 – Região de condicionamento do fluxo $[x_0, x_1]$	32
Figura 8 – Elevação adiabática da temperatura segundo a equação de Hill com parâmetros $a=0,92$, $c=1,86$ e $\Delta T_{\infty}^{ad}=28,1^{\circ}\text{C}$	35
Figura 9 – Diagrama do comportamento da viscosidade aparente e a modelagem bi-linear para baixas taxas de deformação para um fluido do tipo Herschel-Bulkley.....	37
Figura 10 – Comparação de curvas tensão cisalhamento de um fluido com tensão de escoamento 15 Pa e viscosidade plástica 50 Pa.s utilizando o modelo de Bingham e o modelo Bingham-Papanastasiou com valores de $m=100$, 200 e 1000 s.....	38
Figura 11 – Variação do passo de tempo máximo de acordo com os critérios de estabilidade (a) CFL e (b) difusividade.....	39
Figura 12 – Fluxograma do processo de mapeamento da célula de parede mais próxima de uma célula do domínio computacional.....	45
Figura 13 – Caso onde a célula de parede mais próxima não contém a partícula de parede mais próxima.....	46

Figura 14 – Detalhe da distribuição de temperatura no tempo 10s	48
Figura 15 – Comparação dos resultados obtidos pelo MPS e os resultados analíticos.....	49
Figura 16 – Condição inicial mostrando o perfil de temperatura senoidal	50
Figura 17 – Resultados (a) e (c) utilizam a formulação original do laplaciano (KOSHIZUKA; OKA, 1996) e resultados (b) e (d) utilizam o laplaciano de Zhang et al. (2006)	50
Figura 18 – Distribuição de temperatura na condição inicial (a) e após 10s (b) do caso simulando uma descontinuidade de temperatura.....	51
Figura 19 – Perfil de temperatura em função da posição horizontal. Resultados com boa concordância e pequeno desvio próximo da região da descontinuidade térmica.	53
Figura 20 – (a) Linhas mostram o caminho percorrido por algumas partículas sorteadas (b) Distribuição de temperatura e curvas isotérmicas.	55
Figura 21 – Desenho esquemático dos casos 1, 2 e 3.....	56
Figura 22 – Lançamento do concreto no caso 3	57
Figura 23 – Curvas isotérmicas para os casos no tempo $t=450s$	59
Figura 24 – Magnitude do gradiente de temperatura na seção central das formas para os três casos $t=600s$	60
Figura 25 – Geometria e dimensões do caso (unidade: cm)	61
Figura 26 – (a) Distribuição das velocidades no canal e (b) perfil de velocidade medido comparado com o perfil analítico	63
Figura 27 – (a) Perfil da taxa de deformação e (b) perfil da viscosidade aparente. ..	63
Figura 28 – Geometria do <i>dam break</i> (unidade: cm).....	64
Figura 29 – Resultados numéricos e experimentais Leite (2009) e resultados do MPS para o instante de tempo $t=0,4 s$ e altura $h = 8 cm$	65
Figura 30 – Resultados numéricos e experimentais Leite (2009) e resultados do MPS para o instante de tempo $t=0,4 s$ e altura $h = 10 cm$	66
Figura 31 – Resultados numéricos e experimentais Leite (2009) e resultados do MPS para o instante de tempo $t=0,4 s$ e altura $h = 12 cm$	66
Figura 32 – Frentes viscoplásticas no instante $t=0,4s$ para taxas de deformação crítica 0,05; 0,1; e $1,0 s^{-1}$	67

Figura 33 – Frentes viscoplásticas no instante $t=0,4s$ para taxas de deformação crítica 0,2; 0,4; 0,6 e 0,8 s^{-1} .	68
Figura 34 – Percentual de partículas com taxa de deformação abaixo da taxa de deformação crítica em função do tempo.	69
Figura 35 – Comparação entre os resultados de Cremonesi et al. (2010) à esquerda e obtidos com o MPS para resolução de 2mm e $\dot{\gamma}_{cr}=0,03 s^{-1}$ à direita	71
Figura 36 – Diagrama do caso de escoamento entre placas planas utilizado na avaliação do cálculo implícito da viscosidade.	72
Figura 37 – Resultados do teste de convergência para os métodos implícito e explícito.	73
Figura 38 – Consumo de tempo dos métodos implícito e explícito para a resolução $h/l_0=40$.	74
Figura 39 – Geometrias utilizadas nos testes, em verde e marrom são partículas <i>dummy</i> , em vermelho e amarelo são partículas de parede e em azul são partículas de fluido. Amarelo e marrom correspondem a partículas do segundo material. Medidas em centímetros.	75
Figura 40 – (a) Detalhe da distribuição de partículas no caso H, em preto são as partículas de parede e em cinza as partículas <i>dummy</i> . (b) Valores de distância entre a partícula de fluido e a partícula de parede mais próxima, calculados para as partículas destacadas na figura da esquerda.	76
Figura 41 – Valores da distância à parede mais próxima, calculados para as partículas destacadas na figura da esquerda. Na figura em preto são as partículas de parede, em cinza as partículas <i>dummy</i> .	77
Figura 42 – Detalhe da junção entre os canais horizontal e vertical. Na tabela as linhas destacadas estão sob influência da parede horizontal e que correspondem as partículas mais à direita da seleção.	78
Figura 43 – Detalhe da seção inclinada, observa-se que os valores de distância à parede mais próxima das partículas destacadas são múltiplos de $0,01\sqrt{2}$	79
Figura 44 – Na esquerda, distribuição do valor de y_p nas partículas e, na direita, curvas com y_p constante.	80

Figura 45 – Detalhe das partículas entre dois materiais distintos. Em escala de cinza estão as partículas de parede e <i>dummy</i> para cada um dos sólidos.....	81
Figura 46 – As curvas de igual distância a parede acompanham a superfície do obstáculo.	81
Figura 47 – À esquerda, geometria e dimensões do caso, à direita, discretização com partículas, onde em vermelho são as partículas <i>dummy</i> , em verde as partículas de parede e em azul as partículas de fluido. As paredes laterais frontal e traseira foram removidas para melhor visualização.	82
Figura 48 – Visualização da distância até a parede mais próxima em tempos distintos.....	83
Figura 49 – Destaque da seção utilizada na verificação do algoritmo no caso de dam break.....	84
Figura 50 – Detalhe das partículas ao redor do pilar, em destaque as partículas com os dados mostrados na tabela.	84
Figura 51 – Geometria e dimensões do caso (unidade: metros).....	86
Figura 52 – Histórico de tempo do pnd_{avg} para um escoamento de Poiseuille com $Re=64.600$	86
Figura 53 – Perfil de velocidade para o escoamento de Poiseuille, $Re=64.600$	87
Figura 54 – Geometria do caso e seções de análise	88
Figura 55 – Velocidade horizontal na seção 1 e velocidade vertical na seção 2 pra $Re=3.200$ e distância entre partículas de 3mm, 2mm, 1mm e 0,5mm e resolução 50, 75, 150 e 300 respectivamente.	89
Figura 56 – Linhas de fluxo para $Re=3.200$ e distância entre partículas de 3.0mm, 2.0mm, 1.0mm e 0.5mm, resoluções L/l_0 de 50, 75, 150 e 300 respectivamente.	90
Figura 57 – Comparação dos perfis de velocidade: em azul MPS com modelo de turbulência, em vermelho MPS sem modelo de turbulência e em verde os resultados obtidos por Ghia, Ghia e Shin (1982)	91
Figura 58 – Comparação das linhas de fluxo: a esquerda obtidas da simulação com MPS e a direita as linhas obtidas por Ghia, Ghia e Shin(1982) ($L/\Delta x=129$ para o $Re=3.200$ e $L/\Delta x =257$ para o $Re=10.000$)	92

Figura 59 – Geometria e parâmetros do caso	93
Figura 60 – Histórico da pressão no ponto de estagnação a montante do cilindro para $Re=5.000$ e resolução $40 D_{cil}/l_0$	94
Figura 61 – Período de desprendimento de vórtices para o caso com $Re=5.000$ e resoluções de 10, 20, 40 e $80 D_{cil}/l_0$	95
Figura 62 – Distribuição da magnitude de velocidade e da viscosidade total (fluido + viscosidade turbulenta) para $Re=5000$, resolução $40 D_{cil}/l_0$ e $t=20s$	96
Figura 63 – Gráfico de dependência entre os números de Strouhal x Reynolds obtido por Blevins (1990) com os resultados do MPS, representado pelos pontos azuis, sobrepostos para a resolução de $40 D_{cil}/l_0$	97
Figura 64 – Geometria do canal modelado baseado no “canal F”	98
Figura 65 – Teste de convergência para a abertura. (a) Comparação do coeficiente de descarga com o valor teórico, (b) Diferença em relação ao caso com maior resolução	99
Figura 66 – Comparação da do coeficiente de descarga com e sem modelo de turbulência em relação à equação teórica, resolução $h/l_0=20$	100
Figura 67 – Teste de convergência de $Fr1$ (a) em função da resolução e (b) diferença de $Fr1$ em relação ao valor para a maior resolução	100
Figura 68 – Influência do modelo de turbulência na relação de profundidades d_2/d_1 , resolução $h/l_0=20$	101
Figura 69 – Influência do modelo de turbulência no comprimento do ressalto com a profundidade d_1 , resolução $h/l_0=20$	102
Figura 70 – Influência do modelo de turbulência na perda de energia em relação a energia inicial, resolução $h/l_0=20$	103

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Descrição e dimensão dos casos	56
Tabela 2 – Parâmetros para o modelo reológico Herschel-Bulkley	62
Tabela 3 – Parâmetros para o modelo reológico Herschel-Bulkley. Fonte: Leite (2009).	64
Tabela 4 – Quantidade de partículas para cada caso simulado	65
Tabela 5 – Análise de estabilidade	69
Tabela 6 – Desvio no avanço da frente de onda para cada resolução utilizada e taxa de deformação crítica $\dot{\gamma}_{cr}=0,2$ e $0,03 \text{ s}^{-1}$	70
Tabela 7 – Relação entre a viscosidade e o número de Reynolds das simulações ..	93
Tabela 8 – Custos computacionais das 5 resoluções testadas	94

LISTA DE SÍMBOLOS

$\vec{u}$	vetor velocidade
t	tempo
ρ	massa específica
P	pressão
ν	viscosidade cinemática
$\vec{f}$	forças externas
$w(\vec{r}_{ij})$	função peso
$\vec{r}_i$	vetor posição da partícula i
$\vec{r}_j$	vetor posição da partícula j
r_e	raio efetivo
l_0	distância entre partículas na condição inicial
pnd	densidade de número de partículas
pnd_i	densidade de número de partículas da partícula i
ϕ	função escalar genérica
$\vec{\phi}$	função vetorial genérica
dim	número de dimensões
pnd^0	densidade de número de partículas na condição inicial
λ	parâmetro estatístico para o cálculo do laplaciano
pnd_i^*	densidade de número de partículas calculado na etapa explícita
Δt	passo de tempo
pnd_{avg}	densidade média de número de partículas
$\vec{n}$	vetor normal
i'	partícula virtual
$\vec{u}_{i'}$	velocidade da partícula virtual
β_{fs}	valor limite para o critério de detecção de superfície livre usando pnd
N	número de partículas vizinhas
N^0	número de partículas vizinhas na condição inicial
N_i^*	número de partículas vizinhas calculado na etapa explícita
γ_{fs}	valor limite para o critério de detecção de superfície livre usando N

σ_i	<i>Neighborhood Particles Centroid Deviation</i>
x_{ij}	Componente da distância entre as partículas i e j na direção x
y_{ij}	Componente da distância entre as partículas i e j na direção y
z_{ij}	Componente da distância entre as partículas i e j na direção z
δ_{fs}	valor limite para o critério de detecção de superfície livre usando σ_i
U	perfil velocidade determinada
a_0	intensidade da aceleração para equação de fator de forma
T	temperatura
α	difusividade térmica
Q	fonte/sorvedouro de temperatura
β	coeficiente de expansão térmica
g	gravidade
T_r	temperatura de referência da aproximação de Boussinesq
Ra	número de Rayleigh
L	comprimento característico
ΔT^{ad}	elevação de temperatura adiabática
ΔT_{∞}^{ad}	elevação de temperatura adiabática no tempo infinito
a	parâmetro numérico para ajuste da equação do tipo Hill
c	parâmetro numérico para ajuste da equação do tipo Hill
$\mathbb{T}$	tensor das tensões viscosas
η	viscosidade aparente
$\mathbb{D}$	tensor das taxas de deformação
τ_0	tensão de escoamento
K	índice de consistência
$\dot{\gamma}$	taxa de deformação
n	índice Power-Law
μ_p	viscosidade plástica
m	parâmetro de controle do crescimento exponencial da tensão no modelo de Papanastasiou
C	critério de estabilidade de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL)
D	critério de estabilidade para a difusão
ν_{eff}	viscosidade efetiva

ϕ	variável da equação governante
$\bar{\phi}$	contribuição da variável na escala da partícula
ϕ_{SPS}	contribuição da variável na escala da subpartícula
$\mathbb{R}$	tensor de tensões residuais
ν_e	viscosidade dos turbulenta
u_τ	velocidade de fricção
$\tilde{u}_p$	componente tangencial da velocidade próxima da parede
y_p	distância à parede
κ	constante de von Kármán
B	parâmetro do modelo LES Smagorinsky padrão
τ_w	tensão de fricção na parede
y^+	distância adimensional à parede
N_f	número de partículas de fluido
N_s	número de partículas de sólido
δl	dimensão da célula
k	condutividade térmica
C_v	calor específico
T_{bar}	Temperatura da barra
T_l	Temperatura na extremidade esquerda
Ra_c	número de Rayleigh crítico
$T_{RB,S}$	temperatura na placa superior na instabilidade de Rayleigh-Bénard
$T_{RB,I}$	temperatura na placa inferior na instabilidade de Rayleigh-Bénard
L_{obst}	comprimento do obstáculo
D_{cil}	diâmetro do cilindro
H	nível do tanque de carga constante
h	altura da abertura
l	comprimento do canal
d_1	altura da água a montante do ressalto
d_2	altura da água a jusante do ressalto
q	vazão de entrada
Fr	número de Froude
u_{caract}	velocidade característica do escoamento

Cd	coeficiente de descarga
L_{jump}	comprimento do ressalto
E_L	perda de energia
E_I	energia inicial

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	18
1.1 OBJETIVOS	21
2 METODOLOGIA	22
2.1 O MÉTODO <i>MOVING PARTICLE SEMI-IMPLICIT</i> (MPS).....	22
2.2 DENSIDADE MÉDIA DE NÚMERO DE PARTÍCULAS PARA ESCOAMENTOS CONFINADOS	25
2.3 CONDIÇÕES DE CONTORNO.....	26
2.3.1 Condição de contorno de parede	26
2.3.2 Condição de contorno de influxo	28
2.3.3 Condição de contorno de superfície livre	28
2.3.3.1 Koshizuka e Oka (1996)	28
2.3.3.2 Lee et al. (2011)	29
2.3.3.3 <i>Neighborhood Particles Centroid Deviation</i> (NPCD) (TSUKAMOTO; CHENG; MOTEZUKI, 2016).....	30
2.3.4 Condição de contorno de periodicidade	31
2.3.5 Condicionador de fluxo	31
2.4 ALGORITMO DE TROCAS TÉRMICAS.....	33
2.4.1 Aproximação de Boussinesq	33
2.4.2 Condição de contorno de parede isotérmica e adiabática	34
2.4.3 Variação térmica do concreto	34
2.5 MODELAGEM DE FLUIDOS NÃO-NEWTONIANOS.....	35
2.5.1 Modelo bi-linear	36
2.5.2 Modelo reológico modificado de Papanastasiou (1987).....	37
2.5.3 Cálculo implícito do termo viscoso	38
2.6 MODELAGEM DE TURBULÊNCIA.....	41
2.6.1 Lei de parede	42
2.6.2 Algoritmo de busca da partícula de parede mais próxima	43
3 RESULTADOS DE VALIDAÇÃO	47
3.1 ESCOAMENTOS COM TROCAS TÉRMICAS.....	47
3.1.1 Condução térmica unidirecional em uma barra	47
3.1.2 Condução térmica bidimensional em uma placa quadrada	49

3.1.3 Trocas térmicas em um fluido com descontinuidade térmica	51
3.1.4 Instabilidade de Rayleigh-Bénard	53
3.1.5 Reação exotérmica.....	55
3.1.5.1 Convergência	57
3.1.5.2 Resultados	60
3.2 ESCOAMENTO DE FLUIDO NÃO-NEWTONIANO	61
3.2.1 Escoamento entre placas planas paralelas	61
3.2.2 Dam Break.....	64
3.2.2.1 Convergência	65
3.2.2.2 Resultados	67
3.2.3 Caixa L.....	70
3.2.4 Validação do Cálculo implícito do termo viscoso	71
3.2.4.1 Teste de convergência	72
3.2.4.2 Medição do tempo de processamento consumido	73
3.3 BUSCA DE PARTÍCULA DE PAREDE MAIS PRÓXIMA 2D.....	74
3.3.1 Caso H.....	75
3.3.2 Caso Z	78
3.3.3 Caso com dois corpos	80
3.4 BUSCA DA PARTÍCULA DE PAREDE MAIS PRÓXIMA 3D.....	82
3.5 ESCOAMENTO TURBULENTO.....	84
3.5.1 Escoamento de Poiseuille turbulento.....	85
3.5.2 Escoamento turbulento em uma cavidade quadrada impulsionado pela tampa.....	87
3.5.2.1 Convergência	88
3.5.2.2 Resultados	90
3.5.3 Escoamento ao redor de um cilindro	92
3.5.3.1 Convergência	93
3.5.3.2 Dependência do Número de Strouhal	95
3.5.4 Ressalto hidráulico	97
3.5.4.1 Teste de convergência	98
3.5.4.2 Resultados	100
4 CONCLUSÕES	104
REFERÊNCIAS.....	107

1 INTRODUÇÃO

O concreto, como material de construção, é um dos mais versáteis e utilizados no mundo. Sua versatilidade se deve, em grande parte, por ele ser facilmente conformável quando no estado fresco e a grande resistência à compressão no estado sólido. Nas estruturas, sua grande resistência à compressão é associada a resistência à tração do aço, produzindo uma estrutura de alta resistência, razoavelmente barata, de fácil produção e com boa adaptabilidade a exigências arquitetônicas.

Como material de estudo ele é complexo por ser reativo, mudando rapidamente suas características com o tempo desde o início do processo de hidratação do cimento, por possuir uma grande variação em suas características, conforme a dosagem adotada para os seus constituintes, e também por sofrer a influência de variáveis ambientais como a temperatura ambiente, umidade, vento e incidência de radiação solar. Em geral, o concreto é composto por três componentes sólidos em escalas de dimensão bem distintas: o cimento na escala de 10 a 100 micrometros, a areia na escala de 100 a 1000 micrometros e a brita na escala de 1000 a 10000 micrometros (ALFERES FILHO et al., 2016).

No escoamento do concreto, além destas variáveis e por seu comportamento não-newtoniano, têm-se como variáveis a velocidade do escoamento, a complexidade da forma a ser preenchida além da densidade e posição da armadura.

Para a modelagem numérica é um desafio, as escalas de interação variam desde o microscópico na interação molecular entre os componentes do concreto, a separação das fases, até a macro escala onde ocorrem colisões entre os agregados graúdos, a interferência da armadura e do molde no processo de concretagem. Com esta amplitude de escalas, seria inviável modelar cada um dos elementos do concreto em sua escala natural para uma aplicação de engenharia, portanto faz-se necessário o uso de algumas hipóteses simplificadoras e técnicas de modelagem para simular o escoamento do concreto fresco. Atualmente estas técnicas podem ser divididas em três famílias (ROUSSEL et al., 2007): simulação de fluidos homogêneos, modelagem numérica do escoamento de partículas discretas e técnicas numéricas que permitem a simulação de partículas suspensas em fluido.

Neste trabalho foi desenvolvido um sistema de simulação computacional baseado no método de partículas *Moving Particle Semi-implicit* (MPS) com a implementação de módulos básicos para a reprodução, de forma simplificada, do escoamento de fluidos com características reológicas variadas.

O método MPS, proposto por Koshizuka e Oka (1996) para escoamentos incompressíveis com superfície livre, é um método sem malha onde o domínio espacial é discretizado utilizando partículas e as equações governantes são resolvidas em sua forma lagrangeana, ou seja, a advecção é considerada pelo próprio movimento das partículas, o que elimina o problema da difusão numérica presente nos métodos de malha.

Na última década, tendo em vista a facilidade do método para rastrear a superfície livre submetida a grandes deformações, fragmentação e junção, e de trabalhar com contornos complexos e móveis, o método foi extensamente aplicado nos estudos de hidrodinâmica não linear (SHIBATA; KOSHIZUKA; OKA, 2004; SHIBATA et al., 2012; TSUKAMOTO; CHENG; NISHIMOTO, 2011).

Por outro lado, nos últimos anos, a flexibilidade do método MPS permitiu a sua aplicação na modelagem de escoamentos com múltiplos fluidos (SHAKIBAEINIA; JIN, 2012), fenômenos multifísicos como acidentes severos em reatores nucleares (CHEN et al., 2014; MORITA et al., 2011), rompimento de jatos de fluido (SHIBATA; KOSHIZUKA; OKA, 2004), escoamento de jatos incidentes em superfícies (TANG; WAN, 2015), interação fluido-estrutura e hidroelasticidade (AKIMOTO, 2013; AMARO JUNIOR; CHENG, 2013), geometrias complexas como no caso da forja de peças de alumínio (REGMI et al., 2015), além de aplicações na área de computação gráfica (KOSHIZUKA, 2011) e aplicações em hidráulica como escoamento em canais abertos (FU; JIN, 2013; SHAKIBAEINIA; JIN, 2011), escoamento sobre vertedouros ogivais (FADAFAN; KERMANI, 2015) e escadas para peixes (XU; JIN, 2014).

Como ponto negativo o método possui um alto custo computacional, no entanto este ponto é amenizado com o avanço da capacidade de processamento dos computadores e com a melhoria e otimização dos algoritmos implementados.

Com estas características, o método MPS se mostra interessante para a aplicação na engenharia civil, onde diversas áreas podem se beneficiar das

vantagens apresentadas. Entre elas, e um dos focos desta pesquisa, é a simulação do escoamento do concreto durante o processo de concretagem.

Como passo inicial do desenvolvimento de um sistema mais complexo de simulação numérico-computacional baseado no método de partículas MPS, o concreto é modelado como um fluido homogêneo não-newtoniano, abrangendo uma família de concretos auto adensáveis, grautes e argamassas finas em regimes de escoamento. Ao mesmo tempo, para simplificar o processo de desenvolvimento, focou-se primeiro nos aspectos reológicos (MOTÉZUKI et al., 2015; PEREIRA et al., 2013) e térmicos (MOTÉZUKI; CHENG, 2010, 2013) do escoamento do concreto. Como a influência destes dois aspectos ocorrem em instantes distintos, sendo o primeiro na etapa de lançamento do concreto e o segundo durante a etapa de cura, eles foram modelados separadamente.

O comportamento reológico do concreto foi estudado em um reômetro de placas planas por de Larrard, Ferraris e Sedran (1998), chegando a conclusão de que o modelo de Herschel-Bulkley descreve melhor o comportamento reológico do concreto.

O comportamento térmico do concreto foi estudado por Faria (2004) que propôs um modelo simplificado utilizando uma função Hill, que foi calibrada por meio de ensaio em um calorímetro adiabático.

Para a modelagem dos efeitos de turbulência, foi adotado um modelo de turbulência (GOTOH; SAKAI; SHIBAHARA, 2000; SHAO; GOTOH, 2005) baseado no modelo *Detached Eddy Simulation* (DES) (SPALART, 2009; SPALART et al., 1997) para considerar os efeitos de turbulência na escala de subpartícula (SPS).

Para o cálculo da viscosidade dos vórtices (*eddy viscosity*) é necessário avaliar a distância entre a partícula de fluido e a partícula de parede mais próxima, no entanto, como as partículas de fluido não possuem uma topologia definida, este processo se torna computacionalmente pesado. Para contornar esta dificuldade, é proposto um método eficiente, de baixo custo e adequado para geometrias complexas baseado em um método *cell-linked list* (HEINZ; HUNENBERGER, 2004; MATTSON; RICE, 1999; YAO et al., 2004), mais comumente utilizado nos métodos de simulação de dinâmica molecular.

Para aumentar a estabilidade de cálculo em escoamentos confinados, o conceito de densidade média de número de partículas (pnd_{avg}) (ARAI; KOSHIZUKA;

MUROZONO, 2012) é aplicado ao cálculo do termo fonte da equação de Poisson da pressão.

A tese está estruturada de forma que no capítulo 2 é apresentado a metodologia, iniciando pela apresentação do método MPS na seção 2.1, e da densidade de partículas média para a simulação de escoamentos confinados na seção 2.2. Na seção 2.3 são apresentadas as condições de contorno gerais utilizadas nas simulações. Os métodos desenvolvidos são apresentados a seguir, com o módulo de trocas térmicas, seção 2.4, o módulo para fluidos não newtonianos na seção 2.5 e o módulo de modelagem da turbulência na seção 2.6.

No capítulo 3 são apresentados os resultados de validação para o módulo de trocas térmicas na seção 3.1 e para o módulo de fluidos não-newtonianos na seção 3.2. Nas seções 3.3 e 3.4 são apresentados os resultados do algoritmo de busca de partícula de parede mais próxima, aplicado no modelo de turbulência, cujos resultados são apresentados na seção 3.5.

Finalizando a tese, as conclusões são apresentadas no capítulo 4.

1.1 OBJETIVOS

A tese tem como objetivo principal propor um sistema de simulação computacional baseado no método de partículas com os módulos básicos para reproduzir, de forma simplificada, o comportamento do concreto fresco em seu escoamento na macroescala.

Como objetivos secundários têm-se:

- Apresentar e testar novos procedimentos metodológicos no MPS, referente ao bombeamento e escoamento do concreto em seu estado fresco, inferindo a difusão térmica durante a hidratação do material.
- Validar o sistema computacional proposto, com base em resultados analíticos, numéricos e experimentais de fluidos newtonianos e não-newtonianos presentes na literatura.

2 METODOLOGIA

2.1 O MÉTODO MOVING PARTICLE SEMI-IMPLICIT (MPS)

O MPS é um método lagrangeano sem malha que utiliza partículas para discretizar o espaço. As equações governantes são as equações de conservação de massa e de quantidade de movimento, Eqs. (1) e (2), para o cálculo do escoamento do fluido

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{D\vec{u}}{Dt} = -\frac{\nabla P}{\rho} + \nu \nabla^2 \vec{u} + \vec{f} \quad (2)$$

em que $\vec{u}$ é a velocidade, t é o tempo, ρ é a massa específica, P é a pressão, ν é a viscosidade e $\vec{f}$ representa as forças externas.

No MPS, os operadores diferenciais contínuos são substituídos por operadores diferenciais discretos obtidos a partir de uma função peso $w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|, r_e)$ definida pela Eq. (3):

$$w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|, r_e) = \begin{cases} \frac{r_e}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} - 1 & \text{se } |\vec{r}_j - \vec{r}_i| \leq r_e \\ 0 & \text{se } |\vec{r}_j - \vec{r}_i| > r_e \end{cases} \quad (3)$$

em que $|\vec{r}_j - \vec{r}_i|$ representa a distância entre uma partícula i e seus vizinhos j e r_e é o raio efetivo dentro do qual as partículas vizinhas j possuem influência sobre a partícula calculada i .

Neste trabalho, para os casos 2D será adotado $r_e = 2.1l_0$, onde l_0 é a distância entre partículas no início da simulação, e para o cálculo do laplaciano será utilizado $r_e = 4.0l_0$. Nos casos 3D, o valor $r_e = 2.1l_0$ será utilizado em todos os operadores.

A soma da função peso de todos os vizinhos j de uma partícula i é denominada densidade de número de partículas (pnd) da partícula i , e é definida pela Eq. (4):

$$pnd_i = \sum_{j \neq i} w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|, r_e) \quad (4)$$

Sendo proporcional à massa específica do fluido, a densidade do número de partículas é utilizada como parâmetro para assegurar a incompressibilidade.

O gradiente de uma função escalar ϕ e o divergente de uma função vetorial $\vec{\phi}$ são modelados respectivamente pelas Eq. (5) e Eq. (6):

$$\langle \nabla \phi \rangle_i = \frac{dim}{pnd^0} \sum_{j \neq i} \left[\frac{\phi_j - \phi_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|^2} (\vec{r}_j - \vec{r}_i) w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|, r_e) \right] \quad (5)$$

$$\langle \nabla \cdot \vec{\phi} \rangle_i = \frac{dim}{pnd^0} \sum_{j \neq i} \left[\frac{(\vec{\phi}_j - \vec{\phi}_i) \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_i)}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|^2} w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|, r_e) \right] \quad (6)$$

em que dim é o número de dimensões do caso sendo simulado, e pnd^0 é a densidade de número de partículas calculada pela eq. (4) utilizando a distribuição inicial das partículas.

O operador laplaciano, de acordo com o método original, é dado pela Eq. (7):

$$\langle \nabla^2 \phi \rangle_i = \frac{2dim}{pnd^0 \lambda} \sum_{j \neq i} [(\phi_j - \phi_i) w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|, r_e)] \quad (7)$$

em que λ , obtido por meio do teorema do limite central, é definido pela Eq. (8):

$$\lambda = \frac{\sum_{j \neq i} |\vec{r}_j - \vec{r}_i|^2 w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|, r_e)}{\sum_{j \neq i} w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|, r_e)} \quad (8)$$

O método MPS utiliza um algoritmo semi-implícito para resolver as equações governantes a cada passo de tempo; a Fig. 1 mostra um fluxograma do método. No começo de cada passo de tempo são calculadas de forma explícita as contribuições dos termos do lado direito da equação de conservação de quantidade de movimento exceto o termo relacionado à pressão e com isso se obtém uma estimativa da posição, velocidade e pnd .

Figura 1 – Fluxograma do método MPS

Fonte: autor.

Com esta estimativa, é construído um sistema linear de equações de Poisson de pressão. A equação é obtida por meio da equação de conservação de massa e do gradiente de pressão, e dada pela Eq. (9).

$$\langle \nabla^2 P \rangle_i^{t+\Delta t} = -\frac{\rho}{\Delta t^2} \frac{pnd_i^* - pnd^0}{pnd^0} \quad (9)$$

em que pnd_i^* é a densidade de número de partículas calculada na etapa explícita.

2.2 DENSIDADE MÉDIA DE NÚMERO DE PARTÍCULAS PARA ESCOAMENTOS CONFINADOS

Um dos desafios na simulação de escoamentos confinados no método MPS é a instabilidade do campo de pressões calculado, devido à falta de uma superfície livre cuja condição de contorno dinâmica provê uma referência absoluta para o cálculo da pressão.

Uma alternativa para esta questão é o uso da densidade média de número de partículas (pnd_{avg}) (ARAI; KOSHIZUKA; MUROZONO, 2012), que suaviza essas oscilações de pressão. O pnd_{avg} baseia-se na hipótese de que em um escoamento confinado deve haver uma maior tolerância para variações locais no valor do pnd , uma vez que estas variações são necessárias para evitar uma maior resistência ao movimento das partículas enquanto elas preenchem completamente o domínio confinado.

O pnd_{avg} substitui o pnd^0 na equação de Poisson da pressão, Eq. (9), o que traduz em uma maior tolerância a pequenas variações nos valores locais de pnd enquanto conserva a incompressibilidade geral, o que é necessário para a mobilidade das partículas nos escoamentos confinados. A equação de Poisson da pressão após a substituição é dada pela Eq. (10):

$$\langle \nabla^2 P \rangle_i^{t+\Delta t} = -\frac{\rho}{\Delta t^2} \frac{pnd_i^* - pnd_{avg}}{pnd_{avg}} \quad (10)$$

O valor do pnd_{avg} é calculado por meio da média aritmética do pnd em todas as partículas do domínio e este valor substitui o pnd^0 no termo fonte da equação de Poisson da pressão. Como o pnd^0 é utilizado com referência para garantir a incompressibilidade do fluido, a variação do valor do pnd_{avg} no tempo deve ser zero e esta condição deve ser verificada para assegurar a incompressibilidade do fluido.

A Figura 2 mostra o histórico do valor do pnd_{avg} para uma simulação do tipo “Escoamento em uma cavidade quadrada impulsiona pela tampa” descrita na

subseção 3.5.2. Observa-se pela figura que, do início da simulação até o instante de tempo 0,5 s, o valor do pnd_{avg} sofre um pequeno aumento de 5,905 para 6,024. Este pequeno aumento é esperado quando as partículas saem de um arranjo ordenado para um arranjo caótico conservando o mesmo volume e permite uma maior liberdade de movimento das partículas. Após o instante de tempo 0,5 s o valor do pnd_{avg} fica estável indicando que não há compressão do fluido.

Figura 2 – Um exemplo do histórico do valor do pnd_{avg} obtido da simulação de um caso de escoamento em uma cavidade quadrada impulsionado pela tampa.

Fonte: Autor

2.3 CONDIÇÕES DE CONTORNO

2.3.1 Condição de contorno de parede

No método MPS as paredes também são modeladas utilizando partículas, sendo utilizada a configuração de uma camada de partículas de parede e duas camadas de partículas *dummy*, utilizadas para garantir o correto cálculo do pnd nas partículas de parede. O uso das *dummies* é necessário para o correto cálculo das pressões e manter a incompressibilidade nas regiões vizinhas das paredes.

A Figura 3 ilustra a distribuição de partículas próximas da parede, mostrando partículas de fluido, parede e *dummy*, além do raio efetivo para uma partícula de parede i .

Figura 3 – Distribuição das partículas próxima da parede, destacando o raio efetivo da partícula de parede i .

Fonte: Koshizuka e Oka (1996)

Nas paredes é aplicada a condição de contorno no-slip. Esta condição além de impor velocidade zero nas paredes estáticas, utiliza um esquema de espelhamento para estimar a velocidade para as partículas *dummy* e garantir um cálculo mais preciso dos operadores diferenciais dependentes da velocidade nas paredes.

A Figura 4 mostra um esquema do processo de espelhamento. Nele, a distância da partícula *dummy* para a partícula de parede mais próxima é utilizada para posicionar a partícula virtual i' dentro do espaço do fluido a mesma distância da parede. Em seguida, a partícula virtual i' é utilizada para estimar a velocidade $\vec{u}_{i'}$ e então calcular a velocidade $\vec{u}_i$ que é então aplicada a partícula *dummy* para o cálculo da condição de contorno.

Figura 4 – Processo de espelhamento mostrando a partícula *dummy* i e a partícula virtual i' .

Fonte: Autor.

2.3.2 Condição de contorno de influxo

A condição de contorno de influxo é modelada de forma similar a uma parede, com uma fileira de partículas de influxo e duas fileiras de partículas *dummy*.

O efeito de injeção de partículas no domínio de simulação é obtido pela movimentação do conjunto de partículas de influxo e *dummy* a uma velocidade e uma direção determinadas.

Quando o deslocamento da partícula influxo em relação à posição da fronteira ultrapassar o valor de uma distância entre partículas l_0 (instante $t = t_n$), ela é transformada em partícula de fluido, e a partícula *dummy* adjacente à ela é transformada em partículas de influxo e uma nova partícula *dummy* é adicionada no lado externo e adjacente à partícula *dummy* remanescente (instante $t = t_{n+1}$), conforme ilustra a Fig. 5.

Figura 5 – Etapas do influxo de partículas no domínio computacional. As partículas brancas representam as *dummies*, as partículas amarelas representam as partículas de influxo e as azuis as partículas de fluido.

Fonte: Autor.

2.3.3 Condição de contorno de superfície livre

2.3.3.1 Koshizuka e Oka (1996)

A técnica original de rastreamento de superfície livre (KOSHIZUKA; OKA, 1996), se baseia na comparação da vizinhança da partícula considerada em relação a vizinhança de uma partícula completamente envolta por partículas de fluido, de

forma que, caso uma partícula esteja na superfície do fluido, esta possuirá menos vizinhos que a partícula completamente imersa.

Numericamente, a técnica faz a comparação do valor da densidade do número de partículas calculado na parte explícita do método, pnd_i^* , com o valor de pnd^0 multiplicado por um valor limite β_{fs} com valor sugerido $0,80 < \beta_{fs} < 0,99$, conforme a Eq. (11)

$$pnd_i^* < \beta_{fs} \cdot pnd^0. \quad (11)$$

Quando valores baixos de β_{fs} são adotados, poucas partículas são detectadas como superfície livre e são insuficientes para delimitar uma interface, por outro lado, quando valores muito altos são utilizados, muitas partículas são detectadas como sendo de superfície livre e inclusive algumas partículas são erroneamente detectadas dentro espaço do fluido, já que qualquer desvio no valor de pnd_i^* satisfaz a condição. Um valor de β_{fs} adequado foi determinado empiricamente para um raio efetivo $r_e = 2,1l_0$ sendo $\beta_{fs} = 0,97$.

2.3.3.2 Lee et al. (2011)

A técnica de rastreamento da superfície livre proposta por Lee et al. (2011) utiliza dois critérios de detecção: o primeiro é o critério da técnica original e o segundo é um critério complementar, que utiliza o número de partículas vizinhas N :

$$\begin{cases} pnd_i^* < \beta_{fs} \cdot pnd^0 \\ N_i^* < \gamma_{fs} \cdot N^0 \end{cases} \quad (12)$$

onde N_i^* é o número de partículas vizinhas calculado na etapa explícita, N^0 é o número de partículas vizinhas na condição inicial e γ_{fs} é um valor limite do segundo critério.

Os valores recomendados pelos autores do método para os valores limites são: $\beta_{fs} = 0,97$ e $\gamma_{fs} = 0,85$. Quando as duas condições são satisfeitas, a partícula é marcada como sendo de superfície livre e a condição dinâmica da superfície livre é aplicada nela.

A detecção de superfície livre utilizando N necessita de mais partículas vizinhas para aumentar a precisão da detecção, de forma que os raios efetivos utilizados em cada critério são diferentes. Para o critério usando pnd , o raio efetivo

considerado é $r_e = 2,1l_0$ e para o critério usando N o raio efetivo considerado é $r_e = 3,1$.

2.3.3.3 *Neighborhood Particles Centroid Deviation* (NPCD) (TSUKAMOTO; CHENG; MOTEZUKI, 2016)

A técnica *Neighborhood Particles Centroid Deviation* (NPCD) proposta por Tsukamoto, Cheng e Motezuki (2016) também utiliza dois critérios para a detecção de partículas de superfície, sendo o primeiro o critério da técnica original e o segundo um critério que utiliza a posição do centroide das partículas vizinhas.

O uso do centroide inicialmente proposto por Gotoh, Khayyer e Hori (2009) mostra que a técnica é eficaz dentro do domínio do fluido, eliminando a falsa detecção de partículas de superfície livre, no entanto, na superfície, ela deixa de detectar partículas que são claramente de superfície livre. Esta falha na detecção se dá pelo fato de todas as partículas dentro do raio efetivo terem a mesma contribuição no cálculo do centroide.

Na técnica NPCD, o centroide é calculado utilizando a função peso, de modo que as partículas mais próximas têm uma contribuição maior que as partículas mais distantes. A equação para o cálculo do centroide no NPCD é dada pela Eq. (13):

$$\sigma_i = \frac{\sqrt{|\sum_{j \neq i}^N w(\vec{r}_{ij})x_{ij}|^2 + |\sum_{j \neq i}^N w(\vec{r}_{ij})y_{ij}|^2 + |\sum_{j \neq i}^N w(\vec{r}_{ij})z_{ij}|^2}}{\sum_{j \neq i}^N w(\vec{r}_{ij})} \quad (13)$$

onde N é o número de partículas vizinhas, x_{ij} , y_{ij} e z_{ij} são as componentes da distância entre a partícula i e a partícula j e $w(\vec{r}_{ij})$ é a função peso entre as partículas i e j .

Portanto se uma partícula for de superfície livre, ela apresentará um desequilíbrio significativo na distribuição de partículas vizinhas levando a um desvio na posição do centroide maior que um valor limite, ou seja $\sigma_i > \delta_{fs} \cdot l_0$.

Com isso os dois critérios da técnica NPCD são dados pela Eq. (14):

$$\begin{cases} pnd_i^* < \beta_{fs} \cdot pnd^0 \\ \sigma_i > \delta_{fs} \cdot l_0 \end{cases} \quad (14)$$

2.3.4 Condição de contorno de periodicidade

As condições de contorno periódicas são aplicadas em casos onde um fenômeno possui repetição cíclica no espaço.

Na condição de contorno periódica, ilustrada por uma linha tracejada na Fig. 6, quando uma partícula se desloca para fora do domínio computacional ela é reintroduzida com as mesmas propriedades físicas no lado oposto do domínio.

Para calcular os operadores diferenciais das partículas próximas da condição de contorno periódica, partícula verde, as partículas no lado oposto também são consideradas, partículas vermelhas. As partículas em cinza são repetições cíclicas das partículas vermelhas, para efeito de cálculo as partículas em vermelho são replicadas numericamente na posição das partículas cinzas. Este procedimento torna fácil a adaptação dos operadores diferenciais e também do sistema linear de equações para a condição de contorno periódica.

Figura 6 – Detalhes da condição de contorno periódica representada pela linha tracejada e a aplicação de um operador diferencial discreto para a partícula selecionada

Fonte: Autor.

2.3.5 Condicionador de fluxo

Quando se considera a modelagem do escoamento ao redor de um corpo em um canal, a primeira solução para as condições de contorno é o uso de condições de influxo e saída de fluido, no entanto estas condições envolvem a criação e destruição de partículas que possui um custo computacional relativamente alto

comparado com a recirculação. Se utilizarmos como alternativa a recirculação das partículas por meio da condição de periodicidade, a perturbação no escoamento também será realimentada.

Para fornecer um influxo com um perfil de velocidade determinado, Bellezi et al. (2013) propuseram um condicionador de fluxo cuja principal função é suprimir a velocidade transversal ao escoamento e ajustar a velocidade na direção do escoamento de acordo com o perfil de velocidade.

Considerando um escoamento com perfil uniforme de velocidade e velocidade igual a U na direção x , o condicionador de fluxo atua na região de entrada do fluido, entre x_0 e x_1 da Fig. 7, ajustando suavemente, utilizando uma função de forma $f(x)$, a velocidade das partículas à medida que elas avançam pela região de condicionamento de fluxo.

Figura 7 – Região de condicionamento do fluxo $[x_0, x_1]$

Fonte: Bellezi et al. (2013)

A correção na velocidade transversal proposta pelo método impõe velocidade transversal zero assim que a partícula entra na região de condicionamento.

A correção na velocidade longitudinal baseia-se na diferença entre a velocidade determinada pelo perfil de velocidade, U , e a velocidade horizontal da partícula u_x e uma função de forma $f(x)$ que modula a intensidade da força de aceleração em função da posição x da partícula, ilustrada na Fig. 7. Desta forma, a força de aceleração adotada, que é considerada como uma força externa na equação de conservação de movimento, é da forma apresentada na Eq. (15)

$$\frac{\partial u_x}{\partial t} = f(x)(U - u_x) \quad (15)$$

com a função de forma $f(x)$ é dada pela Eq. (16):

$$f(x) = a_0 \frac{\sin\left(\pi \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} - \frac{\pi}{2}\right) + 1}{2} \quad (16)$$

onde a_0 é um parâmetro de entrada para a intensidade da aceleração e x_0 e x_1 são os limites da região de condicionamento de fluxo.

2.4 ALGORITMO DE TROCAS TÉRMICAS

Para o cálculo da temperatura foi implementada a equação da difusão térmica, conforme trabalho anterior (MOTUZUKI; CHENG, 2013), e descrita por:

$$\frac{dT}{dt} = \alpha \nabla^2 T + Q \quad (17)$$

onde T é a temperatura, α é a difusividade térmica do material e Q representa as fontes/sumidouros de calor.

Em um trabalho anterior, Zhang et al. (2006) mostraram que o operador laplaciano aplicado para a equação de conservação de energia superestima a transferência de calor, e propuseram um novo operador laplaciano baseado no divergente do gradiente, dado pela eq. (18).

$$\langle \nabla^2 \phi \rangle_i = \frac{2d}{pnd^0} \sum_{i \neq j} \frac{\phi_j - \phi_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|^2} w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|, r_e) \quad (18)$$

Observa-se que o novo operador laplaciano não possui o parâmetro λ além de permitir que se resolva a equação de Poisson de forma exata.

2.4.1 Aproximação de Boussinesq

A aproximação de Boussinesq, utilizada na convecção térmica, assume que a variação de massa específica devido à temperatura é pequena de modo que pode ser tratada como constante nos termos transientes e variável no termo gravitacional.

A formulação implementada no método MPS representa as forças de flutuação como uma força externa $\vec{f}$ dada pela Eq. (19):

$$\vec{f} = \beta \vec{g}(T - T_r) \quad (19)$$

onde $\vec{f}$ é a força de flutuação, $\vec{g}$ é a aceleração devido à gravidade, T_r é uma temperatura de referência e β é o coeficiente de expansão térmica.

A relação de magnitude entre as forças de flutuação e as forças de convecção forçada é dada pela relação entre o número de Reynolds e o número de Rayleigh, onde o número de Rayleigh é dado pela Eq. (20):

$$Ra = \frac{g\beta(T - T_r)L^3}{\nu\alpha} \quad (20)$$

em que L é um comprimento característico do escoamento.

Quando $Re/Ra > 10^4$ os efeitos da convecção natural podem ser desprezados.

2.4.2 Condição de contorno de parede isotérmica e adiabática

A condição de contorno de parede isotérmica é uma condição do tipo Dirichlet onde o valor da temperatura nas partículas de parede e nas partículas *dummy* é imposto.

A condição para a parede adiabática é obtida igualando a temperatura das partículas *dummy* com a da partícula sendo calculada, desta forma, impondo com boa aproximação, a condição de transferência de calor igual a zero.

2.4.3 Variação térmica do concreto

A geração de calor devido ao processo de hidratação do concreto pode ser obtida por meio de medição em um calorímetro adiabático. A elevação de temperatura neste teste, também conhecido por elevação de temperatura adiabática, é modelada por uma equação do tipo Hill (FARIA, 2004) dada por:

$$\Delta T^{ad}(t) = \Delta T_{\infty}^{ad} \left(\frac{t^c}{a^c + t^c} \right) \quad (21)$$

onde ΔT_{∞}^{ad} é a elevação de temperatura no tempo infinito em graus Celsius, t é o tempo em dias e a e c são parâmetros numéricos escolhidos para ajustar a resultados experimentais.

A Figura 8 mostra a elevação adiabática da temperatura para um concreto com parâmetros $a = 0,92$, $c = 1,86$ e $\Delta T_{\infty}^{ad} = 28,1$ °C (GOMES; GAMBALE, 2012).

Figura 8 – Elevação adiabática da temperatura segundo a equação de Hill com parâmetros $a=0,92$, $c=1,86$ e $\Delta T_{\infty}^{ad}=28,1^{\circ}\text{C}$.

Fonte: Gomes e Gambale (2012).

Para o cálculo do acréscimo de temperatura em cada partícula, e para cada passo de tempo, é necessária a derivada temporal de $\Delta T^{ad}(t)$ que é dada por:

$$\frac{d}{dt}\Delta T^{ad}(t) = \Delta T_{\infty}^{ad} a^c c + \frac{t^{c-1}}{(a^c + t^c)^2} \quad (22)$$

2.5 MODELAGEM DE FLUIDOS NÃO-NEWTONIANOS

Para a modelagem de fluidos não-newtonianos, a equação da conservação de quantidade de movimento, ao invés da eq. (2), é dada pela Eq. (23):

$$\frac{D\vec{u}}{Dt} = \frac{1}{\rho} (-\nabla P + \nabla \cdot \mathbb{T} + \rho \vec{f}) \quad (23)$$

onde $\nabla \cdot \mathbb{T}$ é o divergente do tensor das tensões viscosas dado pela Eq. (24):

$$\nabla \cdot \mathbb{T} = 2\mathbb{D}\nabla \cdot \eta + \eta[\nabla^2 \vec{u} + \nabla \cdot \nabla \vec{u}^T] \quad (24)$$

na qual $\mathbb{T}$ é dado pela Eq (25).

$$\mathbb{T} = 2\eta\mathbb{D} \quad (25)$$

onde η é a viscosidade aparente e $\mathbb{D}$ é o tensor das taxas de deformação dada pela Eq. (26).

$$\mathbb{D} = \frac{1}{2} [\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^T] \quad (26)$$

Aplicando a hipótese de escoamento incompressível, $\nabla \cdot \nabla \vec{u}^T = 0$, na Eq. (24) resulta na Eq. (27):

$$\nabla \cdot \mathbb{T} = 2\mathbb{D}\nabla \cdot \eta + \eta \nabla^2 \vec{u} \quad (27)$$

A partir da qual a Eq. (23) pode ser reescrita como a Eq.(28):

$$\frac{D\vec{u}}{Dt} = \frac{1}{\rho} [-\nabla P + 2\mathbb{D}\nabla \cdot \eta + \eta \nabla^2 (\vec{u}) + \vec{f}] \quad (28)$$

Para a modelagem de η foram implementados os modelos reológicos Power-law, Bingham e Herschel-Bulkley, cujas equações constitutivas são respectivamente:

$$\eta = K\dot{\gamma}^{n-1} \quad (29)$$

$$\eta = \frac{\tau_0}{\dot{\gamma}} + \mu_p \quad (30)$$

$$\eta = \frac{\tau_0}{\dot{\gamma}} + K\dot{\gamma}^{n-1} \quad (31)$$

onde τ_0 é a tensão de escoamento, K é o índice de consistência, $\dot{\gamma}$ é a taxa de deformação, μ_p é a viscosidade plástica e n é o índice de escoamento.

O modelo Herschel-Bulkley é o mais geral dos modelos implementados, engloba os modelos Power-law e Bingham por meio de seus parâmetros.

Os modelos reológicos Power Law, Bingham e Herschel-Bulkley possuem uma singularidade no cálculo da viscosidade aparente em baixas taxas de deformação, sendo a viscosidade aparente infinita no limite da taxa de deformação tendendo a zero, ou seja $\lim_{\dot{\gamma} \rightarrow 0} \eta(\dot{\gamma}) = \infty$.

Para contornar esta singularidade, foram implementados dois modelos: bi-linear e suavização de Papanastasiou (1987).

2.5.1 Modelo bi-linear

O modelo bi-linear de tensão e taxa de deformação utiliza duas equações lineares para modelar o comportamento do fluido, uma para deformações abaixo de uma taxa de deformação crítica, $\dot{\gamma}_{cr}$, e uma outra para tensões acima, que correspondem as regiões abaixo da tensão de escoamento do fluido e acima da tensão de escoamento, respectivamente. A equação para a região abaixo da taxa de deformação crítica é modelada de modo a limitar a viscosidade aparente por um valor máximo, ou seja

$$\eta = \begin{cases} \eta(\dot{\gamma}_{cr}) & \text{se } \dot{\gamma} < \dot{\gamma}_{cr} \\ \eta(\dot{\gamma}) & \text{se } \dot{\gamma} > \dot{\gamma}_{cr} \end{cases} \quad (32)$$

A Figura 9 mostra o comportamento da viscosidade aparente e a singularidade próxima da taxa de deformação zero para um fluido do tipo Herschel-Bulkley.

Figura 9 – Diagrama do comportamento da viscosidade aparente e a modelagem bi-linear para baixas taxas de deformação para um fluido do tipo Herschel-Bulkley.

Fonte: Autor.

2.5.2 Modelo reológico modificado de Papanastasiou (1987)

Papanastasiou (1987) propôs uma modificação nos modelos reológicos que apresentam tensão de escoamento, como os modelos de Bingham e Herschel-Bulkley. Com esta modificação, a função de viscosidade não apresenta mais uma singularidade no limite da taxa de deformação tendendo a zero e uma única equação é aplicada para as regiões acima e abaixo da tensão de escoamento do fluido.

As funções modificadas para o modelo de Bingham e Herschel-Bulkley são dadas respectivamente pelas Eqs. (33) e (34):

$$\eta = \mu_p + \frac{\tau_0}{|\dot{\gamma}|} (1 - \exp(-m|\dot{\gamma}|)) \quad (33)$$

$$\eta = K|\dot{\gamma}|^{n-1} + \frac{\tau_0}{|\dot{\gamma}|} (1 - \exp(-m|\dot{\gamma}|)) \quad (34)$$

em que m é o parâmetro de controle do crescimento exponencial da tensão.

Quando estas funções são levadas ao limite de $|\dot{\gamma}|$ tendendo a zero, obtemos

$$\lim_{|\dot{\gamma}| \rightarrow 0} \left(\mu + \frac{\tau_0}{|\dot{\gamma}|} (1 - \exp(-m|\dot{\gamma}|)) \right) = \mu_p + \tau_0 m \quad (35)$$

$$\lim_{|\dot{\gamma}| \rightarrow 0} \left(K|\dot{\gamma}|^{n-1} + \frac{\tau_0}{|\dot{\gamma}|} (1 - \exp(-m|\dot{\gamma}|)) \right) = K|\dot{\gamma}|^{n-1} + \tau_0 m \quad (36)$$

A Figura 10 mostra a influência dos valores de m no comportamento reológico do fluido modelado e comparados com o modelo de Bingham como referência.

Figura 10 – Comparação de curvas tensão cisalhamento de um fluido com tensão de escoamento 15 Pa e viscosidade plástica 50 Pa.s utilizando o modelo de Bingham e o modelo Bingham-Papanastasiou com valores de $m=100, 200$ e 1000 s.

Fonte: da Mata et al. (2017)

2.5.3 Cálculo implícito do termo viscoso

Em aplicações de hidráulica e hidrodinâmica, onde a viscosidade do fluido é relativamente baixa, o principal critério de estabilidade é o critério de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL), no MPS dado pela eq. (37)

$$C = |\vec{u}| \frac{\Delta t}{l_0} \leq 1. \quad (37)$$

em que Δt é o passo de tempo.

Para assegurar cálculos mais estáveis, o valor de $C=0,2$ é geralmente utilizado como valor limite para o cálculo explícito do MPS.

No entanto, quando se consideram fluidos com viscosidades mais elevadas, o termo viscoso passa a ser predominante e o critério de estabilidade para a difusão deve ser considerado. O critério de estabilidade para a difusão em fluidos newtonianos é dado pela Eq. (38).

$$D = v_{eff} \frac{\Delta t}{l_0^2} \leq 1. \quad (38)$$

De forma similar, o valor de $D = 0,2$ é adotado empiricamente como valor limite para o critério de estabilidade para a difusão.

Foram feitos testes para analisar o maior passo de tempo permitido por cada critério de estabilidade. A Fig. 11(a) mostra a variação do passo de tempo máximo, Δt_{max} , em função da distância entre partículas utilizando os parâmetros $|\vec{u}| = 0,1$ m/s e $\nu = 0,001$ m²/s. Na Fig. 11(b) é mostrada a variação de Δt_{max} , em função da viscosidade ν , utilizando os parâmetros $|\vec{u}| = 0,1$ m/s, $l_0 = 0,001$ m.

Figura 11 – Variação do passo de tempo máximo de acordo com os critérios de estabilidade (a) CFL e (b) difusividade

Fonte: Autor.

A Figura 11a mostra que considerando o critério de CFL o passo de tempo reduz linearmente com a diminuição da distância entre partículas l_0 , enquanto que pelo critério de difusão o passo de tempo reduz de forma quadrática. Observa-se que pelos parâmetros adotados, para distância entre partículas abaixo de 0,01m o critério de estabilidade predominante passa a ser o de difusão.

A Figura 11b mostra que o critério de CFL é independente da viscosidade, porém o passo de tempo pelo critério de difusão diminui rapidamente.

Esta relação dos passos de tempo máximos para cada um dos critérios mostra um dos principais desafios para o uso do método de integração explícita com fluidos de viscosidade alta e modelos de alta resolução.

Para contornar esta questão, um método implícito pode ser aplicado ao cálculo do termo viscoso e às forças de campo. Com o uso de um método implícito o

tempo de processamento por passo de tempo é maior, no entanto o método permite o uso de passos de tempo maiores que o explícito e com isso o tempo total consumido pode ser menor do que utilizando o método explícito.

Para o cálculo implícito dos termos viscosos e forças de campo, a equação de conservação de quantidade de movimento considerando fluidos Newtonianos, Eq. (28), pode ser escrita como:

$$\frac{u_i^* - u_i^k}{\Delta t} = \nu \nabla^2 \vec{u} + \vec{g} \quad (39)$$

onde $\vec{u}^k$ é a velocidade calculada no passo de tempo anterior, $\vec{u}^*$ é uma velocidade intermediária calculada antes da solução do sistema linear de equações de Poisson da pressão.

Aplicando-se o operador diferencial laplaciano temos:

$$\frac{u_i^* - u_i^k}{\Delta t} = \nu \left(\frac{2 \dim}{\lambda \text{ pnd}^0} \sum_{j \neq i} (\vec{u}_j^* - \vec{u}_i^*) w(\vec{r}_{ij}) \right) + \vec{g} \quad (40)$$

Isolando as velocidades intermediárias da Eq.(40), temos:

$$u_i^* + \nu \Delta t \left(\frac{2 \dim}{\lambda \text{ pnd}^0} \sum_{j \neq i} \vec{u}_i^* w(\vec{r}_{ij}) \right) - \nu \Delta t \left(\frac{2 \dim}{\lambda \text{ pnd}^0} \sum_{j \neq i} \vec{u}_j^* w(\vec{r}_{ij}) \right) = u_i^k + \Delta t \vec{g} \quad (41)$$

A partir da Eq. (41) podemos montar um sistema linear de equações para a velocidade intermediária u^* conforme Eq. (42)

$$\begin{bmatrix} 1 + \nu \Delta t \frac{2 \dim}{\lambda \text{ pnd}^0} \sum_{j \neq 1} w(\vec{r}_{1j}) & \cdots & -\nu \Delta t \frac{2 \dim}{\lambda \text{ pnd}^0} w(\vec{r}_{1j}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ -\nu \Delta t \frac{2 \dim}{\lambda \text{ pnd}^0} w(\vec{r}_{nj}) & \cdots & 1 + \nu \Delta t \frac{2 \dim}{\lambda \text{ pnd}^0} \sum_{j \neq n} w(\vec{r}_{nj}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{u}_1^* \\ \vdots \\ \vec{u}_n^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{u}_1^k + \Delta t \vec{g} \\ \vdots \\ \vec{u}_n^k + \Delta t \vec{g} \end{bmatrix} \quad (42)$$

Para o cálculo de fluidos não-Newtonianos deve-se considerar que a viscosidade varia de partícula para partícula e, portanto, a Eq. (41) deve ser reescrita como:

$$u_i^* + \Delta t \left(\frac{2 \dim}{\lambda \text{ pnd}^0} \sum_{j \neq i} \frac{\eta_{ij}}{\rho} \vec{u}_i^* w(\vec{r}_{ij}) \right) - \Delta t \left(\frac{2 \dim}{\lambda \text{ pnd}^0} \sum_{j \neq i} \frac{\eta_{ij}}{\rho} \vec{u}_j^* w(\vec{r}_{ij}) \right) = u_i^k + \Delta t \vec{g} \quad (43)$$

onde η_{ij} é a viscosidade aparente calculada para cada partícula conforme o modelo reológico adotado. O sistema linear da Eq.(42) pode então ser reescrito como:

$$\begin{bmatrix} 1 + \Delta t \frac{2 \dim}{\lambda pnd^0} \sum_{j \neq 1} \frac{\eta_{ij}}{\rho} w(\vec{r}_{1j}) & \cdots & -\Delta t \frac{2 \dim}{\lambda pnd^0} \frac{\eta_{ij}}{\rho} w(\vec{r}_{1j}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ -\Delta t \frac{2 \dim}{\lambda pnd^0} \frac{\eta_{ij}}{\rho} w(\vec{r}_{nj}) & \cdots & 1 + \Delta t \frac{2 \dim}{\lambda pnd^0} \sum_{j \neq n} \frac{\eta_{ij}}{\rho} w(\vec{r}_{nj}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{u}_1^* \\ \vdots \\ \vec{u}_n^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{u}_1^k + \Delta t \vec{g} \\ \vdots \\ \vec{u}_n^k + \Delta t \vec{g} \end{bmatrix} \quad (44)$$

Como o sistema linear possui características similares ao sistema linear da pressão, para a solução foi utilizado o método de gradientes conjugados, que é o mesmo aplicado na solução do sistema linear da pressão.

2.6 MODELAGEM DE TURBULÊNCIA

A modelagem da turbulência utilizada neste trabalho é baseada no *Large Eddy Simulation* (LES), onde as escalas de turbulência são divididas por um valor limite, geralmente vinculado à resolução do caso. As escalas maiores que este valor ou *large eddies* são simuladas diretamente, pois a resolução espacial do caso é suficiente para representar os vórtices destas escalas, ao contrário dos vórtices em escalas menores, que devem ser modeladas numericamente. Como complemento ao LES, é adotada uma lei de parede para evitar a necessidade de um maior refinamento nas regiões próximas da parede por conta do grande gradiente de velocidades nesta região (ARAI; KOSHIZUKA; MUROZONO, 2012).

As variáveis das equações governantes, aqui denominadas por ϕ , são filtradas espacialmente na escala da partícula $\bar{\phi}$ que é resolvida pelo método MPS e na escala de subpartícula ϕ_{SPS} , conforme a Eq. (45):

$$\phi = \bar{\phi} + \phi_{SPS} \quad (45)$$

Com isso as equações governantes podem ser escritas como:

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (46)$$

$$\frac{D\vec{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla \bar{P} + \nu \nabla^2 \vec{u} - \nabla \cdot \mathbb{R} + \vec{f} \quad (47)$$

$$\mathbb{R} = \overline{\vec{u} \cdot \vec{u}} - \vec{u} \cdot \vec{u} \quad (48)$$

onde $\mathbb{R}$ é um tensor de tensões residuais representando o efeito dos movimentos na escala de subpartícula (SPS). O valor de $\mathbb{R}$ não pode ser calculado precisamente por conter também a parte caótica do movimento turbulento, sendo necessária a modelagem numérica desta parte.

Nesta implementação foi utilizado o modelo Smagorinsky padrão para estimar as tensões residuais, de modo que o tensor de tensões residuais pode ser escrito como:

$$\mathbb{R} = -2\nu_e \mathbb{D} + \frac{1}{3} \mathbb{I} \text{Tr} \mathbb{R} \quad (49)$$

$$\nu_e = (C_s \Delta)^2 |\mathbb{D}| \quad (50)$$

onde C_s é a constante de Smagorinsky, ν_e (m²/s) é a viscosidade turbulenta na SPS, Δ (m) é a distância de filtragem que para os métodos de partícula corresponde a l_0 , $\mathbb{D}$ é o tensor taxa de deformação, representado pela Eq. (26) e $\mathbb{I}$ é a matriz identidade.

Substituindo a Eq. (49) na Eq. (47) obtemos uma equação de conservação de quantidade de movimento em um formato similar ao utilizado no método de turbulência *Reynolds Averaged Navier Stokes* (RANS), representada por:

$$\frac{D\vec{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla \bar{P} + (\nu + \nu_e) \nabla^2 \vec{u} + \vec{f} \quad (51)$$

2.6.1 Lei de parede

Spalart et al. (1997) propuseram uma abordagem para modelar a região próxima da parede chamada *Detached Eddy Simulation* (DES). No DES a viscosidade turbulenta no escoamento longe da parede é calculada pelo modelo LES, e no escoamento próximo da parede é utilizado um modelo RANS para baixos números de Reynolds.

Neste trabalho utiliza-se uma abordagem similar ao DES adaptado para o método de partículas utilizado por Arai, Koshizuka e Murozono (2012), onde para o escoamento longe da parede é utilizado um modelo LES Smagorinsky padrão e para a região próxima da parede é utilizado um modelo RANS de zero-equação.

A média temporal da velocidade tangencial próxima da parede $\tilde{u}_p$ (m/s) pode ser expressa pela lei-log:

$$F(u_\tau) = \frac{\tilde{u}_p}{u_\tau} - \frac{1}{\kappa} \ln \left(\frac{y_p u_\tau}{\nu} \right) - B = 0 \quad (52)$$

onde u_τ (m/s) é a velocidade de fricção, y_p (m) é a distância a parede e ν (m²/s) é a viscosidade cinemática. Os valores padrão para os coeficientes do modelo são a

constante de von Kármán $\kappa = 0.41$ e $B = 5.5$. A velocidade de fricção u_τ é definida como:

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (53)$$

onde τ_w (Pa) é a fricção na parede, obtida resolvendo a Eq. (52) pelo método de Newton-Raphson.

$$u_\tau^{k+1} = u_\tau^k - \frac{F(u_\tau^k)}{\left[\frac{dF}{du_\tau}\right]_{u_\tau^k}} \quad (54)$$

Com o u_τ calculado a partir da Eq. (54), pode se obter y^+ pela Eq. (55) que será utilizado para determinar a qual camada a partícula pertence: viscosa, lei-log ou externa.

$$y^+ = \frac{y_p}{\nu/u_\tau} \quad (55)$$

Dependendo da região, uma expressão específica é utilizada para determinar a viscosidade turbulenta ν_e , Eqs (56), (57) e (58).

$$\text{Camada viscosa} \quad \nu_e = 0 \quad y^+ < 10 \quad (56)$$

$$\text{RANS zero-equação} \quad \nu_e = \kappa y_p u_\tau \quad 10 \leq y^+ < 200 \quad (57)$$

$$\text{Modelo Smagorinsky} \quad \nu_e = (C_s \Delta)^2 |\bar{\mathbf{D}}| \quad y^+ > 200 \quad (58)$$

Para as partículas em contato com a parede é mais razoável obter ν_e por meio da fricção na parede τ_w , de modo que:

$$\nu_e = \frac{\tau_w}{\rho} \frac{y_p}{\tilde{u}_p} = u_\tau^2 \frac{y_p}{\tilde{u}_p} \quad (59)$$

2.6.2 Algoritmo de busca da partícula de parede mais próxima

Para o cálculo do u_τ de uma partícula de fluido é necessário determinar a distância da partícula de fluido até a partícula de parede mais próxima (y_p). Isso significa que é necessário identificar primeiro qual é a partícula de parede mais próxima à partícula de fluido. Como não há uma topologia fixa entre as partículas de fluido, se N_f e N_s são, respectivamente, os números totais de partículas de fluido e

de sólido na simulação, no pior dos casos utilizando uma busca exaustiva, levaria a $N_f \cdot N_s$ comparações para fazer a identificação, o que pode acarretar num custo computacional muito grande para modelos de simulação muito complexos ou com um número muito grande de partículas.

Uma forma de acelerar a identificação das partículas de parede mais próximas é usar uma malha uniforme quadrada (ou cúbica no caso tridimensional) para dividir todo o domínio em células e reduzir o domínio da busca de modo análogo ao algoritmo *cell-linked list* (ALLEN; TILDESLEY, 1987), aplicado à busca de partículas vizinhas. No caso da busca das partículas vizinhas à partícula i , tem-se um problema de busca de curto alcance, e somente a célula que contém a partícula i e as células adjacentes necessitam ser consideradas na busca. Porém, como a busca da partícula de parede mais próxima não é necessariamente um problema de curto alcance, se a técnica fosse utilizada da mesma forma sem alterações, no caso em que a partícula de parede mais próxima não pertence a célula que contém a partícula de fluido ou as células adjacentes, a aplicação recursiva da técnica iria expandir o domínio de busca de 3^3 células para 5^3 , 7^3 e assim sucessivamente até que uma partícula de parede seja encontrada. O aumento do custo computacional afeta principalmente os casos mais refinados, onde a razão entre células do domínio e células que contém partículas de parede é maior.

O algoritmo de busca da partícula de parede mais próxima proposto neste trabalho também adota uma malha retangular para dividir o domínio, mas ao invés de iniciar a busca a partir da célula que contém a partícula de fluido em questão e depois expandir a busca pelas células adjacentes, é utilizada uma lista de células que contém as partículas de parede, criada por meio de uma varredura pelas partículas de parede e identificação da célula em que se encontram. Como na maioria dos casos as partículas de parede são minoria em relação as partículas de fluido, identificar primeiro as células que contém partículas de parede geralmente irá reduzir o domínio de busca e assim reduzir o tempo de processamento.

O algoritmo é dividido em três etapas:

1. Criar a lista de células que contém partículas de parede;
2. Mapear, para cada célula do domínio computacional, as células que contém partículas de parede mais próximas;

3. Varrendo as células do domínio, para cada partícula de fluido dentro da célula calcular a distância dela às partículas de parede contidas nas células de parede mais próximas, utilizando o mapeamento da etapa 2.

Inicialmente, por simplicidade, somente paredes estáticas são consideradas. Desta forma, as etapas 1 e 2 podem ser executadas apenas uma vez, no começo da simulação, e a etapa 3 é executada em cada passo de tempo.

A Figura 12 mostra um fluxograma das etapas 1 e 2, onde o mapeamento das células é executado. Como a célula é quadrada (ou cúbica nos casos tridimensionais), esta etapa utiliza o índice das células para o cálculo da distância. Isso equivale a usar, para o cálculo da distância, um ponto notável, que pode ser o centro das células para o propósito de mapeamento. A distância calculada é então utilizada como critério de identificação das células mais próximas, que contêm a partícula de parede.

Figura 12 – Fluxograma do processo de mapeamento da célula de parede mais próxima de uma célula do domínio computacional.

Fonte: Autor.

É importante notar que em alguns casos com condições de contorno de geometria mais complexa, a partícula de parede mais próxima não está necessariamente na célula de parede mais próxima. Um exemplo desta situação é

mostrado na Fig. 13: considerando a partícula de fluido marcado em vermelho, se usar somente a distância entre as células, a célula de baixo e à direita são as mais próximas com distância igual a $1\delta l$, no entanto a partícula de parede mais próxima está na célula inferior direita com a distância entre centro das células igual a $1,41\delta l$ e a distância entre partículas igual a $\vec{r}_p$.

Figura 13 – Caso onde a célula de parede mais próxima não contém a partícula de parede mais próxima.

Fonte: Autor

Para contornar esta questão, adotou-se um valor de tolerância igual a $1\delta l$, ou seja, são consideradas como candidatas as células de parede que possuem distância até o espaçamento de uma célula maior que a célula de parede mais próxima.

Na etapa 3, para cada célula do domínio, verifica-se quais são as partículas de fluido no seu interior e, para cada partícula de fluido, calcula-se a distância em relação as partículas de parede contidas nas células de parede mais próximas.

3 RESULTADOS DE VALIDAÇÃO

3.1 ESCOAMENTOS COM TROCAS TÉRMICAS

São apresentados três casos de validação com comparação com resultados analíticos.

O primeiro caso de condução térmica em uma barra é utilizado para verificar a condição de contorno isotérmica, bem como a implementação da equação de difusão térmica.

O segundo caso de condução térmica bidimensional em uma placa quadrada utiliza as condições de contorno isotérmica e adiabática. Este caso também é utilizado para avaliar a implementação do laplaciano proposto por Zhang (2006).

O terceiro caso de difusão térmica em um fluido com descontinuidade de temperatura foi utilizado para verificar a implementação aplicada a fluidos.

Como aplicações são apresentados um teste de convecção térmica feito com a instabilidade de Rayleigh-Bénard e um segundo com fonte de calor simulando a reação exotérmica de cura do concreto.

3.1.1 Condução térmica unidirecional em uma barra

O caso consiste de uma barra sólida uniforme com dimensão 100x2mm modelada por uma distribuição de 1000x20 partículas, a temperatura inicial da barra é $T_{bar} = 0$ °C e a condição de contorno do lado esquerdo é uma parede isotérmica mantida a $T_l = 20$ °C, a difusividade térmica do material é $\alpha = 10^{-5}$ m²/s.

A solução analítica em função do tempo t e posição x para este caso é dada pela Eq. (60). Uma imagem ampliada da região da condição de contorno isotérmica é mostrada na Fig. 14.

$$T(x, t) = T_l \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha t}} \right) \right) \quad (60)$$

Figura 14 – Detalhe da distribuição de temperatura no tempo 10s

Fonte: Autor.

Para os instantes de tempo $t = 2,5s$, $t = 5,0s$, $t = 7,5s$ e $t = 10s$, a média e o desvio padrão da temperatura das partículas em cada posição x são calculados e os resultados apresentados na Fig. 15 e comparados com a solução analítica.

Dos resultados pode-se observar que a média tem boa aderência à curva da equação analítica e o desvio padrão é relativamente pequeno. O maior desvio, σ_{max} , em relação à amplitude térmica, $\Delta T = T_l - T_{bar} = 20\text{ }^{\circ}\text{C}$, é para o caso onde $t = 2,5s$ e se encontra na ordem de 2,5%.

Figura 15 – Comparação dos resultados obtidos pelo MPS e os resultados analíticos

Fonte: Autor.

3.1.2 Condução térmica bidimensional em uma placa quadrada

O modelo deste caso é uma placa quadrada de 0,1mx0,1m modelada com uma matriz de 40x40 partículas, mostrada na Fig. 16.

As condições de contorno na esquerda e na direita são isotérmicas e mantidas a $T = 0^\circ\text{C}$, as condições de contorno de topo e fundo são adiabáticas. A distribuição inicial de temperaturas é senoidal e é descrita pela Eq. (61).

$$T(x, t) = \sin\left(\frac{\pi x}{l}\right) \exp\left(-\left(\frac{\pi}{l}\right)^2 \alpha t\right) \quad (61)$$

onde l é o comprimento da placa e $\alpha = 0,1\text{m}^2/\text{s}$.

Figura 16 – Condição inicial mostrando o perfil de temperatura senoidal

Fonte: Autor.

Figura 17 – Resultados (a) e (c) utilizam a formulação original do laplaciano (KOSHIZUKA; OKA, 1996) e resultados (b) e (d) utilizam o laplaciano de Zhang et al. (2006)

Fonte: Autor.

Dos resultados mostrados na Fig. 17, pode-se observar que o perfil de temperatura obtido utilizando o laplaciano original, Fig. 17(a) e (c) possuem boa

concordância com a curva analítica assim como o laplaciano proposto por Zhang et al., Fig. 17(b) e (d).

No entanto, o modelo original do laplaciano subestima a transferência de calor nas bordas próximas da condição de contorno isotérmica enquanto o laplaciano proposto por Zhang et al., não ocorre tal problema.

3.1.3 Trocas térmicas em um fluido com descontinuidade térmica

Foi modelado um recipiente retangular de 80x20 cm cheio de fluido. O fluido modelado possui condutividade térmica $k = 1 \text{ W/(m.K)}$ e calor específico $C_v = 1 \text{ J/K}$ e massa específica $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$. O fluido é dividido em duas metades, a metade esquerda possui temperatura $T_l = 0^\circ \text{C}$ e a metade direita $T_r = 1^\circ \text{C}$, a Fig. 18(a) mostra a condição inicial e a Fig. 18 (b) o instante $t = 10\text{s}$.

Figura 18 – Distribuição de temperatura na condição inicial (a) e após 10s (b) do caso simulando uma descontinuidade de temperatura.

Fonte: Autor.

O domínio do fluido é modelado por uma matriz de 80x20 partículas, com uma distância entre partículas de 1cm e passo de tempo $\Delta t = 0,0001\text{s}$.

Neste caso, a hipótese de Boussinesq não foi utilizada, uma vez que o efeito a ser estudado é puramente condutivo. A condução térmica é simulada em uma condição crítica com um grande gradiente de temperatura e é esperado que, mesmo com a movimentação das partículas, o perfil de temperatura concorde com a curva analítica.

A solução analítica para este caso é dada pela Eq. (62):

$$T(x, t) = T_c \left(1 + \operatorname{erf} \left(\frac{x - x_m}{2\sqrt{\alpha t}} \right) \right) \quad (62)$$

em que: T_c é a temperatura média entre as paredes esquerda e direita, neste caso $T_c = 0,5^\circ\text{C}$, x é a posição no eixo horizontal, $x_m = 0,4\text{cm}$ é a posição da descontinuidade e a difusividade térmica pode ser calculada por $\alpha = \frac{k}{\rho C_v}$.

O domínio foi dividido em colunas utilizando uma distância entre partículas com referência, e a média e o desvio padrão da temperatura são calculados para as partículas dentro de cada coluna. Os resultados apresentados na Fig. 19, para ambos laplacianos, mostram que a condição crítica é próxima do início da simulação onde o gradiente de temperatura é grande. Nos instantes seguintes, a simulação possui um comportamento mais próximo da curva analítica.

Figura 19 – Perfil de temperatura em função da posição horizontal. Resultados com boa concordância e pequeno desvio próximo da região da descontinuidade térmica.

Fonte: Autor.

3.1.4 Instabilidade de Rayleigh-Bénard

Seja uma massa de fluido confinado entre duas placas, uma superior e outra inferior, com a placa inferior aquecendo o fluido e a placa superior resfriando. Neste caso, haverá uma redução da massa específica do fluido aquecido produzindo um

empuxo, enquanto que as forças viscosas dissiparão esta energia. Esta relação entre forças de empuxo e dissipação viscosa é dado pelo número de Rayleigh pela Eq. (20).

Com pequenas diferenças de temperatura, o empuxo é dissipado pela viscosidade e a transferência de calor é predominantemente por condução. No entanto, quando a diferença de temperatura ultrapassa um determinado limite, representado por um número de Rayleigh crítico Ra_c , a viscosidade não consegue dissipar a força de empuxo permitindo assim o movimento do fluido e a formação das células de convecção. De acordo com Reid e Harris (1958), para o caso confinado entre duas placas rígidas, o valor do número de Rayleigh crítico é aproximadamente $Ra_c = 1.708$.

O caso consiste de uma camada de 8x4 cm de ar confinado entre duas placas, a superior com temperatura $T_{RB,S}=0^{\circ}\text{C}$ e a inferior com temperaturas $T_{RB,I}=33,0^{\circ}\text{C}$, que corresponde a $Ra=30.000$ e as laterais utilizam a condição de contorno de periodicidade. Tentou-se simular casos próximos ao número de Rayleigh crítico do caso, no entanto, não foi possível observar a formação das células de convecção. Isto pode ser devido a um efeito de amortecimento numérico decorrente do intertravamento das partículas (MOTEZUKI; CHENG, 2014).

O caso é simulado utilizando distância entre partículas de 0,05mm, num total de 13.760 partículas, e passo de tempo de 0,002ms, a condição inicial de temperatura das partículas é uma distribuição linear entre $T_{RB,S}$ e $T_{RB,I}$.

A Figura 20 mostra os contornos de temperatura e os rastros de algumas partículas obtidas das simulações realizadas pelo MPS. Observa-se a formação de duas células de convecção à medida que o gradiente de temperatura entre as paredes superior e inferior aumenta, o que é condizente com a teoria linear, e consistente com os resultados do Zhang et al. (2006).

Figura 20 – (a) Linhas mostram o caminho percorrido por algumas partículas sorteadas
(b) Distribuição de temperatura e curvas isotérmicas.

Fonte: Autor.

3.1.5 Reação exotérmica

Para avaliar o uso de fontes de calor na equação de difusão térmica, foi modelado o processo de lançamento e cura do concreto considerando a variação térmica no processo. Por simplicidade o concreto foi considerado um fluido newtoniano de alta viscosidade e que não apresenta uma variação significativa da viscosidade com a temperatura durante o processo de lançamento.

Os resultados descritos nesta seção foram publicados em Motezuki e Cheng (2013).

Foi utilizada uma equação do tipo Hill, apresentado na Eq. (21), para modelar o processo exotérmico de cura. Os parâmetros utilizados na equação são $a = 0,92$, $c = 1,86$, e $\Delta T_{\infty}^{ad} = 28,1^{\circ}\text{C}$ (GOMES; GAMBALE, 2012), ilustrado na Fig. 08.

Foram utilizados casos em que o concreto fresco é bombeado em uma forma de base quadrada de dimensões 2m x 2m e 3m de altura por um bocal fixo, de seção quadrada de 900cm² posicionado no canto da forma. Para aumentar a complexidade da geometria, há um obstáculo de comprimento L_{obst} e altura 1,5m, conforme a Fig. 21. A Tab. 1 fornece as dimensões para os três casos.

Figura 21 – Desenho esquemático dos casos 1, 2 e 3.

Fonte: autor.

Tabela 1 – Descrição e dimensão dos casos

Caso	Descrição	Forma			Obstáculo	
		Comprimento	Largura	Altura	A	Altura
1	Caso base	2,0	2,0	3,0	0,0	1,5
2	Obstáculo meio comprimento				1,0	
3	Obstáculo comprimento inteiro				2,0	

Fonte: autor.

As paredes da forma são modeladas como paredes isotérmicas com temperatura de 34°C e o concreto fresco é bombeado com uma vazão de 18 l/s a uma temperatura de 34°C.

A Figura 22 mostra a evolução temporal do caso 3. O bombeamento inicia no tempo $t=0s$, iniciando o preenchimento do lado direito. No instante $t=200s$, Fig. 22(a), o lado direito está cheio e o concreto passa a fluir extravasando para o lado esquerdo da forma. No tempo $t=300s$, Fig. 22(b), ambos os lados estão cheios e o concreto passa a preencher o espaço acima do obstáculo. O bombeamento do concreto se encerra em $t=450s$.

Figura 22 – Lançamento do concreto no caso 3

Fonte: autor.

3.1.5.1 Convergência

Para verificar a precisão das simulações foram consideradas quatro distâncias entre partículas: 0,1m; 0,08m; 0,05m; e 0,04m. Considerando a lateral da forma como comprimento característico $L=2m$, as respectivas resoluções são $L/l_0=20$, 25, 40 e 50. Estas distâncias foram escolhidas para modular o tamanho da forma, no entanto a dimensão do bocal de bombeamento pode ter uma pequena variação dependendo da distância entre partícula escolhida. A vazão de concreto foi mantida constante entre as resoluções efetuando pequenos ajustes na velocidade de influxo do concreto.

A Figura 23 mostra as curvas isotérmicas calculadas no tempo $t=450s$ no plano central da forma e perpendicular ao obstáculo, obtidas das simulações dos casos 1, 2 e 3 considerando as quatro distâncias entre partículas. Os resultados mostram que, apesar do comportamento geral ser capturado independente da resolução, as curvas isotérmicas para as distâncias entre partículas de 0,1m ($L/l_0=20$) e 0,08m ($L/l_0=25$) não são tão suaves quanto nos casos com distâncias entre partículas de 0,05m ($L/l_0=40$) e 0,04m ($L/l_0=50$). Por outro lado, as diferenças entre os casos de alta e baixa resolução são evidentes. Como os resultados obtidos

utilizando a distância entre partículas de 0,05m ($L/l_0=40$) é praticamente o mesmo dos obtidos com distância entre partículas de 0,04m ($L/l_0=50$), pode-se dizer por estes dados que a distância entre partículas de 0,05m ($L/l_0=40$) é uma solução de compromisso entre custo computacional e precisão dos resultados.

3.1.5.2 Resultados

Nos casos 1 e 2, como o concreto lançado primeiro pode fluir do lado direito para o lado esquerdo, pode-se observar uma temperatura mais elevada no lado esquerdo devido ao concreto mais recente empurrar o mais antigo para o lado esquerdo.

No caso 3, a parede bloqueia o escoamento do concreto do lado esquerdo para o lado direito, desta forma o concreto mais antigo fica preso no lado direito e somente após o completo enchimento do lado direito o concreto trasborda para o lado esquerdo. E para finalizar, após o enchimento do lado esquerdo, o concreto mais recente enche a parte superior da forma, acima do obstáculo.

Foi observado um gradiente mais elevado de temperatura na região onde o concreto mais recente e frio encontra com o concreto mais antigo e quente. Esta faixa de gradiente elevado pode ser vista na Fig. 24(c).

Figura 24 – Magnitude do gradiente de temperatura na seção central das formas para os três casos $t=600s$

Fonte: autor.

3.2 ESCOAMENTO DE FLUIDO NÃO-NEWTONIANO

Nesta seção são apresentados três casos de validação, sendo o primeiro caso, um escoamento entre placas planas paralelas, cujos resultados foram comparados com resultados analíticos.

Em seguida foi simulado um caso do tipo *dam break* e os resultados foram comparados com os resultados numéricos e experimentais de Leite (2009).

O terceiro caso se trata do escoamento em uma caixa L onde os resultados são comparados com os obtidos por Cremonesi et al. (2010).

Finalizando a seção tem-se a validação do cálculo implícito do termo viscoso, com comparação do tempo consumido pelo cálculo explícito e o cálculo implícito.

3.2.1 Escoamento entre placas planas paralelas

O escoamento entre placas planas paralelas é similar ao modelo do escoamento de Poiseuille, no entanto foi adaptado pelo fato da implementação atual permitir a imposição de pressão apenas na superfície livre. Sendo assim, a diferença de pressão entre as extremidades do escoamento é substituída por uma aceleração na direção do fluxo com magnitude igual ao que seria obtido pela diferença de pressão. A geometria do caso é ilustrada pela Fig. 25.

Fonte: Autor.

Com a substituição do gradiente de pressão por uma aceleração $\vec{a}$, a equação de conservação de quantidade de movimento em duas dimensões pode ser escrita como:

$$\frac{d\tau_{xy}}{dy} + \rho \vec{a} = 0 \quad (63)$$

Utilizando o modelo de Herschel-Bulkley e modelo de fluido newtoniano generalizado o perfil analítico de velocidades é dado pela Eq. (64):

$$u(y) = \begin{cases} \frac{\rho a}{\eta_{\infty}} \cdot (y_{cr}^2 - y^2) + \left(\frac{\rho a}{K}\right)^{\frac{1}{n}} \cdot \frac{n}{n+1} \cdot \left[\left(H - \frac{\tau_0}{\rho a}\right)^{\frac{n}{n+1}} - \left(y - \frac{\tau_0}{\rho a}\right)^{\frac{n+1}{n}} \right] & \text{se } y < y_{cr} \\ \left(\frac{\rho a}{K}\right)^{\frac{1}{n}} \cdot \frac{n}{n+1} \cdot \left[\left(H - \frac{\tau_0}{\rho a}\right)^{\frac{n+1}{n}} - \left(y - \frac{\tau_0}{\rho a}\right)^{\frac{n+1}{n}} \right] & \text{se } y_{cr} \leq y \leq H \end{cases} \quad (64)$$

em que u é a velocidade horizontal, y é a distância medida a partir da linha de centro entre as placas, $\eta_{\infty} = \eta(\dot{\gamma}_{cr})$ de acordo com o modelo utilizado para contornar a singularidade, Eq. (32) e H é a meia altura do canal.

A distância y_{cr} , denominada altura crítica, é a distância onde $\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_{cr}$, sendo definida por:

$$y_{cr} = \frac{\tau_0 + K\dot{\gamma}_{cr}^n}{\rho a} \quad (65)$$

O caso foi modelado com partículas de 1mm, num total de 8.955 partículas e taxa de deformação crítica de $1,0 \text{ s}^{-1}$. O fluido possui massa específica $\rho=2.231 \text{ kg/m}^3$ e a aceleração é $\vec{a}=0,1 \text{ m/s}^2$ Os parâmetros reológicos para o modelo de Herschel-Bulkley são dados na Tab. 02.

Tabela 2 – Parâmetros para o modelo reológico Herschel-Bulkley

$\tau_0[\text{Pa}]$	$K [\text{Pa} \cdot \text{s}^n]$	n
4,0	5,0	0,7

A Figura 26(a) mostra a distribuição de velocidade obtido com o método MPS em $t=2.0\text{s}$ com o escoamento em regime permanente. A linha branca indica o local de medição da velocidade, taxa de deformação e viscosidade aparente. Na Fig. 26(b) os pontos mostram o perfil de velocidade medido no MPS e a curva sólida o resultado analítico.

Figura 26 – (a) Distribuição das velocidades no canal e (b) perfil de velocidade medido comparado com o perfil analítico

Fonte: Pereira et al (2013).

Figura 27 – (a) Perfil da taxa de deformação e (b) perfil da viscosidade aparente.

Fonte: Pereira et al (2013).

Observa-se pelas Fig. 26 e 27 a proximidade e coerência dos resultados computados pelo MPS. O desvio no perfil de velocidade é pequeno, máximo 5%, e o cálculo da taxa de deformação e viscosidade aparente praticamente correspondem aos valores calculados analiticamente. No entanto, os pontos das paredes possuem valores diferentes do previsto e necessitam de uma investigação mais aprofundada, muito provavelmente relacionados ao tratamento da condição de contorno.

3.2.2 Dam Break

Leite (2009) estudou o caso *dam break* utilizando carbopol 940, um carbômero hidrossolúvel espessante utilizado industrialmente para a fabricação de géis e que possui comportamento não newtoniano.

Os parâmetros para o modelo reológico Herschel-Bulkley da mistura utilizada por Leite (2009) são mostrados na Tab. 3.

Tabela 3 – Parâmetros para o modelo reológico Herschel-Bulkley. Fonte: Leite (2009).

τ_0 [Pa]	K [Pa. s ⁿ]	n
4,4715	1,1849	0,5497

A Figura 28 ilustra a geometria utilizada. Sendo uma caixa de 20x150 cm que contém uma coluna retangular de fluido de 50cm de comprimento e com alturas h de 8, 10 e 12cm, inicialmente em repouso.

Figura 28 – Geometria do *dam break* (unidade: cm)

Fonte: Pereira et al (2013).

Para a simulação do caso foram utilizadas três resoluções com distância entre partículas de 5mm, 2mm e 1mm. A Tabela 4 mostra, como referência, a quantidade de partículas geradas para cada combinação de altura e distância entre partículas.

Tabela 4 – Quantidade de partículas para cada caso simulado

Distância entre Partículas (mm)	Quantidade de partículas		
	h = 8 cm	h = 10 cm	h = 12 cm
1	50156	59637	70116
2	15142	17642	20142
5	3660	4056	4452

3.2.2.1 Convergência

Foi executado um teste de convergência com as três resoluções e comparados com resultados experimentais e numéricos obtidos por Leite (2009). As comparações são mostradas nas Figs. 29, 30 e 31.

Observa-se que os resultados mais próximos do experimental e com menor dispersão das partículas foram obtidos com a resolução mais alta, ou seja, 1mm.

Figura 29 – Resultados numéricos e experimentais Leite (2009) e resultados do MPS para o instante de tempo $t=0,4$ s e altura $h = 8$ cm.

Fonte: Leite (2009)

Figura 30 – Resultados numéricos e experimentais Leite (2009) e resultados do MPS para o instante de tempo $t=0,4$ s e altura $h = 10$ cm.

Fonte: Leite (2009)

Figura 31 – Resultados numéricos e experimentais Leite (2009) e resultados do MPS para o instante de tempo $t=0,4$ s e altura $h = 12$ cm.

Fonte: Leite (2009).

3.2.2.2 Resultados

Foi executado um estudo adicional sobre a sensibilidade da taxa de deformação crítica utilizado no termo viscoso. O estudo focou-se no caso com resolução mais alta (1 mm) e altura de 10cm.

As frentes viscoplásticas para diferentes taxas de deformação crítica, $\dot{\gamma}_{cr}$, são comparados com os de Leite (2009) para o instante $t=0,4s$ e são apresentados nas Figs. 32 e 33.

Figura 32 – Frentes viscoplásticas no instante $t=0,4s$ para taxas de deformação crítica 0,05; 0,1; e 1,0 s^{-1} .

Fonte: Leite (2009).

Figura 33 – Frentes viscoplásticas no instante $t=0,4s$ para taxas de deformação crítica 0,2; 0,4; 0,6 e 0,8 s^{-1} .

Fonte: Leite (2009).

A Figura 32 mostra que as frentes viscoplásticas para $\dot{\gamma}_{cr}=0,05$ e $\dot{\gamma}_{cr}=0,10$ estão sobrepostas, mesmo um aumento para $\dot{\gamma}_{cr}=1,0$ mantém um perfil bastante próximo aos dois anteriores.

A Figura 33 mostra os resultados para valores intermediários de $\dot{\gamma}_{cr}$ entre 0,1 e 1,0. Observa-se que não apresentam mudanças significativas no perfil de onda. No entanto, observando a Fig. 34, nota-se que há um aumento significativo da quantidade de partículas com taxa de deformação abaixo do valor de $\dot{\gamma}_{cr}$ com o aumento de $\dot{\gamma}_{cr}$.

Figura 34 – Percentual de partículas com taxa de deformação abaixo da taxa de deformação crítica em função do tempo.

Fonte: Autor.

Nos escoamentos com predominância dos efeitos de viscosidade, a existência de muitas partículas abaixo da taxa de deformação crítica pode comprometer a precisão dos resultados, o que faz precisar de se impor uma taxa de deformação crítica mais baixa.

No entanto, considerando a condição de estabilidade numérica para a difusão viscosa dada pela Eq. (38), e assumindo a viscosidade efetiva igual a viscosidade máxima, $v_{eff} = \eta(\dot{\gamma}_{cr})/\rho$ e o passo de tempo $\Delta t = 10^{-5}s$, obtém-se os seguintes valores de D , apresentados na Tab. 05.

Tabela 5 – Análise de estabilidade

$\dot{\gamma}_{cr} [s^{-1}]$	$\eta(\dot{\gamma}_{cr}) [Pa.s]$	D
0,05	99,396	0,994
0,1	50,756	0,507
0,2	26,153	0,261
0,4	13,643	0,136
0,6	9,394	0,094
0,8	7,237	0,072
1,0	5,926	0,059

Uma redução no valor de $\dot{\gamma}_{cr}$ leva a uma redução na quantidade de partículas abaixo da taxa de deformação crítica, no entanto aumenta o valor de D e com isso o

risco de instabilidade no cálculo. Para diminuir o risco de instabilidade deve-se reduzir o passo de tempo, sendo necessário encontrar uma solução de compromisso entre $\dot{\gamma}_{cr}$ e Δt .

3.2.3 Caixa L

A caixa L é um ensaio de escoamento de concreto onde um compartimento vertical é preenchido com concreto fresco e na base se encontra uma comporta, o ensaio prossegue com a rápida abertura da comporta. No caso de concretos mais consistentes, é feita a medição da distância que o concreto avança no compartimento horizontal, para concretos mais fluidos, como os autoadensáveis, é feita a medição da diferença de altura do concreto na base do compartimento vertical e na parede oposta a comporta.

Cremonesi et al. (2010) realizou um estudo computacional utilizando uma pasta de cimento, com densidade $\rho = 2.200 \text{ kg/m}^3$, adotando um modelo de Bingham com parâmetros reológicos $\tau_0 = 15 \text{ Pa}$ e $\mu_p = 50 \text{ Pa.s}$.

Para este caso foram comparados os avanços das frentes viscoplásticas, em caráter qualitativo, dos resultados de Cremonesi et al. (2010) e os resultados obtidos no MPS.

Tabela 6 – Desvio no avanço da frente de onda para cada resolução utilizada e taxa de deformação crítica $\dot{\gamma}_{cr} = 0,2$ e $0,03 \text{ s}^{-1}$.

Resolução	0,5 mm			1,0 mm			2,0mm			5,0mm		
Tempo (s)	1,0	2,0	3,5	1,0	2,0	3,5	1,0	2,0	3,5	1,0	2,0	3,5
$\dot{\gamma}_{cr} = 0,2$	-11%	-15%	N/D	-8%	-17%	-24%	-8%	-13%	-20%	-12%	-20%	-26%
$\dot{\gamma}_{cr} = 0,03$	-9%	-15%	N/D	-9%	-18%	-25%	-7%	-12%	-19%	-12%	-21%	-27%

Observa-se que os resultados obtidos no MPS em geral estão atrasados em relação ao obtido por Cremonesi et al. (2010). No entanto, a evolução das regiões de baixa taxa de deformação, e por consequência alta viscosidade, obtido por Cremonesi et al. (2010) e destacados em cor preta na Fig. 35 esquerda, são reproduzidas no MPS.

Figura 35 – Comparação entre os resultados de Cremonesi et al. (2010) à esquerda e obtidos com o MPS para resolução de 2mm e $\dot{\gamma}_{cr}=0,03 \text{ s}^{-1}$ à direita

Fonte: Cremonesi et al. (2010).

3.2.4 Validação do Cálculo implícito do termo viscoso

Para verificar a solução do sistema de equações para o termo viscoso utilizando o método implícito também foi utilizado um caso de escoamento entre placas planas.

O caso, ilustrado na Fig. 36, possui comprimento $L=0,5\text{m}$ e $h=0,1\text{m}$, as paredes superior e inferior são modeladas com uma condição *no-slip* e laterais esquerda e direita utilizando a condição de contorno de periodicidade.

O espaço entre as placas é preenchido com um fluido cuja viscosidade é modificada para se obter uma variação de números de Reynolds de $Re = 10^0$ até $Re = 10^3$, considerando para o cálculo a distância entre placas como dimensão característica e a velocidade máxima.

Figura 36 – Diagrama do caso de escoamento entre placas planas utilizado na avaliação do cálculo implícito da viscosidade.

Fonte: Autor.

O escoamento é induzido por uma aceleração $\vec{a}$ na direção x . A aceleração é calculada a partir da equação analítica para o escoamento plano de Poiseuille, dada pela Eq. (66)

$$u(y) = \frac{\vec{a}}{2\nu} y(h - y) \quad (66)$$

3.2.4.1 Teste de convergência

Para o teste de convergência foram consideradas as resoluções $h/l_0 = 10, 20, 40, 80$ e 160 .

O erro é calculado utilizando a seguinte equação:

$$erro = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^n \frac{\sqrt{(u_i - \hat{u}_i)^2}}{u_{max}}, \quad (67)$$

onde u_i é a velocidade calculada para cada partícula, $\hat{u}_i$ é a velocidade calculada pela Eq. (66) na posição vertical da partícula i e u_{max} é a velocidade máxima calculada para o escoamento.

A Figura 37 mostra a variação do erro no teste de convergência para os métodos implícito e explícito. O caso com $Re=1$, para o método explícito, apresentou instabilidades para resoluções acima de $h/l_0=80$ o que não ocorreu no método implícito.

Figura 37 – Resultados do teste de convergência para os métodos implícito e explícito.

Fonte: Autor.

Para a análise de eficiência de cada método foi considerada a resolução $h/l_0=40$, por apresentar o menor erro para ambos os métodos.

3.2.4.2 Medição do tempo de processamento consumido

Para a medição do tempo de processamento consumido foi executada uma varredura para Reynolds entre $Re = 10^0$ e $Re = 10^3$, de modo a verificar o ponto onde o método implícito passa a ser vantajoso para o caso simulado.

A Figura 38 mostra os resultados de consumo de tempo obtidos por cada método. O consumo de tempo é medido pelo tempo de processamento normalizado pelo tempo da simulação. Observa-se que, para o método implícito, a variação de Reynolds não influencia no consumo de tempo, no entanto, para o método explícito o tempo tende a aumentar com a diminuição do número de Reynolds. Para $Re > 100$

o método explícito é mais rápido que o implícito, para $Re \leq 100$ ocorre uma mudança e o método implícito passa ter um menor consumo de tempo.

Figura 38 – Consumo de tempo dos métodos implícito e explícito para a resolução $h/l_0=40$

Fonte: Autor.

Este resultado indica que para casos em que $Re \leq 100$ o método implícito pode ser usado com vantagem no consumo de tempo.

3.3 BUSCA DE PARTÍCULA DE PAREDE MAIS PRÓXIMA 2D

Para verificar a eficácia do algoritmo para cálculo da distância entre as partículas de fluido e sua respectiva partícula de parede mais próxima, foram utilizadas algumas geometrias mostradas na Fig. 39.

Nos exemplos, as geometrias são discretizadas com partículas de 0,01m. Como o objetivo é testar o algoritmo de busca de partícula de parede mais próxima, as distâncias entre as partículas de fluido e de parede são calculadas considerando apenas a posição inicial de todas as partículas.

Figura 39 – Geometrias utilizadas nos testes, em verde e marrom são partículas *dummy*, em vermelho e amarelo são partículas de parede e em azul são partículas de fluido. Amarelo e marrom correspondem a partículas do segundo material. Medidas em centímetros.

Fonte: Autor.

Nas imagens dos casos descritos em 3.3.1, 3.3.2 e 3.3.3, são apresentadas a esquerda em destaque as partículas que estão sendo observadas e a direita uma tabela com os dados de material, coordenadas de posição em x , y e z , distância até a partícula de parede mais próxima e os índices da célula a qual a partícula pertence, respectivamente. A escala de cor da partícula indica sua distância até a partícula de parede mais próxima calculada aplicando o algoritmo.

3.3.1 Caso H

No caso H, os canais horizontais têm um espaçamento de 0,17m entre as partículas de parede, o que corresponde a 16 partículas de fluido entre elas. Desta forma, as partículas estariam a uma distância máxima de 0,085m de uma das paredes, no entanto, devido ao arranjo reticulado, tem-se duas partículas em torno da linha média do canal, a 0,08m de distância de suas respectivas paredes. Esta

disposição e valores são coerentes com os valores obtidos pelo método e apresentados na Fig. 40.

Figura 40 – (a) Detalhe da distribuição de partículas no caso H, em preto são as partículas de parede e em cinza as partículas *dummy*. (b) Valores de distância entre a partícula de fluido e a partícula de parede mais próxima, calculados para as partículas destacadas na figura da esquerda.

(a)

(b)

Fonte: Autor.

Os canais verticais possuem 0,10m de largura, e comportam 9 partículas de fluido. Com número ímpar de partículas na seção e com distribuição reticulada, espera-se que haja uma partícula exatamente no centro do canal, ou seja, a 0,05m de distância da parede mais próxima.

A Figura 41 mostra um trecho do canal vertical, as partículas de parede estão nas coordenadas x nas posições 0,10m e 0,20m. No centro do canal em 0,15m há uma partícula onde se pode ver que a distância à parede é máxima de 0,05m, conforme previsto no cálculo anterior.

Figura 41 – Valores da distância à parede mais próxima, calculados para as partículas destacadas na figura da esquerda. Na figura em preto são as partículas de parede, em cinza as partículas *dummy*.

Fonte: Autor.

Na junção entre o canal vertical e o canal horizontal, Fig. 42, observa-se a transição entre a zona de influência da parede vertical e a zona de influência das paredes horizontais. Observando os dados das partículas destacadas na Fig. 42 tem-se que a parede vertical influencia as partículas de fluido até uma distância de 0,08m. A partir deste ponto, as paredes horizontais passam a ter influência sobre as partículas de fluido.

Figura 42 – Detalhe da junção entre os canais horizontal e vertical. Na tabela as linhas destacadas estão sob influência da parede horizontal e que correspondem as partículas mais à direita da seleção.

Material	X	Y	Z	y_p
Parede	0,10	-0,62	0,00	0,00
Fluido	0,11	-0,62	0,00	0,01
Fluido	0,12	-0,62	0,00	0,02
Fluido	0,13	-0,62	0,00	0,03
Fluido	0,14	-0,62	0,00	0,04
Fluido	0,15	-0,62	0,00	0,05
Fluido	0,16	-0,62	0,00	0,06
Fluido	0,17	-0,62	0,00	0,07
Fluido	0,18	-0,62	0,00	0,08
Fluido	0,19	-0,62	0,00	0,080623
Fluido	0,20	-0,62	0,00	0,08

Fonte: Autor.

3.3.2 Caso Z

Para o caso Z, espera-se que no canal inclinado, o método tenha comportamento similar aos canais horizontais e verticais.

Na Fig. 43 pode-se observar que as paredes estão posicionadas nas coordenadas (0,41, -0,39) e (0,51, -0,49), ou seja, com uma variação em x de 0,10m e em y de -0,10m. O canal está inclinado em 45° . Considerando a distribuição reticulada, espera-se que a distância a parede mais próxima das partículas destacadas na Fig. 43 seja múltipla de $0,01 \cdot \sqrt{2}$. Pode-se observar que os resultados obtidos pelo método são coerentes com o esperado para este caso.

Figura 43 – Detalhe da seção inclinada, observa-se que os valores de distância à parede mais próxima das partículas destacadas são múltiplos de $0,01 \cdot \sqrt[3]{2}$.

Fonte: Autor.

Na junção do canal inclinado com o canal horizontal superior é um local onde ocorre o encontro dos contornos em três posições distintas: horizontal, vertical e inclinada a 45° .

A Figura 44 mostra que as curvas de igual distância a parede mais próxima para as partículas de fluido na junção acompanham as paredes, conforme comportamento visto nos casos anteriores. Observa-se também que a parte central da junção é mais distante das paredes e que na região de encontro das paredes, que formam um ângulo agudo, não houve problemas para o cálculo da distância.

Figura 44 – Na esquerda, distribuição do valor de y_p nas partículas e, na direita, curvas com y_p constante.

Fonte: Autor.

3.3.3 Caso com dois corpos

Neste caso é considerada a presença de dois corpos distintos e suas paredes, o que não deve gerar qualquer problema, uma vez que o método distingue apenas se o material é parede ou fluido.

No caso analisado, mostrado na Fig. 45, para um dos corpos, considerou-se o formato cilíndrico para averiguar o comportamento do método com paredes curvilíneas. Espera-se que as curvas de igual distância à parede acompanhem as paredes curvas.

Figura 45 – Detalhe das partículas entre dois materiais distintos. Em escala de cinza estão as partículas de parede e *dummy* para cada um dos sólidos.

Material	X	Y	Z	y_p
Parede 1	0,44	-0,10	0,00	0,00
Fluido	0,44	-0,11	0,00	0,01
Fluido	0,44	-0,12	0,00	0,02
Fluido	0,44	-0,13	0,00	0,03
Fluido	0,44	-0,14	0,00	0,04
Fluido	0,44	-0,15	0,00	0,05
Fluido	0,44	-0,16	0,00	0,04
Fluido	0,44	-0,17	0,00	0,03
Fluido	0,44	-0,18	0,00	0,02
Fluido	0,44	-0,19	0,00	0,01
Parede 2	0,44	-0,20	0,00	0,00

Fonte: Autor.

A Figura 45 mostra os valores calculados para as partículas destacadas. Pode-se ver que o canal formado entre a parede horizontal e o cilindro é calculado adequadamente. Na Figura 46 observa-se que a distância calculada pelo método na superfície do cilindro é coerente com o esperado, as curvas equidistantes à parede acompanham as paredes. Algumas curvas apresentam cantos chanfrados onde se espera cantos vivos devido ao processo de pós-processamento que necessita interpolar os dados das partículas

Figura 46 – As curvas de igual distância a parede acompanham a superfície do obstáculo.

Fonte: Autor.

3.4 BUSCA DA PARTÍCULA DE PAREDE MAIS PRÓXIMA 3D

Para verificar a eficácia do algoritmo de busca da partícula de parede mais próxima em um caso tridimensional dinâmico, foi utilizado um caso de *dam break* com obstáculo, uma vez que a validação do método de busca independe dos efeitos hidrodinâmicos, estes não foram analisados. As dimensões do caso são mostradas na Fig. 47. O caso foi discretizado utilizando partículas de 0,02m.

Figura 47 – À esquerda, geometria e dimensões do caso, à direita, discretização com partículas, onde em vermelho são as partículas *dummy*, em verde as partículas de parede e em azul as partículas de fluido. As paredes laterais frontal e traseira foram removidas para melhor visualização.

Fonte: Autor.

O funcionamento do método pode ser visto na Fig. 48, onde no instante inicial o maior valor para y_p é 0,3m, o que confere com a geometria do bloco de fluido. Pode-se observar também, que o perfil de variação de y_p no plano horizontal e vertical são condizentes com as restrições impostas pelas paredes.

Observa-se que mesmo com a desordenação das partículas e a fragmentação da superfície livre, o cálculo de y_p é feito de conforme o esperado.

Para uma análise quantitativa foi escolhido o instante de tempo $t=0,5$ s, instante no qual a frente de onda passa pelo obstáculo, a Fig. 49 mostra a seção considerada para análise, com a escala de cores mostrando a distância. A Fig. 50 mostra as partículas destacadas em magenta, utilizadas para a análise e os resultados na tabela mostram que a distância calculada das partículas de fluido a parede é compatível com a real distância das partículas a parede mais próxima.

Figura 48 – Visualização da distância até a parede mais próxima em tempos distintos.

Fonte: Autor.

Figura 49 – Destaque da seção utilizada na verificação do algoritmo no caso de *dam break*

Fonte: Autor.

Figura 50 – Detalhe das partículas ao redor do pilar, em destaque as partículas com os dados mostrados na tabela.

Fonte: Autor.

3.5 ESCOAMENTO TURBULENTO

Nesta subseção quatro casos de *benchmark* para escoamentos turbulentos são apresentados.

O primeiro caso é o escoamento de Poiseuille turbulento que utiliza o conceito de pnd médio (pnd_{avg}) e também faz uso de um algoritmo condicionador de fluxo para realimentar as partículas na simulação.

O segundo caso é o de escoamento em cavidade quadrada impulsionado pelo deslocamento da tampa, onde os resultados são comparados com os obtidos por um código de simulação numérica direta (DNS), onde a resolução da malha é refinada para conseguir capturar vórtices em escalas pequenas.

O terceiro caso é o de escoamento ao redor de um cilindro, onde é analisada a frequência de desprendimento de vórtices. Os resultados obtidos com o MPS são comparados com uma compilação de resultados experimentais apresentada por Blevins (2001).

O quarto caso se trata de uma aplicação para a engenharia hidráulica na avaliação de ressaltos hidráulicos para dissipação de energia. Neste caso são verificados os parâmetros que caracterizam o ressalto e comparados com os resultados experimentais de Peterka (1974).

3.5.1 Escoamento de Poiseuille turbulento

O caso consiste de duas paredes sem escorregamento, uma no fundo e uma no topo de uma camada de fluido, o canal possui uma razão de aspecto de 1:12. O fluido é um líquido hipotético de viscosidade cinemática $\nu=10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$, o escoamento é induzido por um algoritmo condicionador de fluxo (BELLEZI et al., 2013) que fornece uma entrada de fluido com escoamento uniforme. O escoamento se desenvolve no canal e chega à linha de medição, localizada a distância de 9,7m da entrada, já completamente desenvolvido. O número de Reynolds atingido pela simulação considerando a velocidade média dentro do canal é $Re=64.600$.

A algoritmo condicionador de fluxo adotado realimenta as partículas que saem do domínio computacional pela condição de contorno a jusante na condição de contorno a montante, ao mesmo tempo efetua-se um tratamento da velocidade de modo que a velocidade das partículas realimentadas obedeça a um perfil de velocidade predeterminado.

A geometria do caso de Poiseuille é dada pela Fig. 51, a distância entre partículas adotada para este caso foi de 0,01m, equivalente a uma resolução de 100 partículas/espessura do canal

Figura 51 – Geometria e dimensões do caso (unidade: metros)

Fonte: Autor.

Como este é um caso considerado confinado, foi utilizado o conceito de pnd_{avg} , para verificar a incompressibilidade, o histórico de tempo dos valores de pnd_{avg} é mostrado na Fig. 52. Observa-se na figura que o valor de pnd_{avg} aumenta do seu valor inicial de aproximadamente 6,29 para aproximadamente 6,38, um aumento de menos de 1,5% e pode ser considerado um escoamento incompressível.

Figura 52 – Histórico de tempo do pnd_{avg} para um escoamento de Poiseuille com $Re=64.600$

Fonte: Autor.

Após a verificação da incompressibilidade, o perfil de velocidade na posição $x=9.7m$ é analisado. Para melhor analisar o perfil de velocidade, uma coluna de 3 cm, o equivalente a 3 partículas de largura, é considerada como volume de controle e a velocidade de cada partícula dentro deste volume é impressa na Fig. 53.

Comparando os resultados de simulação com os experimentos de Telbany e Reynolds (1980), há uma boa concordância nos perfis de velocidade com um pequeno desvio próximo das paredes do canal.

Figura 53 – Perfil de velocidade para o escoamento de Poiseuille, $Re=64.600$

Fonte: Autor.

3.5.2 Escoamento turbulento em uma cavidade quadrada impulsionado pela tampa

Este caso consiste em uma cavidade quadrada cheia de fluido com lado $L=15$ cm e uma tampa que move a uma velocidade constante $\vec{v}=2,0$ m/s. A análise do escoamento é baseada na velocidade do fluido perpendicular a duas seções indicadas na Fig. 54.

Figura 54 – Geometria do caso e seções de análise

Fonte: Autor.

3.5.2.1 Convergência

Para analisar a convergência, as velocidades das partículas nas seções 1 e 2 da cavidade foram calculadas para a distância entre partículas l_0 de 3mm, 2mm, 1mm e 0,5mm, o que corresponde as resoluções $\frac{L}{l_0} = 50, 75, 150$ e 300, respectivamente. A medição foi feita em uma região de aproximadamente 7mm de espessura para permitir a captura da informação de um número maior de partículas. O número de Reynolds do escoamento é $Re=3.200$.

Os resultados da medição são mostrados na Fig. 55, onde cada ponto representa uma partícula e a posição é adimensionalizada com relação à dimensão lateral da cavidade quadrada.

Figura 55 – Velocidade horizontal na seção 1 e velocidade vertical na seção 2 pra $Re=3.200$ e distância entre partículas de 3mm, 2mm, 1mm e 0,5mm e resolução 50, 75, 150 e 300 respectivamente.

Fonte: Autor.

A Figura 55 mostra que em ambas as seções, exceto para a resolução mais grosseira $L/l_0 = 50$ ($l_0 = 3$ mm), os perfis de velocidade são próximos, indicando uma boa convergência dos resultados numéricos. Nas regiões próximas do fundo e das paredes laterais, há uma dispersão um pouco maior na velocidade das partículas devido à turbulência nestas regiões. Por outro lado, na tampa da cavidade os perfis são praticamente iguais por ser uma região de fluxo laminar.

A Figura 56 mostra as linhas de fluxo no instante $t=10$ s para cada resolução estudada. No instante mostrado, o centro do vórtice principal não demonstra um deslocamento expressivo, e considera-se que o escoamento permanente foi atingido.

O método de Convolução de Integral de Linha (LIC), aplicado para a obtenção das linhas de fluxo, utiliza a informação instantânea do campo vetorial para traçar as linhas de fluxo. Por isso, as linhas são mais nítidas onde as partículas possuem uma direção e velocidade bem definidas. No vórtice secundário, onde o deslocamento das partículas possui mais ruído, as linhas não são bem desenhadas e em alguns casos de baixa resolução nem chegam a ser desenhadas.

Para as quatro resoluções consideradas no caso de estudo, os centros do vórtice principal estão quase na mesma posição e o formato do vórtice é bastante similar, mostrando apenas pequenas variações entre as resoluções.

No canto inferior direito pode-se observar um vórtice secundário devido ao fluxo descendente ao longo da parede direita inicialmente com a resolução $L/l_0 =$

150 ($l_0=1$ mm) e para a resolução $L/l_0 = 300$ ($l_0=0.5$ mm) o vórtice possui uma definição um pouco melhor.

Figura 56 – Linhas de fluxo para $Re=3.200$ e distância entre partículas de 3.0mm, 2.0mm, 1.0mm e 0.5mm, resoluções L/l_0 de 50, 75, 150 e 300 respectivamente.

Fonte: Autor.

3.5.2.2 Resultados

Os perfis de velocidade obtidos pela simulação com o modelo de turbulência são comparados com os perfis obtidos sem o modelo e os obtidos por DNS usando diferenças finitas.

A Figura 57 mostra a comparação dos resultados obtidos para o caso com $Re=3.200$ e resolução L/l_0 150 ($l_0=1$ mm). Próximo da tampa, o perfil de velocidade é bastante similar entre as três resoluções devido ao escoamento laminar aderido à tampa. Nas outras regiões o perfil de velocidades do caso sem modelo de turbulência mostra um vórtice principal com menor intensidade comparado com o caso que utiliza o modelo. No geral, o perfil de velocidade obtido com o modelo de

turbulência e resolução L/l_0 150 ($l_0=1\text{mm}$) é bem próxima ao obtido por Ghia, Ghia e Shin (1982).

Figura 57 – Comparação dos perfis de velocidade: em azul MPS com modelo de turbulência, em vermelho MPS sem modelo de turbulência e em verde os resultados obtidos por Ghia, Ghia e Shin (1982)

Fonte: Ghia, Ghia e Shin(1982).

A Figura 58 mostra uma comparação entre as linhas de fluxo obtidas pelo MPS e as linhas de fluxo obtidas por Ghia, Ghia e Shin(1982) utilizando simulação numérica direta e diferenças finitas, no qual um esquema *multigrid* foi utilizado na solução, para os números de Reynolds $Re=3.200$ e $Re=10.000$. As resolução utilizada no MPS foi $L/l_0=300$ para ambos números de Reynolds enquanto que as resoluções utilizadas por Ghia, Ghia e Shin(1982) foram $L/\Delta x=129$ para $Re=3.200$ e $L/\Delta x=257$ para $Re=10.000$, onde Δx é a dimensão das células.

Comparando as imagens da simulação com o MPS e de Ghia, Ghia e Shin (1982), algumas diferenças podem ser observadas, principalmente os vórtices secundários. Apesar das diferenças entre linhas de fluxo e linhas de corrente, pode ser concluído que o tamanho dos vórtices secundários é menor nos resultados do MPS, o que pode indicar que a resolução utilizada é insuficiente para capturar estes

vórtices. Também para $Re=10.000$ não há a formação de duplo vórtice no canto inferior esquerdo, o que também pode ser um indicativo de resolução insuficiente.

Figura 58 – Comparação das linhas de fluxo: a esquerda obtidas da simulação com MPS e a direita as linhas obtidas por Ghia, Ghia e Shin(1982)
($L/\Delta x=129$ para o $Re=3.200$ e $L/\Delta x=257$ para o $Re=10.000$)

Fonte: Ghia, Ghia e Shin(1982).

3.5.3 Escoamento ao redor de um cilindro

O caso ilustrado na Fig. 59 consiste em um cilindro de diâmetro $D_{cil}=1.0m$ com o centro posicionado a meia altura e a uma distância de $9,5D_{cil}$ da condição de contorno de influxo. A direção do escoamento é da esquerda para a direita com velocidade constante de $\vec{u}=3,0$ m/s e perfil de velocidade uniforme na entrada.

Figura 59 – Geometria e parâmetros do caso

Fonte: Autor.

Utilizando o diâmetro do cilindro como comprimento característico, os resultados numéricos para diversos números de Reynolds são obtidos pela mudança na viscosidade do fluido, como mostrado na Tab. 7.

Tabela 7 – Relação entre a viscosidade e o número de Reynolds das simulações

Viscosidade ν [m ² /s]	Re
0.006	500
0.003	1.000
0.0006	5.000
0.0003	10.000
0.00006	50.000
0.00003	100.000

As condições de contorno superior e inferior são condições de periodicidade, e a condição de parede sem escorregamento é aplicada no cilindro. Nas condições de contorno da esquerda e direita é aplicado o condicionador de fluxo (BELLEZI et al., 2013).

3.5.3.1 Convergência

Um caso com $Re = 5.000$ foi simulado com 4 resoluções diferentes. As medições dos custos computacionais em um computador intel Xeon são mostradas na Tab. 8

Tabela 8 – Custos computacionais das 5 resoluções testadas

Distância entre partículas [m]	Resolução [D_{cil}/l_0]	Número de partículas	Tempo de simulação
0,100	10	29.500	32m
0,050	20	118.000	4h04m
0,025	40	472.000	2d4h22m
0,0125	80	1.888.000	15d00h58m

A Figura 60 mostra o histórico de pressão calculado no ponto de estagnação no lado a montante do cilindro para a resolução de $40 D_{cil}/l_0$. O histórico de pressão mostra um aumento no período inicial da simulação, devido à imposição de pressão zero como condição inicial. No instante de tempo $t=10s$ a pressão estabiliza, oscilando em torno de um valor médio.

Figura 60 – Histórico da pressão no ponto de estagnação a montante do cilindro para $Re=5.000$ e resolução $40 D_{cil}/l_0$

Fonte: Autor.

A Figura 61 mostra o período de desprendimento de vórtices para o caso com $Re=5.000$ para as 4 resoluções testadas. Tomando por base o período de desprendimento de vórtices da resolução de $80 D_{cil}/l_0$, a resolução de $10 D_{cil}/l_0$ possui um período 17,7% maior, a resolução de $20 D_{cil}/l_0$ reduz a diferença para 6,2% e a resolução de $40 D_{cil}/l_0$ possui uma diferença no período de 1,8%. Para as resoluções entre $10 D_{cil}/l_0$ e $20 D_{cil}/l_0$ há uma variação de aproximadamente 0,2Hz, entre $20 D_{cil}/l_0$ e $40 D_{cil}/l_0$ há uma variação de 0,08Hz e de $40 D_{cil}/l_0$ a $80 D_{cil}/l_0$ são 0,07Hz, mostrando uma convergência para este caso. A resolução de $40 D_{cil}/l_0$ foi escolhida para as análises seguintes como uma solução de compromisso entre precisão e custo computacional.

Figura 61 – Período de desprendimento de vórtices para o caso com $Re=5.000$ e resoluções de 10, 20, 40 e 80 D_{cil}/l_0

Fonte: Autor.

3.5.3.2 Dependência do Número de Strouhal

A Figura 62 mostra a evolução temporal da distribuição de velocidade e de viscosidade turbulenta no canal. Observa-se a formação de vórtices simétricos no começo da simulação, quando a velocidade do escoamento ainda é baixa.

A partir de 3,5 s, quando o escoamento já atingiu a velocidade final, começa a ocorrer o desprendimento de vórtices.

A viscosidade turbulenta aparece com maior intensidade próximo das paredes, onde há uma maior dissipação de energia pelo modelo de turbulência.

Figura 62 – Distribuição da magnitude de velocidade e da viscosidade total (fluido + viscosidade turbulenta) para $Re=5000$, resolução $40 D_{cil}/l_0$ e $t=20s$

Fonte: Autor.

Os resultados de Reynolds x Strouhal são apresentados na Fig. 63, adaptados dos resultados experimentais compilados por Blevins (1990). Os resultados da simulação com o MPS são mostrados com marcadores azuis para a resolução de $40 D_{cil}/l_0$. Em geral, os resultados numéricos mostraram boa concordância com os resultados experimentais. Para $Re=500$ e $Re=1.000$ o número de Strouhal obtido da simulação é de aproximadamente 0,15 enquanto os resultados de Blevins (1990) estão na faixa de 0,20, neste caso a resolução pode ter sido insuficiente para uma boa reprodução da geometria lisa do cilindro e do desprendimento de vórtices em baixos números de Reynolds. Para os Reynolds mais elevados observa-se uma boa aproximação entre os resultados numéricos e os experimentais.

Figura 63 – Gráfico de dependência entre os números de Strouhal x Reynolds obtido por Blevins (1990) com os resultados do MPS, representado pelos pontos azuis, sobrepostos para a resolução de $40 D_{cil}/l_0$.

Fonte: Blevins (1990)

3.5.4 Ressalto hidráulico

O ressalto hidráulico é um fenômeno de escoamento turbulento com superfície livre, onde o escoamento de um canal passa do regime torrencial para o regime fluvial e com isso há uma perda energia. Esta perda de energia é estudada na engenharia hidráulica como forma de proteção de estruturas hidráulicas e do leito de rios.

Neste caso foi utilizado um canal baseado nas dimensões do “canal F” descrito por Peterka (1974). O canal físico possui inclinação ajustável e dimensões de 1 pé de largura por 20 pés de comprimento. Nos experimentos feitos por Peterka (1974) o canal foi mantido na horizontal, enquanto que o ajuste na profundidade a jusante do ressalto é feita por meio de uma barragem ao final do canal.

O canal modelado, ilustrado na Fig. 64, é composto por um tanque de carga constante H para regular o escoamento, na base do tanque há uma abertura de altura $h=0.10\text{m}$. O canal tem um comprimento $l=6\text{m}$ e o nível inicial da água no canal é igual à altura da abertura e a altura da água a jusante, d_2 , é regulada ajustando-se à altura da barragem ao final do canal.

Figura 64 – Geometria do canal modelado baseado no “canal F”

Fonte: Peterka (1974).

O número de Froude, Fr , é definido pela Eq. (68)

$$Fr = \frac{u_{caract}}{\sqrt{g \cdot L}}, \quad (68)$$

onde u_{caract} é a velocidade característica do escoamento, g é a aceleração da gravidade e L é um comprimento característico. Para este estudo, são considerados com velocidade característica a velocidade média na seção de medição e como comprimento característico a profundidade na seção de medição.

3.5.4.1 Teste de convergência

Para o teste de convergência, a vazão de influxo é fixada em $q=0,175 \text{ m}^3/\text{s}$ e as resoluções consideradas são $h/l_0=5, 10, 20$ e 40 .

Primeiramente foi analisada a variação do coeficiente de descarga da abertura em função da variação da resolução, de modo a encontrar uma resolução que reproduza a vazão na abertura. Em seguida, os efeitos da resolução na variação do número de Froude na seção de montante do ressalto, Fr_1 , são verificados para assegurar que as características do escoamento também são reproduzidas para a resolução escolhida.

O valor de Fr_1 é calculado na seção da *vena contracta*, logo após a abertura, esta mesma seção é utilizada para calcular a vazão que passa pela abertura.

Os escoamentos por aberturas, como o deste caso, são chamados de *sluice-gate*. O coeficiente de descarga, Cd , foi estudado por Swamee (1992) que estabeleceu a seguinte relação baseado nas alturas H e h , com base nos trabalhos de Henry (1950):

$$Cd = 0,611 \left(\frac{H - h}{H + 15h} \right)^{0,072}, \quad (69)$$

Utilizando a Eq.(69), o coeficiente de descarga teórico para este caso é $Cd = 0,544$.

A Figura 65a mostra que o Cd calculado baseado nas simulações do MPS possuem boa concordância com o valor teórico. A Fig. 65b mostra a relação entre o Cd dos casos e o Cd da maior resolução em função da resolução. Observa-se que a taxa de redução diminui com o aumento da resolução, a diferença entre $h/l_0=20$ e $h/l_0=40$ é abaixo de 2,5%, indicando que a resolução $h/l_0=20$ é a resolução boa para a simulação da descarga.

Figura 65 – Teste de convergência para a abertura. (a) Comparação do coeficiente de descarga com o valor teórico, (b) Diferença em relação ao caso com maior resolução

Fonte: Autor.

Para as comparações a seguir as medições foram feitas utilizando os resultados numéricos. As simulações possuem 60 segundos de duração, dos quais os primeiros 30 segundos são descartados devido ao transiente inicial. Nos 30 segundos seguintes foram feitas medições a cada 0,5s, totalizando 60 medições. Estas medições foram divididas em quartis para melhor representar a dispersão dos resultados e exibidas em forma de gráfico de caixas.

A Figura 66 mostra o Cd calculado a partir das simulações com resolução $h/l_0=20$ com e sem modelo de turbulência, variando a vazão de entrada. A média de Cd é bem próxima da curva teórica definida pela Eq.(69) enquanto que o segundo e terceiro quartis estão bem próximos da média, indicando boa concordância e consistência dos resultados de descarga.

Figura 66 – Comparação da do coeficiente de descarga com e sem modelo de turbulência em relação à equação teórica, resolução $h/l_0=20$.

Fonte: Autor.

A Figura 67a mostra que até a resolução $h/l_0=20$ o número de Froude aumenta e se mantém praticamente constante para a resolução maior. A Fig. 67b mostra a diferença em relação ao caso de maior resolução. Neste caso também a diferença entre a resolução $h/l_0=20$ e $h/l_0=40$ é menor que 2,5%, indicando um bom compromisso entre precisão e custo computacional.

Figura 67 – Teste de convergência de Fr_1 (a) em função da resolução e (b) diferença de Fr_1 em relação ao valor para a maior resolução

Fonte: Autor.

3.5.4.2 Resultados

Nas comparações seguintes, os resultados experimentais de Peterka (1974) são aproximados por curvas e apresentados como linha de tendência experimental.

O primeiro resultado de comparação é a relação de profundidades d_2/d_1 . Esta relação é bem conhecida da teoria do ressalto hidráulico e é função do número de Froude conforme a Eq. (70)

$$d_2/d_1 = \frac{1}{2} \left(\sqrt{1 + 8Fr_1^2} - 1 \right), \quad (70)$$

A Figura 68 mostra que a média dos valores obtidos com e sem o modelo de turbulência se aproximam bem da curva de tendência experimental. Por outro lado, a dispersão dos resultados aumenta com o aumento do número de Froude, o que é devido a maior oscilação da superfície da água a jusante na seção de medição de d_2 . Não obstante, quando o modelo de turbulência é adotado, a dispersão é menor para $Fr_1 = 6$, mostrando que apesar da contribuição do modelo de turbulência não ser muito significativa, por ser um fenômeno dominado pelo Froude, a adoção do modelo de turbulência leva a uma estimativa um pouco mais estável de d_2 .

Figura 68 – Influência do modelo de turbulência na relação de profundidades d_2/d_1 , resolução $h/l_0=20$.

Fonte: Autor.

O comprimento do ressalto hidráulico é definido utilizando a base da onda de recirculação como ponto de início e o ponto de término é o mais distante dentre o ponto de onde o jato de alta velocidade da descarga desprende do fundo do canal, ou o ponto imediatamente a jusante da onda de recirculação, o que aumenta significativamente a dificuldade de medição.

A Figura 69 mostra que em geral o MPS subestimou o comprimento médio do ressalto hidráulico. No entanto para $Fr_1 > 4$ os quartis superiores se sobrepõem com os resultados experimentais, indicando uma aproximação dos resultados.

Nos resultados com o modelo de turbulência, os resultados com $Fr_1 < 4$ ficam abaixo da linha de tendência experimental, no entanto para $Fr_1 > 4$ a média dos resultados do MPS se aproxima da linha de tendência experimental, indicando uma melhor concordância do comprimento de ressalto com a adoção do modelo de turbulência. Os resultados com a adoção do modelo também apresentam uma menor dispersão em relação aos resultados sem o uso do modelo de turbulência.

Figura 69 – Influência do modelo de turbulência no comprimento do ressalto com a profundidade d_1 , resolução $h/l_0=20$

Fonte: Autor.

A Figura 70 mostra a perda de energia devido ao ressalto hidráulico. Em geral os resultados do MPS com modelo de turbulência mostram uma melhor concordância com os resultados experimentais, e em geral possui uma menor dispersão que os resultados obtidos sem o modelo de turbulência.

Figura 70 – Influência do modelo de turbulência na perda de energia em relação a energia inicial, resolução $h/l_0=20$

Fonte: Autor.

A melhoria na acurácia e estabilidade dos resultados mostra que o MPS com modelo de turbulência provê resultados ligeiramente melhores que o MPS sem modelo de turbulência.

4 CONCLUSÕES

Como uma primeira aproximação para a aplicação de métodos de partículas para a simulação do escoamento de concreto acoplado com a difusão térmica, este estudo mostrou a formulação e a técnica numérica adotada para a modelagem do problema multi-físico.

No estudo da difusão térmica, três casos idealizados foram considerados neste estudo para avaliar o potencial e detectar problemas relacionados ao lançamento do concreto e o gradiente de temperatura, por meio de simulação computacional, antes da execução em obra. Simplificações como a modelagem do concreto fresco como um fluido Newtoniano homogêneo e altamente viscoso e formas de geometria simples foram adotadas. No entanto, a comparação dos resultados calculados para os três casos revelou algumas questões interessantes. Por exemplo, o Caso 3, com um obstáculo atravessante, um gradiente de temperatura relativamente grande é gerado devido às características do escoamento.

Com os modelos reológicos para fluidos não-newtonianos, foram analisados um escoamento entre placas planas paralelas e um *dam break* como casos de *benchmark* e validação, com boa concordância com resultados analíticos e experimentais respectivamente. Como caso de aplicação, foi estudado o escoamento em uma caixa-L, utilizado na avaliação da trabalhabilidade do concreto, os resultados foram comparados com resultados experimentais mostrando uma boa concordância na velocidade de avanço da frente de escoamento com os resultados de Cremonesi et al. (2010).

Com a grande variação de viscosidade nos fluidos não-newtonianos, o método explícito de cálculo dos termos viscosos apresentou uma limitação de passo de tempo, devido ao critério de estabilidade, que faz com que o tempo consumido por cada simulação aumentasse. Para contornar esta questão, foi proposta a aplicação de um método implícito para o cálculo dos termos viscosos e de forças de campo. Apesar de ser mais demorado para a solução do sistema linear, o método implícito permite o uso de passos de tempo maiores. Os testes comparativos entre os métodos mostraram que para uma mesma resolução e números de $Re < 100$ o método implícito é mais rápido. Também foi observado que o método implícito possui um erro menor para casos com altas resoluções.

No estudo da turbulência, com o número de Reynolds elevado, grande parte das partículas possuem y^+ acima de 200, deixando apenas uma pequena camada onde é necessária a aplicação do modelo de parede. Em alguns casos esta camada é menor do que a distância entre partículas, nesses casos não é feito o cálculo do modelo de parede e o LES é aplicado diretamente.

O método para identificação da partícula de parede mais próxima é aplicado para todas as partículas de fluido do domínio, tornando-o um método mais genérico e que pode ser aplicado para geometrias complexas.

Para melhorar a eficiência, o método de busca da partícula de parede mais próxima aproveita a estrutura de células e dados da busca de vizinhança já executada pelo MPS normalmente, com isso conseguiu-se uma redução significativa do volume de cálculos a serem executados.

Casos de geometria variada e com obstáculos dentro da geometria foram utilizados para testar a eficácia do método. Os resultados mostraram que o cálculo da distância é igual ao analítico e condizente com o esperado para os casos mais complexos.

Nos casos tridimensionais, o método se mostrou funcional calculando as distâncias conforme o esperado, independente de ordenação das partículas ou mesmo se houve fragmentação da superfície livre.

O uso do pnd_{avg} resultou em simulações mais estáveis para escoamentos confinados, sem afetar a incompressibilidade do escoamento.

Os resultados de perfil de velocidade obtidos para o caso de escoamento em cavidade quadrada impulsionado pela tampa são coerentes com os obtidos por Ghia; Ghia e Shin (1982), utilizando simulação numérica direta por diferenças finitas.

Os vórtices secundários não ficaram bem definidos, sendo uma das possíveis causas a necessidade de maior refinamento do caso.

O caso de escoamento em torno de um cilindro forneceu resultados coerentes com os obtidos na literatura, com desprendimento alternado de vórtices para números de Reynolds acima de 1000.

Apesar da discrepância no número de Strouhal para Reynolds 500 e 1.000, observou-se uma boa aproximação dos resultados numéricos com os resultados experimentais compilados por Blevins. A discrepância nos valores de Strouhal para

os Reynolds mais baixos pode ser devido a irregularidades na superfície do cilindro devido ao processo de discretização do objeto.

Como aplicação do modelo de turbulência em um escoamento com superfície livre, foi estudado o ressalto hidráulico em um canal. A relação entre as profundidades d_2/d_1 mostrou uma boa concordância com os resultados experimentais e os resultados com o modelo de turbulência mostraram uma menor dispersão. A medição do comprimento do ressalto apresentou uma dificuldade maior devido aos movimentos oscilatórios a jusante do ressalto. Mesmo assim, o MPS com modelo de turbulência mostrou menor desvio e dispersão do que o MPS sem modelo de turbulência em relação aos resultados experimentais. Com relação à perda de energia no ressalto hidráulico a dispersão foi menor do que em outros parâmetros e o MPS com modelo de turbulência também mostrou uma melhor concordância com resultados experimentais.

Conforme mostrada na tese, diversas partes do método MPS foram aprimoradas neste trabalho e diversos métodos e técnicas desenvolvidas para incorporar um sistema capaz de simular escoamentos não-newtonianos ligados à engenharia civil foram processados.

Durante o desenvolvimento foi possível reconhecer desafios e a amplitude do assunto. Com este reconhecimento, foi possível desenvolver um sistema que possa atender algumas necessidades de simulação de fluidos newtonianos e não-newtonianos, sujeitos a efeitos de variação térmica e turbulência para a engenharia civil.

Com o desenvolvimento deste sistema, consegue-se um passo essencial para alavancar novas pesquisas de desenvolvimento e aplicação baseadas no método partículas.

Como sugestão de trabalhos futuros tem-se:

- O estudo da influência da temperatura na viscosidade do fluido,
- Estudo de fluidos com viscosidade variável no tempo,
- Estudo da influência da turbulência na difusão térmica;
- Estudo de outros métodos de modelagem da turbulência mais apropriados para os escoamentos não abordados nesta tese

REFERÊNCIAS

- AKIMOTO, H. Numerical simulation of the flow around a planing body by MPS method. **Ocean Engineering**, v. 64, p. 72–79, 2013.
- ALFERES FILHO, R. S. et al. EVALUATING THE APPLICABILITY OF RHEOMETRY IN STEEL FIBER REINFORCED SELF COMPACTING CONCRETES. **IBRACON Structures and Materials Journal**, v. 9, n. 6, p. 969–988, 2016.
- ALLEN, M. P.; TILDESLEY, D. J. **Computer simulation of liquids**. Oxford: Clarendon press, 1987.
- AMARO JUNIOR, R. A.; CHENG, L. Y. Brittle fracture and hydroelastic simulations based on moving particle simulation. **Computer Modeling in Engineering & Sciences**, v. 95, n. 2, p. 87–118, 2013.
- ARAI, J.; KOSHIZUKA, S.; MUROZONO, K. Large eddy simulation and a simple wall model for turbulent flow calculation by a particle method. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 71, n. 6, p. 772–787, 28 fev. 2012.
- BELLEZI, C. A. et al. **Flow conditioning modeling and application to particle method**. 3rd International Conference on Particle-Based Methods Fundamentals and Applications, Particles 2013. **Anais...** Stuttgart; Germany: 2013
- BLEVINS, R. D. **Flow-Induced Vibration**. Malabar: Krieger Publishing Company, 2001.
- CHEN, R. et al. Numerical investigation on melt freezing behavior in a tube by MPS method. **Nuclear Engineering and Design**, v. 273, p. 440–448, jul. 2014.
- CREMONESI, M. et al. Simulation of the flow of fresh cement suspensions by a Lagrangian finite element approach. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 165, n. 23–24, p. 1555–1563, dez. 2010.
- DA MATA, M. S. et al. **Modelagem numérica para fluidos não newtonianos utilizando o modelo Bingham-Papanastasiou e o método Moving Particle Semi-Implicit (MPS)**. 2017 Disponível em: <<http://www.swge.inf.br/proceedings/paper/?P=CILAMCE2017-0757>>
- DE LARRARD, F.; FERRARIS, C. F.; SEDRAN, T. Fresh concrete: A Herschel-Bulkley material. **Materials and Structures**, v. 31, n. 7, p. 494–498, ago. 1998.
- FADAFAN, M. A.; KERMANI, M.-R. H. **Modeling of flow over an ogee spillway using moving particle semi-implicit method**. E-proceedings of the 36th IAHR World Congress. **Anais...** 2015 Disponível em: <<https://www.flow3d.com/wp-content/uploads/2014/04/Numerical-Study-of-Overflow-Capacity-of-Spillways.pdf>>. Acesso em: 5 abr. 2017
- FARIA, É. F. DE. **Predição da exotermia da reação de hidratação do concreto através de modelo termo-químico e modelo de dados**. [s.l.] UFRJ, 2004.

FU, L.; JIN, Y.-C. A mesh-free method boundary condition technique in open channel flow simulation. **Journal of Hydraulic Research**, v. 51, n. 2, p. 174–185, abr. 2013.

GHIA, U.; GHIA, K. .; SHIN, C. . High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method. **Journal of Computational Physics**, v. 48, n. 3, p. 387–411, dez. 1982.

GOMES, F. M. P.; GAMBALE, E. DE A. Experimentação e Modelagem Termomecânica da Caixa Espiral da UHE Batalha R2. **Anais do 54º Congresso Brasileiro do Concreto**, 2012.

GOTOH, H.; KHAYYER, A.; HORI, C. New Assessment Criterion of Free Surface for Stabilizing Pressure Field in Particle Method [in Japanese]. **Journal of Japan Society of Civil Engineers, Ser. B2 - Coastal Engineering**, v. 65, n. 1, p. 21–25, 2009.

GOTOH, H.; SAKAI, T.; SHIBAHARA, T. Lagrangian flow simulation with sub-particle-scale turbulence model. **Proceedings of hydraulic engineering**, v. 44, p. 575–580, 2000.

HEINZ, T. N.; HUNENBERGER, P. H. A fast pairlist-construction algorithm for molecular simulations under periodic boundary conditions. **Journal of Computational Chemistry**, v. 25, n. 12, p. 1474–1486, 2004.

HENRY, H. R. Discussion of Diffusion of submerged jets. **Transactions of ASCE**, v. 115, n. 1, p. 687–694, 1950.

KOSHIZUKA, S. Current Achievements and Future Perspectives on Particle Simulation Technologies for Fluid Dynamics and Heat Transfer. **Journal of Nuclear Science and Technology** (日本原子力学会英文論文誌), v. 48, n. 2, p. 155–168, 2011.

KOSHIZUKA, S.; OKA, Y. Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid. **Nuclear science and engineering**, v. 123, n. 3, p. 421–434, 1996.

LEE, B. H. et al. Moving particle simulation for mitigation of sloshing impact loads using surface floaters. **Computer Modeling in Engineering and Sciences**, v. 75, n. 2, p. 89–112, 2011.

LEITE, L. O. B. **Determinação física e numérica de corridas de lama resultantes de ruptura de barreira retendo material viscoplástico**. [s.l.] Universidade Estadual Paulista, 2009.

MATTSON, W.; RICE, B. M. Near-neighbor calculations using a modified cell-linked list method. **Computer Physics Communications**, v. 119, p. 135–148, 1999.

MORITA, K. et al. Detailed analyses of key phenomena in core disruptive accidents of sodium-cooled fast reactors by the COMPASS code. **Nuclear Engineering and Design**, abr. 2011.

MOTEZUKI, F. K. et al. Modelagem do escoamento tridimensional do concreto fresco utilizando o método Moving Particle Semi-Implicit. **XXXVI Ibero-Latin American Congress on Computational Methods in Engineering**, 2015.

MOTEZUKI, F. K.; CHENG, L. **Implementação do módulo de trocas térmicas num simulador baseado no método Moving Particle Semi-implicit (MPS)**. Proceedings of XXXI CILAMCE - Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering. **Anais...** Buenos Aires: 2010

MOTEZUKI, F. K.; CHENG, L. Y. **Coupled Particle Based Simulation of Concrete Casting and Thermal Diffusion**. (B. H. V. Topping, P. Iványi, Eds.) Proceedings of the Fourteenth International Conference on Civil, Structural and Environmental Engineering Computing. **Anais...** Stirlingshire, UK: Civil-Comp Press, 2013 Disponível em: <<http://www.ctresources.info/ccp/paper.html?id=7554>>

MOTEZUKI, F. K.; CHENG, L. Y. **AN EXPERIMENT ON THE NUMERICAL DAMPING OF MOVING PARTICLE SEMI-IMPLICIT (MPS) METHOD**. Proceedings of 10th WCCM. **Anais...** São Paulo: maio 2014 Disponível em: <<http://www.proceedings.blucher.com.br/article-details/9086>>

PAPANASTASIOU, T. C. Flows of Materials with Yield. **Journal of Rheology**, v. 31, n. 5, p. 385, 1987.

PEREIRA, D. DA S. et al. **Uma modelagem numérica do escoamento do concreto fresco baseado no método Moving Particle Semi-implicit (MPS)**. Proceedings of the XXXIV Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering. **Anais...** Pirenópolis: 2013

PETERKA, A. J. Hydraulic design of stilling basins and energy dissipators. **Water resources technical publication**, n. 25, p. 240, 1974.

REGMI, A. et al. Flow simulation and solidification phenomena of AC4CH aluminum alloy in semi-solid forging process by explicit MPS method. **Computational Particle Mechanics**, 2015.

REID, W. H.; HARRIS, D. L. Some Further Results on the Bénard Problem. **Physics of Fluids**, v. 1, n. 2, p. 102, 1958.

ROUSSEL, N. et al. Computational modeling of concrete flow: General overview. **Cement and Concrete Research**, v. 37, n. 9, p. 1298–1307, set. 2007.

SHAKIBAEINIA, A.; JIN, Y.-C. MPS based mesh-free particle method for modeling open-channel flows. **Journal of Hydraulic Engineering**, v. 137, n. 11, p. 1375–1384, nov. 2011.

SHAKIBAEINIA, A.; JIN, Y.-C. MPS mesh-free particle method for multiphase flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 229–232, p. 13–26, jul. 2012.

SHAO, S.; GOTOH, H. Turbulence particle models for tracking free surfaces. **Journal of Hydraulic Research**, v. 43, n. 3, p. 276–289, maio 2005.

SHIBATA, K. et al. Lagrangian simulations of ship-wave interactions in rough seas. **Ocean Engineering**, v. 42, p. 13–25, mar. 2012.

SHIBATA, K.; KOSHIZUKA, S.; OKA, Y. Numerical Analysis of Jet Breakup Behavior Using Particle Method. **Journal of Nuclear Science and Technology**, v. 41, n. 7, p. 715–722, jul. 2004.

SPALART, P. R. et al. Comments on the feasibility of LES for wings, and on a hybrid RANS/LES approach. **Advances in DNS/LES**, 1997.

SPALART, P. R. Detached-Eddy Simulation. **Annual Review of Fluid Mechanics**, v. 41, n. 1, p. 181–202, jan. 2009.

SWAMEE, P. K. Sluice-gate discharge equations. **Journal of Irrigation and Drainage Engineering**, v. 118, n. 1, p. 56–60, jan. 1992.

TANG, Z.; WAN, D. Numerical simulation of impinging jet flows by modified MPS method. **Engineering Computations**, v. 32, n. 4, p. 1153–1171, 15 jun. 2015.

TELBANY, M. M. M. EL; REYNOLDS, A. J. Velocity distributions in plane turbulent channel flows. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 100, n. 01, p. 1, set. 1980.

TSUKAMOTO, M. M.; CHENG, L.-Y.; NISHIMOTO, K. Analytical and numerical study of the effects of an elastically-linked body on sloshing. **Computers & Fluids**, v. 49, n. 1, p. 1–21, out. 2011.

TSUKAMOTO, M. M.; CHENG, L. Y.; MOTEZUKI, F. K. Fluid interface detection technique based on neighborhood particles centroid deviation (NPCD) for particle methods. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 82, n. 3, p. 148–168, 2016.

XU, T.; JIN, Y.-C. Numerical investigation of flow in pool-and-weir fishways using a meshless particle method. **Journal of Hydraulic Research**, v. 52, n. 6, p. 849–861, 2 nov. 2014.

YAO, Z. et al. Improved neighbor list algorithm in molecular simulations using cell decomposition and data sorting method. **Computer Physics Communications**, v. 161, p. 27–35, 2004.

ZHANG, S. et al. An improved MPS method for numerical simulations of convective heat transfer problems. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 51, n. 1, p. 31–47, maio 2006.