

ANDRÉ SARKIS MÜLLER

**Um método numérico para a simulação tridimensional de fluidos carregados com  
partículas**

São Paulo

2024

ANDRÉ SARKIS MÜLLER

**Um método numérico para a simulação tridimensional de fluidos carregados com partículas**

**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:  
Engenharia de Estruturas

Orientador: Prof. Dr. Eduardo de Morais Barreto  
Campello

São Paulo  
2024

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

Müller, André Sarkis

Um Método Numérico para a Simulação Tridimensional de Fluidos Carregados com Partículas / A. S. Müller -- versão corr. -- São Paulo, 2014. 160 p.

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

1.Fluidos incompressíveis 2.Partículas 3.Interação fluido-partícula 4.Fronteiras imersas 5.Método dos elementos finitos I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia de Estruturas e Geotécnica II.t.

MÜLLER, A. S. **Um método numérico para a simulação tridimensional de fluidos carregados com partículas.** 2024. 160f. Tese (Doutorado em Engenharia Civil) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2024.

Aprovado em:

Banca examinadora

Prof. Dr. \_\_\_\_\_  
Instituição: \_\_\_\_\_  
Julgamento: \_\_\_\_\_

# AGRADECIMENTOS

Primeiro a Deus que me ajuda e me inspira todos os dias de minha vida.

À minha família que com muito carinho me ajuda a passar pelas dificuldades inerentes ao processo de crescimento. Especialmente a minha esposa Renata e minhas filhas, Júlia e Luiza, que com muito amor e dedicação me ajudam a dar o meu melhor na produção deste trabalho.

Em especial aos meus pais queridos que me transmitiram valores imortais durante toda a minha vida e que, mesmo de longe, contribuem para o meu crescimento.

Aos meus irmãos amados por fazerem parte de minha vida de forma tão singular e importante.

Ao meu tio Jorge e tia Malu, por me receberem em São Paulo com todo o conforto e carinho para que eu pudesse desenvolver este trabalho *in loco*. Além, é claro, dos diversos momentos de descontração pelos mesmos a mim proporcionados.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Eduardo Campello, que me aceitou como seu aluno e que muito contribui para a consolidação de minha formação profissional através de diversas discussões técnicas compartilhando sua vasta experiência em pesquisa de alto nível.

Ao Prof. Dr. Henrique Campelo por todo o seu tempo e conhecimento empenhados durante todo o período de desenvolvimento na parte de fluidos deste trabalho com fomento de diversas discussões valorosas sobre a Mecânica dos Fluidos e suas nuances.

Ao Prof. Dr. Gustavo Carlos Buscaglia e Prof. Dr. Carlos Tiago pelas contribuições durante o exame de qualificação que muito me ajudou no desenvolvimento deste trabalho.

A todos os professores e funcionários(as) do Laboratório de Mecânica Computacional (LMC) da EPUSP. Em especial a secretária do LMC, Guiomar, por todo o acolhimento e apoio recebido quando da minha chegada e permanência no LMC. Também não poderia deixar de agradecer ao técnico de informática do LMC, José Ferreira Leite Neto (mais conhecido como Zê), que inúmeras vezes teve a paciência de religar o ceguinho quando solicitei.

Aos amigos do LMC que contribuíram e muito não só profissionalmente, mas, principalmente, com o convívio salutar diário durante a minha estada em São Paulo.

À Fundação de Amparo à Pesquisa e ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico do Maranhão (FAPEMA) pelo suporte financeiro (BD-02045/19).

Ao Instituto Federal do Maranhão e ao Departamento de Construção Civil que apoiaram a minha ausência momentânea para que eu pudesse me qualificar profissionalmente.

# RESUMO

MÜLLER, A. S. **Um método numérico para a simulação tridimensional de fluidos carregados com partículas**. 2024. 160f. Tese (Doutorado em Engenharia Civil) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2024.

O objetivo principal deste trabalho é o desenvolvimento de um método numérico capaz de simular problemas tridimensionais de Interação Fluido-Partícula (IFP). Fenômenos como transporte de poluição atmosférica, dinâmica de corpos flutuantes e simulação de problemas de biomecânica envolvendo escoamento de fluidos biológicos carregados com partículas, tais como sangue, são apenas alguns exemplos aos quais se aplica a formulação proposta neste trabalho. Grande parte dos problemas de IFP são de natureza complexa com interfaces móveis e cinemática não-linear. Para que seja possível o cumprimento do objetivo supracitado, inicialmente utiliza-se uma formulação estabilizada do método dos elementos finitos (MEF) para solução de problemas de escoamento tridimensional governado pela equação de Navier-Stokes para fluidos incompressíveis. Após isso, emprega-se o Método dos Elementos Discretos para que o comportamento das partículas seja considerado neste contexto, onde os contatos entre partícula-partícula e entre partícula-superfície rígida (contorno fixo) são permitidos e equacionados. O problema de IFP é conseguido acoplando-se os dois problemas, fluido e partícula, utilizando o conceito de fronteiras imersas em conjunto com o método de Nitsche como alternativa a abordagens ALE (*Arbitrary Lagrangian Eulerian*) clássicas. Na solução do sistema acoplado, utiliza-se um método explícito e particionado que é desenvolvido para a obtenção da convergência dentro de cada passo do processo de solução. Uma metodologia inovadora para a obtenção das forças hidrodinâmicas é apresentada de forma a possibilitar a simulação de contatos complexos, incluindo a possibilidade de pequenas interpenetrações entre as partículas. Para todos os casos, foram implementados os correspondentes códigos computacionais, bem como efetuada a sua validação com resultados de referências. Por fim, alguns exemplos de IFP são apresentados para validar a consistência e a robustez do método proposto.

Palavras-chave: Fluidos incompressíveis. Partículas. Interação fluido-partícula. Fronteiras imersas. Método dos elementos finitos (MEF). Método dos elementos discretos (MED).

# ABSTRACT

MÜLLER, A. S. **A numerical method for the three-dimensional simulation of particle-laden fluids**. 2024. 160f. Tese (Doutorado em Engenharia Civil) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2024.

The aim of this work is the development of a numerical model capable of simulating tridimensional Fluid-Particle Interaction (FPI) problems. Phenomena such as transport of atmospheric pollution, dynamics of floating bodies and biomechanical simulation involving the flow of biological fluids laden with particles, such as blood, are examples, just to say a few, of problems to which the formulation proposed may be applied. Most FPI problems are complex in nature with moving interfaces and nonlinear kinematics. In order to achieve the aim of this work, initially a stabilized Finite Element Method formulation (FEM) is used to solve tridimensional fluid flow problems governed by the incompressible Navier-Stokes equation. After this, the Discrete Element Method (DEM) is employed to describe the particle behavior, wherein both particle-to-particle and particle-to-wall (fixed boundaries) contacts are fully permitted and resolved. The FPI problem is achieved by coupling both fluid and particle problems through an immersed boundary method in conjunction with the Nitsche method as an alternative to classical Arbitrary Lagrangian Eulerian (ALE) approaches. To solve the coupled system of equations, an explicit, staggered scheme is adopted, which will be developed to achieve convergence within each time step of the solution process. An innovative methodology for obtaining hydrodynamic forces is presented in order to allow the simulation of complex contacts, including the possibility of small interpenetrations between particles. For all cases, the corresponding computational codes were implemented, and then validated against reference solutions. Finally, some IFP examples are presented to validate the consistency and robustness of the proposed algorithm.

Keywords: Incompressible fluids. Particles. Fluid-particle interaction. Immersed boundary. Finite element method (FEM). Discrete element method (DEM).

# SUMÁRIO

|   |           |
|---|-----------|
| <b>LISTA DE FIGURAS .....</b>   | <b>I</b>  |
| <b>LISTA DE TABELAS .....</b>   | <b>II</b> |
| <b>1 INTRODUÇÃO .....</b>   | <b>17</b> |
| 1.1 Objetivos .....   | 21        |
| 1.2 Revisão bibliográfica .....                                       | 22        |
| 1.3 Organização do texto .....  | 27        |
| 1.4 Notação adotada.....  | 28        |
| <b>2 DESCRIÇÃO E VERIFICAÇÃO DO PROBLEMA FLUIDO.....</b>              | <b>29</b> |
| 2.1 Equação de Navier-Stokes .....                                    | 29        |
| 2.2 Forma Fraca .....   | 31        |
| 2.3 Discretização do tempo e integração numérica .....                | 33        |
| 2.3.1 <i>Método de Newmark</i> .....                                  | 33        |
| 2.3.2 <i>Método de Euler implícito</i> .....                          | 34        |
| 2.4 Discretização do espaço por elementos finitos .....               | 35        |
| 2.5 Solução do sistema não linear.....                                | 40        |
| 2.6 Exemplos Numéricos .....  | 41        |
| 2.6.1 <i>Escoamento estacionário em torno de um cilindro 3D</i> ..... | 42        |
| 2.6.2 <i>Escoamento transiente em torno de um cilindro 3D</i> .....   | 47        |
| <b>3 DESCRIÇÃO E VERIFICAÇÃO DO PROBLEMA PARTÍCULA.....</b>           | <b>51</b> |
| 3.1 Método dos elementos discretos .....                              | 51        |
| 3.2 Tratamento das rotações .....                                     | 51        |
| 3.3 Unidade básica de um sistema de partículas.....                   | 54        |
| 3.4 Sistemas com várias partículas .....                              | 57        |
| 3.5 Forças atuantes nas partículas.....                               | 60        |
| 3.5.1 <i>Forças de campos externos</i> .....                          | 60        |
| 3.5.2 <i>Forças de contato</i> .....                                  | 60        |
| 3.5.3 <i>Forças de atrito</i> .....                                   | 63        |
| 3.5.4 <i>Contato em superfícies rígidas</i> .....                     | 64        |
| 3.6 Solução numérica das equações do sistema.....                     | 65        |
| 3.7 Exemplos numéricos.....   | 71        |

|          |   |            |
|----------|---|------------|
| 3.7.1    | <i>Choque frontal de uma partícula com um anteparo</i>  | 71         |
| 3.7.2    | <i>Partícula em queda livre</i>   | 72         |
| 3.7.3    | <i>Choque entre duas partículas alinhadas</i>   | 74         |
| 3.7.4    | <i>Choque entre duas partículas desalinhadas</i>  | 76         |
| 3.7.5    | <i>Choque frontal entre três partículas</i>   | 77         |
| <b>4</b> | <b>MÉTODO DE FRONTEIRA IMERSA</b>   | <b>80</b>  |
| 4.1      | Condições de contorno ao longo da interface   | 81         |
| 4.1.1    | <i>Método de Nitsche</i>  | 82         |
| 4.1.2    | <i>Cálculo das ações do fluido na interface fluido-partícula</i>  | 86         |
| 4.1.3    | <i>Elementos de fluido com cortes simples</i>   | 90         |
| 4.2      | Exemplos numéricos  | 93         |
| 4.2.1    | <i>Estudo de escolha da malha e dos parâmetros de penalidade: escoamento em torno de uma partícula fixa</i> | 93         |
| 4.2.2    | <i>Escoamento em torno de duas partículas fixas</i>   | 97         |
| 4.2.3    | <i>Escoamento em torno de um cilindro</i>   | 100        |
| <b>5</b> | <b>MÉTODO PROPOSTO PARA INTERAÇÃO FLUIDO-PARTÍCULA</b>  | <b>105</b> |
| 5.1      | Elementos de fluido com cortes duplos   | 105        |
| 5.2      | Cálculo das forças hidrodinâmicas na iminência de colisões  | 107        |
| 5.3      | Tratamento dos “nós sombras”  | 110        |
| 5.4      | Estratégia de solução para o acoplamento fluido-partícula   | 111        |
| 5.5      | Estrutura do programa desenvolvido  | 114        |
| 5.6      | Exemplos numéricos  | 117        |
| 5.6.1    | <i>Escoamento em canal curto com duas partículas próximas uma da outra</i>                                  | 117        |
| 5.6.2    | <i>Sedimentação de uma partícula imersa em um fluido</i>  | 123        |
| 5.6.3    | <i>Escoamento em torno de uma partícula móvel</i>   | 128        |
| 5.6.4    | <i>Escoamento em torno de duas partículas móveis</i>  | 135        |
| 5.6.5    | <i>Escoamento em torno de três partículas móveis</i>  | 143        |
| <b>6</b> | <b>DISCUSSÃO, CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS</b>  | <b>149</b> |
|          | <b>REFERÊNCIAS</b>  | <b>152</b> |

## Lista de Figuras

|   |    |
|---|----|
| Figura 1: Exemplos de problemas de Interação Fluido-Partícula. ....   | 18 |
| Figura 2: Elementos finitos mistos 3D (Taylor-Hood).....  | 36 |
| Figura 3: Desenho esquemático do exemplo 2.6.1.....   | 42 |
| Figura 4: (a) Malha de elementos finitos 3D utilizada no exemplo 2.6.1 (6200 elementos finitos hexaedros mistos com 54348 nós); (b) Detalhe do refinamento da malha na região do cilindro. .... | 43 |
| Figura 5: Isocurvas de velocidade, exemplo 2.6.1 (vistas isométricas). ....   | 43 |
| Figura 6: Isocurvas de velocidade, exemplo 2.6.1 (vista lateral e em planta).....   | 44 |
| Figura 7: Isocurvas de pressão, exemplo 2.6.1 (vistas isométricas).....   | 44 |
| Figura 8: Isocurvas de pressão, exemplo 2.6.1 (vista lateral e em planta).....  | 44 |
| Figura 9: <i>Streamline</i> de velocidade, exemplo 2.6.1. ....  | 45 |
| Figura 10: Malha de elementos finitos 3D utilizada no exemplo 2.6.1 (37200 elementos finitos tetraedros mistos com 54348 nós). ....   | 47 |
| Figura 11: Malha de elementos finitos 3D utilizada no exemplo 5.2.2 (67533 elementos finitos tetraedros mistos com 96684 nós). ....   | 48 |
| Figura 12: Evolução no tempo do campo de velocidade para $Re = 100$ (vistas isométricas). .   | 48 |
| Figura 13: Evolução no tempo do campo de pressão para $Re = 100$ (vistas isométricas). ....   | 49 |
| Figura 14: <i>Streamlines</i> de velocidade para $Re = 100$ ( $t = 8,0$ s) . ....   | 49 |
| Figura 15: Variação dos coeficientes de arrasto (a) e sustentação (b) ao longo do tempo para $Re = 100$ . ....  | 50 |
| Figura 16: Representação das configurações de uma partícula (cinemática de uma partícula). (Figura extraída de Campello [32]). ....   | 55 |
| Figura 17: Representação das configurações de uma partícula genérica $i$ em um sistema de várias partículas imersas em um meio fluido (Figura extraída de Campello [32]). ....                  | 59 |
| Figura 18: Desenho esquemático do exemplo 3.7.1.....  | 71 |
| Figura 19: Evolução no tempo da força de contato para os métodos (a) explícito e (b) implícito. ....  | 72 |
| Figura 20: Desenho esquemático do exemplo 3.7.2.....  | 73 |
| Figura 21: Variação da posição espacial da partícula do exemplo 3.7.2 para os casos 01 e 02. ....   | 74 |

|   |    |
|---|----|
| Figura 22: Cenário 01 do exemplo 3.7.3. ....  | 74 |
| Figura 23: Cenário 02 do exemplo 3.7.3. ....  | 74 |
| Figura 24: Cenário 03 do exemplo 3.7.3. ....  | 75 |
| Figura 25: Desenho esquemático do exemplo 3.7.4. ....   | 76 |
| Figura 26: Evolução da trajetória das partículas P1 e P2 com o tempo. ....  | 77 |
| Figura 27: Evolução da velocidade resultante das partículas P1 e P2 durante o choque. ....  | 77 |
| Figura 28: Desenho esquemático do exemplo 3.7.5. ....   | 78 |
| Figura 29: Evolução da trajetória das partículas P1, P2 e P3 com o tempo. ....  | 79 |
| Figura 30: Evolução da velocidade resultante das partículas P1, P2 e P3 durante o choque. ...   | 79 |
| Figura 31: Definição dos domínios do problema. ....   | 80 |
| Figura 32: Subdivisão do domínio fluido em $\Omega^+$ e $\Omega^-$ ....   | 81 |
| Figura 33: (a) Desenho esquemático ilustrando a área superficial utilizada nas integrações de contorno dos termos em (115); (b) Exemplo de interseções entre elementos de fluidos (tetraedros) e uma partícula (esférica). .... | 85 |
| Figura 34: Região da vizinhança da superfície molhada sujeita a perturbações nos campos de pressão e velocidade. ....   | 88 |
| Figura 35: Esquema para obtenção dos pontos cujos valores de pressão e $\nabla \mathbf{u}$ são extrapolados. ....   | 90 |
| Figura 36: Elementos de fluido com “cortes simples” (CS). ....  | 91 |
| Figura 37: Decomposição do domínio em células de integração para o elemento de fluido com CS (caso 01). ....  | 92 |
| Figura 38: Decomposição do domínio em células de integração para o elemento de fluido com CS (caso 02). ....  | 92 |
| Figura 39: Decomposição do domínio em células de integração para o elemento de fluido com CS (caso 03). ....  | 92 |
| Figura 40: (a) Geometria e condições de contorno do exemplo 4.2.1; (b) Malha de elementos finitos usada no exemplo 4.2.1 (158057 elementos finitos tetraedros mistos com 213992 nós) para malha $D_{17,5}$ . ....               | 94 |
| Figura 41: Malha Lagrangiana usada no exemplo 4.2.1 (780 elementos triangulares com 392 nós). ....  | 94 |
| Figura 42: Resultados para a malha $D_{17,5}$ e $\alpha_1 = \alpha_2 = 10^5$ ; (a) Isocurvas de velocidade (modelagem convencional); (b) Isocurvas de velocidade (com fronteira imersa). ....                                   | 96 |

|  |     |
|--|-----|
| Figura 43: Resultados para a malha $D_{17,5}$ e $\alpha_1 = \alpha_2 = 10^5$ ; (a) Isocurvas de pressão (modelagem convencional); (b) Isocurvas de pressão (com fronteira imersa).....         | 96  |
| Figura 44: (a) Geometria e condições de contorno do exemplo 4.2.2; (b) Malha de elementos finitos usada no exemplo 4.2.2 (158057 elementos finitos tetraedros mistos com 213992 nós).<br>..... | 98  |
| Figura 45: Detalhe da malha no em torno das partículas; (a) Modelagem da geometria no Gid; (b) Refinamento da malha na região das partículas ( $D_{10}$ ); .....                               | 98  |
| Figura 46: (a) Isocurvas de velocidade (modelagem convencional); (b) Isocurvas de velocidade (com fronteira imersa). .....   | 99  |
| Figura 47: (a) Isocurvas de pressão (modelagem convencional); (b) Isocurvas de pressão (com fronteira imersa). .....   | 100 |
| Figura 48: Desenho esquemático do exemplo 4.2.3 para os cenários 1 e 2. ....   | 101 |
| Figura 49: Malha de elementos finitos 3D utilizada no exemplo 4.2.3 (158082 elementos finitos tetraedros mistos com 220324 nós), $D_{7,5}$ .....   | 101 |
| Figura 50: Malha Lagrangiana usada no exemplo 4.2.3 (320 elementos triangulares com 170 nós) para os cenários 1 e 2.....   | 101 |
| Figura 51: Isocurvas de velocidade do exemplo 4.2.3 (com fronteira imersa). ....   | 103 |
| Figura 52: Isocurvas de pressão do exemplo 4.2.3 (com fronteira imersa).....   | 104 |
| Figura 53: Variação do coeficiente de arrasto ao longo do tempo (exemplo 4.2.3).....   | 104 |
| Figura 54: Elementos de fluido com cortes duplos (CD) .....  | 106 |
| Figura 55: Decomposição do domínio em células de integração para o elemento de fluido com CD (caso 01). .....  | 106 |
| Figura 56: Decomposição do domínio em células de integração para o elemento de fluido com CD (caso 02). .....  | 107 |
| Figura 57: Decomposição do domínio em células de integração para o elemento de fluido com CD (caso 03). .....  | 107 |
| Figura 58: Decomposição do domínio em células de integração para o elemento de fluido com CD, caso 04. ....  | 107 |
| Figura 59: Esquema para cálculo de FH para os contatos partícula-corpo rígido; (a) condição original e (b) proposta de solução.....  | 109 |
| Figura 60: Esquema para cálculo de FH para os contatos partícula-partícula; (a) condição original e (b) proposta de solução.....   | 110 |

|  |     |
|--|-----|
| Figura 61: Representação da movimentação de uma partícula em dois passos de tempo consecutivos ( $t^n$ e $t^{n+1}$ ). .....  | 111 |
| Figura 62: Esquema de acoplamento particionado explícito.....  | 112 |
| Figura 63: Diagrama que contém a relação geral entre os módulos da plataforma.....   | 115 |
| Figura 64: Detalhe do módulo <i>NMethod</i> . .....  | 115 |
| Figura 65: Diagrama que contém o módulo dos métodos numéricos. ....  | 115 |
| Figura 66: Utilização de herança para implementação dos diversos tipos de elementos.....   | 116 |
| Figura 67: (a) Geometria do exemplo 5.6.1; (b) Malha de elementos finitos usada no exemplo 5.6.1 (98400 elementos finitos tetraedros mistos com 139523 nós). ....  | 118 |
| Figura 68: Detalhe da malha entre as duas partículas. ....   | 119 |
| Figura 69: Resultados no plano xy para a malha $D_{10}$ e $\alpha_1 = \alpha_2 = 10^6$ ; (a) Isocurvas de velocidade (modelagem convencional); (b) Isocurvas de velocidade (com fronteira imersa). ..... | 120 |
| Figura 70: Resultados no plano yz para a malha $D_{10}$ e $\alpha_1 = \alpha_2 = 10^6$ ; (a) Isocurvas de velocidade (modelagem convencional); (b) Isocurvas de velocidade (com fronteira imersa). ..... | 120 |
| Figura 71: Resultados no plano xy para a malha $D_{10}$ e $\alpha_1 = \alpha_2 = 10^6$ ; (a) Isocurvas de pressão (modelagem convencional); (b) Isocurvas de pressão (com fronteira imersa).....         | 121 |
| Figura 72: Detalhe do Resultado, na vizinhança das partículas, das isocurvas de pressão no plano xy para a malha $D_{10}$ e $\alpha_1 = \alpha_2 = 10^6$ .....   | 121 |
| Figura 73: <i>Streamline</i> de velocidade, exemplo 5.6.1. ....  | 122 |
| Figura 74: Vetores de velocidade em torno das partículas.....  | 122 |
| Figura 75: (a) Geometria do exemplo 5.6.2; (b) Malha de elementos finitos usada no exemplo 5.6.2 (158354 elementos finitos tetraedros mistos com 117330 nós), $D_{5,55}$ .....                           | 124 |
| Figura 76: Evolução no tempo do campo de velocidade do exemplo 5.6.2 (vistas isométricas). .....   | 126 |
| Figura 77: Evolução no tempo do campo de pressão do exemplo 5.6.2 (vistas isométricas). .....  | 127 |
| Figura 78: Histórico da velocidade (componente vertical) da partícula em queda livre.....  | 128 |
| Figura 79: Detalhe do posicionamento da partícula próximo a parede de fundo do canal.....  | 128 |
| Figura 80: (a) Geometria e condições de contorno do exemplo 5.6.3; (b) Malha de elementos finitos usada no exemplo 5.6.3 (47616 elementos finitos tetraedros mistos com 68607 nós). .....                | 129 |

|  |     |
|--|-----|
| Figura 81: Evolução no tempo do campo de velocidade do exemplo 5.6.3 (vistas isométricas).<br>.....  | 132 |
| Figura 82: Evolução no tempo do campo de pressão do exemplo 5.6.3 (vistas isométricas).  | 133 |
| Figura 83: Histórico da distância (dist) entre a partícula e o anteparo do exemplo 5.6.3. ....   | 134 |
| Figura 84: Histórico de velocidade da partícula (direção x) do exemplo 5.6.3.....  | 134 |
| Figura 85: Histórico da força hidrodinâmica resultante na partícula (direção x) do exemplo 5.6.3. ....   | 134 |
| Figura 86: (a) Geometria e condições de contorno do exemplo 5.6.4; (b) Malha de elementos finitos usada no exemplo 5.6.4 (29766 elementos finitos tetraedros mistos com 43907 nós).<br>..... | 135 |
| Figura 87: Evolução no tempo do campo de velocidade do exemplo 5.6.4 (vistas isométricas).<br>.....  | 138 |
| Figura 88: Evolução no tempo do campo de pressão do exemplo 5.6.4 (vistas isométricas).  | 140 |
| Figura 89: Detalhe do contato partícula-partícula sem interpenetração entre elas.....  | 140 |
| Figura 90: Detalhe do contato partícula-partícula com interpenetração entre elas. ....   | 141 |
| Figura 91: Histórico da distância (dist) entre as partículas do exemplo 5.6.4.....   | 141 |
| Figura 92: Histórico de velocidade das partículas (direção x) do exemplo 5.6.4.....  | 142 |
| Figura 93: Geometria e condições de contorno do exemplo 5.6.5. ....  | 143 |
| Figura 94: Evolução no tempo do campo de velocidade do exemplo 5.6.5 (vistas isométricas).<br>.....  | 145 |
| Figura 95: Evolução no tempo do campo de pressão do exemplo 5.6.5 (vistas isométricas).  | 147 |
| Figura 96: Histórico da distância (dist) entre as partículas $P_1$ e $P_2$ do exemplo 5.6.5.....   | 147 |
| Figura 97: Histórico da distância (dist) entre as partículas $P_2$ e $P_3$ do exemplo 5.6.5.....   | 148 |
| Figura 98: Histórico de velocidade das partículas (direção x) do exemplo 5.6.5.....  | 148 |

## Lista de Tabelas

|  |     |
|--|-----|
| Tabela 1: Parâmetros do fluido referente ao exemplo 2.6.1.....   | 43  |
| Tabela 2: Comparação dos resultados obtidos do exemplo 2.6.1.....  | 45  |
| Tabela 3: Valores de $C_L$ e $C_D$ para simulações com refinamentos variados da camada limite utilizando os elementos finitos mistos tetraédrico e hexaédrico. ....      | 46  |
| Tabela 4: Parâmetros utilizados no exemplo 2.6.2.....  | 47  |
| Tabela 5: Comparação dos resultados obtidos do exemplo 2.6.2.....  | 50  |
| Tabela 6: Parâmetros da análise do exemplo 3.7.1.....  | 72  |
| Tabela 7: Velocidades pós-choque obtidas para diferentes passos de tempo e métodos de integração temporal. ....  | 72  |
| Tabela 8: Parâmetros utilizados no exemplo 3.7.2.....  | 73  |
| Tabela 9: Parâmetros da análise do exemplo 3.7.3.....  | 75  |
| Tabela 10: Resultados pós-choques obtidos para a partícula 01 do exemplo 3.7.3. ....   | 75  |
| Tabela 11: Resultados pós-choques obtidos para a partícula 02 do exemplo 3.7.3. ....   | 76  |
| Tabela 12: Parâmetros da análise do exemplo 3.7.4.....   | 76  |
| Tabela 13: Parâmetros da análise do exemplo 3.7.5.....   | 78  |
| Tabela 14: Parâmetros utilizados no exemplo 4.2.1.....   | 94  |
| Tabela 15: Valores dos coeficientes de sustentação ( $C_L$ ) e arrasto ( $C_D$ ) para diversos níveis de refinamento de malha e valores de $\alpha_1$ e $\alpha_2$ ..... | 97  |
| Tabela 16: Valores de referência dos coeficientes de sustentação ( $C_L$ ) e arrasto ( $C_D$ ), exemplo 4.2.1. ....  | 97  |
| Tabela 17: Parâmetros utilizados no exemplo 4.2.2.....   | 98  |
| Tabela 18: Parâmetros utilizados no exemplo 4.2.3 para os cenários 1 e 2. ....   | 102 |
| Tabela 19: Valores dos coeficientes de sustentação ( $C_L$ ) e arrasto ( $C_D$ ) para dois níveis de refinamento de malha e valores de $\alpha_1$ e $\alpha_2$ .....     | 103 |
| Tabela 20: Comparação dos resultados obtidos do exemplo 4.2.3.....   | 104 |
| Tabela 21: Parâmetros utilizados no exemplo 5.6.1.....   | 119 |
| Tabela 22: Valores de $C_L$ e $C_D$ para três níveis de refinamento de malha com $\alpha_1$ e $\alpha_2$ variados de $10^5$ à $10^7$ .....                               | 123 |

|   |     |
|---|-----|
| Tabela 23: Valores de referência dos coeficientes de sustentação ( $C_L$ ) e arrasto ( $C_D$ ), exemplo 5.6.1. .... | 123 |
| Tabela 24: Parâmetros utilizados no exemplo. ....   | 124 |
| Tabela 25: Valores de velocidade terminal (referências). ....   | 125 |
| Tabela 26: Parâmetros utilizados no exemplo 5.6.3. ....   | 129 |
| Tabela 27: Parâmetros utilizados no exemplo 5.6.4. ....   | 135 |

# 1 INTRODUÇÃO

Os problemas de Interação Fluido-Partícula (IFP) são de natureza multifásica, pois envolvem conceitos da mecânica dos fluidos e a mecânica dos sólidos, com interdependência entre as equações que governam os fluídos e as partículas, gerando um problema de acoplamento de sistemas. Um problema de IFP acrescenta o desafio de se buscar uma solução simultânea do sistema acoplado onde as condições de contorno das interfaces entre o fluido e as partículas são desconhecidas *a priori*, devido justamente à interdependência citada anteriormente. Isto se traduz em desafio teórico e grande esforço computacional, o que por vezes pode inviabilizar a obtenção da solução de um problema de IFP principalmente em simulações tridimensionais devido a necessidade de malha com grau de refinamento elevado nas interfaces fluido-partículas. Além disso, grande parte dos problemas de IFP é de natureza complexa com interfaces móveis e cinemática não-linear. Portanto, é fácil perceber a necessidade, ou melhor, a inevitabilidade, da utilização de métodos numéricos para se resolver problemas de IFP.

Muitos são os exemplos dos problemas de IFP na engenharia e na natureza. A Figura 1, por exemplo, ilustra algumas situações bastante distintas nas quais se observa este tipo de fenômeno acoplado. Perfuração de poços de petróleo em rochas submersas usando brocas rotativas (Figura 1(a)), transporte de sedimentos em leitos de rios (Figura 1(b)), percolação de fluidos através de meios porosos (Figura 1(c)), erosão em ravinas (Figura 1(d)), dentre outros exemplos. Quanto maior for a superfície de contato entre o fluido e as partículas, a viscosidade e a velocidade do meio fluido, mais significativos são os esforços gerados pelo fluido sobre as partículas.

Um campo onde a IFP é muito importante é a dos corpos em queda com geometrias simples ou complexas, influenciados pela gravidade e por forças hidrodinâmicas (Pesavento e Wang [1], Andersen et al. [2], Jin e Xu [3], You et al. [4]). A não linearidade inerente nesses problemas frequentemente resulta em padrões de queda complexos com trajetórias caóticas. Alguns experimentos foram realizados (Belmonte et al. [5] e Mahadevan et al. [6]) a fim de se obter os parâmetros necessários para o desenvolvimento de métodos numéricos capazes de simular tais fenômenos com boa previsibilidade e a robustez necessária para uma simulação confiável.

Outro campo de aplicação da IFP é na modelagem da fluidização de leitos particulados (e.g., ver Yu e Xu [7]). Isso se deve ao fato de esta técnica, muito utilizada na indústria química,

promover um bom contato entre a superfície das partículas e o fluido ao seu redor (em geral ar seco), fazendo com que a resistência ao transporte de calor e massa seja reduzida, além de se promover uma boa mistura e homogeneização do material.



Figura 1: Exemplos de problemas de Interação Fluido-Partícula.

Devido à complexidade natural dos problemas que envolvem IFP, é difícil definir uma determinada metodologia ou abordagem que seja, em todos os aspectos, superior às demais. Cada técnica ou modelo tem os seus pontos positivos e negativos. Nos últimos anos, grande esforço tem sido feito pela comunidade científica para aprimorar as técnicas existentes bem como desenvolver novas técnicas mais eficientes. Dentre os diversos modelos que podem ser utilizados para problemas IFP, destacam-se:

- Modelo de Dois Fluidos (TFM, do inglês “*Two-Fluid Model*”): Neste modelo, as fases fluida e sólida (partículas) são tratadas como um meio contínuo interpenetrante em uma célula computacional que é muito maior do que o tamanho das partículas individuais, reduzindo sobremaneira o número de equações do sistema (Anderson e Jackson [8]). No entanto, seu uso eficaz depende fortemente de fatores constitutivos, de relações fechadas para a fase sólida e a “troca” de momento entre as fases que não são possíveis de serem obtidos diretamente pelo modelo.
- Modelo de Simulação Numérica Direta (DNS, do inglês “*Direct Numerical*”)

*Simulation*”): No DNS, o domínio do fluido é discretizado em uma escala comparável ao espaçamento das partículas, enquanto as partículas são tratadas como “contornos discretos móveis” (Hu [9]). Uma das principais características desse modelo é o tratamento implícito do sistema fluido-partícula usando-se, para isso, uma formulação fraca combinada. Diversos métodos numéricos podem ser usados sob essa abordagem. Alguns desses métodos têm suas formulações baseadas em uma abordagem ALE (*Arbitrary Lagrangian Eulerian*), cuja ideia principal é a introdução de um referencial arbitrário através de uma malha computacional que não é fixa no espaço (abordagem Euleriana) e nem fixa no meio material (abordagem Lagrangiana) de forma que a malha se ajuste da melhor forma possível ao meio e a interface. Essa abordagem tem aplicações em diversas áreas da engenharia, uma vez que combina as abordagens Lagrangiana e Euleriana, tendo a sua origem na simulação de problemas com grandes deformações que resultam em distorções indesejáveis nos elementos. Todavia, sua principal desvantagem é o seu alto custo computacional (devido a necessidade de geração de novas malhas em cada passo de tempo, mesmo que somente de regiões específicas do domínio) dependendo da complexidade dos movimentos das partículas. DNS tem grande potencial para produzir resultados detalhados de interações hidrodinâmicas entre fluidos e partículas em um sistema. Contudo, um grande ponto de atenção deste modelo é sua baixa capacidade de lidar com colisões de partículas. Uma alternativa de se lidar com este problema é a introdução de forças repulsivas na equação do movimento para evitar possíveis colisões entre as partículas (Glowinski et al. [10], Singh et al. [11]).

- Modelo Contínuo e Discreto Combinado (CCDM, do inglês “*Combined Continuum and Discrete Model*”): No CCDM, o movimento de partículas individuais é obtido pela resolução das equações do movimento de Newton-Euler enquanto para o fluido, utilizam-se as mesmas equações governantes do TFM e do DNS (por exemplo, as equações de Navier-Stokes). A representação do meio fluido é alcançada por métodos de discretização comumente utilizados na Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD, do inglês “*Computational Fluid Dynamic*”) como por exemplo o Método dos Elementos Finitos (MEF). Já para a representação das partículas, o Método dos Elementos Discretos (MED) vem se tornando uma opção bastante atrativa devido a sua simplicidade e robustez.

Este trabalho opta pela abordagem CCDM para a solução do problema de IFP.

Quando se trata de modelagem de IFP, uma pergunta central precisa ser respondida:

“Como as interfaces fluido-partículas serão tratadas?”. Existem algumas metodologias na literatura que nos auxiliam a responder esta questão. Uma delas, conhecida como método de fronteiras coincidentes, utiliza uma abordagem ALE clássica, na qual a malha do fluido se deforma localmente para acompanhar o movimento das partículas (e.g., ver Tezduyar et al. [12] e [13]). Nos casos em que o movimento das partículas for complexo, torna-se inevitável a geração de uma nova malha em cada instante de tempo uma vez que a malha do fluido está conectada ao contorno das partículas. Outra forma é adotar uma malha fixa Euleriana para representar o domínio do fluido independentemente das partículas, estando essas últimas “imersas” em seu domínio (e.g., ver Johnson e Tezduyar [14], [15] e Glowinski et al. [10]). Isso faz com que os domínios do fluido e das partículas se tornem superpostos, necessitando da aplicação de técnicas especiais para impor o efeito do movimento dos contornos das partículas sobre o fluido, e vice-versa. O movimento dessas interfaces atua como uma condição de contorno essencial no fluido. Em ambos os casos, a descrição do movimento das partículas pode ser feita por uma abordagem Lagrangiana usual. Na literatura, esses últimos são comumente chamados de métodos de fronteiras imersas (MFI) que são, geralmente, empregados para simular escoamentos complexos de fluidos no em torno de corpos arbitrários fixos ou móveis sem a necessidade de, a cada instante de tempo, ter que gerar a malha do fluido novamente. Existem vários métodos que são classificados como MFI, por exemplo: “fronteiras virtuais” (Goldstein et al. [16]), “domínios fictícios” (Glowinski et al. [17], Girault e Glowinski [18], Glowinski et al. [19]), “malhas imersas” (Tilch et al. [20]), “interfaces imersas” (Leveque e Lee [21], Lee e Leveque [22], Mittal e Iaccarino [23]), “elementos finitos imersos” (Liu et al. [24], Zhang et al. [25]), dentre outros. Existe ainda uma terceira alternativa que é tratar o fluido e as partículas por meio de uma abordagem Lagrangiana unificada. Este método é conhecido como método dos elementos finitos com partículas (em tradução livre do autor, a partir da nomenclatura original “*Particle-Finite Element Method*”) e foi desenvolvido por Oñate e Idelson ([26], [27], [28], [29] e [30]) e mostra-se muito promissor para simulações que envolvem escoamento de fluidos com superfície livre e desprendimento de parte do domínio em subdomínios, como por exemplo, impacto de ondas em objetos fixos. A principal vantagem deste método é a eliminação do termo convectivo da formulação, pagando-se o preço de se gerar uma nova malha a cada instante de tempo. Neste trabalho o fluido é tratado pelo MEF tendo como base uma abordagem Euleriana.

No que diz respeito à descrição das partículas, dentre os diversos métodos numéricos existentes capazes de simular o comportamento físico de um conjunto de partículas, destacam-se: o Método de Dinâmica Molecular (MDM), o Método dos Elementos Discretos além do

próprio Método dos Elementos Finitos, dentre outros. Optou-se em se utilizar neste trabalho o MED tendo como base a formulação desenvolvida por Campello [31], [32] e [33] que, dentre outras contribuições, apresenta-se de forma simples e robusta para partículas consideradas indeformáveis e, portanto, as suas deformações são consideradas desprezíveis durante os seus movimentos podendo ocorrer contatos entre si (contato partícula-partícula) e com superfícies rígidas (contato partícula-superfície rígida) múltiplas vezes durante o movimento sem a necessidade de calcular suas deformações.

Para se resolver o problema da interação fluido-partícula, utiliza-se neste trabalho a abordagem das fronteiras imersas. Dentre as diversas técnicas de MFI existentes, o método de Nitsche [34] (Nitsche) foi escolhido como técnica capaz de possibilitar a interação bifásica (fluido-partícula) proposta por este trabalho via aplicação das condições de contorno de *Dirichlet* de forma fraca na interface dos corpos imersos (partículas). A ideia é considerar as partículas como esferas móveis indeformáveis, e utilizar Nitsche como ferramenta de “diálogo” entre os dois domínios físicos. Algo similar foi trabalhado em Benk et al. [35] para simulações de problemas de interação fluido-estrutura (IFE). Com isso, a principal contribuição deste trabalho é a forma como as forças hidrodinâmicas são calculadas e consideradas de forma a possibilitar a simulação eficiente e robusta de problemas de IFP mais simples como também os mais complexos com ocorrência de contatos do tipo partícula-corpo rígido e partícula-partícula de forma isolada ou simultânea.

## 1.1 Objetivos

O objetivo deste trabalho de doutoramento é desenvolver um método numérico capaz de simular problemas tridimensionais de Interação Fluido-Partícula de forma eficiente e robusta para problemas tridimensionais. Para este propósito, adotou-se técnicas de fronteira imersa como ferramenta de acoplamento entre as duas fases do problema. Além disso, trabalhos anteriores desenvolvidos pelo grupo de pesquisa serão utilizados devido ao alto nível de maturidade de suas formulações. Também é objetivo deste trabalho a implementação computacional e a validação do método proposto em um código computacional próprio. Para tanto, o desenvolvimento de uma estrutura para este código capaz de executar diversos tipos de análises em um código único se faz necessário. Num contexto mais amplo, este trabalho também objetiva o fortalecimento de pesquisa científica na área de Interação Fluido-Partícula, no Laboratório de Mecânica Computacional (LMC) da Escola Politécnica da USP.

## 1.2 Revisão bibliográfica

A primeira etapa deste trabalho de doutoramento foi o desenvolvimento de um código computacional capaz de simular os problemas tridimensionais provenientes da mecânica dos fluidos, mais especificamente, aqueles governados pelas equações de Navier-Stokes para fluidos incompressíveis. Para tanto, foi utilizado o MEF como ferramenta de obtenção de solução aproximada do problema. Os trabalhos de Oden [36], Taylor e Hood [37] e Cheng [38] no final da década de 1960 e início da década de 1970 são os primeiros registros de contribuição da comunidade científica neste assunto. Porém, ao se utilizar o MEF com projeções de Galerkin usuais para aplicações da mecânica dos fluidos, observaram-se problemas na obtenção de soluções ótimas sendo, inclusive, sujeitas a problemas de instabilidade numérica. Isso se deve ao fato do MEF, em sua origem, ter sido desenvolvido para a obtenção de soluções aproximadas de equações diferenciais regidas por equações elípticas auto-adjuntas, que é característica dos problemas da mecânica das estruturas. Para fluido, cujo comportamento é governado pela equação de Navier-Stokes, isso não se verifica devido à natureza hiperbólica de seu regime, principalmente em problemas de convecção dominante. Consequentemente, outros métodos numéricos apareceram como alternativa ao MEF para se obter solução aos problemas regidos pela mecânica dos fluidos. Os métodos que mais se destacaram foram: Método das Diferenças Finitas (MDF) e o Método dos Volumes Finitos ([39], [40]), sendo este último, ainda hoje, largamente utilizado em softwares comerciais.

Contudo, no início da década de 1980, Brooks e Hughes [41] desenvolveram uma nova formulação de elementos finitos capaz de resolver problemas com convecção dominante. Esta versão estabilizada do MEF durante muito tempo foi considerada como uma das principais referências para simulação de problemas da mecânica dos fluidos utilizando o MEF. A base dessa formulação é a utilização da técnica de estabilização SUPG (do inglês, “*Streamline Upwind/Petrov-Galerkin*”). A busca por formulações robustas e confiáveis para simulação de escoamento de fluidos é um campo amplo de pesquisa possuindo, portanto, uma vasta literatura para consulta (e.g., ver Argyris et al. [42], Masud e Calderer [43], Charnyi et al. [44], Shakib et al. [45] e Abali [46]).

Especificamente para os problemas regidos pelas equações de Navier-Stokes para fluidos incompressíveis, a satisfação da condição de incompressibilidade ao campo de velocidade induz a utilização de uma formulação mista de elementos finitos que exige um cuidado especial na escolha dos subespaços de aproximação da velocidade e da pressão (Gomes [47]). Isso se deve ao fato da escolha de alguns pares de velocidade e pressão gerar modos espúrios de pressão

caso a condição de compatibilidade *inf-sup* ou LBB (referência a *Ladyzhenskaya, Babuska e Brezzi*), ver Brezzi e Fortin [48]) não seja satisfeita. Muito trabalho foi realizado a fim de suplantar tais problemas até se obter uma formulação de elementos finitos capaz de se utilizar qualquer subespaço de aproximação de forma estável. Por exemplo, em [49] Tezduyar e Osawa propõe uma forma alternativa de calcular os parâmetros de estabilidade, SUPG e PSPG (do inglês, “Pressure-stabilizing/*Petrov-Galerkin*”), usados em formulações estabilizadas do MEF. Para tanto, eles propuseram a sua obtenção por meio de uma formulação baseada nas matrizes e vetores locais a nível dos elementos que foram testadas e validadas em problemas transientes governados tanto pela equação de transporte de massa via difusão-advecção como pela equação de Navier-Stokes para fluidos incompressíveis. Já Hughes e Franca, em [50], propuseram uma melhoria de sua própria formulação apresentada em [51], tornando-a simétrica e estabilizada para quaisquer pares de velocidade e pressão escolhido (inclusive para pares com mesma ordem de interpolação), especificamente para problemas governados pela equação de Stokes. Para problemas transientes regidos pela equação de Navier-Stokes, Tezduyar et al. [52] trouxe grande contribuição no desenvolvimento de uma formulação estável para pares de interpolação de velocidade e pressão de mesma ordem. Esta formulação é uma modificação sutil da formulação, para regime permanente, de Galerkin/Mínimos quadrados (do inglês “*Galerkin/least-squares formulation*”) testados e validados para elementos bidimensionais triangulares e quadrilaterais.

A segunda etapa deste trabalho é o desenvolvimento de um algoritmo capaz de simular o movimento no espaço de partículas sólidas e relativamente rígidas, isto é, com deformações desprezíveis durante os seus movimentos. Dentre os diversos métodos numéricos capazes de simular problemas da mecânica dos sólidos rígidos (MSR), este texto irá se concentrar no MED devido a sua utilização neste trabalho, conforme justificado na introdução. O MED tem a sua origem em meados dos anos 1970 do século passado com os trabalhos de Cundall [53] e [54] para o exército norte-americano. Contudo, apenas em 1979 Cundall e Strack apresentaram o seu trabalho [55] em um periódico acadêmico sendo este considerado por muitos como o trabalho que deu origem ao MED. Neste trabalho, os autores buscaram descrever com detalhes o modelo concebido por Cundall em [53] concentrando-se na representação das forças de contato e atrito entre os grãos. Em paralelo, Serrano e Rodrigue-Ortiz desenvolveram o seu trabalho [56] muito similar ao de Cundall diferenciando-se, basicamente, na forma como as forças de contato e atrito são consideradas. Cundall e Strack ponderam este trabalho como um dos primeiros a tentar simular problemas da MSR numericamente. O fruto desse esforço é o surgimento de um sem-número de trabalhos aplicados a variados fins tendo como base a

formulação do MED. Pode-se até mesmo dizer que existem vários métodos dos elementos discretos, ainda que quase todos sejam na sua essência variações generalizadas ou releituras do método original, e ainda que muitos deles se autodenominem por outros nomes que não o MED, sem fazer qualquer menção à terminologia “MED” (Campello [32]). Alguns expoentes nesta área devem ser citados como exemplos de contribuições maduras e relevantes do MED como Thornton [57] que utiliza uma formulação do MED, cujo contato partícula-partícula é baseado na teoria de Hertz (ver Johnson [58]) e Mindlin e Deresiewicz [59]), para simular processos de engenharia presentes na indústria, como: processos de aglomeração por sedimentação de partículas, atrito e cominuição de aglomerados, dentre outros. Já Munjiza et al. [60], combina o MEF com o MED de forma a simular problemas de progressão de fraturas em meios contínuos bidimensionais. Owen e Feng [61] apresentam uma estratégia de paralelização baseada na decomposição de domínios dinâmicos para análise combinada entre o MEF e MED com sólidos que apresentam múltiplas fraturas. Zohdi [62], por sua vez, apresenta uma estrutura computacional modular que combina várias etapas dentro de um processo de manufatura aditiva que envolve a deposição de partículas sobre uma superfície seguida de aquecimento a laser seletivo e direcionado. Campello e Quintana-Ruiz em [63], apresenta um modelo de adesão interpartículas simples capaz de modelar a adesão entre partículas cujos tamanhos são da ordem de algumas centenas de micrometros onde as forças inerciais são relevantes e as teorias clássicas de adesão, normalmente, não são capazes de modelar satisfatoriamente. Muitos outros trabalhos também podem ser citados como contribuições relevantes como Matuttis et al. [64], Rojek et al [65], Avci e Wriggers [66], Lim e Andrade [67], Zohdi [68], Quintana-Ruiz e Campello [69], Pöschel e Schwager [70], Zhu et al. [71] e [72] e Campello [33].

A terceira e última etapa deste trabalho é o desenvolvimento de um método numérico capaz de unificar as duas etapas descritas anteriormente. A inspiração para o acoplamento entre fluido e as partículas origina-se das técnicas utilizadas para IFE. Tais técnicas atraem atenção de pesquisadores desde há muito tempo. Um dos primeiros trabalhos publicados no assunto foi desenvolvido por Peskin ([73] e [74]) no início da década de 1970 para simular problemas biomecânicos (modelos de válvulas cardíacas). O modelo trabalhado por Peskin era bastante simplificado e não utilizava o MEF em sua formulação. Os primeiros trabalhos com o MEF surgiram no final da década de 70 e início da década de 80 (ver Belytschko e Kennedy [75] e Hughes et al. [76]) e utilizaram em sua formulação uma abordagem ALE. Esta abordagem ainda é muito utilizada e estudada nos dias de hoje (ver, Wall et al. [77], Kuhl et al. [78], Zhang e Hisada [79], Sawada e Hisada [80], Farhat et al. [81] e Tallec e Mouro [82]) tendo a sua utilização original integrada com o MDF. Porém, quando se pretende simular problemas com

geometrias complexas, buscar abordagens alternativas a ALE é um caminho importante e necessário uma vez que a necessidade de geração da malha a cada instante de tempo torna esse método caro no ponto de vista computacional. Uma alternativa é a utilização de métodos que tratam o fluido e a partícula como dois domínios superpostos independentes podendo, então, o fluido ser formulado a partir de uma malha fixa indeformável, totalmente independente da partícula, por meio de uma abordagem Euleriana. Esses métodos possuem uma vasta designação na literatura sendo, neste texto, chamado de fronteira imersa.

O conceito de fronteira imersa traz um grande benefício à programação que é a utilização de uma malha Euleriana fixa para a representação do fluido independente de corpos arbitrários (no nosso caso, partículas) que possam compor outras fases do problema não necessitando de novas malhas a cada instante de tempo. Por outro lado, a imposição das condições de contorno nas interfaces entre o fluido e as partículas acaba se tornando um dos grandes desafios de se utilizar esta técnica. Tais condições de contorno, para um problema fluido, diz respeito a imposição de velocidades na interface, isto é, trata-se de condições de contorno essenciais (*Dirichlet*). Existem diversas técnicas que auxiliam na aplicação destas condições de contorno sendo este tema assunto de desenvolvimento contínuo até os dias de hoje. Uma delas é a utilização do MEF em conjunto com os multiplicadores de Lagrange para impor as condições de contorno nas interfaces dos sólidos imersos. Esta técnica tem sido largamente utilizada por diversos pesquisadores (Gerstenberger e Wall [83], [84], Legay et al. [85], Gomes e Pimenta [86], Fernandes et al. [87]), com variações na forma como a discretização das interfaces do fluido com o corpo imerso é tratada (por exemplo, totalmente independente da malha do fluido), juntamente com a utilização de funções de interpolação variadas (e.g., constante dentro dos elementos das interfaces e descontínuas entre si) para aproximar os multiplicadores de Lagrange. Esta técnica foi utilizada com sucesso tanto para problemas de IFE (Gomes e Pimenta [86]) como para problemas de IFP (Fernandes et al. [87]), porém, ambos aplicados a problemas bidimensionais. Até onde é de conhecimento do autor, para problemas tridimensionais, a adoção desta técnica ainda está em aberto devido à complexidade de sua implementação e a problemas de instabilidade numérica. Lew e Buscaglia propuseram em seu trabalho [88], a troca dos elementos intersectados pelo corpo imerso por aproximações descontínuas de Galerkin para impor as condições de contorno em *Dirichlet* de forma forte. Outra técnica muito conhecida é a desenvolvida por Nitsche [34] que, originalmente, foi concebida para solução de problemas de Poisson mas logo foi adaptada para problemas de Stokes e Navier-Stokes (Benk et al. [89], Benk [35], Hansbo e Juntunen [90] e Becker [91]) devido a facilidade em sua implementação e pelo fato de não acrescentar novos graus de liberdade ao sistema. A desvantagem dessa técnica

é a introdução e, conseqüentemente, a escolha adequada, de parâmetros de penalidade necessários para a imposição da condição de contorno em *Dirichlet*. Esta técnica deu origem a muitos trabalhos importantes tais como Codina e Baiges [92], Burman [93], Massing et al. [94], dentre outros. Neste trabalho, optou-se em se utilizar Nitsche como técnica para acoplar as duas fases do problema.

Nada obstante, quando se trata, especificamente, de simulação de problemas IFP, a compreensão e análise de seus fenômenos é significativamente importante, particularmente no que diz respeito ao acoplamento existente nos problemas de escoamento de moderada a alta concentração de particulado. Esses problemas exigem uma descrição precisa de seus sistemas tendo a simulação de escoamento de grande número de partículas um grande desafio até os dias de hoje. Em meados da primeira metade da década de 1960, um dos primeiros trabalhos na área foi desenvolvido por Jayaweera e Mason [95] que realizou experimentos de sedimentação de múltiplas esferas em tubos preenchidos por líquidos. Já na década de 1980, Fortes et al. [96] promoveram estudos experimentais de fluidização com água de partículas esféricas em queda contra a gravidade em colunas de seção transversal retangular apresentando importantes cenários como “*drafting*”, “*kissing*” e “*tumbling*”. Contudo, somente no início da década de 1990 tem-se notícia dos primeiros estudos de simulação computacional bidimensional de interação fluido-partícula levando-se em consideração em sua formulação a natureza multifásica do problema (ver Tezduyar et al. [12], [13], Hu e Joseph [97]). O primeiro trabalho de simulação tridimensional de IFP utilizando o MEF, de conhecimento do autor, foi promovido por Johnson e Tezduyar [14] no início da segunda metade de 1990 que é um marco na modelagem tridimensional de escoamento de fluidos carregados com partículas. Posteriormente, os mesmos autores promoveram uma série de publicações ([15], [98]) a fim de demonstrar a robustez de sua formulação sendo capaz de simular escoamento de fluidos com um número considerável de partículas imersas (100 a 1000 partículas) para problemas tridimensionais. Assim como nos problemas de IFE, os problemas de IFP podem ser abordados via ALE (Tezduyar et al [12], [13]) ou tratando o fluido de maneira Euleriana (Johnson e Tezduyar [14], [15], Glowinski et al. [19]). Independente da abordagem, em ambos os casos as partículas são descritas de forma Lagrangiana usual. Muito se fez a fim de se aprimorar os métodos existentes, como também desenvolver novos métodos mais eficientes e robustos (ver Zhu et al. [71] e Zohdi [99], Avci e Wriggers [66], Fernandes et al. [87]). Ainda há muito a se avançar nesta área pois, levando-se em consideração a complexidade natural dos problemas de IFP, além das diversas peculiaridades e nuances dos problemas específicos de interesse, não é possível estabelecer um método que seja suficientemente geral e aplicável a todos os tipos de

problemas simultaneamente, tornando este assunto ainda relevante e atual.

### **1.3 Organização do texto**

Este texto descreve os desenvolvimentos empreendidos e resultados do trabalho de doutoramento do autor, desempenhadas no Laboratório de Mecânica Computacional (LMC) do Departamento de Engenharia de Estruturas e Geotécnica da Escola Politécnica da USP (EPUSP), e em parte também em modo remoto, devido à pandemia. Assim, o presente trabalho foi organizado conforme descrito a seguir.

Capítulo 2 aborda os conceitos e o equacionamento do problema fluido passando por todas as etapas matemáticas principais até a obtenção do sistema de equações governante do problema. Além disso, alguns exemplos são apresentados com o intuito de verificar a implementação computacional referente aos problemas de fluidos.

Capítulo 3 aborda os conceitos referentes à descrição do movimento das partículas pelo método dos elementos discretos passando pelo equacionamento de problemas de uma partícula até a sua extensão para problemas com várias partículas. Como no fluido, no final deste capítulo, alguns exemplos são apresentados com o intuito de verificar a implementação computacional referente aos problemas de partículas.

Capítulo 4 aborda o método de Nitsche para o acoplamento entre as fases (fluido e partículas) via fronteiras imersas e a forma como o sistema de equações governante é reescrito devido a sua aplicação. No final da parte teórica desse capítulo, o autor propõe uma nova metodologia para o cálculo das forças hidrodinâmicas considerando corpos imersos fixos sendo este, portanto, a primeira grande contribuição deste trabalho. No final do capítulo são apresentados alguns exemplos para verificar a implementação computacional considerando corpos imersos fixos.

Capítulo 5 aborda as especificidades do método proposto neste trabalho para a consideração da interação entre fluido e partícula passando por diversos aspectos de configurações possíveis de serem simuladas. É neste capítulo que se encontram as maiores contribuições deste trabalho. No final do capítulo são apresentados alguns exemplos para verificação do método proposto.

Capítulo 6 aborda as discussões e conclusões deste trabalho, além de propostas para trabalhos futuros abrindo caminho para novas contribuições nesta linha de pesquisa.

## 1.4 Notação adotada

Nas seções a seguir, serão utilizadas a seguinte notação:

- Para grandezas escalares faz-se uso de símbolos latinos e gregos em itálico ( $a, b, A, B, \mu, \rho$ , etc);
- Para vetores, utilizam-se letras minúsculas em negrito e itálico ( $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ , etc);
- Para valores nodais letras minúsculas em negrito ( $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ , etc);
- e de letras maiúsculas em negrito e itálico ( $\mathbf{A}, \mathbf{B}$ , etc) para tensores de segunda ordem pertencentes ao espaço vetorial Euclidiano tridimensional ( $\mathbf{E}^3$ ) tendo a sua base ortonormal da geometria clássica dada por  $\{e_1, e_2, e_3\}$ ;
- O produto interno de dois vetores  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{y}$  do espaço vetorial da geometria clássica  $\mathbf{V}^3$  é um número real  $(\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}) = x_1y_1 + x_2y_2 + x_3y_3 = x_iy_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ). A norma associada ao produto interno de um vetor  $\mathbf{x}$  é  $\|\mathbf{x}\| = \sqrt{(\mathbf{x} \cdot \mathbf{x})}$ ;
- A notação  $\mathbf{A} : \mathbf{B}$  é utilizada para o produto interno no contexto de matrizes e de tensores e é definida por  $\mathbf{A} : \mathbf{B} = \text{tr}(\mathbf{A}^T \mathbf{B})$ , onde  $\text{tr}(\mathbf{M}) = \sum_{i=1}^n M_{ii}$ .
- O produto diádico entre dois vetores  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{y}$  do espaço vetorial  $\mathbf{V}^3$  é dado por  $\mathbf{x} \otimes \mathbf{y} = \mathbf{xy}^T$ .

As demais definições adotadas serão apresentadas quando necessário ao longo do texto.

## 2 DESCRIÇÃO E VERIFICAÇÃO DO PROBLEMA FLUIDO

Neste capítulo as equações governantes do problema fluido são estabelecidas de forma resumida para um tipo de fluido particular, aqueles considerados incompressíveis governados pelas equações de Navier-Stokes. A descrição deste capítulo sofreu grande influência do capítulo sobre fluido da tese de doutoramento de Gomes [47]. No final deste capítulo, dois exemplos clássicos de CFD são apresentados com o intuito de validar o algoritmo desenvolvido neste trabalho para a simulação do problema de fluido tridimensional tendo como base a formulação apresentada a seguir.

### 2.1 Equação de Navier-Stokes

A conservação da quantidade de movimento de um ponto material infinitesimal de massa  $dm$  para fluidos viscosos incompressíveis governados pelas equações de Navier-Stokes pode ser expressa por

$$\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \operatorname{div} \mathbf{T} + \rho \mathbf{b}, \quad (1)$$

onde  $\rho$ ,  $\mathbf{u}$ ,  $\mathbf{T}$  e  $\mathbf{b}$  são, respectivamente, a densidade do fluido, o vetor das velocidades, o Tensor das tensões de Cauchy e o vetor das forças de volume por unidade de massa. O termo  $d\mathbf{u}/dt$  é a derivada material da velocidade com relação ao tempo. A condição de incompressibilidade do fluido é garantida pela imposição de restrição no campo de velocidade pelo princípio de conservação de volume dado por

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0. \quad (2)$$

Considerando uma descrição Euleriana do escoamento do fluido, a parcela referente à derivada material da velocidade na equação (1), pode ser dividida em duas parcelas de aceleração: a aceleração local e a aceleração convectiva como se segue

$$\rho (\dot{\mathbf{u}} + (\nabla \mathbf{u}) \mathbf{u}) = \operatorname{div} \mathbf{T} + \rho \mathbf{b}, \quad (3)$$

onde  $\dot{\mathbf{u}}$  denota a derivada ordinária da velocidade com relação ao tempo. A definição do termo

$\nabla \mathbf{u}$ , que é o gradiente da velocidade, pode ser observada na equação (4). Neste ponto, torna-se importante ressaltar que a convenção de somatório sobre índices repetidos, ou mudos, é utilizada ao longo deste texto, bem como a notação  $\mathbf{a}_{,i}$  para designar a derivada do vetor  $\mathbf{a}$  com relação à coordenada  $i$  de um sistema cartesiano definido pelas bases  $\mathbf{e}_i$ .

$$\nabla \mathbf{u} = \mathbf{u}_{,i} \otimes \mathbf{e}_i. \quad (4)$$

Para este trabalho, o tensor das tensões de Cauchy  $\mathbf{T}$  é aquele definido para fluidos Newtonianos expresso pela equação (5).

$$\mathbf{T} = -\bar{p}\mathbf{I} + 2\mu\varepsilon(\mathbf{u}), \quad (5)$$

onde  $\bar{p}$ ,  $\mathbf{I}$ ,  $\mu$  e  $\varepsilon(\mathbf{u})$  são, respectivamente, a pressão hidrostática, tensor identidade, a viscosidade absoluta do fluido e o tensor taxa de deformação da velocidade dado por

$$\varepsilon(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \left( \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right). \quad (6)$$

Substituindo a equação (6) na equação (3) e acrescentando o termo referente à condição de incompressibilidade, obtém-se o sistema de equações diferenciais parciais dado por (7).

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{u}} + (\nabla \mathbf{u})\mathbf{u} - 2\nu \operatorname{div}(\nabla^s \mathbf{u}) + \nabla p = \mathbf{b} & \text{em } \Omega, \\ \operatorname{div} \mathbf{u} = 0 & \text{em } \Omega, \end{cases} \quad (7)$$

onde  $\Omega$  é o domínio do problema e  $\nabla^s \mathbf{u}$  é o gradiente simétrico das velocidades que é idêntico ao tensor taxa de deformação da velocidade  $\varepsilon(\mathbf{u})$ .

É importante ressaltar alguns aspectos referentes ao sistema de equações (7):

- Todos os termos da equação da quantidade de movimento foram divididos por  $\rho$ , resultando na viscosidade cinemática ( $\nu = \mu/\rho$ ) e na pressão cinemática ( $p = \bar{p}/\rho$ );
- O divergente do tensor das tensões de Cauchy é dado por  $\operatorname{div} \mathbf{T} = -\nabla p + 2\nu \operatorname{div}(\nabla^s \mathbf{u})$ ;
- O segundo termo da primeira equação é responsável pelo comportamento convectivo e, o terceiro termo pelo comportamento viscoso;

- Para que seja possível a obtenção da solução do sistema de equações diferenciais parciais em questão, torna-se necessária a imposição de condições de contorno e de condições iniciais ao problema, uma vez que se trata de problema transiente. Tais condições podem ser definidas por:

$$\begin{aligned} \mathbf{T}\mathbf{n} &= \bar{\mathbf{t}} && \text{em } \Gamma_t \\ \mathbf{u} &= \bar{\mathbf{u}} && \text{em } \Gamma_u \\ \mathbf{u} &= \mathbf{u}_0 && \text{em } \Omega \text{ e } t = 0, \end{aligned} \quad (8)$$

onde  $\Gamma_u$  e  $\Gamma_t$  são as partes do contorno onde são impostas as condições de contorno de *Dirichlet* (essenciais) e de *Neumann* (naturais), respectivamente, tais que  $\Gamma = \Gamma_u \cup \Gamma_t$  e  $\Gamma_u \cap \Gamma_t = \emptyset$ . Os termos  $\bar{\mathbf{t}}$  e  $\bar{\mathbf{u}}$  são, respectivamente, o vetor tensão e o vetor velocidade prescritos. Já  $\mathbf{u}_0$  é o vetor com os valores das velocidades iniciais do problema que deve também satisfazer a condição de incompressibilidade e,  $\mathbf{n}$  é o vetor unitário normal a superfície  $\Gamma_t$ .

Portanto, o sistema de equações diferenciais parciais que descreve o comportamento do fluido neste trabalho pode ser resumido por:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{u}} + (\nabla \mathbf{u})\mathbf{u} - 2\nu \operatorname{div}(\nabla^s \mathbf{u}) + \nabla p = \mathbf{b} & \text{em } \Omega, \\ \operatorname{div} \mathbf{u} = 0 & \text{em } \Omega, \\ \mathbf{T}\mathbf{n} = \bar{\mathbf{t}} & \text{em } \Gamma_t, \\ \mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} & \text{em } \Gamma_u, \\ \mathbf{u} = \mathbf{u}_0 & \text{em } \Omega \text{ e } t = 0. \end{cases} \quad (9)$$

## 2.2 Forma Fraca

A obtenção da forma fraca da equação de Navier-Stokes requer a introdução de classes de funções especiais para os campos de velocidade e pressão. No que diz respeito ao campo de velocidade, escrevem-se os espaços dessas funções especiais, comumente chamadas de funções de aproximação e peso, como

$$\mathcal{S} = \{ \mathbf{u} \in \mathbf{H}_1(\Omega) \mid \mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \text{ em } \Gamma_u \} \quad (10)$$

e

$$\mathcal{V} = \mathbf{H}_1^{B=0} = \{ \mathbf{w} \in \mathbf{H}_1(\Omega) \mid \mathbf{w} = \mathbf{0} \text{ em } \Gamma_u \}, \quad (11)$$

onde  $\mathcal{S}$  e  $\mathcal{V}$  são subespaços de Hilbert cujas condições de contorno de *Dirichlet* devem ser satisfeitas pelas funções de aproximação, e as funções peso devem ser nulas em  $\Gamma_u$ .

Para o campo de pressão, uma vez que as derivadas espaciais em pressão não aparecem na expressão da forma fraca da equação de Navier-Stokes, o espaço das funções é requerido que seja quadrado integrável. Portanto, define-se  $\mathcal{Q} = L_2(\Omega)$  como sendo o espaço que contém as funções de aproximação e de peso para a variável em pressão.

Aplicando-se as funções teste arbitrárias  $(\mathbf{w}, q) \in \mathcal{V} \times \mathcal{Q}$  no sistema de equações (7), o mesmo pode ser reescrito em sua forma integral a seguir.

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \dot{\mathbf{u}} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot (\nabla \mathbf{u}) \mathbf{u} d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot [2\nu \operatorname{div}(\nabla^s \mathbf{u})] d\Omega + \\ \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \nabla p d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \mathbf{b} d\Omega \quad \text{em } \Omega, \\ \int_{\Omega} q \cdot \operatorname{div} \mathbf{u} d\Omega = 0 \quad \text{em } \Omega. \end{aligned} \quad (12)$$

Aplicando-se o teorema do divergente nos termos viscoso e o de pressão da equação (12) obtêm-se:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \dot{\mathbf{u}} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot (\nabla \mathbf{u}) \mathbf{u} d\Omega + \int_{\Omega} 2\nu \nabla^s \mathbf{w} : \nabla^s \mathbf{u} d\Omega \\ - \int_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{w} \cdot p d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \mathbf{b} d\Omega + \int_{\Gamma_t} \mathbf{w} \cdot \bar{\mathbf{t}} d\Gamma_t, \\ \int_{\Omega} q \cdot \operatorname{div} \mathbf{u} d\Omega = 0. \end{aligned} \quad (13)$$

Portanto, o enunciado do problema pode ser definido como: encontrar  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{S} \times ]0, T]$  e  $p(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{Q} \times ]0, T]$ , tal que,  $\forall (\mathbf{w}, q) \in \mathcal{V} \times \mathcal{Q}$

$$\begin{aligned} (\mathbf{w}, \dot{\mathbf{u}})_{\Omega} + c(\mathbf{u}; \mathbf{w}, \mathbf{u})_{\Omega} + a(\mathbf{w}, \mathbf{u})_{\Omega} - (\operatorname{div} \mathbf{w}, p)_{\Omega} + (q, \operatorname{div} \mathbf{u})_{\Omega} \\ - (\mathbf{w}, \bar{\mathbf{t}})_{\Gamma_t} = (\mathbf{w}, \mathbf{b})_{\Omega} \end{aligned} \quad (14)^1$$

que é a forma fraca da equação de Navier-Stokes em notação compacta. Os termos  $c(\mathbf{u}; \mathbf{w}, \mathbf{u})_{\Omega}$  e  $a(\mathbf{w}, \mathbf{u})_{\Omega}$  são, respectivamente, as formas trilinear e bilinear dos termos convectivo e viscoso dadas a seguir:

---

<sup>1</sup> A equação (14) pode ser apresentada, basicamente, de duas formas: a primeira contendo duas expressões (com os termos dependentes da velocidade separados dos termos dependentes da pressão) e, a segunda contendo uma única expressão (com os termos dependentes da velocidade e da pressão juntos). Observe que a equação (14) é apresentada de acordo com a segunda forma descrita anteriormente (muito comum no ambiente científico). Ao longo deste texto o leitor irá encontrar as duas formas de se expressar a equação de Navier-Stokes.

$$c(\mathbf{u}; \mathbf{w}, \mathbf{u})_{\Omega} = \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot (\nabla \mathbf{u}) \mathbf{u} d\Omega \quad \text{e} \quad a(\mathbf{w}, \mathbf{u})_{\Omega} = \int_{\Omega} 2\nu \nabla^s \mathbf{w} : \nabla^s \mathbf{u} d\Omega. \quad (15)$$

## 2.3 Discretização do tempo e integração numérica

Existem vários métodos numéricos capazes de se realizar integrações temporais na literatura. De forma geral, pode-se dividi-los em dois grandes grupos: os métodos explícitos e os implícitos. Os trabalhos desenvolvidos por Dettmer e Peric [100], Jansen *et al.* [101], Fries e Zilian [102], Bijl *et al.* [103] e van Zuijlen *et al.* [104], só para mencionar alguns, mostram a importância de se escolher um método de integração temporal adequado de acordo com o problema que se pretende resolver. Neste trabalho, serão abordados os seguintes métodos de integração temporais implícitos:

- Newmark<sup>2</sup> [105];
- Euler implícito.

Ressalta-se que, durante o desenvolvimento deste trabalho o método  $\alpha$ -generalizado ( $\alpha$ -G) foi implementado como método alternativo para integração temporal da equação de Navier-Stokes para problemas bidimensionais. Porém, observou-se um aumento não desprezível do custo computacional quando comparado com os métodos de Newmark e Euler. Esse fato fez com que o  $\alpha$ -G não fosse considerado neste trabalho para problemas tridimensionais, uma vez que, um dos grandes desafios desta tese é simular problemas com grande número de graus de liberdade (acima de quinhentos mil) devido a limitação de hardware e memória.

### 2.3.1 Método de Newmark

De uma forma geral, para qualquer método de integração temporal usual, o tempo  $t$  é expresso de forma discreta utilizando instantes de tempo  $t^n$  e incrementos de tempo  $\Delta t$  tal que  $t^{n+1} = t^n + \Delta t$  onde  $t^{n+1}$  é o instante de tempo subsequente a  $t^n$ .

Newmark [105] propõe escrever a aceleração do fluido no instante  $t^{n+1}$  da seguinte forma:

---

<sup>2</sup> A rigor, o método de Newmark foi desenvolvido para integrar equações diferenciais de segunda ordem no tempo, como, por exemplo, as equações da dinâmica dos sólidos e das estruturas. Talvez para fluido, como a equação temporal é de primeira ordem, designá-lo como método da aceleração média constante seja o mais apropriado. Todavia, ao longo deste texto, o autor irá referenciá-lo como usualmente este é citado na literatura, isto é, como método de Newmark.

$$\dot{\mathbf{u}}^{n+1} = \frac{1}{\gamma} \frac{(\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n)}{\Delta t} - \frac{(1-\gamma)}{\gamma} \dot{\mathbf{u}}^n, \quad (16)$$

onde  $\gamma$  é o parâmetro de integração de Newmark cujos valores podem variar de  $0 < \gamma \leq 1$ . Para se garantir convergência de segunda ordem, o parâmetro  $\gamma$  deve ser definido como  $1/2$  e a equação (16) pode ser reescrita como

$$\dot{\mathbf{u}}^{n+1} = \frac{2(\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n)}{\Delta t} - \dot{\mathbf{u}}^n. \quad (17)$$

Portanto, aplicando-se a equação (16) em (9), obtém-se a equação de Navier-Stokes para fluidos incompressíveis em sua forma semidiscreta a seguir.

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\mathbf{u}^{n+1}}{\gamma \Delta t} + (\nabla \mathbf{u}^{n+1}) \mathbf{u}^{n+1} - 2\nu \operatorname{div}(\nabla^s \mathbf{u}^{n+1}) + \nabla p^{n+1} = & \text{em } \Omega, \\ \mathbf{b}^{n+1} + \frac{\mathbf{u}^n}{\gamma \Delta t} + \frac{(1-\gamma)}{\gamma} \dot{\mathbf{u}}^n & \text{em } \Omega, \\ \operatorname{div} \mathbf{u}^{n+1} = 0 & \text{em } \Omega, \\ [2\nu \varepsilon(\mathbf{u}^{n+1}) - p^{n+1} \mathbf{I}] \mathbf{n} = \bar{\mathbf{t}}^{n+1} & \text{em } \Gamma_t, \\ \mathbf{u}^{n+1} = \bar{\mathbf{u}}^{n+1} & \text{em } \Gamma_u, \\ \mathbf{u}^{n=0} = \mathbf{u}_0 & \text{em } \Omega \text{ e } t = 0. \end{array} \right. \quad (18)$$

A forma fraca da equação (18) pode ser obtida semelhantemente a (14) sendo dada por

$$\left\{ (\mathbf{w}, \mathbf{u})_{\Omega} + \gamma \Delta t \left[ c(\mathbf{u}; \mathbf{w}, \mathbf{u})_{\Omega} + a(\mathbf{w}, \mathbf{u})_{\Omega} - (\operatorname{div} \mathbf{w}, p)_{\Omega} + (q, \operatorname{div} \mathbf{u})_{\Omega} - (\mathbf{w}, \bar{\mathbf{t}})_{\Gamma_t} - (\mathbf{w}, \mathbf{b})_{\Omega} \right] \right\}^{n+1} = (\mathbf{w}, \mathbf{u}^n)_{\Omega} + (1-\gamma) \Delta t (\mathbf{w}, \dot{\mathbf{u}}^n)_{\Omega}, \quad \forall (\mathbf{w}, q) \in \mathbf{V} \times \mathbf{Q}. \quad (19)$$

### 2.3.2 Método de Euler implícito

O método de Euler implícito tem o tempo  $t$  expresso da mesma forma discreta apresentada anteriormente tendo a aceleração do fluido no instante  $t^{n+1}$  definida conforme equação (20).

$$\dot{\mathbf{u}}^{n+1} = \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t}. \quad (20)$$

É interessante observar que o método de Euler implícito é um caso particular do método

de Newmark quando  $\gamma = 1$ . Esse método é extremamente simples de ser implementado, porém não é possível se obter convergência de segunda ordem com o mesmo tornando-o, muitas vezes, preterido com relação aos métodos de segunda ordem.

Neste caso a forma fraca da equação (18) torna-se igual a

$$\left\{ (\mathbf{w}, \mathbf{u})_{\Omega} + \Delta t \left[ c(\mathbf{u}; \mathbf{w}, \mathbf{u})_{\Omega} + a(\mathbf{w}, \mathbf{u})_{\Omega} - (\operatorname{div} \mathbf{w}, p)_{\Omega} + (q, \operatorname{div} \mathbf{u})_{\Omega} - (\mathbf{w}, \bar{\mathbf{t}})_{\Gamma_i} - (\mathbf{w}, \mathbf{b})_{\Omega} \right] \right\}^{n+1} = (\mathbf{w}, \mathbf{u}^n)_{\Omega}, \quad \forall (\mathbf{w}, q) \in \mathbf{V} \times \mathcal{Q}. \quad (21)$$

## 2.4 Discretização do espaço por elementos finitos

Uma forma de se obter a discretização espacial das equações (19) e (21) é aproximando as variáveis do problema (pressão e velocidade) bem como as funções testes apresentadas em 2.3 de acordo com a formulação de Galerkin via elementos finitos. Isto acarretará na obtenção de uma formulação mista de elementos finitos. A escolha adequada do elemento finito a ser usada para a discretização do domínio do fluido é de suma importância para se evitar problemas de instabilidade numérica do tipo LBB. Isso se dá quando a escolha de um elemento finito com muitos graus de liberdade de pressão e poucos de velocidade causar travamentos ou instabilidades numéricas devido ao excesso de restrição ao campo de velocidade. Muitos trabalhos foram desenvolvidos com o intuito de se identificar a condição pela qual o par de pressão e velocidade deve satisfazer a fim de se evitar tais problemas (ver Brezzi e Fortin [48], Donea e Huerta [106], Hughes [107], Burman e Fernández [108], Wieners [109] e Gomes e Pimenta [110]). Neste trabalho são utilizados elementos finitos 3D mistos muito conhecidos na literatura como elementos de Taylor-Hood (ver Wieners [109]) que satisfazem as condições LBB (ver Figura 2). Além desse problema de instabilidade, é sabido que a utilização da formulação de Galerkin (projeções usuais de Galerkin) para a simulação de fluidos não é a melhor escolha possível uma vez que ela é suscetível a outras fontes de instabilidades numérica devido a própria natureza hiperbólica da equação de Navier-Stokes, tendo os seus efeitos agravados quando o efeito da convecção é dominante. Portanto, nesse caso, há a necessidade de se implementar métodos estabilizadores da convecção a fim de suplantar este problema. Neste contexto, uma das primeiras e principais contribuições no assunto foi dada por Brooks e Hughes [41] que desenvolveram uma versão estabilizada da formulação de Galerkin utilizando técnicas de estabilização SUPG (do inglês, “*Streamline Upwind/Petrov-Galerkin*”) para problemas com convecção dominante. Além deste trabalho, muitos outros foram desenvolvidos

e até hoje este assunto é tema de pesquisa (ver Argyris et al. [42], Förster et al. [111] e Hsu et al. [112]). Para se contornar os problemas de estabilização da convecção mencionados, neste trabalho optou-se em simular problemas de fluido com baixo número de Reynolds evitando-se, assim, problemas com convecção dominante<sup>3</sup>.

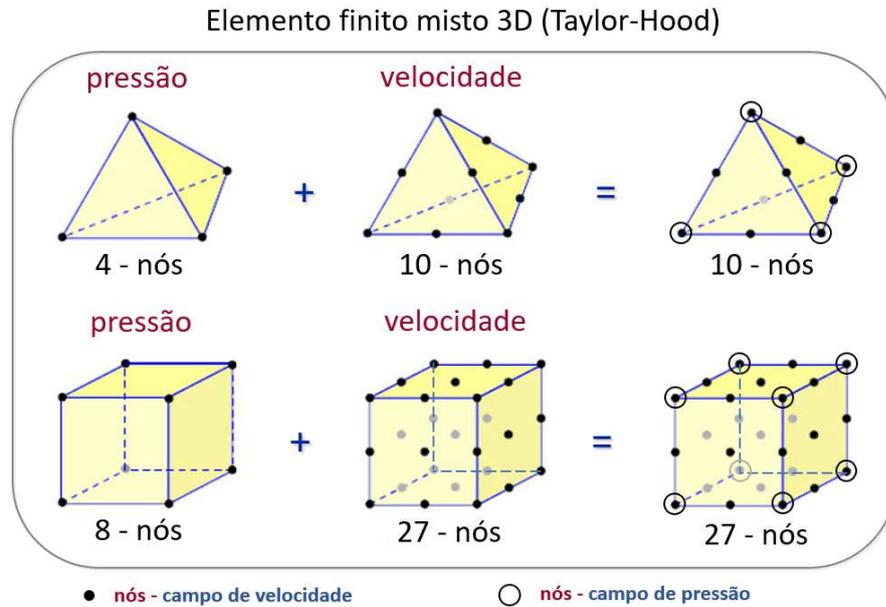


Figura 2: Elementos finitos mistos 3D (Taylor-Hood).

Portanto, para se obter a discretização espacial da equação de Navier-Stokes, faz-se necessário a utilização de funções clássicas aplicadas nas variáveis primitivas do problema bem como nas funções peso mencionadas na seção 2.2 de tal modo que

$$\begin{aligned}
 \mathbf{u}^h(\mathbf{x}) &= \bigcup_{e=1}^{Nel} \mathbf{N}_u \mathbf{u}_e, & p^h(\mathbf{x}) &= \bigcup_{e=1}^{Nel} \mathbf{N}_p \mathbf{p}_e, \\
 \mathbf{w}^h(\mathbf{x}) &= \bigcup_{e=1}^{Nel} \mathbf{N}_u \mathbf{w}_e, & q^h(\mathbf{x}) &= \bigcup_{e=1}^{Nel} \mathbf{N}_p \mathbf{q}_e,
 \end{aligned} \tag{22}$$

onde o índice  $h$  diz respeito à aproximação da função em questão e  $Nel$  é o número de elementos finitos utilizados para a discretização do domínio do problema.  $\mathbf{N}_u$  e  $\mathbf{N}_p$  são as matrizes que contêm as funções de interpolação (ou de forma) local do elemento finito sendo dadas por

<sup>3</sup> A técnica estabilizadora SUPG foi implementada pelo nosso grupo de pesquisa com sucesso para simulações bidimensionais (ver Gomes e Pimenta [86]). Neste trabalho optou-se em não utilizá-la em nossa formulação devido ao aumento considerável do custo computacional. Porém, sua inclusão está prevista em trabalhos futuros.

$$\mathbf{N}_u = \begin{bmatrix} N_1^u \mathbf{I} & N_2^u \mathbf{I} & \dots & N_{n_u}^u \mathbf{I} \end{bmatrix} \text{ e } \mathbf{N}_p = \begin{bmatrix} N_1^p & N_2^p & \dots & N_{n_p}^p \end{bmatrix}, \quad (23)$$

onde  $n_u$  e  $n_p$  são os números de nós de velocidade e de pressão por elemento, respectivamente.

Os vetores com índice  $e$  são aqueles que contêm os valores nodais das respectivas variáveis no domínio local do elemento finito. Ressalta-se que a geometria é aproximada com as mesmas funções de interpolação utilizadas para aproximar o campo de velocidade. Como exemplo, os vetores nodais  $\mathbf{u}_e$  (velocidade) e  $\mathbf{p}_e$  (pressão) são definidos por

$$\mathbf{u}_e = \begin{bmatrix} u_1 & v_1 & w_1 & u_2 & v_2 & w_2 & \dots & u_{n_u} & v_{n_u} & w_{n_u} \end{bmatrix}^T \text{ e } \mathbf{p}_e = \begin{bmatrix} p_1 & \dots & p_{n_p} \end{bmatrix}^T, \quad (24)$$

sendo  $u_i$ ,  $v_i$  e  $w_i$  os componentes de velocidade do nó  $i$  nas direções x, y e z, respectivamente.

Portanto, os subespaços  $\mathbf{S}$ ,  $\mathbf{V}$  e  $\mathbf{Q}$  agora têm dimensão finita sendo denominados de  $\mathbf{S}^h$ ,  $\mathbf{V}^h$  e  $\mathbf{Q}^h$ . Com isso, os problemas governados pelas equações (19) e (21), agora na sua forma discretizada, podem ser enunciado como: dados  $\mathbf{b}$ ,  $\bar{\mathbf{t}}$ ,  $\bar{\mathbf{u}}$  e conhecida a solução do problema no instante  $n$ , encontrar  $\mathbf{u}^h(\mathbf{x}) \in \mathbf{S}^h$  e  $p^h(\mathbf{x}) \in \mathbf{Q}^h$  no instante  $t^{n+1} = t^n + \Delta t$  tal que, para qualquer par  $(\mathbf{w}^h, q^h) \in \mathbf{V}^h \times \mathbf{Q}^h$ , tenha-se

$$\begin{cases} \left\{ \left( \mathbf{w}^h, \mathbf{u}^h \right)_\Omega + \gamma \Delta t \left[ c \left( \mathbf{u}^h; \mathbf{w}^h, \mathbf{u}^h \right)_\Omega + a \left( \mathbf{w}^h, \mathbf{u}^h \right)_\Omega - \left( \operatorname{div} \mathbf{w}^h, p^h \right)_\Omega \right] \right\}^{n+1} = \\ \gamma \Delta t \left\{ \left( \mathbf{w}^h, \bar{\mathbf{t}} \right)_{\Gamma_t} + \left( \mathbf{w}^h, \mathbf{b} \right)_\Omega \right\}^{n+1} + \left( \mathbf{w}^h, \mathbf{u}^h \right)_\Omega^n + (1 - \gamma) \Delta t \left( \mathbf{w}^h, \dot{\mathbf{u}}^h \right)_\Omega^n \\ \left( q^h, \operatorname{div} \mathbf{u}^h \right)_\Omega^{n+1} = 0, \end{cases} \quad (25)$$

para a discretização temporal de Newmark ( $\gamma = 1/2$ ) e Euler implícito ( $\gamma = 1$ ). Após algumas manipulações algébricas, o sistema de equações (25) pode ser reescrito em sua forma matricial de acordo com a equação (26), a seguir.

$$\begin{cases} \frac{\mathbf{M}}{\gamma \Delta t} \mathbf{u}^{n+1} + \left\{ \mathbf{C} \left( \mathbf{u}^{n+1} \right) + \mathbf{K} \right\} \mathbf{u}^{n+1} + \mathbf{G} \mathbf{p}^{n+1} = \mathbf{f}^{n+1} + \frac{\mathbf{M}}{\gamma \Delta t} \mathbf{u}^n + \frac{(1 - \gamma)}{\gamma} \mathbf{M} \dot{\mathbf{u}}^n \\ \mathbf{G}^T \mathbf{u}^{n+1} = 0, \end{cases} \quad (26)$$

onde os vetores com valores nodais globais de velocidade e pressão são definidos por  $\mathbf{u}$  e  $\mathbf{p}$ ,

respectivamente.  $\mathbf{M}$ ,  $\mathbf{C}$ ,  $\mathbf{K}$ ,  $\mathbf{G}$  e  $\mathbf{G}^T$  são as matrizes globais de massa, convectiva (não-linear), viscosa, operador gradiente e operador divergente, respectivamente. O vetor  $\mathbf{f}$  contém as forças de volume e tensões aplicadas. Os vetores globais se relacionam com os vetores locais conforme expressão (27) a seguir.

$$\mathbf{u}_e = \mathbf{A}_e \mathbf{u} \quad \text{e} \quad \mathbf{p}_e = \mathbf{A}_e \mathbf{p}. \quad (27)$$

A matriz  $\mathbf{A}_e$  é a matriz de conectividade do elemento  $e$  sendo colocada neste texto somente para fins didáticos não sendo a mesma implementada no código devido a sua ineficiência computacional. O espalhamento das matrizes e vetores locais dos elementos nas respectivas matrizes e vetores globais são dados, por exemplo, por

$$\mathbf{M} = \sum_{e=1}^{Nel} \mathbf{A}_e^T \mathbf{M}_e \mathbf{A}_e \quad \text{e} \quad \mathbf{f} = \sum_{e=1}^{Nel} \mathbf{A}_e^T \mathbf{f}_e. \quad (28)$$

O procedimento é análogo para as demais matrizes e vetores globais do problema. As matrizes locais dos elementos são definidas por

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_e &= \int_{\Omega_e} \mathbf{N}_u^T \mathbf{N}_u d\Omega_e, \\ \mathbf{K}_e &= \int_{\Omega_e} \mathbf{B}_u^T \nu \mathbf{B}_u d\Omega_e, \\ \mathbf{C}_e &= \int_{\Omega_e} \mathbf{N}_u^T \left[ (\mathbf{N}_{u,i} \mathbf{u}_e^{n+1}) \otimes \mathbf{e}_i \right] \mathbf{N}_u d\Omega_e, \\ \mathbf{G}_e &= - \int_{\Omega_e} (\nabla \cdot \mathbf{N}_u)^T \mathbf{N}_p d\Omega_e \quad \text{e} \\ \mathbf{f}_e &= \int_{\Omega_e} \mathbf{N}_u^T \mathbf{b} d\Omega_e + \int_{\Gamma_{te}} \mathbf{N}_u^T \bar{\mathbf{t}} d\Gamma_{te}, \end{aligned} \quad (29)$$

onde

$$\mathbf{B}_u = \begin{bmatrix} N_{1,1}^u \mathbf{I} & N_{2,1}^u \mathbf{I} & \dots & N_{n_u,1}^u \mathbf{I} \\ N_{1,2}^u \mathbf{I} & N_{2,2}^u \mathbf{I} & \dots & N_{n_u,2}^u \mathbf{I} \\ N_{1,3}^u \mathbf{I} & N_{2,3}^u \mathbf{I} & \dots & N_{n_u,3}^u \mathbf{I} \end{bmatrix}, \quad (30)$$

$$\mathbf{N}_{u,i} = \begin{bmatrix} N_{1,i}^u \mathbf{I} & N_{2,i}^u \mathbf{I} & \dots & N_{n_u,i}^u \mathbf{I} \end{bmatrix}, \quad (31)$$

$$(\nabla \cdot \mathbf{N}_u) = \begin{bmatrix} N_{1,1}^u & N_{1,2}^u & N_{1,3}^u & \dots & N_{n_u,1}^u & N_{n_u,2}^u & N_{n_u,3}^u \end{bmatrix}. \quad (32)$$

Se o vetor taxa de deformação for definido por

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{u}) = \nabla^s \mathbf{u} = \left( u_{,1} \quad v_{,2} \quad w_{,3} \quad u_{,2} + v_{,1} \quad v_{,3} + w_{,2} \quad w_{,1} + u_{,3} \right)^T \quad (33)$$

e a matriz constitutiva for dada por

$$\mathbf{C}_\nu = \nu \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (34)$$

a matriz viscosa local pode ser obtida por

$$\mathbf{K}_e = \int_{\Omega_e} \mathbf{B}_u^T \mathbf{C}_\nu \mathbf{B}_u d\Omega_e, \quad (35)$$

onde

$$\mathbf{B}_u = \begin{bmatrix} N_{1,1}^u & 0 & 0 & N_{2,1}^u & 0 & 0 & \dots & N_{n_u,1}^u & 0 & 0 \\ 0 & N_{1,2}^u & 0 & 0 & N_{2,2}^u & 0 & \dots & 0 & N_{n_u,2}^u & 0 \\ 0 & 0 & N_{1,3}^u & 0 & 0 & N_{2,3}^u & \dots & 0 & 0 & N_{n_u,3}^u \\ N_{1,2}^u & N_{1,1}^u & 0 & N_{2,2}^u & N_{2,1}^u & 0 & \dots & N_{n_u,2}^u & N_{n_u,1}^u & 0 \\ 0 & N_{1,3}^u & N_{1,2}^u & 0 & N_{2,3}^u & N_{2,2}^u & \dots & 0 & N_{n_u,3}^u & N_{n_u,2}^u \\ N_{1,3}^u & 0 & N_{1,1}^u & N_{2,3}^u & 0 & N_{2,1}^u & \dots & N_{n_u,3}^u & 0 & N_{n_u,1}^u \end{bmatrix}. \quad (36)$$

Recomenda-se ao leitor que acesse o Apêndice de Gomes [47] para obter mais detalhe sobre a dedução das matrizes locais em (29) e (35).

O sistema de equações (26) também pode ser escrito, na forma matricial, como

$$\begin{bmatrix} \frac{\mathbf{M}}{\gamma \Delta t} + \{ \mathbf{C}(\mathbf{u}^{n+1}) + \mathbf{K} \} & \mathbf{G} \\ \mathbf{G}^T & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}^{n+1} \\ \mathbf{p}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}^{n+1} + \frac{\mathbf{M}}{\gamma \Delta t} \mathbf{u}^n + \frac{(1-\gamma)}{\gamma} \mathbf{M} \dot{\mathbf{u}}^n \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad (37)$$

Observe que (37) é um sistema de equações não linear devido à parcela do termo convectivo  $\mathbf{C}(\mathbf{u}^{n+1})$ . Diversas técnicas podem ser empregadas para obter a solução do sistema não-linear. Na seção 2.5 a seguir, mostrar-se-á como este termo é tratado neste trabalho.

## 2.5 Solução do sistema não linear

Como visto na seção anterior, o termo convectivo,  $\mathbf{C}(\mathbf{u}^{n+1})$ , torna não linear o sistema de equações algébricas (37). Neste trabalho, utiliza-se o método iterativo de Newton-Raphson para se obter a solução do problema não linear. Para tanto, faz-se necessário a obtenção da matriz de rigidez tangente do problema a qual é mostrada ao longo desta seção. Pode-se reescrever o problema (37) da seguinte forma

$$\mathbf{F}(\mathbf{d}^{n+1}) = \mathbf{0}, \quad (38)$$

onde

$$\mathbf{F}(\mathbf{d}^{n+1}) = - \begin{bmatrix} \frac{\mathbf{M}}{\gamma \Delta t} + \{ \mathbf{C}(\mathbf{u}^{n+1}) + \mathbf{K} \} & \mathbf{G} \\ & \mathbf{G}^T \\ & \mathbf{0} \end{bmatrix} \mathbf{d}^{n+1} + \begin{bmatrix} \mathbf{f}^{n+1} + \frac{\mathbf{M}}{\gamma \Delta t} \mathbf{u}^n + \frac{(1-\gamma)}{\gamma} \mathbf{M} \dot{\mathbf{u}}^n \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}, \mathbf{e} \quad (39)$$

$$\mathbf{d}^{n+1} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}^{n+1} \\ \mathbf{p}^{n+1} \end{bmatrix} \quad (40)$$

é o vetor de deslocamentos generalizados. Para se obter a solução de (38), utiliza-se um procedimento iterativo de Newton tal que

$$\begin{cases} \mathbf{A}(\mathbf{d}_k^{n+1}) \delta^{n+1} = -\mathbf{F}(\mathbf{d}_k^{n+1}) \\ \mathbf{d}_{k+1}^{n+1} = \mathbf{d}_k^{n+1} + \delta^{n+1}, \end{cases} \quad (41)$$

onde  $k$  é o número da iteração. A matriz  $\mathbf{A}(\mathbf{d}_k^{n+1})$ , chamada de matriz tangente do problema, é definida como

$$\mathbf{A}(\mathbf{d}_k^{n+1}) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{d}_k^{n+1}} \mathbf{F}(\mathbf{d}_k^{n+1}). \quad (42)$$

A obtenção de  $\mathbf{A}(\mathbf{d}_k^{n+1})$  se dá diferenciando (39) em função das variáveis de  $\mathbf{d}$ , ou seja, de  $\mathbf{u}^{n+1}$  e  $\mathbf{p}^{n+1}$  e, em seguida, espalha-se os termos obtidos de modo análogo a (28). Para tanto,

é necessário a obtenção do operador tangente do termo da forma fraca que dá origem a  $\mathbf{C}(\mathbf{u}^{n+1})$  de modo que

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \mathbf{d}^{n+1}} c(\mathbf{u}^h; \mathbf{w}^h, \mathbf{u}^h)_{\Omega} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{d}^{n+1}} \int_{\Omega} \mathbf{w}^h \cdot (\nabla \mathbf{u}^h) \mathbf{u}^h d\Omega \\
&= \frac{\partial}{\partial \mathbf{d}^{n+1}} \sum_e \int_{\Omega_e} \mathbf{w}^h \cdot (\nabla \mathbf{u}^h) \mathbf{u}^h d\Omega_e \\
&= \frac{\partial}{\partial \mathbf{d}^{n+1}} \sum_e \int_{\Omega_e} (\mathbf{N}_u \mathbf{A}_e \mathbf{w})^T \left\{ [(\mathbf{N}_{u,i} \mathbf{A}_e \mathbf{u}) \otimes \mathbf{e}_i] \mathbf{N}_u \mathbf{A}_e \mathbf{u} \right\} d\Omega_e \\
&= \sum_e \int_{\Omega_e} (\mathbf{N}_u \mathbf{A}_e \mathbf{w})^T \left\{ [(\mathbf{N}_{u,i} \mathbf{A}_e \mathbf{I}) \otimes \mathbf{e}_i] \mathbf{u}^h + (\nabla \mathbf{u}^h) \mathbf{N}_u \mathbf{A}_e \mathbf{I} \right\} d\Omega_e \\
&= \mathbf{w}^T \sum_e \left( \mathbf{A}_e^T \int_{\Omega_e} \left[ \mathbf{N}_u^T (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}^h) \mathbf{N}_{u,i} + \mathbf{N}_u^T (\nabla \mathbf{u}^h) \mathbf{N}_u \right] d\Omega_e \mathbf{A}_e \right) \\
&= \mathbf{w}^T \sum_e (\mathbf{A}_e^T \mathbf{C}_{Te} \mathbf{A}_e)
\end{aligned} \tag{43}$$

com

$$\mathbf{C}_{Te} = \int_{\Omega_e} \left[ \mathbf{N}_u^T (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}^h) \mathbf{N}_{u,i} + \mathbf{N}_u^T (\nabla \mathbf{u}^h) \mathbf{N}_u \right] d\Omega_e. \tag{44}$$

Portanto, a matriz tangente do problema é dada por

$$\mathbf{A}(\mathbf{d}^{n+1}) = \begin{bmatrix} \frac{\mathbf{M}}{\gamma \Delta t} + \mathbf{C}_T(\mathbf{u}^{n+1}) + \mathbf{K} & \mathbf{G} \\ \mathbf{G}^T & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \tag{45}$$

para Newmark e Euler implícito. O termo  $\mathbf{C}_T$  é dado pelo espalhamento das matrizes locais  $\mathbf{C}_{Te}$  dos elementos.

## 2.6 Exemplos Numéricos

Nesta seção serão apresentados os resultados obtidos com a formulação apresentada até o momento com o intuito de verificar o código computacional. Os exemplos serão divididos em estacionário e transiente para problemas tridimensionais. Apesar do objetivo principal deste trabalho ser de natureza transiente, optou-se em apresentar também um problema estacionário com o intuito de validar parcialmente a implementação computacional com exemplo da literatura, uma vez que, basicamente, o que difere computacionalmente um do outro é apenas a

implementação do *looping* do tempo, além de ser um exemplo muito mais rápido de ser obtido do ponto de vista computacional. A plataforma Gid [113] foi utilizada como ferramenta auxiliar para pré- e pós-processamento para todos os exemplos desta seção e das demais seções adiante. Para todos os exemplos a tolerância utilizada para se admitir a convergência do problema não linear nas iterações do método de Newton foi de  $TOL = 10^{-6}$ .

### 2.6.1 Escoamento estacionário em torno de um cilindro 3D

Este é um exemplo clássico da literatura que simula o escoamento em torno de um cilindro. Tal exemplo pode ser encontrado em Schäfer e Turek [114], Turek e Schäfer [115], Bayraktar et al. [116] e Braack e Richter [117]. As referências [114] e [115] são utilizadas como parâmetros de comparação dos resultados. Basicamente, o exemplo consiste em um escoamento de fluido por meio de um canal estreito cuja características geométricas estão ilustradas na Figura 3. Próximo à entrada do canal há um obstáculo (cilindro) de diâmetro  $D = 0,1$  m. O cilindro é considerado como um vazio no interior do fluido.

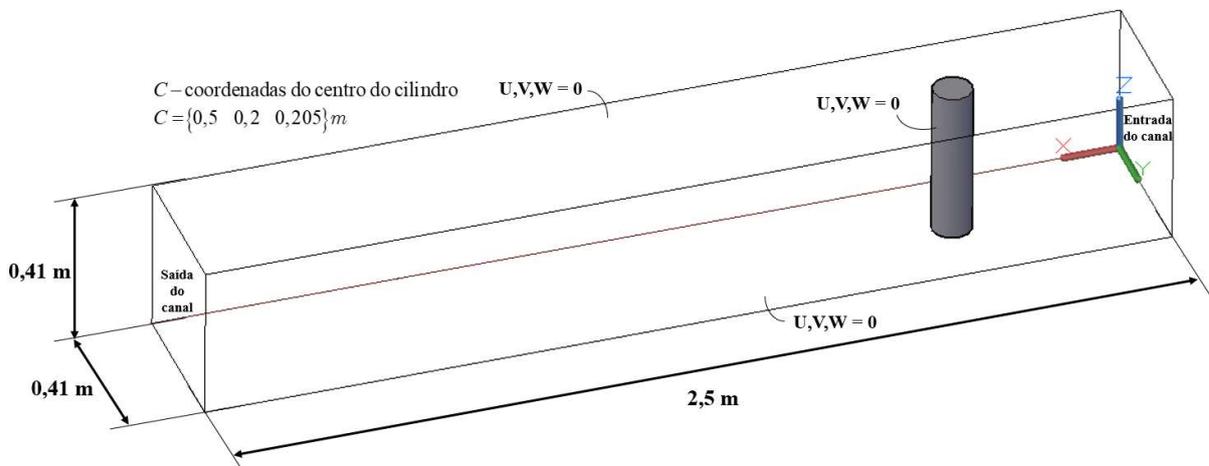


Figura 3: Desenho esquemático do exemplo 2.6.1.

Na entrada do canal é aplicado um perfil de velocidade parabólico conforme equação (46) a seguir.

$$U(0, y, z) = \frac{16U_m yz(H - y)(H - z)}{H^4}, V = W = 0 \quad (46)$$

onde  $U_m = 0,45$  m/s e  $H = 0,41$  m de onde se obtém o número de Reynolds  $Re = 20$  (Schäfer e Turek [115]). A notação das componentes de velocidade adotada é  $(u_1, u_2, u_3) = (U, V, W)$  e a condição de contorno aplicada na saída do canal é a de tensão

zero. Foram utilizados elementos finitos tridimensionais hexaédricos (ver Figura 2) e a malha de acordo com a Figura 4.

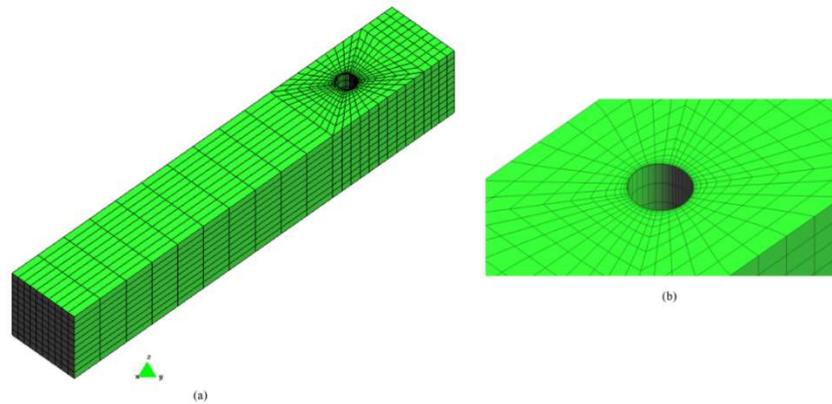


Figura 4: (a) Malha de elementos finitos 3D utilizada no exemplo 2.6.1 (6.200 elementos finitos hexaedros mistos com 54.348 nós); (b) Detalhe do refinamento da malha na região do cilindro.

Os parâmetros do fluido deste exemplo são apresentados na Tabela 1.

| Parâmetros do fluido        |       |
|-----------------------------|-------|
| $\rho$ (kg/m <sup>3</sup> ) | 1,0   |
| $\nu$ (m <sup>2</sup> /s)   | 0,001 |

Tabela 1: Parâmetros do fluido referente ao exemplo 2.6.1.

Da Figura 5 à Figura 9, são apresentados alguns resultados obtidos para os campos de velocidade e pressão para uma avaliação qualitativa.

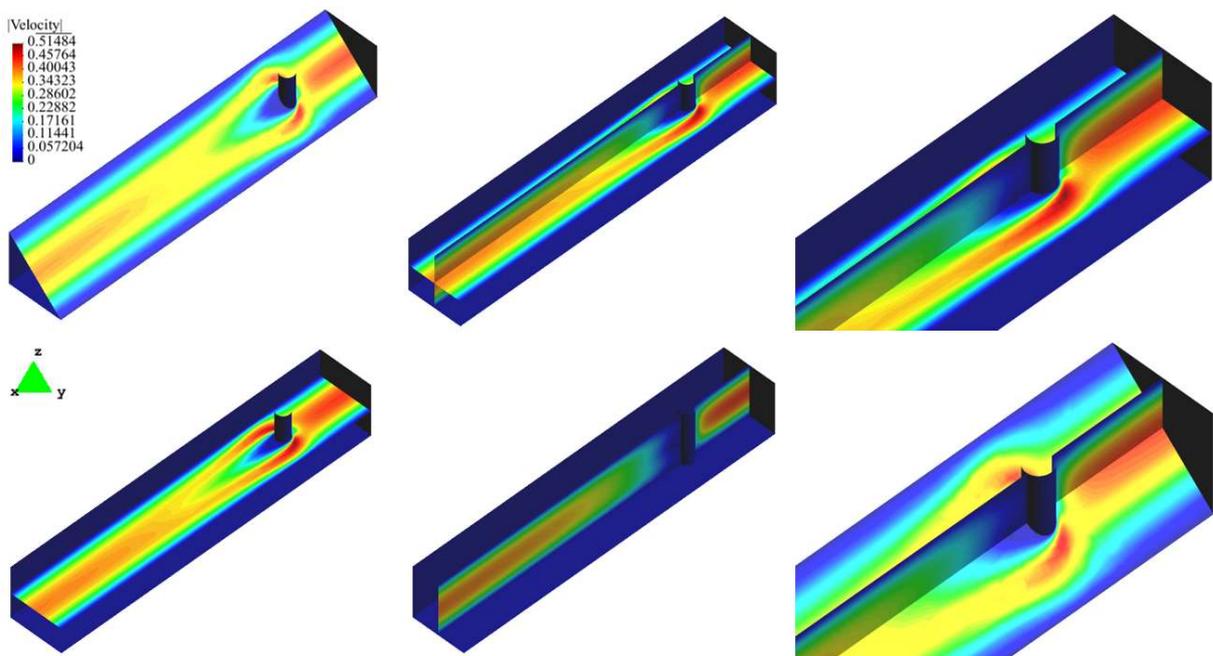


Figura 5: Isocurvas de velocidade, exemplo 2.6.1 (vistas isométricas).

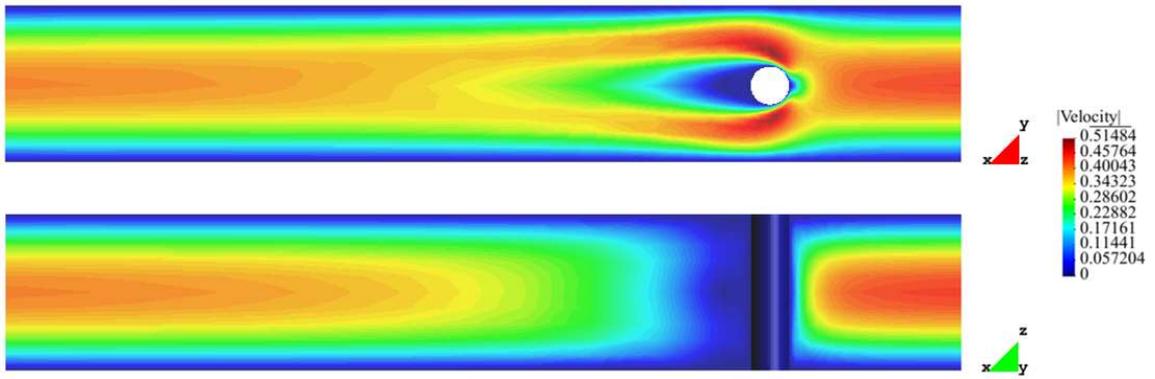


Figura 6: Isocurvas de velocidade, exemplo 2.6.1 (vista lateral e em planta).

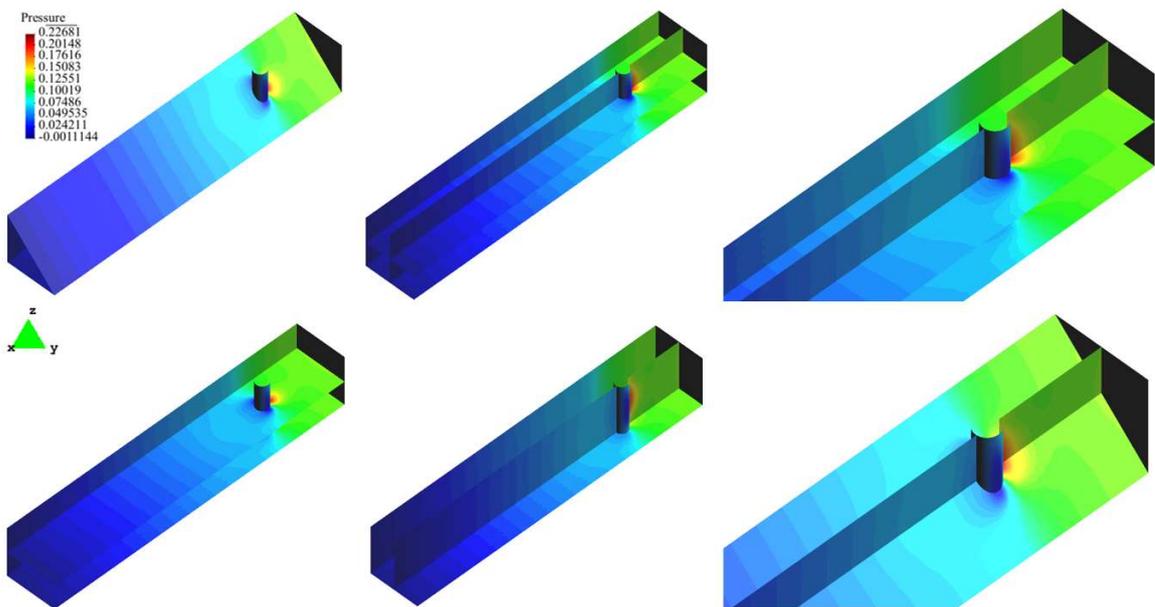


Figura 7: Isocurvas de pressão, exemplo 2.6.1 (vistas isométricas).

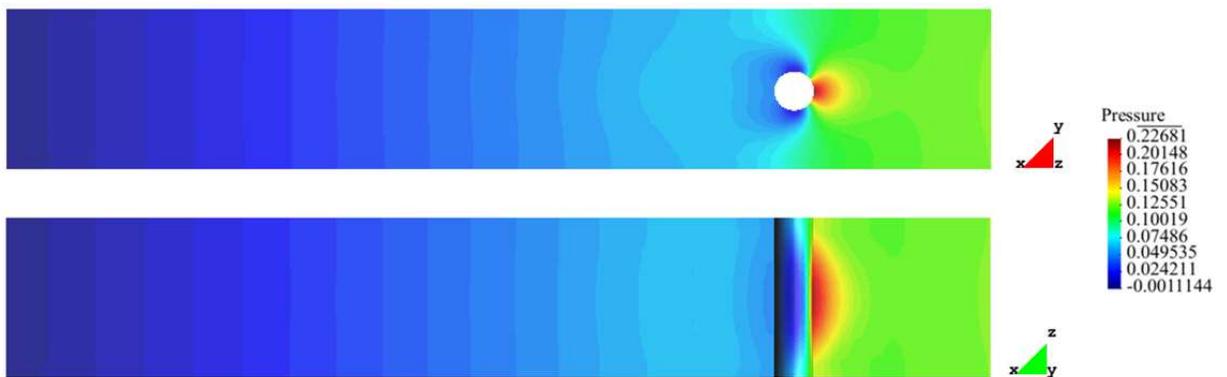


Figura 8: Isocurvas de pressão, exemplo 2.6.1 (vista lateral e em planta).

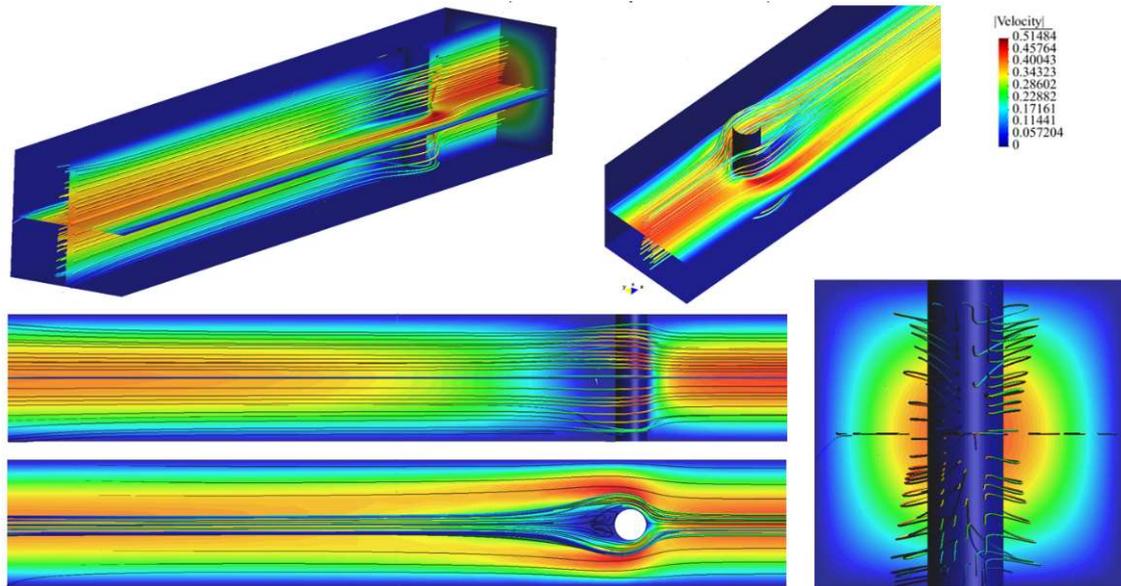


Figura 9: *Streamline* de velocidade, exemplo 2.6.1.

Para este exemplo foram calculados os coeficientes de sustentação e de arrasto de acordo com a equação (47) além da diferença de pressão entre os pontos  $\mathbf{x}_1 = \{0,45 \ 0,20 \ 0,205\}^T$  e  $\mathbf{x}_2 = \{0,55 \ 0,20 \ 0,205\}^T$  para uma avaliação quantitativa. Os resultados obtidos apresentam uma boa concordância com a literatura, conforme pode ser verificado na Tabela 2.

$$C_L = \frac{2F_v}{\rho \bar{U}^2 DH}, \quad C_D = \frac{2F_h}{\rho \bar{U}^2 DH} \quad \text{e} \quad \bar{U} = \frac{4U(0, H/2, H/2)}{9}, \quad (47)$$

onde  $F_v$  e  $F_h$  são as resultantes das forças nas direções x e y, respectivamente.

|                   |      | Cl     | Cd     | ΔP     |
|-------------------|------|--------|--------|--------|
| Presente trabalho |      | 0,0097 | 6,1703 | 0,1725 |
| Schäfer e Turek   | LS*  | 0,0100 | 6,2500 | 0,1750 |
|                   | LI** | 0,0080 | 6,0500 | 0,1650 |

\*LS - limite superior; \*\* LI - limite inferior

Tabela 2: Comparação dos resultados obtidos do exemplo 2.6.1.

Dois tipos de elementos finitos mistos foram implementados neste trabalho, o tetraedro (10 nós) e o hexaedro (27 nós). A ideia inicial era a de avaliar qual dos dois elementos teria um custo computacional menor e qual deles apresentaria os melhores resultados. Com isso, aproveitando os dados do exemplo em questão, realizou-se um breve estudo de refinamento de malha na região em torno do cilindro conforme pode ser observado na Tabela 3. Nota-se que ambos os elementos apresentam resultados dentro dos limites de referência para o coeficiente

de arrasto. Porém, para o coeficiente de sustentação, os resultados obtidos com tetraedro mostram-se distantes dos limites a menos do apresentado com a malha mais refinada (com, aproximadamente, trezentos mil nós). Isso acontece devido a dificuldade do autor deste trabalho em gerar uma malha de boa qualidade com tetraedros na região próxima ao cilindro (curva), mais especificamente na região da camada limite (ver Figura 10) para este exemplo utilizando o pré-processador Gid [113]. Com o hexaedro, as ferramentas disponíveis no Gid facilitam a obtenção de bons refinamentos nesta região, mesmo com um número menor de elemento. Isso evidência como a densificação da malha ou a qualidade da discretização da camada limite é importante para a obtenção das forças hidrodinâmicas na interface fluido-corpo rígido. Este breve estudo mostra que, a princípio, com as ferramentas disponíveis para o desenvolvimento deste trabalho, a utilização de hexaedros é mais vantajosa devido, principalmente, a facilidade na discretização da camada limite reduzindo consideravelmente o custo computacional. Todavia, quando se trata de modelagem com fronteira imersa, esta aparente vantagem deixa de existir devido a utilização de malha estruturada, o que iguala os elementos em relação ao refinamento da malha em torno das fronteiras imersas curvas. Com isso, outros aspectos são importantes de serem avaliados (como por exemplo, o mapeamento das formas como as partículas esféricas cortam os elementos de fluido necessários para a integração das matrizes locais do fluido) para a escolha do elemento finito ideal. Esse assunto é abordado mais adiante no texto (nos capítulos 4 e 5 ). Ressalta-se que, independentemente do pré-processador utilizado, ambos os elementos conseguem apresentar bons resultados, desde que a camada limite seja bem refinada.

| Elemento                    | Malha*       |         | $C_L$    | $C_D$    |
|-----------------------------|--------------|---------|----------|----------|
|                             | Nº Elementos | Nº Nós  |          |          |
| Tetraedro misto<br>(10 nós) | 210 mil      | 300 mil | 0,008060 | 6,157301 |
|                             | 37 mil       | 54 mil  | 0,045149 | 6,132539 |
|                             | 23 mil       | 34 mil  | 0,086485 | 6,239542 |
| Hexaedro misto<br>(27 nós)  | 47 mil       | 400 mil | 0,009280 | 6,170356 |
|                             | 18 mil       | 153 mil | 0,009636 | 6,171976 |
|                             | 8 mil        | 71 mil  | 0,009621 | 6,171912 |
|                             | 7 mil        | 62 mil  | 0,009621 | 6,171913 |
|                             | 6 mil        | 53 mil  | 0,009750 | 6,170335 |
|                             | 5,4 mil      | 48 mil  | 0,009834 | 6,170668 |
| [Schäfer e Turek]           |              | LS**    | 0,010000 | 6,250000 |
|                             |              | LI***   | 0,008000 | 6,050000 |

\* - Número de elementos e nós aproximados.

\*\* - Limite superior; \*\*\* - Limite inferior.

Tabela 3: Valores de  $C_L$  e  $C_D$  para simulações com refinamentos variados da camada limite utilizando os elementos finitos mistos tetraédrico e hexaédrico.

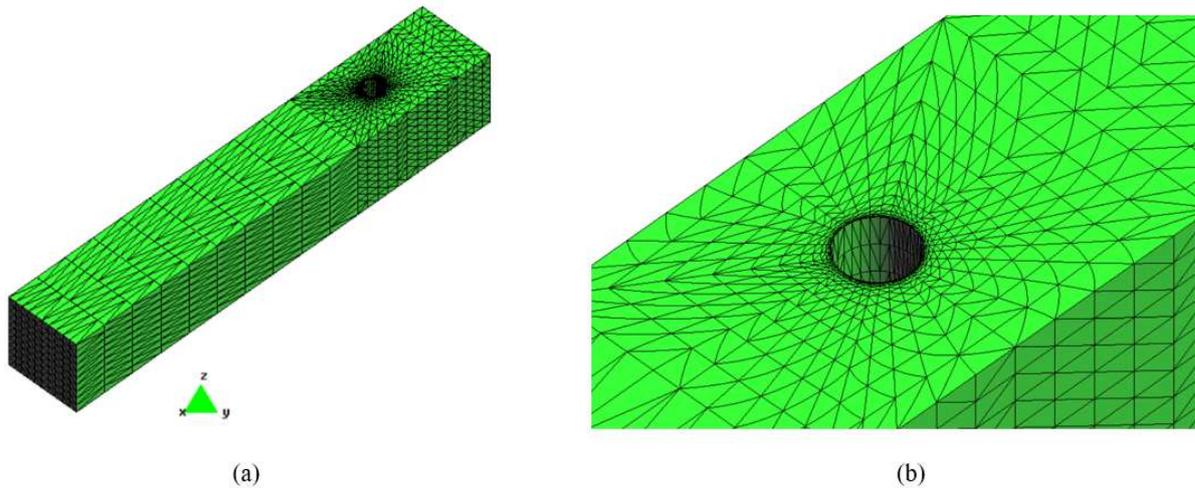


Figura 10: Malha de elementos finitos 3D utilizada no exemplo 2.6.1 (37.200 elementos finitos tetraedros mistos com 54.348 nós).

### 2.6.2 Escoamento transiente em torno de um cilindro 3D

Este exemplo é, basicamente, o mesmo apresentado no exemplo 2.6.1, porém agora considerando uma análise de escoamento de fluido dependente do tempo, ou seja, problema transiente. A geometria e os parâmetros utilizados neste exemplo podem ser vistos na Figura 3 e na Tabela 4, respectivamente.

| Parâmetros da análise       |                   |
|-----------------------------|-------------------|
| $\rho$ (kg/m <sup>3</sup> ) | 1                 |
| $\nu$ (m <sup>2</sup> /s)   | 0,001             |
| $U_m$ (m/s)                 | 2,25              |
| Re                          | 100               |
| Intervalo de tempo (s)      | $0 \leq t \leq 8$ |
| $u_0$ (m/s)                 | 0                 |
| Integração temporal         | Newmark           |
| $\Delta t$ (s)              | 0,005             |

Tabela 4: Parâmetros utilizados no exemplo 2.6.2.

Na entrada do canal é aplicado um perfil de velocidade parabólico conforme equação (46) de forma incremental entre os instantes  $0 \leq \Delta t \leq 1,0$  s, com  $U_m = 2,25$  m/s.

Com intuito de testar os elementos finitos tetraédricos implementados no código computacional, a malha utilizada neste exemplo pode ser observada na Figura 11.

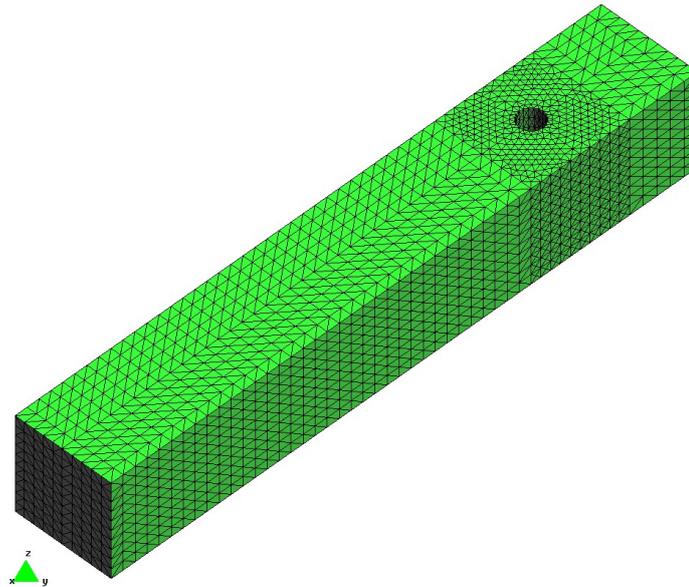


Figura 11: Malha de elementos finitos 3D utilizada no exemplo 5.2.2 (67.533 elementos finitos tetraedros mistos com 96.684 nós).

Os resultados obtidos podem ser observados da Figura 12 à Figura 15. Para o exemplo em questão ( $Re = 100$ ), observa-se o não desprendimento de vórtices na parte traseira do canal tendo o seu comportamento, após a estabilização do problema, semelhante a uma análise permanente. Esse fato também foi observado por Schäfer e Turek [114].

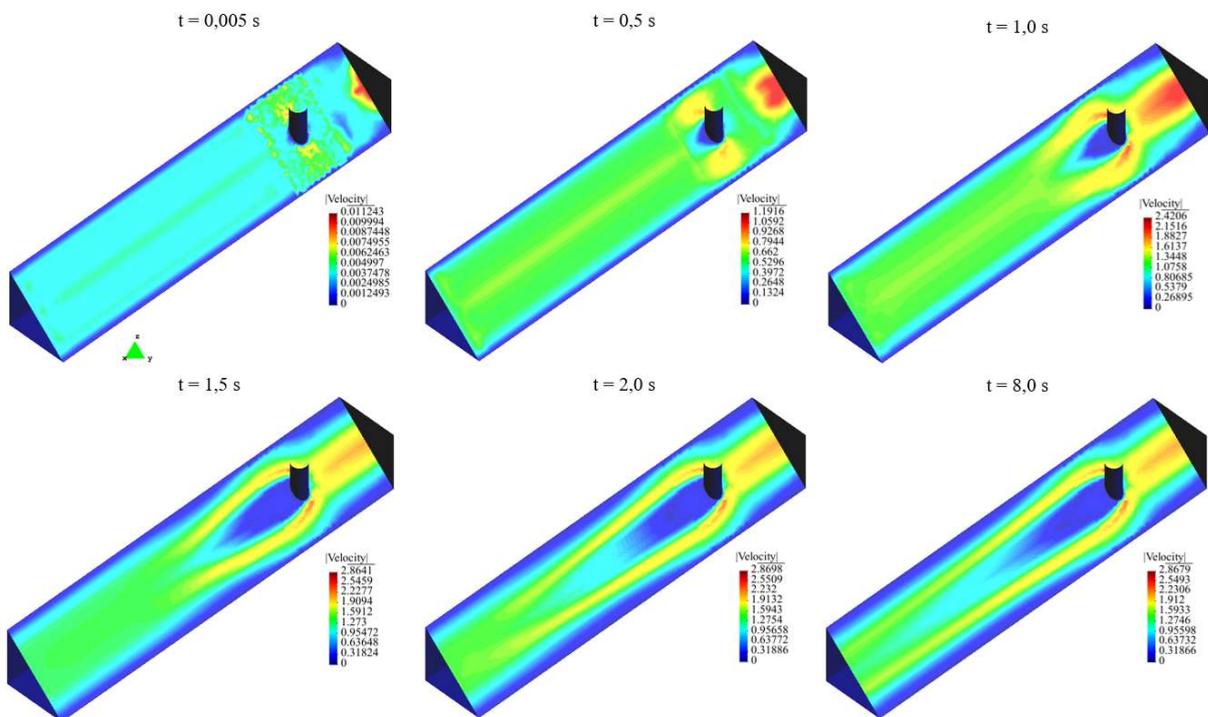


Figura 12: Evolução no tempo do campo de velocidade para  $Re = 100$  (vistas isométricas).

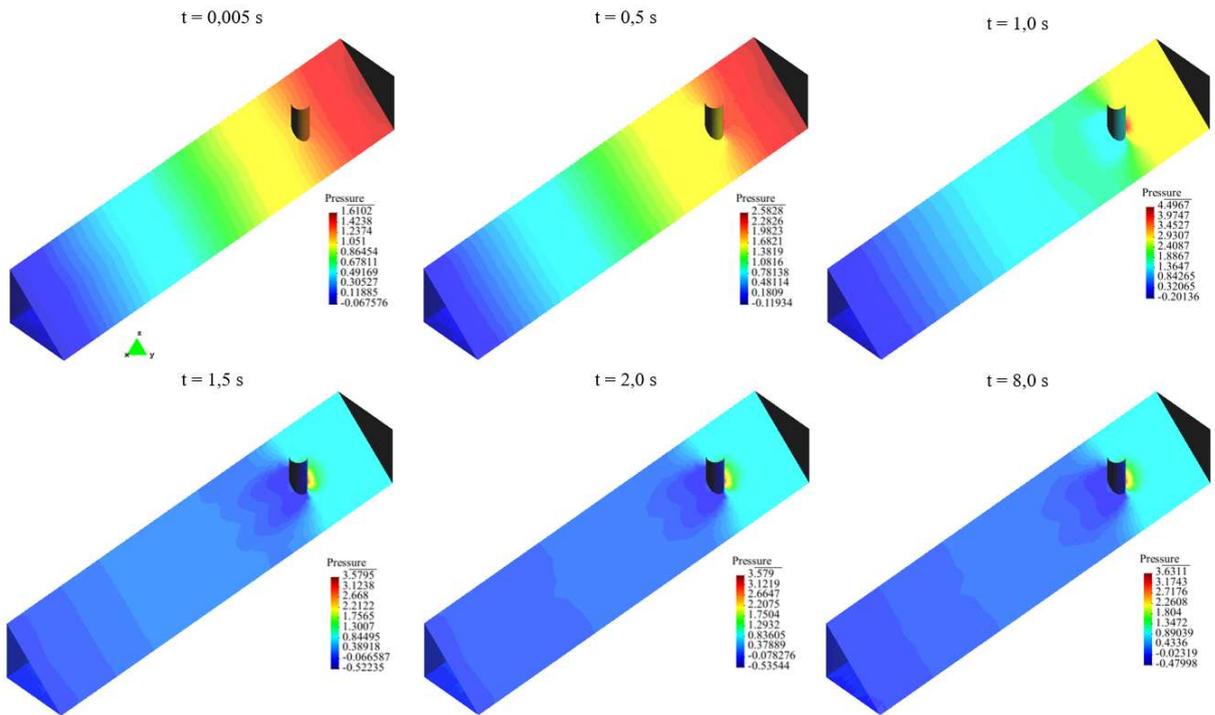


Figura 13: Evolução no tempo do campo de pressão para  $Re = 100$  (vistas isométricas).

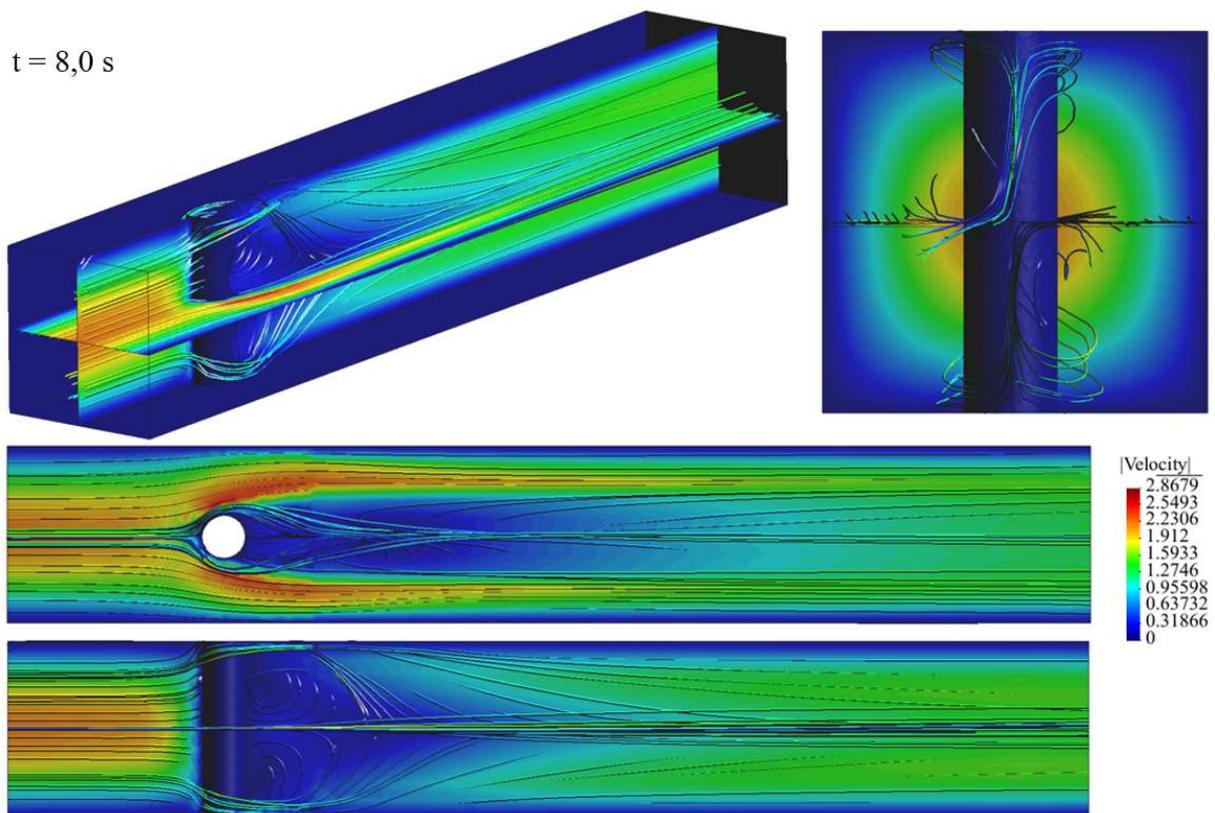


Figura 14: *Streamlines* de velocidade para  $Re = 100$  ( $t = 8,0 \text{ s}$ ).

Os coeficientes  $C_L$  e  $C_D$  foram obtidos ao longo do tempo como mostra a Figura 15. Para

tanto, utilizou-se a mesma malha do exemplo 2.6.1 (Figura 4) devido, principalmente, a necessidade de redução do custo computacional e uma maior facilidade na discretização da região em torno do cilindro com poucos elementos, principalmente na região da camada limite. Tais resultados podem ser vistos pela Figura 15 e Tabela 5, a seguir mostrando uma boa concordância com a literatura.

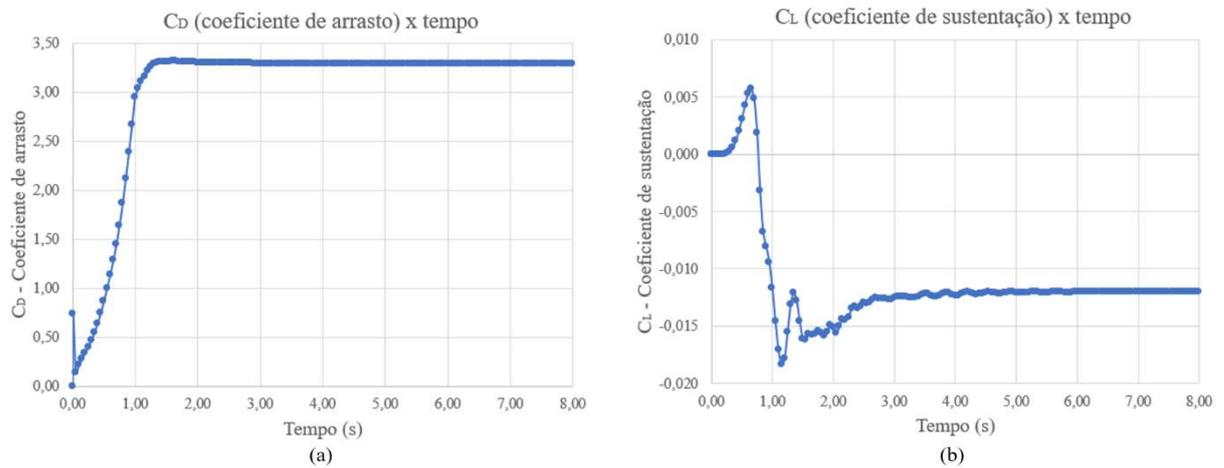


Figura 15: Variação dos coeficientes de arrasto (a) e sustentação (b) ao longo do tempo para  $Re = 100$ .

|                     |      | $C_L$   | $C_D$  |
|---------------------|------|---------|--------|
| Presente trabalho   |      | -0,0120 | 3,2931 |
| [Schäfer and Turek] | LS*  | -0,0080 | 3,3100 |
|                     | LI** | -0,0110 | 3,2900 |

\* LS - Limite superior; \*\* LI - Limite inferior

Tabela 5: Comparação dos resultados obtidos do exemplo 2.6.2.

### **3 DESCRIÇÃO E VERIFICAÇÃO DO PROBLEMA PARTÍCULA**

As partículas se apresentam na natureza desde finos pós suspensos no ar até blocos de rochas presentes em encostas de mar. Diferente dos fluidos, as partículas não podem ser descritas como um conjunto contínuo de pontos materiais pois estas apresentam-se na natureza de forma discreta ou descontínua. No contexto deste trabalho, partículas são definidas como sendo um conjunto de sólidos esféricos indeformáveis discretos de tamanho macroscópico que interagem entre si e com o meio em que se encontra. Neste trabalho, o MED é utilizado como ferramenta computacional para simular a física das partículas. A validação do algoritmo, desenvolvido especificamente para problemas de partículas, é realizada com a apresentação de algumas simulações computacionais no final deste capítulo.

#### **3.1 Método dos elementos discretos**

O método dos elementos discretos não é exatamente um “método”, no sentido de possuir um conjunto de hipóteses, equações e procedimentos que lhe seja próprio ou particular (Campello [32]). Pode-se entender o MED como sendo um modelador de problemas discretos capaz de resolver, numericamente, as equações diferenciais da dinâmica dos sólidos rígidos (elementos discretos ou partículas) enriquecido de modelos capazes de representar as diversas ações externas e internas que podem ou não atuar no problema. Neste trabalho, consideram-se apenas sólidos esféricos infinitamente rígidos, de agora em diante chamados de partículas, o que permite a apresentação da formulação de forma simples e suficientemente geral. A formulação do MED apresentada a seguir sofreu forte influência no trabalho desenvolvido por Campello [32] e [33].

#### **3.2 Tratamento das rotações**

As rotações das partículas no MED podem ser parametrizadas vetorialmente. Isto permite que sua representação formal pode ser feita da mesma maneira que os deslocamentos, por meio de vetores. Essa forma de descrever as rotações traz grande benefício em sua implementação uma vez que evita o uso de entidades complexas como, por exemplo, os ângulos de Euler descritos por Leonard Euler para descrever a orientação de um sólido girante no espaço euclidiano tridimensional. Isso é possível devido a introdução de um certo limite na magnitude

das rotações entre duas configurações consecutivas (esse aspecto é discutido mais adiante). Dentre os diversos tipos de parametrizações vetoriais existentes (e.g., Goldstein [118]), a parametrização utilizada neste trabalho faz uso de um múltiplo do chamado vetor rotação de Rodrigues.

Então, seja o vetor rotação  $\boldsymbol{\theta} = \theta \mathbf{e}$  e  $\theta$  a magnitude de uma rotação arbitrária em torno do eixo  $\mathbf{e}$  ( $\|\mathbf{e}\| = 1$ ) no espaço tridimensional, um vetor  $\mathbf{v}$  qualquer é transformado em  $\mathbf{h} = \mathbf{Q}\mathbf{v}$  quando rotacionado de  $\theta$  em torno de  $\mathbf{e}$  onde

$$\mathbf{Q} = \mathbf{I} + \frac{\sin \theta}{\theta} \boldsymbol{\Theta} + \frac{1 - \cos \theta}{\theta^2} \boldsymbol{\Theta}^2 \quad (48)$$

é o tensor rotação e a equação (48) é a clássica fórmula de Euler-Rodrigues.  $\boldsymbol{\Theta} = \text{Skew}(\boldsymbol{\theta})$  é o tensor antissimétrico cujo vetor axial é  $\boldsymbol{\theta}$  dado por

$$\boldsymbol{\Theta} = \text{Skew}(\boldsymbol{\theta}) = \begin{bmatrix} 0 & -\theta_3 & \theta_2 \\ \theta_3 & 0 & -\theta_1 \\ -\theta_2 & \theta_1 & 0 \end{bmatrix} \Leftrightarrow \boldsymbol{\theta} = \begin{Bmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \\ \theta_3 \end{Bmatrix}. \quad (49)$$

Após a utilização de algumas identidades trigonométricas e manipulações matemáticas, a equação (48) pode ser reescrita conforme a equação (50).

$$\mathbf{Q} = \mathbf{I} + \frac{2}{1 + \tan^2(\theta/2)} \left[ \frac{\tan(\theta/2)}{\theta} \boldsymbol{\Theta} + \frac{\tan^2(\theta/2)}{\theta^2} \boldsymbol{\Theta}^2 \right]. \quad (50)$$

A equação (50) pode ser reescrita de modo que

$$\mathbf{Q} = \mathbf{I} + \frac{2}{1 + \beta^2} [\mathbf{B} + \mathbf{B}^2], \quad (51)$$

Sendo  $\mathbf{B} = \text{Skew}(\boldsymbol{\beta})$  o tensor antissimétrico cujo vetor axial é o vetor rotação de Rodrigues definido por  $\boldsymbol{\beta} = \tan(\theta/2) \mathbf{e}$ , tal que  $\|\boldsymbol{\beta}\| = \beta = \tan(\theta/2)$  e

$$\boldsymbol{\beta} = \frac{\tan(\theta/2)}{\theta} \boldsymbol{\theta}. \quad (52)$$

Apesar de a equação (51), conhecida como a parametrização de Rodrigues do tensor

rotação, não ser válida para valores de  $\theta = \pm\pi$  pois, nestes casos,  $\beta \rightarrow \pm\infty$ , a mesma apresenta duas principais vantagens:

- Envolve um número menor de funções trigonométricas que, do ponto de vista computacional, é relevante;
- A composição de rotações sucessivas é realizada por meio de expressões significativamente simples envolvendo apenas operações vetoriais (a chamada fórmula da composição de rotações de Rodrigues), conforme expressão (53), a seguir.

$$\beta_{1+2} = \frac{1}{1 - \beta_1 \cdot \beta_2} (\beta_1 + \beta_2 - \beta_1 \times \beta_2). \quad (53)$$

As variáveis  $\beta_1$  e  $\beta_2$  são os vetores rotação de Rodrigues associados a  $Q_1$  e  $Q_2$ , respectivamente, e  $\beta_{1+2}$  é o vetor rotação de Rodrigues associado à rotação total  $Q_{1+2} = Q_2 Q_1$ . Contudo, a fórmula da composição de rotações de Rodrigues só pode ser usada quando o tensor das rotações é parametrizado por meio do vetor rotação de Rodrigues, ou por um múltiplo deste. Portanto, conforme utilizado por Campello [119], Pimenta e Campello [120] e Pimenta, Campello e Wriggers [121] no contexto da cinemática de barras, pode-se definir  $\alpha = 2\beta$  um múltiplo do vetor rotação de Rodrigues tal que  $\|\alpha\| = \alpha = 2 \tan(\theta/2)$  e

$$\alpha = \frac{\tan(\theta/2)}{(\theta/2)} \theta. \quad (54)$$

Desta forma, a equação (51) se torna

$$Q = I + \frac{4}{4 + \alpha^2} \left[ A + \frac{1}{2} A^2 \right], \quad (55)$$

onde  $A = \text{Skew}(\alpha)$  e, conseqüentemente, a fórmula da composição de rotações de Rodrigues pode ser expressa por

$$\alpha_{1+2} = \frac{4}{4 - \alpha_1 \cdot \alpha_2} \left( \alpha_1 + \alpha_2 - \frac{1}{2} \alpha_1 \times \alpha_2 \right), \quad (56)$$

o que acarreta expressões para a obtenção do vetor velocidade angular, e suas derivadas espaciais, um pouco mais compactas do que as expressas por  $\beta$ . Neste trabalho, o vetor rotação

$\alpha$  é utilizado na formulação do MED.

Para melhor compreensão e discussão acerca do vetor rotação de Rodrigues e dos parâmetros de Rodrigues, recomenda-se aos leitores interessados os trabalhos de Argyris [122], Cheng e Gupta [123], Ibrahimbegovic [124], Ritto-Correa e Camotim [125], além de Campello [119], [31], [32] e Pimenta e Campello [120], [126] e [126].

### 3.3 Unidade básica de um sistema de partículas

Esta seção busca descrever a cinemática e a dinâmica de uma partícula individual no espaço tridimensional. Para tanto, algumas definições e premissas precisam ser elencadas:

- Considere uma partícula esférica de raio  $r$  e massa específica  $\rho$  conhecidos;
- Seja  $\{e_1, e_2, e_3\}$  uma base ortonormal definida em um sistema de referência fixo  $\{O, e_1, e_2, e_3\}$ , chamado de sistema global, onde  $O$  é a origem do sistema;
- Seja  $\{e_1^l, e_2^l, e_3^l\}$  uma base ortonormal definida em um sistema de referência móvel  $\{C, e_1^l, e_2^l, e_3^l\}$  (sistema local da partícula), associado à partícula com origem em seu centro  $C$  que se move solidária e rigidamente à partícula, conforme Figura 16;
- Considere-se ainda um observador vinculado ao sistema global, e sejam  $\{x_1, x_2, x_3\}$  as coordenadas relacionadas a cada uma das direções deste sistema.

Em um instante qualquer  $t_R$ , denominado de instante de referência, a partícula ocupa uma determinada região do espaço, denominada de configuração de referência tal que  $t_0 \leq t_R < t_F$ .  $t_0$  é o instante correspondente a configuração inicial e  $t_f$  o instante relacionado a configuração final. Define-se  $t$  como sendo o instante referente a configuração atual tal que  $t_R < t \leq t_F$ .

Um ponto material qualquer da partícula tem sua posição no espaço, em sua configuração de referência, definida por

$$\mathbf{x}^r = \mathbf{x}_C^r + \mathbf{r}^r, \quad (57)$$

onde  $\mathbf{x}_C^r$  é o vetor posição do centro da partícula na configuração de referência e  $\mathbf{r}^r$  é o vetor que liga o centro  $C$  um ponto material qualquer da partícula na respectiva configuração (ver Figura 16). Observe-se a adoção da notação  $(\cdot)^r$  para se referir a grandezas relativas à

configuração de referência.

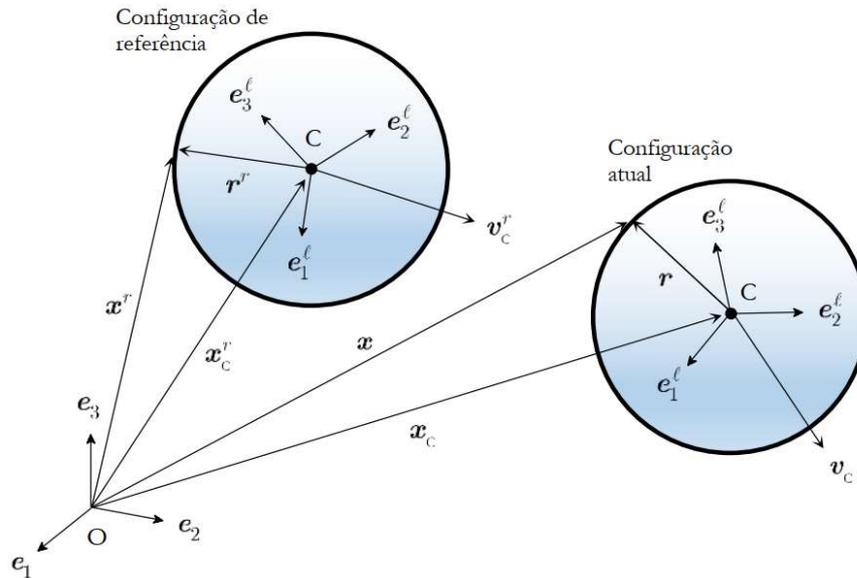


Figura 16: Representação das configurações de uma partícula (cinemática de uma partícula). (Figura extraída de Campello [32]).

A posição deste mesmo ponto material na configuração atual é expressa por:

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_C + \boldsymbol{r}, \quad (58)$$

onde

$$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{Q}_{\Delta} \boldsymbol{r}^r, \quad (59)$$

tendo

$$\boldsymbol{Q}_{\Delta} = \boldsymbol{I} + \frac{4}{4 + \alpha_{\Delta}^2} \left( \boldsymbol{A}_{\Delta} + \frac{1}{2} \boldsymbol{A}_{\Delta}^2 \right), \quad (60)$$

o tensor rotação da partícula entre as duas configurações e  $\alpha_{\Delta} = \|\alpha_{\Delta}\|$  o vetor rotação incremental de Rodrigues com  $\boldsymbol{A}_{\Delta} = \text{Skew}(\alpha_{\Delta})$ .

Derivando no tempo a equação (58), obtém-se a velocidade do ponto material qualquer da partícula conforme equação (61).

$$\boldsymbol{v} = \dot{\boldsymbol{x}} = \dot{\boldsymbol{x}}_C + \dot{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{v}_C + \dot{\boldsymbol{Q}}_{\Delta} \boldsymbol{Q}_{\Delta}^T \boldsymbol{r} = \boldsymbol{v}_C + \boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{r}, \quad (61)$$

onde  $\boldsymbol{v}_C = \dot{\boldsymbol{x}}_C$  é a velocidade do centro da partícula e  $\boldsymbol{\Omega} = \dot{\boldsymbol{Q}}_{\Delta} \boldsymbol{Q}_{\Delta}^T$  é o tensor velocidade angular da partícula. O vetor velocidade angular da partícula  $\boldsymbol{\omega}$  é o vetor axial do tensor

antissimétrico velocidade angular  $\boldsymbol{\Omega}$  designado por

$$\boldsymbol{\omega} = \text{axial}(\boldsymbol{\Omega}) = \text{axial}(\dot{\mathbf{Q}}_{\Delta} \mathbf{Q}_{\Delta}^{\text{T}}) = \frac{4}{4 + \alpha_{\Delta}^2} \left( \mathbf{I} + \frac{1}{2} \mathbf{A}_{\Delta} \right) \dot{\boldsymbol{\alpha}}_{\Delta} = \boldsymbol{\Xi}_{\Delta} \dot{\boldsymbol{\alpha}}_{\Delta}. \quad (62)$$

Desta forma, é possível reescrever a equação (61), como

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_C + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}. \quad (63)$$

De forma similar, pode-se obter a aceleração de um ponto material qualquer da partícula na configuração atual derivando no tempo a equação (61) o que resulta em

$$\mathbf{a} = \dot{\mathbf{v}} = \mathbf{a}_C + \dot{\boldsymbol{\omega}} \times \mathbf{r} + \boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}), \quad (64)$$

onde  $\mathbf{a}_C = \dot{\mathbf{v}}_C$  é a aceleração do centro da partícula e  $\dot{\boldsymbol{\omega}}$  é o vetor axial do tensor antissimétrico aceleração angular da partícula  $\dot{\boldsymbol{\Omega}}$ . A obtenção da posição, da velocidade e da aceleração de uma partícula define a sua cinemática.

O estudo da dinâmica de uma partícula, inicia-se com a definição de sua quantidade de movimento linear em sua configuração atual dado por

$$\boldsymbol{\lambda} = \int_V \rho \mathbf{v} dV = \int_V \rho \mathbf{v}_C dV + \int_V \rho (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) dV = m \mathbf{v}_C, \quad (65)$$

onde  $V$  é o volume da partícula que, por hipótese, é constante ao longo do tempo e

$$m = \int_V \rho dV \quad (66)$$

é a sua massa que também é constante ao longo do tempo.

Já a quantidade de movimento angular de uma partícula, em relação ao seu centro, pode ser dada por

$$\boldsymbol{\mu}_C = \mathbf{x} \times \boldsymbol{\lambda}, \quad (67)$$

que, após algumas manipulações matemáticas, chega-se a

$$\boldsymbol{\mu}_C = \mathbf{J}_C \boldsymbol{\omega}, \quad (68)$$

onde

$$\mathbf{J}_C = \int_V \rho [(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{I} - \mathbf{r} \otimes \mathbf{r}] dV \quad (69)$$

é o tensor de inércia da partícula em relação a  $C$  que, para uma esfera rígida (constante no tempo) resulta em

$$\mathbf{J}_C = j\mathbf{I}, \quad j = \frac{2}{5}mr^2, \quad (70)$$

onde  $\mathbf{I}$  é o tensor identidade e o símbolo “ $\otimes$ ” é o produto tensorial. As derivadas temporais dos momentos linear e angular são dadas por

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}} = m\mathbf{a}_C \quad \text{e} \quad \dot{\boldsymbol{\mu}}_C = j\dot{\boldsymbol{\omega}}. \quad (71)$$

Seja, então,  $\mathbf{f}^{tot}$  o vetor das forças totais que atuam no centro de uma partícula na configuração atual, e  $\mathbf{m}_C^{tot}$  o vetor dos momentos totais sobre uma partícula em relação ao seu centro na configuração atual. As relações dadas por (72) devem ser satisfeitas na configuração atual.

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}} = \mathbf{f}^{tot} \quad \text{e} \quad \dot{\boldsymbol{\mu}}_C = \mathbf{m}_C^{tot}. \quad (72)$$

Tais relações podem ser reescritas como

$$m\mathbf{a}_C = \mathbf{f}^{tot} \quad \text{e} \quad j\dot{\boldsymbol{\omega}} = \mathbf{m}_C^{tot}, \quad (73)$$

que são as equações do movimento de uma partícula, definindo-se, assim, a dinâmica da partícula.

É importante observar que a mecânica da partícula (sua cinemática e dinâmica) conforme apresentado anteriormente é feita seguindo uma descrição Lagrangiana generalizada do seu movimento. Isso se deve ao fato da sua configuração de referência não se confundir com a configuração inicial.

### 3.4 Sistemas com várias partículas

A generalização das equações descritas em 3.3 para problemas que admitem várias partículas requer uma pequena alteração de sua notação. Tais modificações são listadas a seguir:

- Substitui-se o índice alfabético que algumas grandezas utilizam para designar o ponto a que se referem, por um índice numérico que representa o identificador da partícula referente a esta mesma grandeza. Por exemplo, o índice  $C$  de  $\mathbf{x}_C$  passa a ser  $\mathbf{x}_i$  referindo-se, então, ao vetor posição do centro da partícula  $i$  na configuração atual.

Algo similar é feito em relação aos vetores velocidade ( $\mathbf{v}_i$ ) e aceleração ( $\mathbf{a}_i$ ) do centro de uma partícula  $i$  qualquer na mesma configuração;

- Para as grandezas que não apresentam índices alfabéticos (como, por exemplo, o vetor rotação incremental  $\alpha_\Delta$ ) são agora designadas com o mesmo índice numérico  $i$  para se referir ao identificador de uma partícula qualquer. Portanto, os vetores rotação incremental, velocidade angular e aceleração angular passam a ser denominados de  $\alpha_i^\Delta$ ,  $\omega_i^\Delta$  e  $\dot{\omega}_i^\Delta$ , respectivamente.

Então, considere um sistema com  $N_p$  partículas de raio ( $r_i$ ) e densidade ( $\rho_i$ ) conhecidos imersos em um determinado meio fluido, conforme Figura 17. Admitindo-se ainda que a densidade e a viscosidade do meio (fluido e inerte) são conhecidas, as forças totais da partícula ( $\mathbf{f}^{tot}$ ) que atuam sobre uma partícula qualquer  $i$  podem ser escritas como

$$\mathbf{f}_i^{tot} = \mathbf{f}_i^{ce} + \mathbf{f}_i^{con} + \mathbf{f}_i^{atr} + \mathbf{f}_i^{fl}, \quad (74)$$

onde  $\mathbf{f}_i^{ce}$ ,  $\mathbf{f}_i^{con}$ ,  $\mathbf{f}_i^{atr}$  e  $\mathbf{f}_i^{fl}$ , são, respectivamente, as forças de campos externos (gravidade, por exemplo), forças de contato, forças de atrito e forças devido ao fluido. As forças de contato são consideradas centrais, isto é, suas ações são admitidas atuando no centro de cada partícula, tendo a sua direção dada pela linha que une os centros das partículas  $i$  e  $j$ , respectivamente. As forças de atrito, por sua vez, atuam devido ao contato partícula-partícula e/ou partícula-superfície rígida. A ação desta força se dá no ponto de contato tendo a sua direção tangente a este ponto. Além destas, as partículas também podem sofrer ações de outra natureza tais como, forças de adesão e forças de atração e repulsão, somente para citar algumas. Contudo, estas ações não fazem parte do escopo deste trabalho não sendo, portanto, detalhadas mais adiante. Ao leitor interessado nessas ações, sugere-se a leitura de Campello [32].

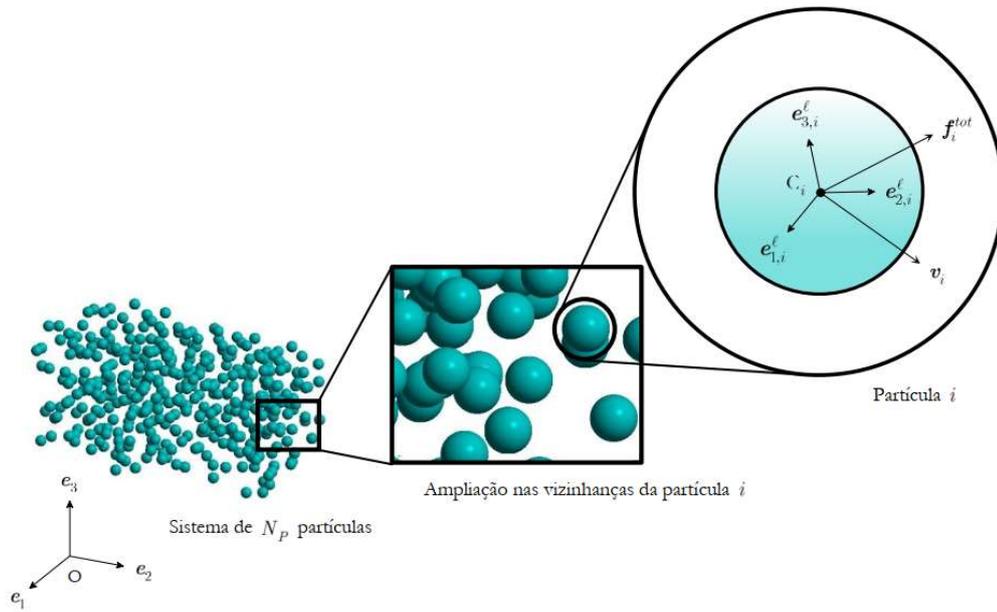


Figura 17: Representação das configurações de uma partícula genérica  $i$  em um sistema de várias partículas imersas em um meio fluido (Figura extraída de Campello [32]).

Como as forças de atrito e de fluidos atuam de forma excêntrica em relação aos centros das partículas, estas conduzem ao surgimento de momentos atuantes nestas partículas com relação aos seus centros ( $C_i$ ). Tais grandezas podem ser consideradas no equilíbrio do sistema por

$$\mathbf{m}_i^{tot} = \mathbf{m}_i^{atr} + \mathbf{m}_i^{fl}, \quad (75)$$

onde  $\mathbf{m}_i^{atr}$  é a resultante dos momentos que atuam sobre a partícula  $i$  em relação ao seu centro  $C_i$  devido ao atrito com outra partícula  $j$  e/ou corpo rígido qualquer e,  $\mathbf{m}_i^{fl}$  é a resultante dos momentos devido a ação do fluido na interface fluido-partícula.

Uma vez que, todas as partículas devem satisfazer às leis de Euler em todos os instantes de tempo, em um instante  $t$  qualquer na configuração atual, as expressões apresentadas em (71) podem ser generalizadas para um sistema com várias partículas, obtendo-se, assim, as equações que governam a dinâmica do sistema (equações (76) ou (77)).

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}}_i = m_i \mathbf{a}_i \quad \text{e} \quad \dot{\boldsymbol{\mu}}_i = j_i \dot{\boldsymbol{\omega}}_i, \quad i = 1, 2, \dots, N_p, \quad (76)$$

ou

$$m_i \mathbf{a}_i = \mathbf{f}_i^{tot} \quad \text{e} \quad j_i \dot{\boldsymbol{\omega}}_i = \mathbf{m}_i^{tot}, \quad i = 1, 2, \dots, N_p, \quad (77)$$

### 3.5 Forças atuantes nas partículas

A natureza das forças externas (ações) que podem ser consideradas atuantes sobre as partículas é diversa. Neste trabalho serão consideradas as forças oriundas de campos externos (especificamente as gravitacionais), as forças originárias do contato mecânico partícula-partícula e/ou partícula-superfície rígida além das forças devido a interação das partículas com o meio externo (fluido). Ressalta-se que a forma de obtenção das forças e momentos resultantes devido a ação de fluidos é apresentada em 4.1.2.

#### 3.5.1 Forças de campos externos

As forças de campos externos são aquelas caracterizadas por campos gravitacionais, campos elétricos e/ou magnéticos externos ao sistema. Neste trabalho, apenas os campos gravitacionais serão considerados. Esta ação é considerada estática e desacoplada em relação ao sistema, isto é, a ação gravitacional não é afetada devido, por exemplo, ao movimento das partículas. Com isso, a resultante das forças gravitacionais que atua em uma partícula  $i$  qualquer é expressa por

$$\mathbf{f}_i^{tot} = m_i \mathbf{g}, \quad (78)$$

onde  $\mathbf{g}$  é o vetor que define o campo gravitacional e  $m_i$  é a massa da partícula  $i$ . Em geral, as forças gravitacionais são caracterizadas pelo MED de forma bastante simples devido a mesma ser externa ao sistema e invariante no tempo.

#### 3.5.2 Forças de contato

A ocorrência de contato mecânico (ou choque mecânico) faz surgir forças provenientes da troca de quantidade de movimento (linear e angular) entre as partículas. Tais forças podem ter direção normal e tangencial no ponto de contato. Para facilitar o estudo dos efeitos originários destas forças, nesta seção serão tratados apenas aqueles causados pela força normal, deixando para o item 3.5.3 os aspectos relacionados à força tangencial.

Neste trabalho considera-se os contatos (ou choques) perfeitamente elásticos e os parcialmente elásticos. O primeiro são aqueles em que a energia e a quantidade de movimento<sup>4</sup> se conservam em sua totalidade antes e após o choque caracterizando-se, assim, um sistema

---

<sup>4</sup> Lembrando ao leitor que todo tipo de choque tem a sua quantidade de movimento conservada. Apenas a energia cinética pode ser dissipada nos casos de choques inelásticos ou parcialmente elástico.

conservativo. Já o segundo, parte da energia cinética é dissipada.

O MED considera os efeitos do contato de forma bastante simplificada quando comparado aos trabalhos desenvolvidos na área da mecânica do contato que elevam o rigor na consideração dos efeitos locais nesta região (isto é, deformações). Ao contrário, o MED se detém na consideração destes efeitos locais de choques mecânicos, porém, buscando-se expressões mais simples e abrangente para a dinâmica do contato entre estes corpos. Uma das expressões mais simples e conhecida, porém eficiente, de se considerar o contato é por meio de

$$\mathbf{f}_{ij}^{con} = -k_{ij}^{con} (\varepsilon_{ij})^\lambda \mathbf{n}_{ij}, \quad (79)$$

onde  $\mathbf{f}_{ij}^{con}$ ,  $k_{ij}^{con}$ ,  $\varepsilon_{ij}$ ,  $\lambda$  e  $\mathbf{n}_{ij}$ , são a força de contato que atua em uma partícula  $i$  devido ao contato com outra partícula  $j$ , um parâmetro relacionado à rigidez do material das partículas, uma medida local de deformação, um parâmetro material a ser determinado empiricamente e a direção normal entre as superfícies das partículas no ponto de contato no sentido de  $i$  para  $j$ , respectivamente. A equação (79) pode ser interpretada como uma expressão que regula o quanto um determinado valor de interpenetração entre as partículas  $i$  e  $j$  é aceitável. Existem diversos modelos criados a partir de (79) (ver Pöschel e Schwager [70], Crowe et al [127], Zohdi [128] e [62]), porém, neste trabalho o contato é considerado conforme Campello [32] que faz uso de um modelo baseado na teoria de Hertz, acrescido por uma força de amortecimento dado por

$$\mathbf{f}_{ij}^{con} = -\frac{4}{3} E^* \sqrt{r^*} |\delta_{ij}|^{3/2} \mathbf{n}_{ij} - d^* \dot{\delta}_{ij} \mathbf{n}_{ij}, \quad (80)$$

onde

$$E^* = \frac{E_i E_j}{E_j (1 - \nu_i^2) + E_i (1 - \nu_j^2)} \quad \text{e} \quad r^* = \frac{r_i r_j}{r_i + r_j} \quad (81)$$

são o módulo de elasticidade equivalente e o raio equivalente das partículas  $i$  e  $j$  em contato.  $E_i$ ,  $E_j$ ,  $\nu_i$ ,  $\nu_j$ ,  $r_i$  e  $r_j$  são os módulos de elasticidade, os coeficientes de Poisson e os raios das partículas  $i$  e  $j$ , respectivamente.  $\delta_{ij}$  e  $\dot{\delta}_{ij}$  é a interpenetração e a taxa de variação da interpenetração com o tempo que também pode ser entendida como a velocidade de aproximação ou de afastamento das partículas na direção de  $\mathbf{n}_{ij}$ .  $d^*$  é um parâmetro de amortecimento associado a dissipação de energia devido ao choque. A interpenetração pode ser

obtida por meio de

$$\delta_{ij} = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| - (r_i + r_j). \quad (82)$$

Observa-se que, segundo a terceira lei de Newton, a força de contato que a partícula  $j$  sofre devido ao contato com a partícula  $i$  é igual a  $\mathbf{f}_{ji}^{con} = -\mathbf{f}_{ij}^{con}$ . Como as partículas são esféricas, as hipóteses da teoria de Hertz (as superfícies de contato sejam lisas e tenham vetor bem definido em todos os seus pontos e, as deformações no contato sejam pequenas e restritas ao ponto de contato, validando assim, as equações da elasticidade linear) são relativamente bem atendidas desde que a interpenetração  $\delta_{ij}$  seja da ordem de uma pequena fração de seu raio.

O valor de  $d^*$  pode ser obtido pela expressão

$$d^* = 2\xi_n \sqrt{2m^* E^* \sqrt{r^*}} |\delta_{ij}|^{1/4}, \quad (83)$$

com a massa equivalente definida por

$$m^* = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j} \quad (84)$$

e,  $\xi_n$  a taxa de amortecimento previamente conhecido.

É importante observar que, na equação (80), a parcela não elástica pode resultar em uma contribuição repulsiva ou atrativa na força de contato a depender do sinal de  $\delta_{ij}$ . Quando na fase de compressão do contato, a contribuição é repulsiva; quando na fase de descompressão, ela é atrativa. Contudo, no caso de o amortecimento ser muito elevado na descompressão, pode ocorrer de (80) se tornar uma força atrativa, o que é inconsistente do ponto de vista físico. Nesse caso, esse problema é resolvido fazendo-se  $\mathbf{f}_{ji}^{con} = \mathbf{0}$  quando o sinal de (80) for positivo em relação a  $\mathbf{n}_{ij}$ . Para mais detalhe sobre essa problemática, o leitor é convidado a consultar Campello [32], Pöschel e Schwager [70].

O modelo de contato apresentado, baseado na teoria de Hertz, é não linear em relação a  $\delta_{ij}$  o que conduz em certos cuidados para ser integrado no tempo. O passo de tempo ( $\Delta t$ ) deve ser suficientemente pequeno para que a perda de precisão seja insignificante e, conseqüentemente, a geração espúria de energia entre as partículas em contato seja reduzida. Esse aspecto é melhor compreendido mais adiante no texto (ver item 3.6).

Portanto, a resultante de contato que atuam sobre uma partícula qualquer  $i$  ( $\mathbf{f}_i^{con}$ ), devido aos contatos com outras  $n_i^{con}$  partículas do sistema, é dada por

$$\mathbf{f}_i^{con} = \sum_{j=1, j \neq i}^{n_i^{con}} \mathbf{f}_{ij}^{con}. \quad (85)$$

### 3.5.3 Forças de atrito

Conforme mencionado anteriormente, a existência de contato entre partícula-partícula e partícula-corpo rígido faz surgir forças tangenciais em seus pontos de contato devido a resistência natural ao movimento relativo na direção tangencial neste ponto causado pela rugosidade de suas superfícies. Tais forças são excêntricas, isto é, atuam na superfície da partícula, a uma distância  $r$  em relação ao seu centro  $C_i$ . Neste trabalho, como as partículas são admitidas imersas em um meio fluido, considera-se que exista, entre as partículas em choque, uma camada fina de “*fluido lubrificante*” que permite a desconsideração da possibilidade de aderência entre elas o que conduz a uma expressão simples para a determinação da força de atrito de uma partícula  $i$  em relação a uma partícula  $j$  dada por

$$\mathbf{f}_{ij}^{atr} = -\mu_d \|\mathbf{f}_{ij}^{con}\| \frac{\mathbf{v}_{rel,t}^P}{\|\mathbf{v}_{rel,t}^P\|}, \quad (86)$$

onde  $\mu_d$  e  $\mathbf{v}_{rel,t}^P$  são o coeficiente de atrito dinâmico e o vetor velocidade relativa tangente no ponto de contato P, respectivamente. Para um modelo de atrito com aderência, recomenda-se a leitura de Campello [33]. A expressão (86) origina-se de um modelo de atrito semiempírico baseado no modelo de Coulomb quando da inexistência de aderência (ver Wriggers [129]). A velocidade relativa tangente em P pode ser obtida por meio de

$$\mathbf{v}_{rel,t}^P = \mathbf{v}_{rel}^P - (\mathbf{v}_{rel}^P \cdot \mathbf{n}_{ij}) \mathbf{n}_{ij} \quad \text{e} \quad \mathbf{v}_{rel}^P = \mathbf{v}_i^P - \mathbf{v}_j^P, \quad (87)$$

onde  $\mathbf{v}_{rel,t}^P$  é a velocidade relativa no ponto P. Já  $\mathbf{v}_i^P$  e  $\mathbf{v}_j^P$ , são as velocidades do ponto de contato de  $i$  e  $j$ , respectivamente, e podem ser calculados por

$$\mathbf{v}_i^P = \mathbf{v}_i + \boldsymbol{\omega}_i \times \mathbf{r}_i^P \quad \text{e} \quad \mathbf{v}_j^P = \mathbf{v}_j + \boldsymbol{\omega}_j \times \mathbf{r}_j^P, \quad (88)$$

sendo  $\mathbf{r}_i^P$  e  $\mathbf{r}_j^P$ , os vetores que ligam os centros  $C_i$  e  $C_j$  a P, respectivamente. Estes, por sua vez, são obtidos por meio de

$$\mathbf{r}_i^P = (r_i - \delta_i) \mathbf{n}_{ij} \quad \text{e} \quad \mathbf{r}_j^P = -(r_j - \delta_j) \mathbf{n}_{ij}, \quad (89)$$

tendo

$$\delta_i = \frac{E_i}{E^*} |\delta_{ij}| \quad \text{e} \quad \delta_j = \frac{E_j}{E^*} |\delta_{ij}|, \quad (90)$$

os encurtamentos locais dos raios de  $i$  e  $j$  no ponto P. As expressões em (89) podem ser simplificadas por  $\mathbf{r}_i^P \approx r_i \mathbf{n}_{ij}$  e  $\mathbf{r}_j^P \approx -r_j \mathbf{n}_{ij}$  desde que se considere uma pequena interpenetração (o que, de fato, deve ocorrer por hipótese). Portanto, a resultante das forças de atrito que atuam sobre uma partícula  $i$  qualquer, devido ao contato com outras  $n_i^{con}$  partículas do sistema, é dada por

$$\mathbf{f}_i^{atr} = \sum_{j=1, j \neq i}^{n_i^{con}} \mathbf{f}_{ij}^{atr}. \quad (91)$$

O momento causado pelas forças de atrito (devido a sua excentricidade) em uma partícula  $i$  devido ao atrito com uma partícula  $j$  qualquer é expresso por

$$\mathbf{m}_{ij}^{atr} = \mathbf{r}_i^P \times \mathbf{f}_{ij}^{atr}. \quad (92)$$

Já a resultante dos momentos devidos às forças de atrito que atuam em uma partícula  $i$ , decorrentes ao contato com outras  $n_i^{con}$  partículas do sistema, é dada por

$$\mathbf{m}_i^{atr} = \sum_{j=1, j \neq i}^{n_i^{con}} \mathbf{m}_{ij}^{atr}. \quad (93)$$

### 3.5.4 Contato em superfícies rígidas

Os contatos entre as partículas e superfícies rígidas podem ser calculados como um caso particular de contato partícula-partícula. Então, considere o contato entre uma partícula  $i$  e uma parede  $w$ , onde a interpenetração é dada por

$$\delta_{iw} = d_{iw} - r_i, \quad (94)$$

onde  $d_{iw}$  é a distância entre  $C_i$  e a face de  $w$ . A deformação na região do contato é dada por

$$\varepsilon_{iw} = \frac{|\delta_{iw}|}{r_i}. \quad (95)$$

Considerando o tamanho, a rigidez e a massa inercial da parede muito grande, isto é,  $r_w = \infty$ ,  $E_w = \infty$  e  $m_w = \infty$  e, aplicando-os nas equações (81) e (84), têm-se

$$r^* = r_i, \quad E^* = E_i \text{ e } m^* = m_i. \quad (96)$$

Com isso, utilizando as expressões (94)-(96), a força de contato entre a partícula  $i$  e a parede  $w$  pode ser obtida com as mesmas expressões apresentadas em 3.5.2. Para o cálculo da força de atrito e seu respectivo momento, utiliza-se o mesmo modelo descrito em 3.5.3. Observa-se que, neste caso, o vetor normal  $\mathbf{n}_{iw}$  é agora definido pelo vetor normal unitário à parede  $w$  no ponto de contato. Portanto, a parcela de contribuição correspondente ao contato entre uma partícula  $i$  e uma parede  $w$  qualquer na resultante das forças de contato pode ser obtida por meio de

$$\sum_{w=1}^{n_i^{con,w}} \mathbf{f}_{iw}^{con}. \quad (97)$$

Algo similar se observa para a contribuição deste mesmo contato nas resultantes das forças de atrito e seus correspondentes momentos (ver eq. (98)).

$$\sum_{w=1}^{n_i^{con,w}} \mathbf{f}_{iw}^{atr} \text{ e } \sum_{w=1}^{n_i^{con,w}} \mathbf{m}_{iw}^{atr}. \quad (98)$$

### 3.6 Solução numérica das equações do sistema

As equações dadas por (77) são um sistema de equações diferenciais fortemente acoplado que, a menos de alguns casos particulares simples, requer uma solução numérica aproximada. Neste trabalho é utilizado um método numérico proposto por Campello [32] que generaliza o método de integração de equações diferenciais ordinárias de Zohdi [68] adicionando à este a rotação e a velocidade angular no sistema de equações. Para tanto, algumas definições são

importantes:

- O intervalo de tempo a ser estudo pode ser discretizado em instantes  $\{t_0, t_1, t_2, \dots, t_i, t_{i+1}, \dots, t_f\}$ , onde  $t_0$  e  $t_f$  são os instantes de tempo inicial (estado do sistema é conhecido) e final (estado do sistema é desconhecido), respectivamente.  $t_i$  e  $t_{i+1}$  são dois instantes de tempo consecutivos onde se admite que em  $t_i$  seja a configuração de referência e  $t_{i+1}$  a configuração atual do sistema;
- O intervalo de tempo entre dois instantes consecutivos é definido como  $\Delta t = t_{i+1} - t_i$ . Em cada instante de tempo calcula-se as posições, velocidades, orientações espaciais e velocidades angulares das partículas na configuração atual ( $t_{i+1}$ ) desde que os seus respectivos valores na configuração de referência ( $t_i$ ) sejam conhecidos;
- De agora em diante a notação com o índice sobre os instantes de tempo serão descartados a fim de evitar ambiguidade com o índice das partículas.

Integrando no tempo as equações (77) entre  $t$  e  $t + \Delta t$  e, sabendo que

$$\mathbf{a}_i = \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} \quad e \quad \dot{\boldsymbol{\omega}}_i = \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt}, \quad (99)$$

chega-se a

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{m_i} \int_t^{t+\Delta t} \mathbf{f}_i^{tot}(\tau) d\tau, \\ \boldsymbol{\omega}_i(t + \Delta t) &= \boldsymbol{\omega}_i(t) + \frac{1}{j_i} \int_t^{t+\Delta t} \mathbf{m}_i^{tot}(\tau) d\tau. \end{aligned} \quad (100)$$

Como os termos do lado direito de (100) não podem ser obtidos analiticamente, utiliza-se o método do trapézio generalizado para poder aproximar esses termos de acordo com (101).

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \mathbf{f}_i^{tot}(\tau) d\tau &\cong \left[ (1 - \phi) \mathbf{f}_i^{tot}(t) + \phi \mathbf{f}_i^{tot}(t + \Delta t) \right] \Delta t, \\ \int_t^{t+\Delta t} \mathbf{m}_i^{tot}(\tau) d\tau &\cong \left[ (1 - \phi) \mathbf{m}_i^{tot}(t) + \phi \mathbf{m}_i^{tot}(t + \Delta t) \right] \Delta t, \quad 0 \leq \phi \leq 1. \end{aligned} \quad (101)$$

Com isso, a equação (100) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned}
\mathbf{v}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t}{m_i} \left[ (1 - \phi) \mathbf{f}_i^{tot}(t) + \phi \mathbf{f}_i^{tot}(t + \Delta t) \right], \\
\boldsymbol{\omega}_i(t + \Delta t) &= \boldsymbol{\omega}_i(t) + \frac{\Delta t}{j_i} \left[ (1 - \phi) \mathbf{m}_i^{tot}(t) + \phi \mathbf{m}_i^{tot}(t + \Delta t) \right].
\end{aligned} \tag{102}$$

Os vetores velocidade e velocidade angular de uma partícula em um instante intermediário  $t_m$  entre  $t$  e  $t + \Delta t$  podem ser aproximados por

$$\begin{aligned}
\mathbf{v}_{i,m} &= \frac{1}{\Delta t} [\mathbf{x}_i(t + \Delta t) - \mathbf{x}_i(t)], \\
\boldsymbol{\omega}_{i,m} &= \frac{1}{\Delta t} \boldsymbol{\alpha}_i^\Delta(t + \Delta t).
\end{aligned} \tag{103}$$

Os vetores posição e rotação incremental no instante de tempo  $t + \Delta t$ , provenientes de (103), são expressos por

$$\begin{aligned}
\mathbf{x}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{x}_i(t) + \mathbf{v}_{i,m} \Delta t = \mathbf{x}_i(t) + [(1 - \phi) \mathbf{v}_i(t) + \phi \mathbf{v}_i(t + \Delta t)] \Delta t, \\
\boldsymbol{\alpha}_i^\Delta(t + \Delta t) &= \boldsymbol{\omega}_{i,m} \Delta t = [(1 - \phi) \boldsymbol{\omega}_i(t) + \phi \boldsymbol{\omega}_i(t + \Delta t)] \Delta t.
\end{aligned} \tag{104}$$

Portanto, o sistema de equações a ser resolvido é caracterizado por

$$\begin{cases}
\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t}{m_i} [(1 - \phi) \mathbf{f}_i^{tot}(t) + \phi \mathbf{f}_i^{tot}(t + \Delta t)] \\
\boldsymbol{\omega}_i(t + \Delta t) = \boldsymbol{\omega}_i(t) + \frac{\Delta t}{j_i} [(1 - \phi) \mathbf{m}_i^{tot}(t) + \phi \mathbf{m}_i^{tot}(t + \Delta t)] \\
\mathbf{x}_i(t + \Delta t) = \mathbf{x}_i(t) + \Delta t [(1 - \phi) \mathbf{v}_i(t) + \phi \mathbf{v}_i(t + \Delta t)] \\
\boldsymbol{\alpha}_i^\Delta(t + \Delta t) = \Delta t [(1 - \phi) \boldsymbol{\omega}_i(t) + \phi \boldsymbol{\omega}_i(t + \Delta t)]
\end{cases} \tag{105}$$

para  $i = 1, \dots, N_p$ .

É possível se observar que, conhecendo  $\mathbf{x}_i(t)$ ,  $\mathbf{v}_i(t)$  e  $\boldsymbol{\omega}_i(t)$ , as posições, rotações incrementais, velocidades e velocidades angulares podem ser obtidas no instante de tempo atual. Para tanto, conforme (102), necessita-se calcular  $\mathbf{f}_i^{tot}(t + \Delta t)$  e  $\mathbf{m}_i^{tot}(t + \Delta t)$  que, por sua vez, são funções das posições, velocidades, rotação incremental e velocidades angulares no mesmo instante de tempo, o que mostra o acoplamento entre as equações do sistema (105). Na prática, esse acoplamento se traduz na necessidade de se utilizar um método iterativo para obter sua solução. Neste trabalho, utiliza-se o método do ponto fixo desenvolvido por Zohdi [68]. A seguir, este método é transcrito conforme apresentado em Campello [32] na forma de

algoritmo, com pequenas adaptações pontuais, como segue.

“Sejam  $t$ ,  $\Delta t$ ,  $\phi$ ,  $\mathbf{x}_i(t)$ ,  $\boldsymbol{\alpha}_i(t)$ ,  $\mathbf{v}_i(t)$  e  $\boldsymbol{\omega}_i(t)$  conhecidos, e seja  $K$  o contador das iterações, com  $(\cdot)^K$  o valor assumido pela grandeza  $(\cdot)$  na iteração  $K$ . Fazer:

1. Inicializar contador:  $K = 0$ ;
2. Arbitrar predictor ou estimativa inicial:

$$\begin{aligned}\mathbf{x}_i^K(t + \Delta t) &= \mathbf{x}_i(t) + \mathbf{v}_i(t)\Delta t, \\ \mathbf{v}_i^K(t + \Delta t) &= \mathbf{v}_i(t), \\ \boldsymbol{\alpha}_i^{\Delta, K}(t + \Delta t) &= \boldsymbol{\omega}_i(t)\Delta t, \\ \boldsymbol{\omega}_i^K(t + \Delta t) &= \boldsymbol{\omega}_i(t);\end{aligned}$$

3. Para cada partícula  $i$ ,  $i = 1, \dots, N_p$ , fazer:

3.1. Calcular as forças e momentos totais em  $t + \Delta t$ :

$$\begin{aligned}\mathbf{f}_i^{\text{tot}, K+1}(t + \Delta t) &= \hat{\mathbf{f}}_i^{\text{tot}} \left[ \mathbf{x}_j^K(t + \Delta t), \mathbf{v}_j^K(t + \Delta t), \boldsymbol{\alpha}_j^{\Delta, K}(t + \Delta t), \boldsymbol{\omega}_j^K(t + \Delta t) \right], \\ \mathbf{m}_i^{\text{tot}, K+1}(t + \Delta t) &= \hat{\mathbf{m}}_i^{\text{tot}} \left[ \mathbf{x}_j^K(t + \Delta t), \mathbf{v}_j^K(t + \Delta t), \boldsymbol{\alpha}_j^{\Delta, K}(t + \Delta t), \boldsymbol{\omega}_j^K(t + \Delta t) \right];\end{aligned}$$

3.2. Atualizar as velocidades e velocidades angulares:

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_i^{K+1}(t + \Delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t}{m_i} \left[ (1 - \phi) \mathbf{f}_i^{\text{tot}}(t) + \phi \mathbf{f}_i^{\text{tot}, K+1}(t + \Delta t) \right], \\ \boldsymbol{\omega}_i^{K+1}(t + \Delta t) &= \boldsymbol{\omega}_i(t) + \frac{\Delta t}{j_i} \left[ (1 - \phi) \mathbf{m}_i^{\text{tot}}(t) + \phi \mathbf{m}_i^{\text{tot}, K+1}(t + \Delta t) \right];\end{aligned}$$

3.3. Atualizar as posições e rotações incrementais:

$$\begin{aligned}\mathbf{x}_i^{K+1}(t + \Delta t) &= \mathbf{x}_i(t) + \Delta t \left[ (1 - \phi) \mathbf{v}_i(t) + \phi \mathbf{v}_i^{K+1}(t + \Delta t) \right], \\ \boldsymbol{\alpha}_i^{\Delta, K+1}(t + \Delta t) &= \Delta t \left[ (1 - \phi) \boldsymbol{\omega}_i(t) + \phi \boldsymbol{\omega}_i^{K+1}(t + \Delta t) \right];\end{aligned}$$

4. Calcular erros:

$$\begin{aligned}\text{erro}(\mathbf{x}) &= \frac{\sum_{i=1}^{N_p} \left\| \mathbf{x}_i^{K+1}(t + \Delta t) - \mathbf{x}_i^K(t + \Delta t) \right\|}{\sum_{i=1}^{N_p} \left\| \mathbf{x}_i^{K+1}(t + \Delta t) - \mathbf{x}_i(t) \right\|}, \\ \text{erro}(\boldsymbol{\alpha}^\Delta) &= \frac{\sum_{i=1}^{N_p} \left\| \boldsymbol{\alpha}_i^{\Delta, K+1}(t + \Delta t) - \boldsymbol{\alpha}_i^{\Delta, K}(t + \Delta t) \right\|}{\sum_{i=1}^{N_p} \left\| \boldsymbol{\alpha}_i^{\Delta, K+1}(t + \Delta t) \right\|},\end{aligned}$$

$$\text{erro}(\mathbf{v}) = \frac{\sum_{i=1}^{N_p} \|\mathbf{v}_i^{K+1}(t + \Delta t) - \mathbf{v}_i^K(t + \Delta t)\|}{\sum_{i=1}^{N_p} \|\mathbf{v}_i^{K+1}(t + \Delta t) - \mathbf{v}_i(t)\|},$$

$$\text{erro}(\boldsymbol{\omega}) = \frac{\sum_{i=1}^{N_p} \|\boldsymbol{\omega}_i^{K+1}(t + \Delta t) - \boldsymbol{\omega}_i^K(t + \Delta t)\|}{\sum_{i=1}^{N_p} \|\boldsymbol{\omega}_i^{K+1}(t + \Delta t) - \boldsymbol{\omega}_i(t)\|};$$

5. Checar a convergência:

- 5.1. Se  $\text{erro}(\mathbf{x}) \leq \text{tol}_x$ ,  $\text{erro}(\boldsymbol{\alpha}^\Delta) \leq \text{tol}\boldsymbol{\alpha}^\Delta$ ,  $\text{erro}(\mathbf{v}) \leq \text{tol}_v$  e  $\text{erro}(\boldsymbol{\omega}) \leq \text{tol}_\omega$ , a solução convergiu. Caso necessário, atualizar as rotações totais  $\boldsymbol{\alpha}_i(t + \Delta t)$  por meio da fórmula de composição de rotações de Rodrigues (56), fazer  $t \leftarrow t + \Delta t$  e repetir o algoritmo para o próximo passo de tempo;
- 5.2. Se  $\text{erro}(\mathbf{x}) > \text{tol}_x$ ,  $\text{erro}(\boldsymbol{\alpha}^\Delta) > \text{tol}\boldsymbol{\alpha}^\Delta$ ,  $\text{erro}(\mathbf{v}) > \text{tol}_v$  ou  $\text{erro}(\boldsymbol{\omega}) > \text{tol}_\omega$ , a solução não convergiu. Fazer  $K \leftarrow K + 1$  e repetir os passos 3, 4 e 5.”

Algumas considerações são importantes de serem destacadas a respeito do algoritmo em questão:

- O previsor sugerido no item 2 pode ser substituído considerando que as partículas inicialmente estejam em repouso tendo, portanto, suas posições, orientações espaciais, velocidades e velocidades angulares nulas;
- No cálculo do erro em 4 pode ocorrer que algum normalizador adotado, de uma determinada grandeza, tenda a zero ou a um número muito pequeno. Isso pode ocorrer, por exemplo, quando uma partícula qualquer esteja atingindo uma configuração estática de equilíbrio (imóvel). Para evitar problemas no cálculo dos erros, os valores destes normalizadores devem sempre ser checados e, caso necessário, adota-se normalizadores alternativos. Neste trabalho, as seguintes condições são adicionadas no item 4 do algoritmo.

$$\text{se } \sum_{i=1}^{N_p} \|\mathbf{x}_i^{K+1}(t + \Delta t) - \mathbf{x}_i(t)\| < 10^{-14} \sum_{i=1}^{N_p} \|\mathbf{x}_i^{K+1}(t + \Delta t)\| \text{ e}$$

$$\sum_{i=1}^{N_p} \|\mathbf{x}_i^{K+1}(t + \Delta t)\| > 10^{-14}, \text{ então}$$

$$\text{erro}(\mathbf{x}) = \frac{\sum_{i=1}^{N_p} \|\mathbf{x}_i^{K+1}(t + \Delta t) - \mathbf{x}_i^K(t + \Delta t)\|}{\sum_{i=1}^{N_p} \|\mathbf{x}_i^{K+1}(t + \Delta t)\|}, \text{ e}$$

$$\text{se } \sum_{i=1}^{N_p} \|\mathbf{x}_i^{K+1}(t + \Delta t)\| < 10^{-14}, \text{ então}$$

$$\text{erro}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N_p} \|\mathbf{x}_i^{K+1}(t + \Delta t) - \mathbf{x}_i^K(t + \Delta t)\|.$$

Esse procedimento é realizado para o cálculo de cada um dos erros mencionados no item 4 do algoritmo;

- Os valores das tolerâncias mencionadas no item 5 ( $tolx$ ,  $tol\alpha^\Delta$ ,  $tolv$  e  $tol\omega$ ) podem ser quão pequenos quanto se deseje. Neste trabalho, utiliza-se o valor de  $10^{-6}$ ;
- O tamanho do passo de integração temporal adotado é tal que  $\Delta t \leq \Delta t_{c,\min}/10$ , onde  $\Delta t_{c,\min}$  é a menor das durações de todos os possíveis contatos do sistema. Isso garante que todos os contatos possíveis que podem ocorrer no sistema possam ser detectados durante o intervalo de solução e a força normal de contato seja integrada no tempo com acurácia suficientemente boa, uma vez que se terá pelo menos dez instantes de tempo durante a integração. De acordo com a teoria de Hertz, o contato partícula-partícula ou partícula-corpo rígido pode ser estimado por

$$\Delta t_c \cong 2,87 \left[ \frac{(m^*)^2}{r^* (E^*)^2 v_{rel}} \right]^{1/5} \quad (106)$$

onde  $v_{rel}$  é a velocidade relativa de aproximação do par na sua direção central no instante em que o contato se inicia. O valor de  $v_{rel}$  geralmente não é conhecido podendo ser estimado com base nas características do sistema;

- O passo de tempo ( $\Delta t$ ) para as partículas, no geral, é bem menor do que o do fluido. Como descrito anteriormente, isso é necessário para que a colisão seja simulada de forma consistente e com precisão aceitável. Portanto, a integração temporal para as partículas representa “subciclos” de integração dentro do passo de tempo do fluido.

### 3.7 Exemplos numéricos

Nesta seção, pretende-se avaliar a formulação do MED para a descrição do movimento das partículas implementada neste trabalho em código único próprio. Para tanto, são apresentados quatro exemplos simples descritos a seguir. Ressalta-se que o algoritmo desenvolvido foi testado e verificado para diversos outros exemplos, porém, escolheu-se apresentar apenas alguns por concisão. A tolerância adotada em todos os exemplos a seguir, quando utilizado o método implícito, é de  $tolx = tol\alpha^{\Delta} = tolv = tol\omega = 10^{-6}$ .

#### 3.7.1 Choque frontal de uma partícula com um anteparo

Este exemplo simula uma colisão entre uma partícula e um anteparo rígido (parede) conforme Figura 18. A partícula tem diâmetro  $d_p = 0,2$  m e massa  $m = 10$  kg. Ela é lançada contra o anteparo com velocidade inicial de  $v = 1,0$  m/s. As propriedades da partícula e parâmetros de análise estão ilustradas na Tabela 6. Utilizou-se quatro passos de tempo distintos refinados progressivamente e os métodos explícito e implícito ( $\phi = 1/2$ ).

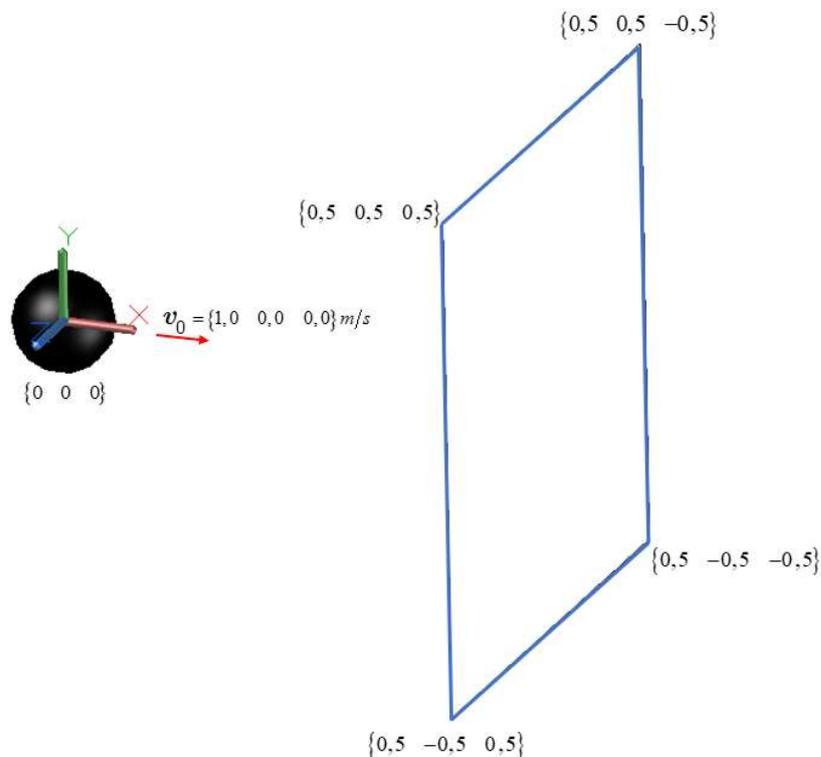


Figura 18: Desenho esquemático do exemplo 3.7.1.

| Parâmetros da análise   |        |
|-------------------------|--------|
| $v_0$ (m/s)             | 1,0    |
| $d_p$ (cm)              | 20,0   |
| $v$                     | 0,0    |
| $\mu_d$                 | 0,0    |
| massa (kg)              | 10,0   |
| $E$ (N/m <sup>2</sup> ) | $10^9$ |
| $\xi_n$                 | 0,0    |

Tabela 6: Parâmetros da análise do exemplo 3.7.1.

A Figura 19 apresenta os resultados da variação das forças de contato com o tempo (contado apenas durante o contato). Nesta figura é possível se observar uma boa convergência dos resultados, principalmente com a redução do passo de tempo. Este aspecto é confirmado na Tabela 7 com os resultados da velocidade pós-choque. A importância deste exemplo é subsidiar este trabalho com informações de forma que propicie a escolha adequada do método temporal e o passo de tempo a ser empregado nos problemas de IFP, além de validar a implementação do MED deste trabalho.

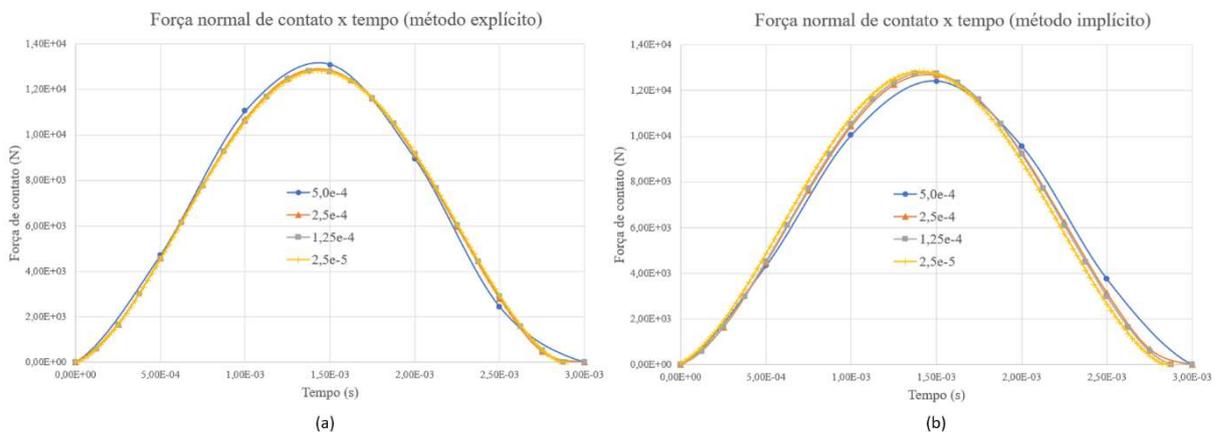


Figura 19: Evolução no tempo da força de contato para os métodos (a) explícito e (b) implícito.

| Passo de tempo (s)                 | Velocidade pós-choque (m/s)* |           |
|------------------------------------|------------------------------|-----------|
|                                    | Explícito                    | Implícito |
| 5,00E-04 ( $\sim \Delta t_c/5$ )   | -1,011929                    | -1,006123 |
| 2,50E-04 ( $\sim \Delta t_c/10$ )  | -1,001418                    | -1,001939 |
| 1,25E-04 ( $\sim \Delta t_c/20$ )  | -1,000154                    | -1,000024 |
| 2,50E-05 ( $\sim \Delta t_c/100$ ) | -1,000006                    | -1,000006 |

\* Valor de referência -1,0 m/s

Tabela 7: Velocidades pós-choque obtidas para diferentes passos de tempo e métodos de integração temporal.

### 3.7.2 Partícula em queda livre

Neste exemplo, aplica-se uma velocidade inicial  $v_0$  em uma partícula e observa-se o seu

comportamento associado com forças gravitacionais. Existe uma superfície finita horizontal que serve de anteparo. Todas as informações geométricas deste exemplo estão ilustradas na Figura 20. Os parâmetros para análise são apresentados na Tabela 8. Foram simulados dois casos; o primeiro considerando uma velocidade inicial dada por  $\mathbf{v}_0 = \{0,5 \ 0,0 \ 0,0\}$  m/s e o segundo por  $\mathbf{v}_0 = \{1,0 \ 0,0 \ 0,0\}$  m/s.

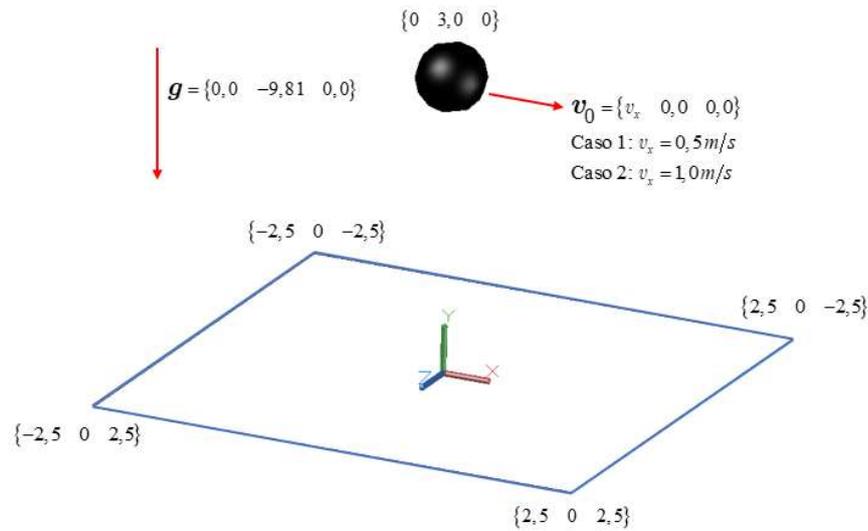


Figura 20: Desenho esquemático do exemplo 3.7.2.

| Parâmetros da análise      |  |
|----------------------------|--|
| $\phi$ (trapézio clássico) | 1/2  |
| $d_p$ (cm)                 | 7,0  |
| $\nu$                      | 0,0  |
| $\mu_d$                    | 0,0  |
| $g$ (m/s <sup>2</sup> )    | 9,81   |
| massa (kg)                 | 1,0  |
| $E$ (N/m <sup>2</sup> )    | $10^7$   |
| $\xi_n$                    | 0,1  |
| $\Delta t$ (s)             | $2,87 \times 10^{-4}$ (entre $\sim \Delta t_c/30$ e $\sim \Delta t_c/35$ ) |

Tabela 8: Parâmetros utilizados no exemplo 3.7.2.

A Figura 21, apresenta o gráfico com a variação da posição da partícula para os casos 01 e 02. Observa-se uma dissipação de energia cada vez que a partícula se choca com o anteparo. Isso é devido a consideração da taxa de amortecimento não nula. Além disso, quando as partículas atingem posições cuja componente da posição  $x > 2,5$  m, a partícula pode se movimentar livremente sem a presença do anteparo, podendo-se, assim, atingir posições negativas na direção  $y$ . Como não há a presença de forças e velocidades na direção  $z$ , as coordenadas da partícula nesta direção, em todo os instantes de tempo, são nulas.

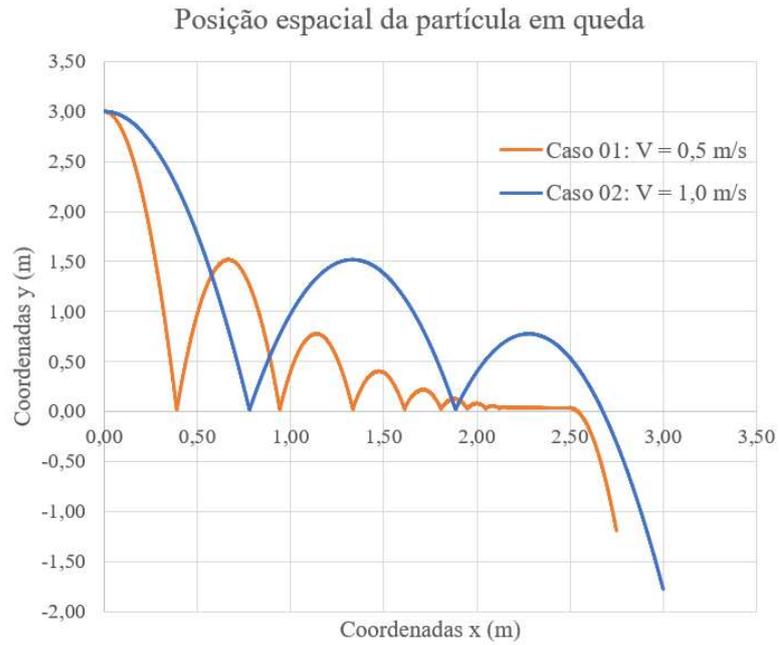


Figura 21: Variação da posição espacial da partícula do exemplo 3.7.2 para os casos 01 e 02.

### 3.7.3 Choque entre duas partículas alinhadas

Este exemplo simples tem como objetivo analisar as velocidades pós-choque de duas partículas alinhadas submetidas a três cenários (ver Figura 22, Figura 23 e Figura 24).

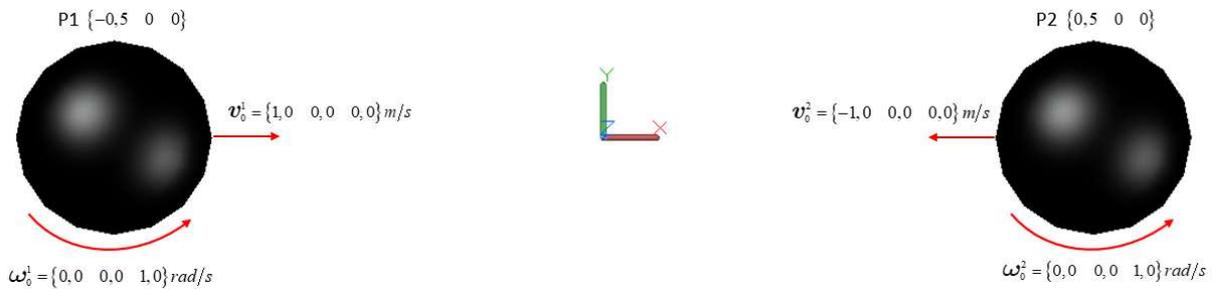


Figura 22: Cenário 01 do exemplo 3.7.3.

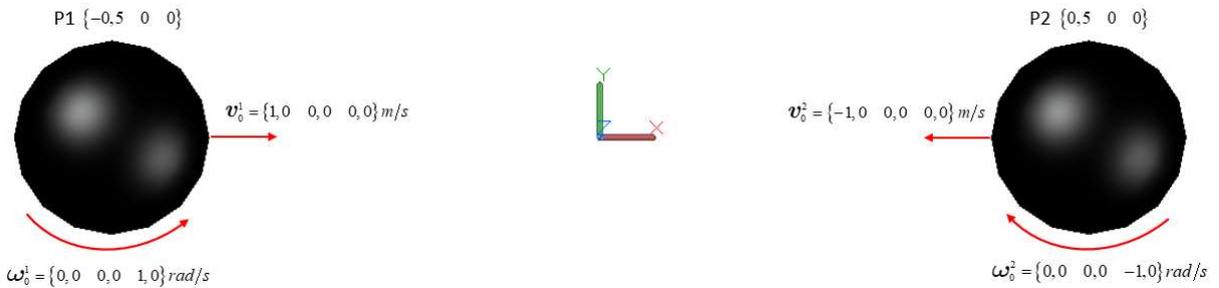


Figura 23: Cenário 02 do exemplo 3.7.3.

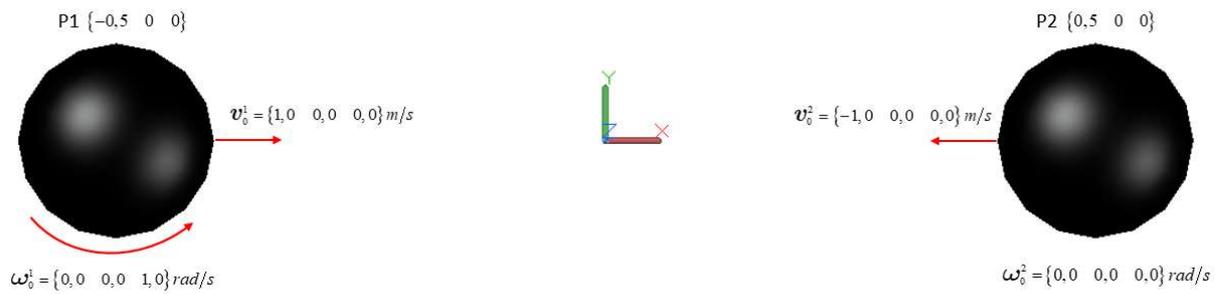


Figura 24: Cenário 03 do exemplo 3.7.3.

As propriedades das partículas e parâmetros do problema utilizados neste exemplo são apresentadas na Tabela 9. Utilizou-se o método explícito de integração temporal.

| Parâmetros da análise           |   |
|---------------------------------|---|
| $d_{p1} = d_{p2}$ (cm)          | 20,0  |
| $v_1 = v_2$                     | 0,0   |
| $\mu_d$                         | 0,25  |
| $m_1 = m_2$ (kg)                | 10,0  |
| $E_1 = E_2$ (N/m <sup>2</sup> ) | $10^9$  |
| $\xi_n$                         | 0,0   |
| $\Delta t$ (s)                  | $2,5 \times 10^{-4}$ ( $\sim \Delta t_c/10$ ) |

Tabela 9: Parâmetros da análise do exemplo 3.7.3.

Os resultados obtidos são comparados com os resultados provenientes do programa PSY (*Particle System Analysis*) que é um programa largamente testado e consolidado de simulação tridimensional de modelos discretos desenvolvido pelo grupo de pesquisa do Prof. Dr. Eduardo Campello. Observa-se uma excelente concordância entre os resultados para todos os cenários (ver Tabela 10 e Tabela 11).

| Partícula 01 - Velocidades pós-choque |                   |         |        |                            |            |            |                  |         |        |                            |            |            |
|---------------------------------------|-------------------|---------|--------|----------------------------|------------|------------|------------------|---------|--------|----------------------------|------------|------------|
| Cenário                               | Presente trabalho |         |        |                            |            |            | PSY              |         |        |                            |            |            |
|                                       | Velocidade (m/s)  |         |        | Velocidade angular (rad/s) |            |            | Velocidade (m/s) |         |        | Velocidade angular (rad/s) |            |            |
|                                       | $v_x$             | $v_y$   | $v_z$  | $\omega_x$                 | $\omega_y$ | $\omega_z$ | $v_x$            | $v_y$   | $v_z$  | $\omega_x$                 | $\omega_y$ | $\omega_z$ |
| 01                                    | -1,0014           | -0,0271 | 0,0000 | 0,0000                     | 0,0000     | 0,3329     | -1,0014          | -0,0271 | 0,0000 | 0,0000                     | 0,0000     | 0,3329     |
| 02                                    | -1,0014           | 0,0000  | 0,0000 | 0,0000                     | 0,0000     | 1,0000     | -0,9985          | 0,0000  | 0,0000 | 0,0000                     | 0,0000     | 1,0000     |
| 03                                    | -1,0014           | -0,0213 | 0,0000 | 0,0000                     | 0,0000     | 0,4779     | -1,0014          | -0,0213 | 0,0000 | 0,0000                     | 0,0000     | 0,4779     |

Tabela 10: Resultados pós-choques obtidos para a partícula 01 do exemplo 3.7.3.

| Partícula 02 - Velocidades pós-choque |                   |        |        |                            |            |            |                  |        |        |                            |            |            |
|---------------------------------------|-------------------|--------|--------|----------------------------|------------|------------|------------------|--------|--------|----------------------------|------------|------------|
| Cenário                               | Presente trabalho |        |        |                            |            |            | PSY              |        |        |                            |            |            |
|                                       | Velocidade (m/s)  |        |        | Velocidade angular (rad/s) |            |            | Velocidade (m/s) |        |        | Velocidade angular (rad/s) |            |            |
|                                       | $v_x$             | $v_y$  | $v_z$  | $\omega_x$                 | $\omega_y$ | $\omega_z$ | $v_x$            | $v_y$  | $v_z$  | $\omega_x$                 | $\omega_y$ | $\omega_z$ |
| 01                                    | 1,0014            | 0,0271 | 0,0000 | 0,0000                     | 0,0000     | 0,3329     | 1,0014           | 0,0271 | 0,0000 | 0,0000                     | 0,0000     | 0,3329     |
| 02                                    | 1,0014            | 0,0000 | 0,0000 | 0,0000                     | 0,0000     | -1,0000    | 0,9985           | 0,0000 | 0,0000 | 0,0000                     | 0,0000     | -1,0000    |
| 03                                    | 1,0014            | 0,0213 | 0,0000 | 0,0000                     | 0,0000     | -0,5221    | 1,0014           | 0,0213 | 0,0000 | 0,0000                     | 0,0000     | -0,5221    |

Tabela 11: Resultados pós-choques obtidos para a partícula 02 do exemplo 3.7.3.

### 3.7.4 Choque entre duas partículas desalinhadas

Este exemplo tem como objetivo analisar o choque entre duas partículas desalinhadas conforme Figura 25. As partículas possuem velocidades iniciais de mesma magnitude, porém, sentidos contrários. Os parâmetros utilizados neste exemplo podem ser observados na Tabela 12. Utilizou-se o método explícito de integração temporal.

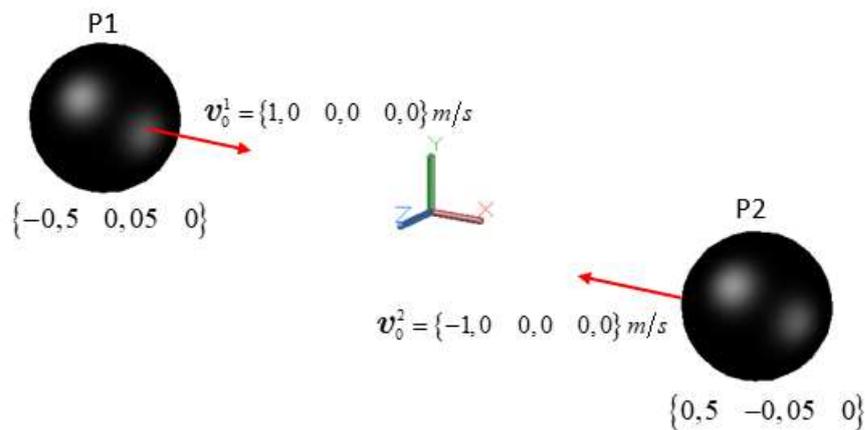


Figura 25: Desenho esquemático do exemplo 3.7.4.

| Parâmetros da análise           |   |
|---------------------------------|---|
| $d_{p1} = d_{p2}$ (cm)          | 20,0                                      |
| $v_1 = v_2$                     | 0,0                                       |
| $\mu_d$                         | 0,0                                       |
| $m_1 = m_2$ (kg)                | 10,0                                      |
| $E_1 = E_2$ (N/m <sup>2</sup> ) | 10 <sup>9</sup>                           |
| $\xi_n$                         | 0,0                                       |
| $\Delta t$ (s)                  | 2,87x10 <sup>-4</sup> ( $\Delta t_c/10$ ) |

Tabela 12: Parâmetros da análise do exemplo 3.7.4.

O resultado deste exemplo é apresentado na Figura 26. É visível o ponto de colisão entre as partículas e a sua mudança de direção causada pelo desalinhamento. Além disso, a trajetória pós-choque são paralelas entre si, o que fisicamente era esperado. A Figura 27 ilustra a variação

da velocidade resultante de ambas as partículas durante o choque. Nela é possível observar que a velocidade resultante das partículas pós-choque é de  $1,0\text{ m/s}$ , o que corresponde com a velocidade resultante de referência.

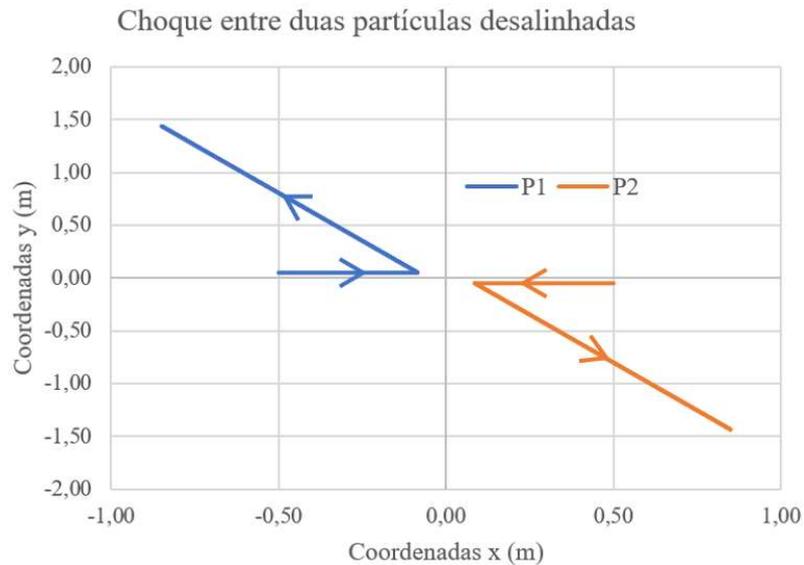


Figura 26: Evolução da trajetória das partículas P1 e P2 com o tempo.

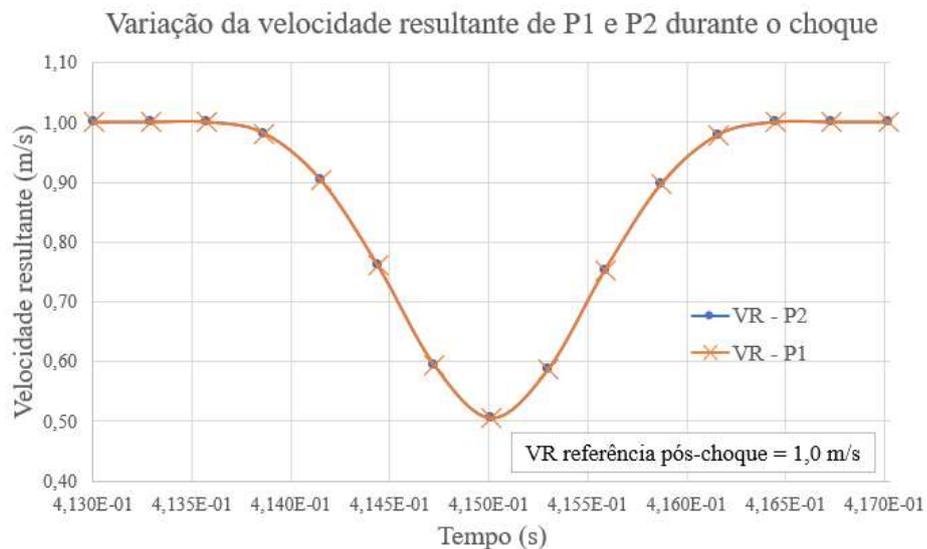


Figura 27: Evolução da velocidade resultante das partículas P1 e P2 durante o choque.

### 3.7.5 Choque frontal entre três partículas

Este exemplo simula a condição de choque entre três partículas conforme Figura 28. A disposição inicial das partículas foi definida de forma que o choque entre elas ocorra no mesmo instante de tempo. Todas as partículas possuem velocidade inicial de mesma magnitude, porém,

com direção diferente. Os parâmetros utilizados neste exemplo podem ser visualizados na Tabela 13. Para esta simulação, utilizou-se o método do trapézio clássico para a integração temporal.

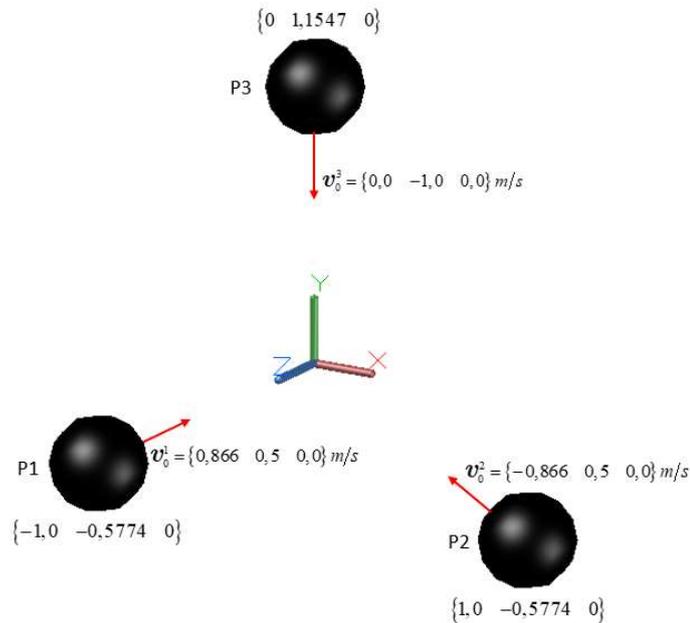


Figura 28: Desenho esquemático do exemplo 3.7.5.

| Parâmetros da análise                 |   |
|---------------------------------------|---|
| $d_{p1} = d_{p2} = d_{p3}$ (cm)       | 20,0                                      |
| $v_1 = v_2 = v_3$                     | 0,0                                       |
| $\mu_d$                               | 0,0                                       |
| $m_1 = m_2 = m_3$ (kg)                | 10,0                                      |
| $E_1 = E_2 = E_3$ (N/m <sup>2</sup> ) | 10 <sup>9</sup>                           |
| $\xi_n$                               | 0,0                                       |
| $\Delta t$ (s)                        | $2,87 \times 10^{-4}$ ( $\Delta t_c/10$ ) |

Tabela 13: Parâmetros da análise do exemplo 3.7.5.

A Figura 29 ilustra o resultado obtido neste exemplo. Pode-se observar que, devido as partículas estarem dispostas inicialmente nos vértices de um triângulo equilátero virtual, era de se esperar que a direção delas não mudassem após o choque tendo, apenas, o seu sentido invertido com relação ao inicial. Assim como observado em 3.7.4, a Figura 30 ilustra a variação da velocidade resultante das três partículas durante o choque. Nela também se observa que a velocidade resultante das partículas pós-choque é de 1,0 m/s, o que corresponde com a velocidade resultante de referência.

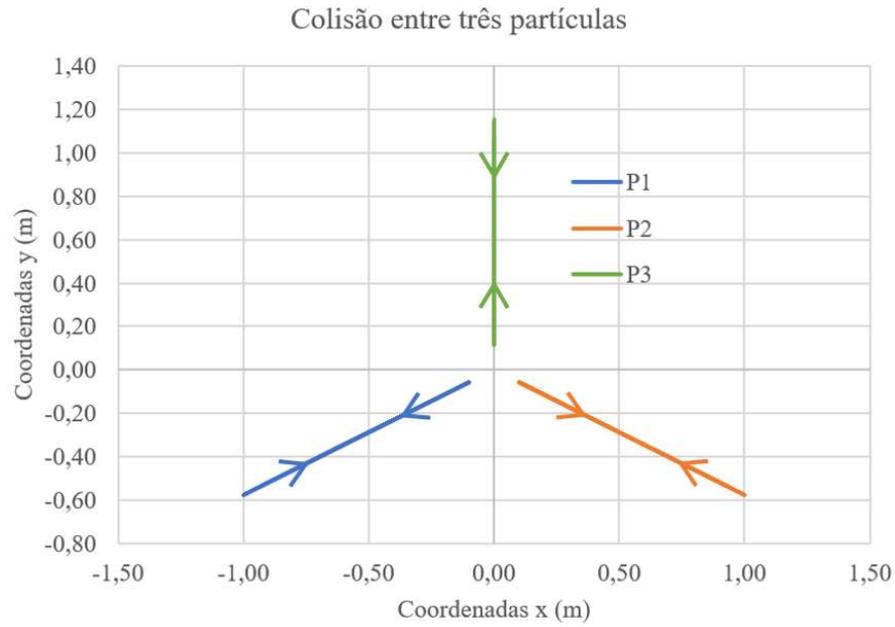


Figura 29: Evolução da trajetória das partículas P1, P2 e P3 com o tempo.

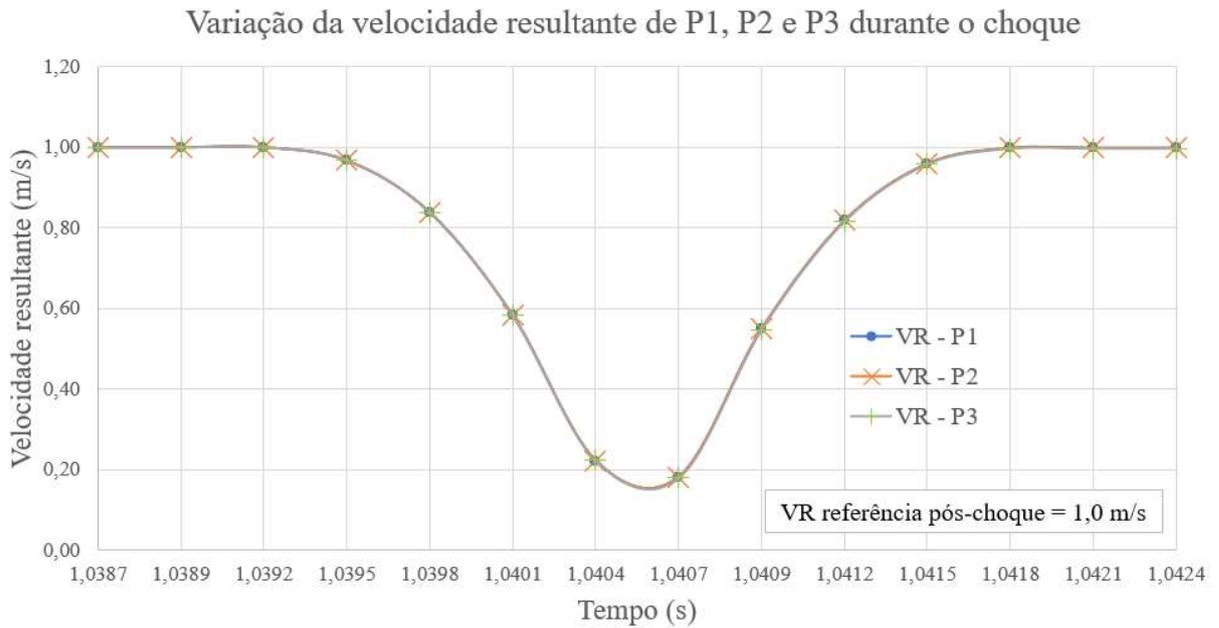


Figura 30: Evolução da velocidade resultante das partículas P1, P2 e P3 durante o choque.

## 4 MÉTODO DE FRONTEIRA IMERSA

Como o objetivo deste trabalho é desenvolver uma metodologia para simulação de interação fluido-partícula, faz-se necessário aplicar alguma técnica numérica que possa representar a interação entre as duas fases do problema. Neste trabalho, serão utilizados conceitos e técnicas já bem estabelecidas de interação fluido-estrutura (IFE). Dentre as técnicas existentes, pretende-se adaptar a técnica desenvolvida por Nitsche [34] em conjunto com o método de fronteira imersa. Um dos maiores desafios de se aplicar esta técnica é impor as condições de contorno nas interfaces entre o fluido e as partículas uma vez que, geralmente, não existem nós da malha do fluido que sejam coincidentes com estas interfaces impossibilitando, assim, a aplicação direta das condições de contorno. A seguir, é desenvolvido o equacionamento matemático necessário para a aplicação da técnica em questão. Então, seja  $\Omega$  o domínio do problema,  $\Omega^f$  o domínio do fluido e  $\Omega^p$  o domínio de uma partícula<sup>5</sup> tal que

$$\Omega^f \cap \Omega^p \neq \emptyset, \quad (107)$$

isto é,  $\Omega^f$  se estende parcial ou totalmente sobre  $\Omega^p$ .

A Figura 31 ilustra os domínios do problema bem como os vetores normais unitários associados  $\mathbf{n}^f$  e  $\mathbf{n}^p$  na interface  $\Gamma^i$ , doravante chamada de “superfície molhada” de uma partícula  $i$  qualquer.

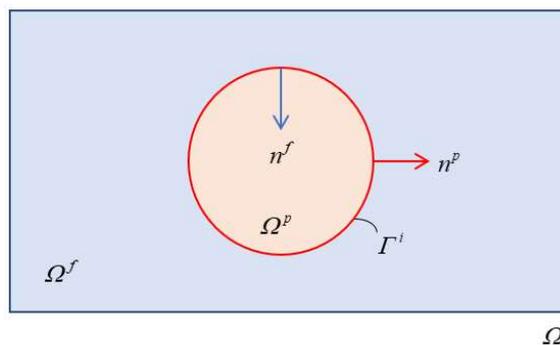


Figura 31: Definição dos domínios do problema.

A superfície molhada, por sua vez, divide o domínio do fluido em dois novos domínios denominados  $\Omega^+$  e  $\Omega^-$  (ver Figura 32), de modo que

<sup>5</sup> O equacionamento apresentado nesta seção é feito para uma única partícula, mas vale para qualquer número de partículas.

$$\Omega^f = \Omega^+ \cup \Omega^- \text{ e } \Omega^+ \cap \Omega^- = \emptyset. \quad (108)$$

Importante ressaltar que o domínio  $\Omega^-$  não tem nenhum significado físico e, por isso, é também chamado de domínio fictício. Os elementos finitos pertencentes a este domínio podem e devem ser desativados durante a solução numérica do sistema visando a redução tanto do custo computacional como de utilização de memória.

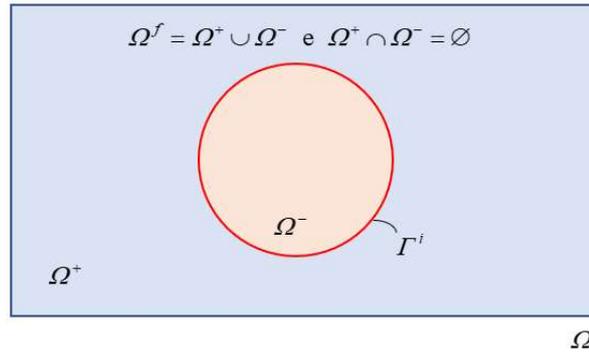


Figura 32: Subdivisão do domínio fluido em  $\Omega^+$  e  $\Omega^-$ .

## 4.1 Condições de contorno ao longo da interface

Como dito anteriormente, um dos principais desafios de se utilizar técnicas baseadas em fronteira imersa é, justamente, a imposição das condições de contorno em  $\Gamma^i$ . A imposição destas condições de forma imprecisa pode ocasionar efeitos claramente contrários à física do problema, como por exemplo, o escoamento do fluido no domínio fictício  $\Omega^-$ . No problema fluido essa condição se traduz em velocidades impostas, ou seja, trata-se de uma condição de contorno do tipo *Dirichlet* e diversas técnicas podem ser utilizadas para impô-la (Gomes [47]). Por exemplo, a imposição aproximada da condição de contorno no qual alguns graus de liberdade de determinados nós da malha são utilizados para minimizar a diferença entre as condições de contorno exata e aproximada (Codina e Baiges [92]). Outra forma é representar as condições de contorno como restrições no espaço de Fourier (Husain e Floryan [130]). Há também a possibilidade de se utilizar os multiplicadores de Lagrange. Esta abordagem foi originalmente proposta por Legay et al. [85] e Gerstenberger e Wall [83] e, basicamente, propõe-se a resolver o problema fluido com uma malha Euleriana fixa e indeformável tendo os elementos intersectados pelo contorno dos objetos enriquecidos de modo a representar a descontinuidade exigidas nas variáveis primitivas do problema (velocidade e pressão). Inicialmente, pensou-se em utilizar os multiplicadores de Lagrange como técnica capaz de

interligar as duas fases (fluido e partículas) do problema, uma vez que seria uma extensão natural do trabalho desenvolvido pelo grupo de pesquisa (Fernandes et al. [87]) para problema de interação fluido-partícula bidimensional. Porém, sua extensão para o espaço tridimensional apresentou problemas complexos de instabilidade numérica, o que inviabilizou a sua aplicação. Tentou-se ainda uma formulação estabilizada dos multiplicadores de Lagrange. Todavia, os resultados nos campos de pressão e velocidades próximos à interface imersa não foram satisfatórios, interferindo diretamente na obtenção das forças hidrodinâmicas. Com isso, alternativamente, optou-se em se utilizar a técnica desenvolvida por Nitsche [34] por ser uma técnica até mais simples de ser implementada em comparação aos multiplicadores de Lagrange, além do fato dela não acrescentar novos graus de liberdade ao sistema, reduzindo-se, assim, o custo computacional. Esta técnica é apresentada a seguir.

#### 4.1.1 Método de Nitsche

Originalmente o método de Nitsche foi desenvolvido para a equação elíptica de Poisson como uma técnica geral e consistente de imposição das condições de contorno de forma a não requerer a introdução de incógnitas adicionais no sistema. A ideia básica do método é definir um funcional de energia que mede o desvio entre a solução discreta e a solução proveniente da equação de Poisson (forma forte) para dadas condições de contorno de *Dirichlet* em  $\Gamma^i$ . Analiticamente, a minimização deste funcional resulta na formulação de Nitsche para um dado problema, incluindo as condições de contorno em *Dirichlet*. Estas condições de contorno são impostas de forma fraca sem a necessidade de malha suplementar na superfície molhada  $\Gamma^i$ . Devido a sua generalidade, o método de Nitsche é muito utilizado em conjunto com o método sem malha (Babuska et al. [131], Huerta e Belytschko [132]), em problemas de discretização de interface (Hansbo e Hansbo [133], Hansbo [134]), além no contexto dos problemas com fronteiras imersas (Codina e Baiges [92], Juntunen e Stenberg [135]). Neste trabalho, o método de Nitsche é aplicado às equações de Navier-Stokes para problemas transientes, tendo como base o trabalho desenvolvido por Benk et al. [35] e Benk [89]. De agora em diante, sempre que o texto mencionar a equação de Navier-Stokes, ele está se referindo a problemas transientes a menos quando explicitado. Este trabalho não se propõe apresentar as deduções da aplicação do método de Nitsche para a equação de Navier-Stokes. Caso o leitor tenha interesse nestas deduções, recomenda-se a leitura de Nitsche [34] para problemas de Poisson e, de Benk [89], Hansbo e Juntunen [90] e Becker [91], para problemas de Stokes e Navier-Stokes.

A obtenção da forma fraca da equação de Navier-Stokes conforme o método de Nitsche,

inicia-se considerando os termos referentes às integrais de contorno provenientes da aplicação do teorema do divergente em (12) que resulta em

$$\begin{aligned} & (\mathbf{w}, \dot{\mathbf{u}})_{\Omega^f} + c(\mathbf{u}; \mathbf{w}, \mathbf{u})_{\Omega^f} + a(\mathbf{w}, \mathbf{u})_{\Omega^f} - \nu \langle \partial_n \mathbf{u}, \mathbf{w} \rangle_{\Gamma^i} - (\operatorname{div} \mathbf{w}, p)_{\Omega^f} + \\ & \langle p \mathbf{n}, \mathbf{w} \rangle_{\Gamma^i} + (q, \operatorname{div} \mathbf{u})_{\Omega^f} - (\mathbf{w}, \bar{\mathbf{t}})_{\Gamma_t} = (\mathbf{w}, \mathbf{b})_{\Omega^f}, \end{aligned} \quad (109)$$

onde

$$\langle \partial_n \mathbf{u}, \mathbf{w} \rangle_{\Gamma^i} = \int_{\Gamma^i} (\nabla \mathbf{u}) \mathbf{n} \cdot \mathbf{w} d\Gamma^i \quad \text{e} \quad \langle p \mathbf{n}, \mathbf{w} \rangle_{\Gamma^i} = \int_{\Gamma^i} p \mathbf{n} \cdot \mathbf{w} d\Gamma^i. \quad (110)$$

Observe que os termos de (110) não aparecem em (13) pois  $\mathbf{w} = 0$  em  $\Gamma_u$ , porém, no contexto da fronteira imersa, esses termos em  $\Gamma^i$  não são nulos, isto é, os graus de liberdade em *Dirichlet* nos elementos cortados pela superfície molhada ( $\Gamma^i$ ) são considerados desconhecidos.

A expressão (109) é a forma fraca da equação de Navier-Stokes sem as condições de contorno em *Dirichlet* aplicadas. Para aplicar tais condições, o método de Nitsche adiciona termos de penalidades bem como termos que mantém o operador da equação governante simétrico. Com isso, a forma fraca final da eq. (109) é dada por

$$\begin{aligned} & (\mathbf{w}, \dot{\mathbf{u}})_{\Omega^f} + c(\mathbf{u}; \mathbf{w}, \mathbf{u})_{\Omega^f} + a(\mathbf{w}, \mathbf{u})_{\Omega^f} - \nu \langle \partial_n \mathbf{u}, \mathbf{w} \rangle_{\Gamma^i} - \nu \langle \partial_n \mathbf{w}, \mathbf{u} \rangle_{\Gamma^i} \\ & - (\operatorname{div} \mathbf{w}, p)_{\Omega^f} + \langle p \mathbf{n}, \mathbf{w} \rangle_{\Gamma^i} - \langle q \mathbf{n}, \mathbf{u} \rangle_{\Gamma^i} + \nu \frac{\alpha_1}{h} \langle \mathbf{u}, \mathbf{w} \rangle_{\Gamma^i} + \\ & \frac{\alpha_2}{h} \langle \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}, \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} \rangle_{\Gamma^i} + (q, \operatorname{div} \mathbf{u})_{\Omega^f} = (\mathbf{w}, \mathbf{b})_{\Omega^f} + (\mathbf{w}, \bar{\mathbf{t}})_{\Gamma_t} - \nu \langle \partial_n \mathbf{w}, \bar{\mathbf{u}} \rangle_{\Gamma^i} \\ & - \langle q \mathbf{n}, \bar{\mathbf{u}} \rangle_{\Gamma^i} + \nu \frac{\alpha_1}{h} \langle \bar{\mathbf{u}}, \mathbf{w} \rangle_{\Gamma^i} + \frac{\alpha_2}{h} \langle \bar{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{n}, \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} \rangle_{\Gamma^i}, \end{aligned} \quad (111)$$

onde  $\bar{\mathbf{u}}$  é a velocidade prescrita em  $\Gamma^i$ ,  $h$  é o tamanho do elemento na região de  $\Gamma^i$  e,  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  são parâmetros de penalidade. Conforme conhecimento do autor deste trabalho, até o presente momento, a escolha dos valores para  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  ainda são temas de pesquisa. Em Becker [91] foi utilizado  $\alpha_1 = 3$  e  $\alpha_2 = 0,1$ , já em Hansbo e Juntunen [90] utilizou-se  $\alpha_1 = 10$  e  $\alpha_2 = 1$  e, em Benk et al. [35]  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  variando de  $10^2$  à  $10^3$ . Neste trabalho, após várias simulações testes, observou-se que valores de  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  entre  $10^4$  à  $10^6$  obteve-se os melhores resultados (ver exemplo 4.2.1) para corpos imersos esféricos.

Obtida a forma fraca, o próximo passo é a discretização desta equação no tempo.

Considerando o método de Newmark, apresentado em 2.3, a equação (111) tem a sua forma semidiscreta a seguir

$$\begin{aligned}
& \left\{ (\mathbf{w}, \mathbf{u})_{\Omega^f} + \gamma \Delta t \left[ c(\mathbf{u}; \mathbf{w}, \mathbf{u})_{\Omega^f} + a(\mathbf{w}, \mathbf{u})_{\Omega^f} - \nu \langle \partial_n \mathbf{u}, \mathbf{w} \rangle_{\Gamma^i} - \nu \langle \partial_n \mathbf{w}, \mathbf{u} \rangle_{\Gamma^i} \right. \right. \\
& - (\operatorname{div} \mathbf{w}, p)_{\Omega^f} + \langle p \mathbf{n}, \mathbf{w} \rangle_{\Gamma^i} - \langle q \mathbf{n}, \mathbf{u} \rangle_{\Gamma^i} + \nu \frac{\alpha_1}{h} \langle \mathbf{u}, \mathbf{w} \rangle_{\Gamma^i} + \frac{\alpha_2}{h} \langle \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}, \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} \rangle_{\Gamma^i} \\
& + (q, \operatorname{div} \mathbf{u})_{\Omega^f} - (\mathbf{w}, \mathbf{b})_{\Omega^f} - (\mathbf{w}, \bar{\mathbf{t}})_{\Gamma_t} + \nu \langle \partial_n \mathbf{w}, \bar{\mathbf{u}} \rangle_{\Gamma^i} + \langle q \mathbf{n}, \bar{\mathbf{u}} \rangle_{\Gamma^i} \\
& \left. \left. - \nu \frac{\alpha_1}{h} \langle \bar{\mathbf{u}}, \mathbf{w} \rangle_{\Gamma^i} - \frac{\alpha_2}{h} \langle \bar{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{n}, \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} \rangle_{\Gamma^i} \right\}^{n+1} = \\
& (\mathbf{w}, \mathbf{u}^n)_{\Omega^f} + (1 - \gamma) \Delta t (\mathbf{w}, \dot{\mathbf{u}}^n)_{\Omega^f}, \quad \forall (\mathbf{w}, q) \in \mathbf{V} \times \mathbf{Q}.
\end{aligned} \tag{112}$$

A aplicação das mesmas funções de aproximação e funções teste mencionadas em 2.4 na eq. (112), faz com que esta equação se torne “totalmente” discreta podendo ser escrita por

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\mathbf{M}}{\gamma \Delta t} \mathbf{u}^{n+1} + \{ \mathbf{C}(\mathbf{u}^{n+1}) + \mathbf{K}^* \} \mathbf{u}^{n+1} + \mathbf{G}^* \mathbf{p}^{n+1} = \mathbf{f}^{n+1} + \frac{\mathbf{M}}{\gamma \Delta t} \mathbf{u}^n + \\ (1 - \gamma) \mathbf{M} \dot{\mathbf{u}}^n + \mathbf{H} \bar{\mathbf{u}}^{n+1} \\ \gamma \\ (\mathbf{G}^*)^T \mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{D}^T \bar{\mathbf{u}}^{n+1} \end{array} \right. , \tag{113}$$

onde

$$\begin{aligned}
\mathbf{K}^* &= \mathbf{K} + \mathbf{B} + \mathbf{H}, \quad \mathbf{G}^* = \mathbf{G}_e + \mathbf{D}, \quad (\mathbf{G}^*)^T = \mathbf{G}_e^T + \mathbf{D}^T \text{ e} \\
\mathbf{H} &= \mathbf{B}^T + \mathbf{E} + \mathbf{F}.
\end{aligned} \tag{114}$$

As matrizes  $\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{H}$ ,  $\mathbf{D}$ ,  $\mathbf{E}$  e  $\mathbf{F}$ , são matrizes globais provenientes das integrais de contorno adicionadas à equação de Navier-Stokes devido a aplicação do método de Nitsche quando da imposição das condições de contorno em *Dirichlet*.  $\bar{\mathbf{u}}$  é o vetor global que reúne as condições de contorno em *Dirichlet* nas superfícies molhadas ( $\Gamma^i$ ). As matrizes locais, provenientes das matrizes globais supracitados, dos elementos de fluido cortados por  $\Gamma^i$ , são definidas por

$$\begin{aligned}
\mathbf{B}_e &= -\nu \int_{\Gamma_p^i} \mathbf{N}_u^T [\mathbf{N}_{u,i} (\mathbf{e}_i^T \mathbf{n})] d\Gamma_p^i, \quad \mathbf{B}_e^T = -\nu \int_{\Gamma_p^i} [\mathbf{N}_{u,i} (\mathbf{e}_i^T \mathbf{n})]^T \mathbf{N}_u d\Gamma_p^i, \\
\mathbf{D}_e &= \int_{\Gamma_p^i} [\mathbf{n}^T \mathbf{N}_u]^T \mathbf{N}_p d\Gamma_p^i, \quad \mathbf{D}_e^T = -\int_{\Gamma_p^i} \mathbf{N}_p^T [\mathbf{n}^T \mathbf{N}_u] d\Gamma_p^i, \\
\mathbf{E}_e &= \nu \frac{\alpha_1}{h} \int_{\Gamma_p^i} \mathbf{N}_u^T \mathbf{N}_u d\Gamma_p^i, \\
\mathbf{F}_e &= \frac{\alpha_2}{h} \int_{\Gamma_p^i} [\mathbf{n}^T \mathbf{N}_u]^T [\mathbf{n}^T \mathbf{N}_u] d\Gamma_p^i,
\end{aligned} \tag{115}$$

onde  $\Gamma_p^i$  é a área superficial sobre  $\Gamma^i$  formada pela interseção entre o elemento  $e$  de fluido e  $\Gamma^i$  (ver Figura 33).

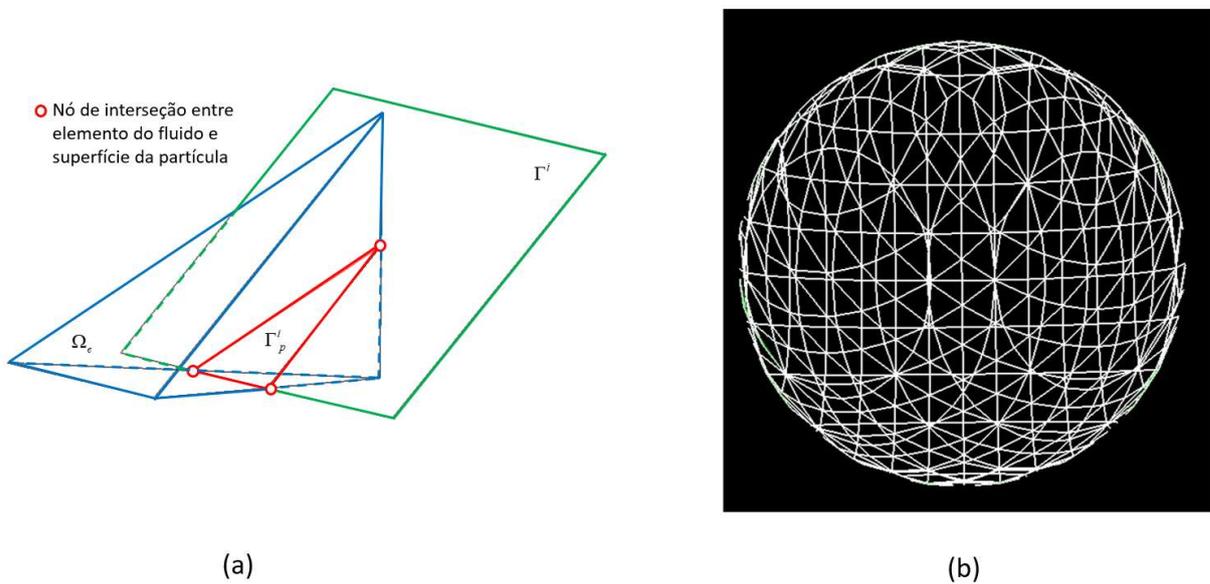


Figura 33: (a) Desenho esquemático ilustrando a área superficial utilizada nas integrações de contorno dos termos em (115); (b) Exemplo de interseções entre elementos de fluidos (tetraedros) e uma partícula (esférica).

O sistema de equações (113) pode ser reescrito na forma matricial como

$$\begin{bmatrix} \frac{\mathbf{M}}{\gamma \Delta t} + \{ \mathbf{C}(\mathbf{u}^{n+1}) + \mathbf{K}^* \} & \mathbf{G}^* \\ (\mathbf{G}^*)^T & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}^{n+1} \\ \mathbf{p}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}^{n+1} + \mathbf{g}(\bar{\mathbf{u}}^{n+1}, \mathbf{u}^n, \dot{\mathbf{u}}^n) \\ \mathbf{D}^T \bar{\mathbf{u}}^{n+1} \end{bmatrix}, \tag{116}$$

onde

$$\mathbf{g}(\bar{\mathbf{u}}^{n+1}, \mathbf{u}^n, \dot{\mathbf{u}}^n) = \mathbf{H} \bar{\mathbf{u}}^{n+1} + \frac{1}{\gamma \Delta t} \mathbf{M} \mathbf{u}^n + \frac{(1-\gamma)}{\gamma} \mathbf{M} \dot{\mathbf{u}}^n. \tag{117}$$

Com isso, a solução de um problema de interação fluido-partícula pode ser obtida

resolvendo os sistemas de equações (116) e (105). As grandes contribuições deste trabalho estão na forma como esse sistema é resolvido (ver seção 4.1.2 e capítulo 5). Importante ressaltar que as integrais de domínio do fluido ( $\Omega^f$ ) devem ser avaliadas apenas em  $\Omega^+$ . Para tanto, devido a malha do fluido ser considerada fixa ao longo do tempo, faz-se necessário identificar as possíveis formas de interseção entre uma superfície molhada  $\Gamma^i$  e um elemento de fluido  $e$  qualquer de forma a desconsiderar as integrações em  $\Omega^-$ . Neste aspecto, a utilização de elemento finito tetraédrico apresenta uma grande vantagem com relação ao elemento finito hexaédrico devido a facilidade de identificação e implementação computacional dos casos possíveis de interseções, principalmente quando da ocorrência de elementos com mais de uma interseção. Neste trabalho, as integrações realizadas em  $\Omega_e^f$  dos elementos cortados (ver Figura 33 (a)) são realizadas via células de integração, como detalhado em 4.1.3 e 5.1. Por este motivo, para simulações envolvendo fronteira imersa, optou-se pela utilização de elementos finitos mistos tetraédricos. Outra implicação importante quando se trata de fronteira imersa é a forma como as forças hidrodinâmicas (FH) são calculadas nas superfícies imersas. Este trabalho traz contribuições importante nesta área propondo uma metodologia alternativa para a sua obtenção tanto para sólidos imersos fixos como para os móveis. A seção 4.1.2 apresenta esta metodologia para os casos de sólidos imersos fixos, já a seção 5.2 apresenta a sua extensão para o caso geral, isto é, considerando os sólidos imersos móveis, incluindo os casos onde estes sólidos se encontram na iminência de colisões entre si ou em colisões com superfícies rígidas. Algumas figuras que ajudam a compreender a metodologia proposta são apresentadas no plano (isto é, de forma bidimensional) com o intuito de facilitar a compreensão do leitor, contudo, suas extrapolações para o espaço tridimensional são naturais.

#### ***4.1.2 Cálculo das ações do fluido na interface fluido-partícula***

As superfícies molhadas  $\Gamma^i$  são as regiões onde há a troca de informações entre o fluido e as partículas imersas (com  $i = 1, \dots, N_p$ ). Essa troca se dá por meio da transferência de forças hidrodinâmicas e seus respectivos momentos exercidos pelo fluido ao longo de  $\Gamma^i$  e a respectiva atualização da configuração de equilíbrio das partículas com suas respectivas velocidade, velocidade angular, posição e orientação espacial (rotação), como resposta. Então, as condições que precisam ser satisfeitas na superfície molhada podem ser escritas como

$$\mathbf{u}^f = \mathbf{u}^p \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma^i \quad (118)$$

e

$$\mathbf{T}^f \mathbf{n}^f = -\mathbf{T}^p \mathbf{n}^p \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma^i, \quad (119)$$

onde a equação (118) estabelece que as velocidades do fluido ( $\mathbf{u}^f$ ) e da partícula ( $\mathbf{u}^p$ ) devem ser iguais em  $\Gamma^i$  (condição cinemática de aderência). Já a equação (119) impõe o equilíbrio de forças em  $\Gamma^i$  (condição de equilíbrio).

A forma natural e mais utilizada na literatura para se calcular estas forças é por meio de

$$\mathbf{f}_{\Gamma^i} = \oint_{\Gamma^i} \mathbf{T} \mathbf{n} d\Gamma^i, \quad (120)$$

onde  $\mathbf{T}$  é o tensor de Cauchy dado por (5). A utilização de métodos baseados em penalidade, como é o caso do método de Nitsche, para a imposição das condições de contorno em *Dirichlet* pode ocasionar perturbações no campo de pressão na vizinhança de  $\Gamma^i$ , além do fato dessas condições de contorno serem impostas de forma fraca, tal que são válidas na média e não ponto a ponto. Consequentemente, a obtenção das FH pode ser severamente afetada. A metodologia proposta para superar esse problema tem inspiração no trabalho desenvolvido por Chadil et al. [136] que, basicamente, utiliza extrapolação de Lagrange de terceira ordem associada a interpolação de Taylor, também de terceira ordem, para estimar pressão e restrições viscosas na superfície  $\Gamma^i$ .

Inicialmente, tentou-se utilizar extrapolação de Lagrange de terceira ordem para obter os valores de pressão e do gradiente de velocidade ( $\nabla \mathbf{u}$ ) na superfície  $\Gamma^i$ . Porém, por se tratar de métodos de extrapolação polinomial, principalmente quando a ordem do polinômio é superior a dois, é sabido que os melhores resultados são obtidos para pontos mais próximos da vizinhança dos pontos de extrapolação (PE) devido ao fenômeno de Runge<sup>6</sup>. Em outras palavras, a utilização dessa técnica requer malha bastante densa próxima a superfície  $\Gamma^i$  de forma a reduzir a distância entre esta superfície e os PE. Com isso, devido a limitação de hardware, a proposta original de Chadil teve que ser adaptada. Então, o que se propõe é extrapolar linearmente os valores de pressão e do  $\nabla \mathbf{u}$  na região mais próxima de  $\Gamma^i$  cujos efeitos nocivos ao cálculo das FH pudessem ser minimizados. De acordo com Chadil esta região é da ordem do tamanho do elemento cortado ( $\Delta \mathbf{x}$ ) (ver Figura 34).

---

<sup>6</sup> Descoberto por Carl Runge (matemático alemão que viveu entre 1856 à 1927), esse fenômeno é um problema de oscilação nas bordas de um intervalo devido ao aumento do grau do polinômio interpolador. Ele percebeu que o erro de interpolação aumenta quando o grau do polinômio interpolador cresce.

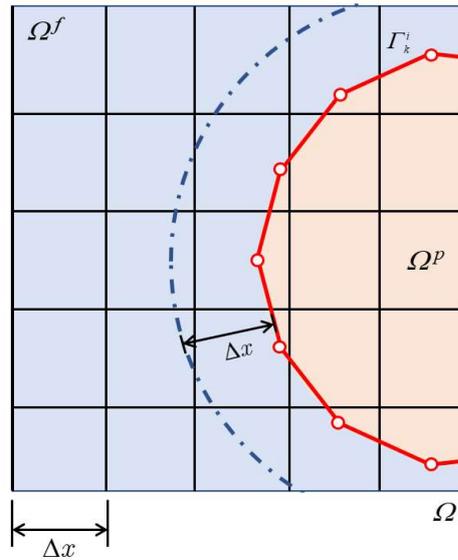


Figura 34: Região da vizinhança da superfície molhada sujeita a perturbações nos campos de pressão e velocidade.

Para tanto, cria-se uma malha Lagrangiana ( $\Gamma_k^i$ ) em cada  $\Gamma^i$  de forma a possibilitar a determinação dos pontos onde os valores de pressão e  $\nabla \mathbf{u}$  são calculados via extrapolação linear. Tais pontos ( $C_k^i$ ) estão localizados em cada centro geométrico de  $\Gamma_k^i$ . Então, as forças hidrodinâmicas e seus respectivos momentos em cada elemento  $\Gamma_k^i$  de uma partícula  $i$  qualquer podem ser obtidos por

$$\mathbf{f}_{\Gamma_k^i} = \oint_{\Gamma_k^i} \mathbf{T} n d\Gamma_k^i, \quad (121)$$

e

$$\mathbf{m}_{\Gamma_k^i} = \mathbf{r}_k^i \times \mathbf{f}_{\Gamma_k^i}, \quad (122)$$

onde  $\mathbf{r}_k^i$  é o raio vetor da partícula  $i$  que sofre a ação de  $\mathbf{f}_{\Gamma_k^i}$ , isto é, é o vetor cuja magnitude é a distância entre o centro da partícula  $i$  e o ponto  $C_k^i$  pertencente ao elemento  $\Gamma_k^i$ .

Por se tratar de extrapolação linear, apenas dois PE são requeridos para o cálculo de FH, que, no geral, estão espaçados de  $\Delta x$ . De forma geral, a expressão para o cálculo das variáveis de pressão e das componentes do  $\nabla \mathbf{u}$  nos pontos  $C_k^i$  é dada por

$$a_{C_k^i} = a_{PE1} - (a_{PE2} - a_{PE1}) \frac{d_1}{d_2}, \quad (123)$$

onde  $a_{PE1}$  e  $a_{PE2}$  são os valores das variáveis no primeiro (PE1) e no segundo (PE2) ponto de extrapolação, respectivamente. Já  $d_1$  e  $d_2$  são as distâncias entre  $C_k^i$  e PE1 e, PE1 e PE2, respectivamente. A direção de busca da localização dos PE é a mesma utilizada por Chadil, ou seja, a direção do vetor normal ( $\mathbf{n}$ ) partindo de  $C_k^i$ . O valor de  $\Delta \mathbf{x}$  é determinado pela média dos tamanhos de todos os elementos cortados por  $\Gamma^i$ . Já o tamanho de um elemento é obtido pela média dos comprimentos de todas as arestas deste elemento finito. É importante observar que, na esmagadora maioria dos casos, os PE estão localizados dentro de algum  $\Omega_e^f$  tendo, portanto, os valores de pressão e  $\nabla \mathbf{u}$  desconhecidos. O valor de pressão em um ponto de extrapolação qualquer ( $p_{pe}$ ) é calculado via as próprias funções de interpolação do elemento finito dado por

$$p_{pe} = \mathbf{N}_p \mathbf{p}_{pe}, \quad (124)$$

onde  $\mathbf{p}_{pe}$  são os valores nodais de pressão do elemento finito onde o ponto de extrapolação se encontra. Já o valor do gradiente de velocidade em um ponto de extrapolação qualquer ( $\nabla \mathbf{u}_{pe}$ ) é calculado por

$$\nabla \mathbf{u}_{pe} = (\mathbf{N}_{u,i} \mathbf{u}_{pe}) \otimes \mathbf{e}_i, \quad (125)$$

onde  $\mathbf{u}_{pe}$  são os valores nodais de velocidade do elemento finito onde o ponto de extrapolação se encontra. A Figura 35 mostra um esquema da metodologia proposta.

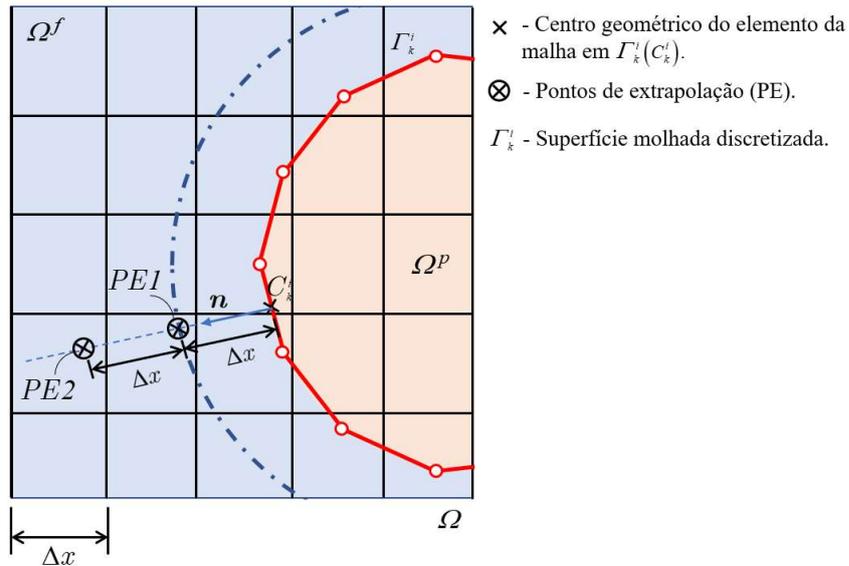


Figura 35: Esquema para obtenção dos pontos cujos valores de pressão e  $\nabla \mathbf{u}$  são extrapolados.

Com os valores de pressão e  $\nabla \mathbf{u}$  calculados em  $\Gamma_k^i$ , utiliza-se a equação (121) e (122) para obter as FH no centro  $C_k^i$  de cada elemento  $\Gamma_k^i$  e os seus respectivos momentos em cada direção. As resultantes, tanto em força como em momento, em cada direção são obtidas através das expressões,

$$\mathbf{f}_R = \sum_{k=1}^{nel\Gamma} \mathbf{f}_{\Gamma_k^i} \quad \text{e} \quad \mathbf{m}_R = \sum_{k=1}^{nel\Gamma} \mathbf{m}_{\Gamma_k^i}, \quad (126)$$

respectivamente, onde  $nel\Gamma$  é o número de elementos da malha Lagrangiana associada a uma partícula qualquer.

### 4.1.3 Elementos de fluido com cortes simples

A utilização de técnicas que descrevem o fluido de forma Euleriana, como tipicamente acontece nos métodos de fronteira imersa, possibilita que a malha utilizada para representar o problema fluido seja invariável com as interações. Isso resulta, na maioria das vezes, em nós não coincidentes entre a malha do fluido e a malha da partícula. Desta forma, a aplicação das condições de contorno de forma forte, como é comum em análise convencional de fluido, torna-se impossibilitada. Portanto, o cálculo das integrais de domínio e de contorno do sistema de equações (116), na região onde estes elementos são cortados, necessita de uma atenção especial. Isso se deve ao fato de, nesse caso, parte de  $\Omega_e^f$  estar contido em  $\Omega^+$  (com significado físico)

e outra parte em  $\Omega^-$  (sem significado físico). Nesta seção é abordado o caso de elementos com “corte simples” (CS), ou seja, elementos que tem seu domínio  $\Omega_e^f$  particionado por uma única superfície molhada  $\Gamma^i$  (ver Figura 36). O caso de elementos em “corte duplo” (CD) é abordado e discutido em 5.1. Elementos com cortes múltiplos (acima de dois cortes) não são abordados neste trabalho pois, devido a necessidade da utilização de uma malha densa próxima a  $\Gamma^i$ , esses casos são impossíveis de ocorrer devido a geometria esférica dos sólidos imersos utilizados neste trabalho.

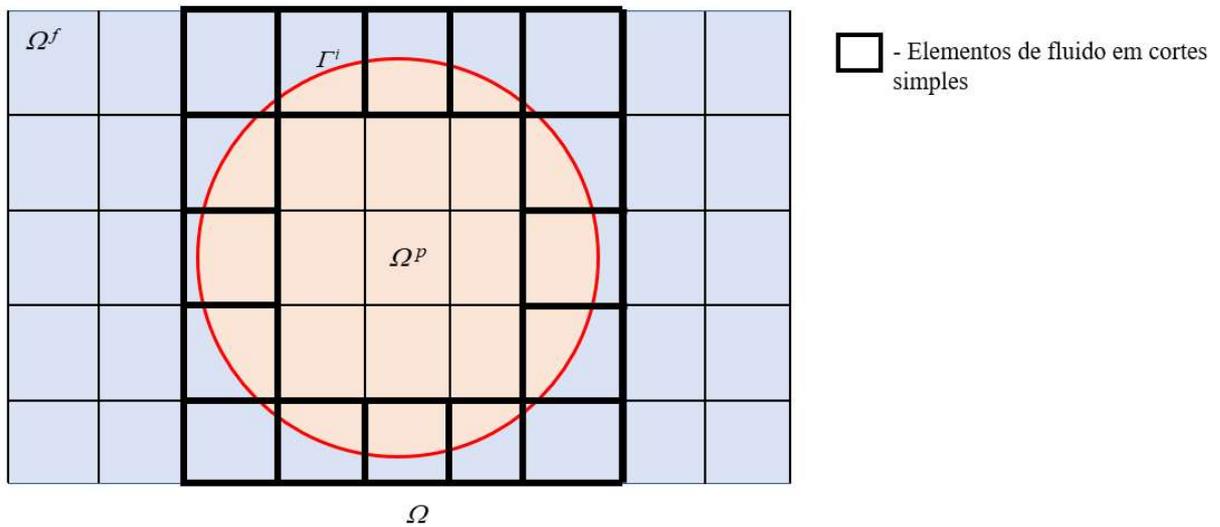


Figura 36: Elementos de fluido com “cortes simples” (CS).

A forma escolhida para tratar as integrações de um elemento com CS, seja de domínio ou contorno, foi a subdivisão da região pertencente a  $\Omega^+$  destes elementos em células de integração, evitando-se assim o uso de funções de enriquecimento que promoveriam a descontinuidade nos campos de velocidade e pressão desses elementos. Neste trabalho optou-se em se utilizar também tetraedros para a decomposição dessas regiões devido a sua simplicidade. Da Figura 37 à Figura 39 apresentam as três formas (casos) possíveis mapeadas de decomposição dessas regiões para CS.

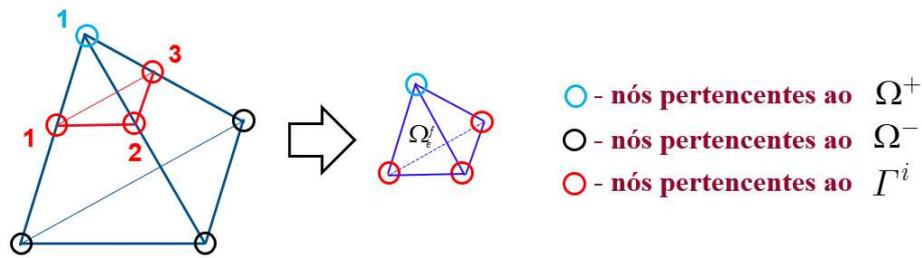


Figura 37: Decomposição do domínio em células de integração para o elemento de fluido com CS (caso 01).

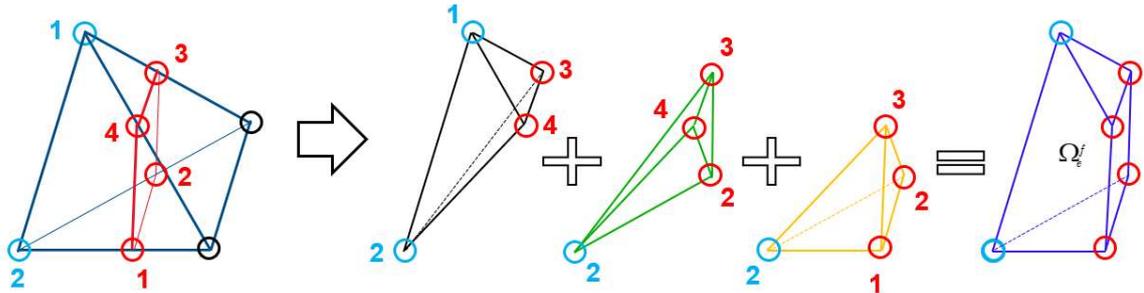


Figura 38: Decomposição do domínio em células de integração para o elemento de fluido com CS (caso 02).

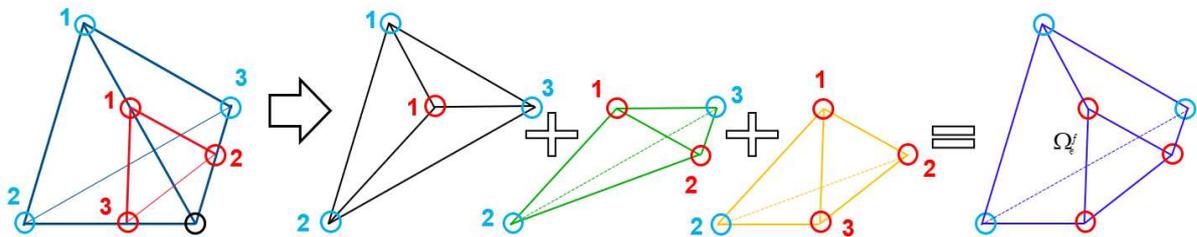


Figura 39: Decomposição do domínio em células de integração para o elemento de fluido com CS (caso 03).

Após a decomposição dos elementos cortados em células de integração, suas integrais de volume, na parte do domínio pertencente ao fluido, são computadas pelo esquema convencional do MEF para cada célula de integração, isto é, pela integração numérica de Gauss. Para tanto, os pontos de integração (pontos de Gauss) são mapeados ao longo do domínio de cada célula. A integração, de cada célula, é então realizada utilizando os valores nodais de velocidade e pressão provenientes dos próprios elementos cortados. No final, soma-se as matrizes locais resultante das integrações em cada célula para se obter, então, a integração de cada elemento cortado. As integrais nas superfícies imersas são computadas mapeando os seus pontos de integração ao longo dos domínios de suas superfícies planas, que podem ser triangulares (para os casos 01 e 03) ou quadrangulares (caso 02), e considerando os valores nodais de velocidade e pressão dos respectivos elementos cortados.

## 4.2 Exemplos numéricos

Nesta seção, o método de Nitsche aplicado a equação de Navier-Stokes utilizando fronteira imersa é avaliado. Esta formulação está implementada no código único próprio desenvolvido neste trabalho. Para tanto, são apresentados exemplos de problemas estacionários e transientes de escoamento de fluidos com a presença de corpos imersos governados pelo sistema de equações (116). Para os exemplos a seguir, os corpos imersos são considerados fixos. Os resultados serão comparados com aqueles provenientes de análise convencional de fluido (referência), isto é, de simulação com aplicação das condições de contorno de forma forte tradicional. Para todos os exemplos a tolerância utilizada para se admitir a convergência do problema não linear nas iterações do método de Newton foi de  $TOL = 10^{-6}$ .

### 4.2.1 Estudo de escolha da malha e dos parâmetros de penalidade: escoamento em torno de uma partícula fixa

Este exemplo simples consiste no escoamento de fluido por meio de um canal estreito e curto que contém uma partícula esférica fixa governado pela equação de Stokes (regime permanente). As características geométricas do problema, bem como os parâmetros utilizados são apresentados na Figura 40 e Tabela 14, respectivamente. A discretização da superfície molhada (malha Lagrangiana) da partícula é ilustrada pela Figura 41. O propósito deste exemplo simples é de avaliar a acurácia dos resultados devido:

- Ao refinamento da malha do fluido na vizinhança da superfície molhada e;
- A variação dos parâmetros de penalidade ( $\alpha_1$  e  $\alpha_2$ ).

O nível de refinamento da malha é designado pela razão entre o diâmetro da partícula ( $d$ ) e o tamanho médio do elemento ( $h$ ), por exemplo,  $D_5$  significa que  $d/h = 5$ . Essa designação é mantida ao longo de todo este texto. O perfil de velocidade aplicado na entrada do canal é dado pela equação (46) com  $U_m = 1,0$  m/s e  $H = 0,2$  m o que resulta em um número de Reynolds  $Re = 100$ . A notação das componentes de velocidade adotada é  $(u_1, u_2, u_3) = (U, V, W)$  e a condição de contorno aplicada na saída do canal é a de tensão zero.

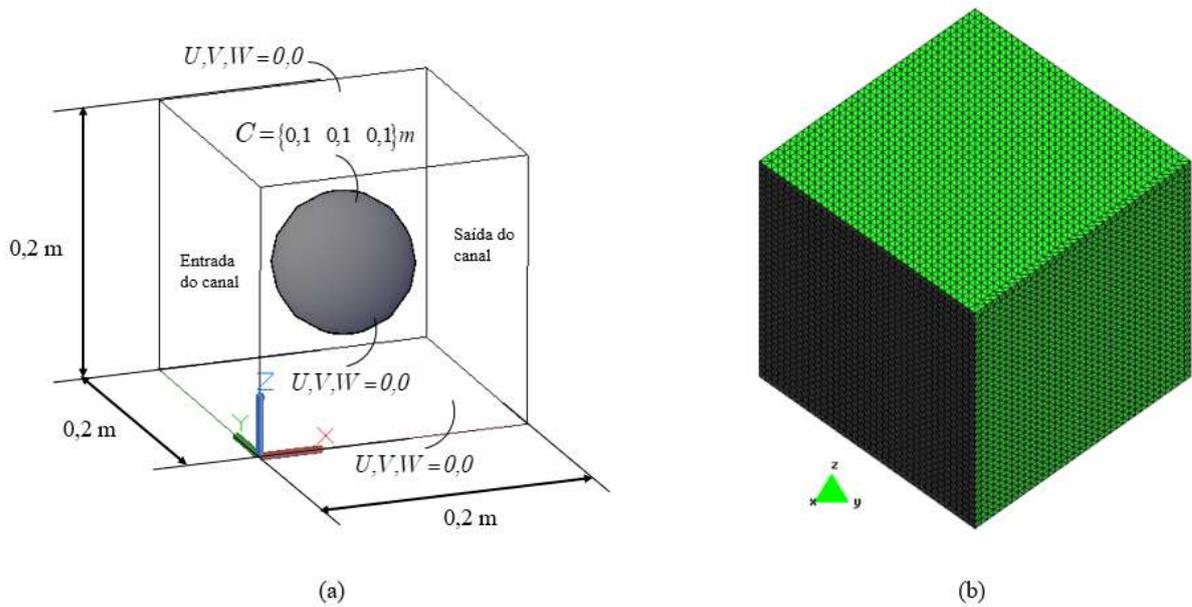


Figura 40: (a) Geometria e condições de contorno do exemplo 4.2.1; (b) Malha de elementos finitos usada no exemplo 4.2.1 (158057 elementos finitos tetraedros mistos com 213992 nós) para malha  $D_{17,5}$ .

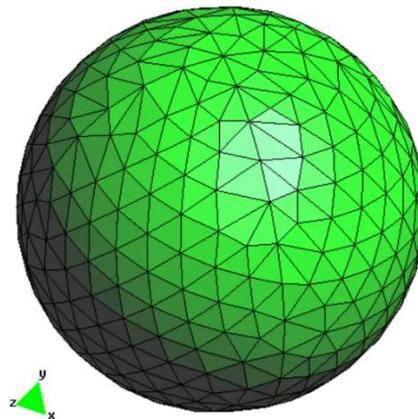


Figura 41: Malha Lagrangiana usada no exemplo 4.2.1 (780 elementos triangulares com 392 nós).

| Parâmetros da análise       |                 |
|-----------------------------|-----------------|
| $\rho$ (kg/m <sup>3</sup> ) | 1,0             |
| $\nu$ (m <sup>2</sup> /s)   | 0,001           |
| $U_m$ (m/s)                 | 1,0             |
| $d$ (cm)                    | 10              |
| Re                          | 100             |
| $\alpha_1 = \alpha_2$       | $10^3$ à $10^9$ |

Tabela 14: Parâmetros utilizados no exemplo 4.2.1.

A Figura 42 e Figura 43 apresentam as isocurvas de velocidade e pressão, respectivamente, obtidos para este exemplo (malha  $D_{17,5}$ ). Observa-se que, para o campo de velocidade, há uma excelente concordância com relação à referência. Para o campo de pressão, há uma pequena diferença nos valores de pressão próximos da superfície molhada. Isso pode

ser devido a uma deficiência do pós-processador utilizado neste trabalho (Gid) que não realiza a interpolação nesta região de maneira correta. Além disso, o método de Nitsche, por ser um método baseado em penalidade, pode causar pequenas perturbações locais no campo de pressão nos elementos cortados, contribuindo, portanto, com esta diferença nos resultados. A Tabela 15 apresenta os coeficientes de sustentação e de arrasto obtidos para diversas configurações de nível de refinamento de malha e de valores para os coeficientes de penalidades. Este exemplo mostra que, para o coeficiente de arrasto, o nível mínimo de refinamento de malha aceitável é o  $D_5$  quando comparado com o valor de referência (Tabela 16). Ainda a respeito ao coeficiente  $C_D$ , o seu valor varia muito pouco entre os níveis  $D_{7,5}$  à  $D_{17,5}$ , também com relação a referência. Isso mostra que, para este coeficiente, o nível de refinamento da ordem de  $D_5$  já se obtêm valores aceitáveis. Com relação ao coeficiente de sustentação, teoricamente, deveria ter o seu valor muito próximo de zero devido a partícula estar posicionada no centro do canal. Isso é observado (Tabela 16) com o seu valor calculado pela referência (na ordem de  $10^{-4}$ ). Os valores deste coeficiente, para todos os níveis de refinamento de malha, calculados pelo método proposto estão distantes dos valores de referência (na ordem de  $10^{-2}$ ). Isso mostra a dificuldade de se obter bons resultados para este coeficiente, principalmente quando este tende numericamente a zero, mesmo com malhas bastante refinadas. Uma das causas dessa diferença de resultado pode ser a geometria da partícula imersa (esférica), da dificuldade inerente de se aplicar as condições de contorno de forma fraca e da própria aproximação resultante da utilização de método numérico.

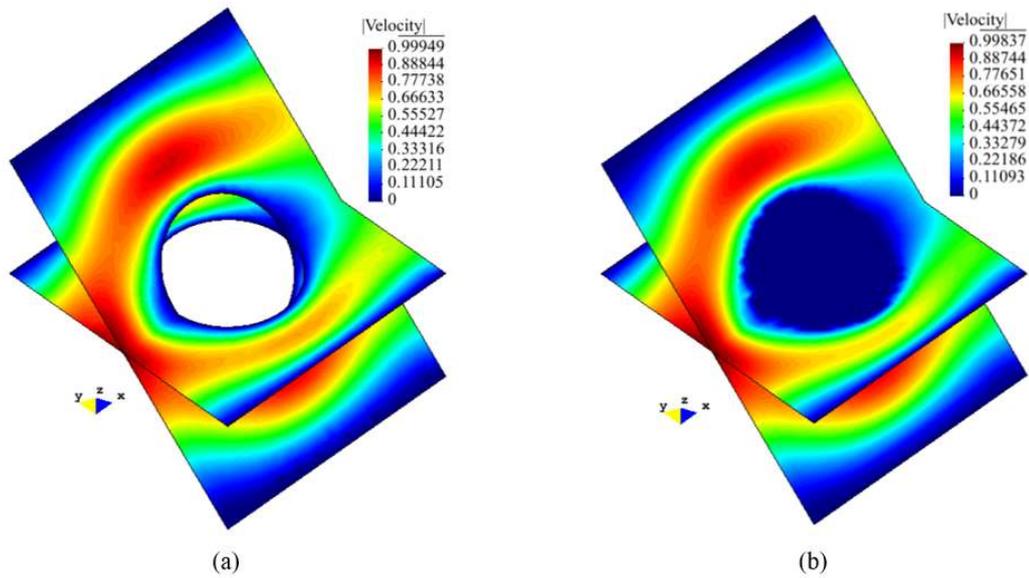


Figura 42: Resultados para a malha  $D_{17,5}$  e  $\alpha_1 = \alpha_2 = 10^5$ ; (a) Isocurvas de velocidade (modelagem convencional); (b) Isocurvas de velocidade (com fronteira imersa).

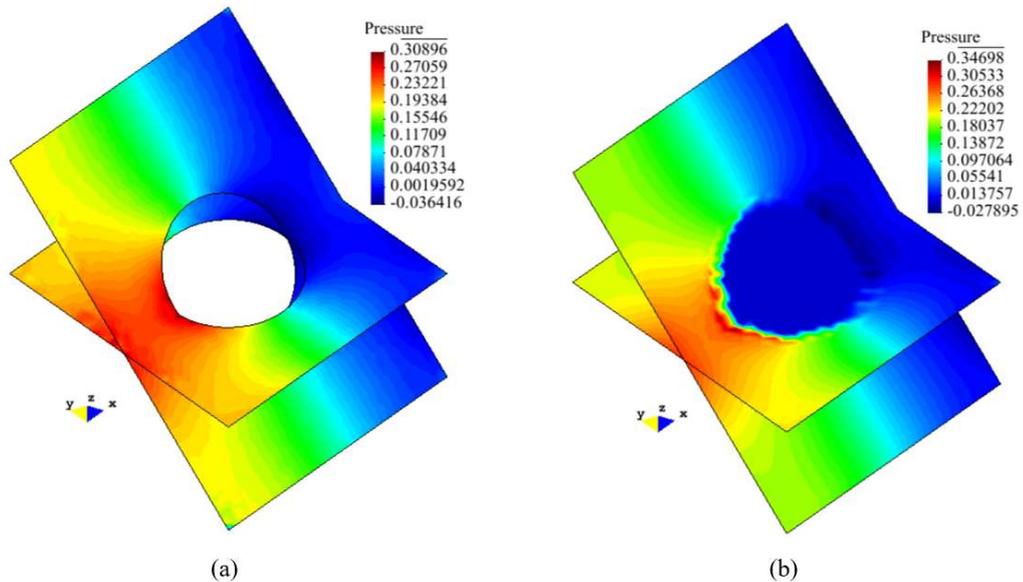


Figura 43: Resultados para a malha  $D_{17,5}$  e  $\alpha_1 = \alpha_2 = 10^5$ ; (a) Isocurvas de pressão (modelagem convencional); (b) Isocurvas de pressão (com fronteira imersa).

Outro aspecto importante apresentado pela Tabela 15 é como a definição dos valores de  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  influenciam diretamente na obtenção dos coeficientes de sustentação e arrasto. Para o exemplo em estudo, observa-se que para valores entre  $10^4$  à  $10^6$  obteve-se os melhores resultados. Ao longo de diversas simulações realizadas durante o desenvolvimento deste

trabalho, para diferentes níveis de refinamento de malha e quantidade de partículas imersas, observou-se que, de fato, para sólidos imersos esféricos, valores de  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  entre  $10^4$  à  $10^7$  geralmente acarreta na obtenção de bons resultados.

| $(\alpha_1 = \alpha_2)^*$ | D <sub>2,5</sub> |                | D <sub>5</sub>    |                   | D <sub>7,5</sub>  |                   | D <sub>10</sub>   |                   | D <sub>15</sub>   |                   | D <sub>17,5</sub> |                   |
|---------------------------|------------------|----------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|
|                           | C <sub>L</sub>   | C <sub>D</sub> | C <sub>L</sub>    | C <sub>D</sub>    | C <sub>L</sub>    | C <sub>D</sub>    | C <sub>L</sub>    | C <sub>D</sub>    | C <sub>L</sub>    | C <sub>D</sub>    | C <sub>L</sub>    | C <sub>D</sub>    |
| 10 <sup>3</sup>           | 7,3695E-02       | 1,8392E-01     | 3,6287E-02        | 5,6993E-01        | 5,6086E-02        | 6,4371E-01        | 6,1461E-02        | 7,1318E-01        | 2,1533E-02        | 8,4289E-01        | 3,9131E-02        | 8,2829E-01        |
| 10 <sup>4</sup>           | 7,2391E-02       | 2,3177E-01     | 3,6453E-02        | 6,5826E-01        | 5,9350E-02        | 7,0669E-01        | 5,9896E-02        | 7,5242E-01        | <b>2,1550E-02</b> | <b>8,8409E-01</b> | 4,7919E-02        | 8,5793E-01        |
| 10 <sup>5</sup>           | 7,1307E-02       | 2,9906E-01     | 3,7171E-02        | 7,6936E-01        | 5,2993E-02        | 7,8710E-01        | 5,0766E-02        | 8,0369E-01        | 1,8360E-02        | 9,0403E-01        | <b>5,0748E-02</b> | <b>8,8324E-01</b> |
| 10 <sup>6</sup>           | 1,0107E-01       | 3,4604E-01     | <b>4,4395E-02</b> | <b>8,9146E-01</b> | <b>4,6796E-02</b> | <b>8,8287E-01</b> | <b>3,9928E-02</b> | <b>8,8209E-01</b> | 1,8318E-02        | 9,3993E-01        | 4,4998E-02        | 9,2008E-01        |
| 10 <sup>7</sup>           | 1,1254E-01       | 3,5853E-01     | 4,1164E-02        | 1,0132E+00        | 4,3263E-02        | 9,6456E-01        | 4,0442E-02        | 9,2604E-01        | 2,6643E-02        | 9,6470E-01        | 3,5187E-02        | 9,5671E-01        |
| 10 <sup>8</sup>           | 1,3199E-01       | 3,7901E-01     | 3,4362E-02        | 1,1108E+00        | 4,2495E-02        | 1,0138E+00        | 4,5905E-02        | 9,5962E-01        | 2,8355E-02        | 9,7929E-01        | 3,2691E-02        | 9,7389E-01        |
| 10 <sup>9</sup>           | 1,4852E-01       | 3,8714E-01     | 3,2831E-02        | 1,1729E+00        | 4,3431E-02        | 1,0353E+00        | 4,7471E-02        | 9,7990E-01        | 2,7758E-02        | 9,7994E-01        | 3,2904E-02        | 9,7796E-01        |

\* Ordem de grandeza dos coeficientes de penalidade

Tabela 15: Valores dos coeficientes de sustentação (C<sub>L</sub>) e arrasto (C<sub>D</sub>) para diversos níveis de refinamento de malha e valores de  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$ .

|            | C <sub>L</sub> | C <sub>D</sub> |
|------------|----------------|----------------|
| Referência | 5,4097E-04     | 8,8117E-01     |

Tabela 16: Valores de referência dos coeficientes de sustentação (C<sub>L</sub>) e arrasto (C<sub>D</sub>), exemplo 4.2.1.

Importante ressaltar que esse breve estudo não tem a pretensão de ser conclusivo com relação a escolha dos valores de  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$ . O autor deste trabalho encoraja estudos mais aprofundados, inclusive com fundamentos matemáticos, para a escolha ideal desses coeficientes. No entanto, este estudo serve para orientar, mesmo que minimamente, a escolha desses parâmetros para este trabalho, visto que seu estudo mais aprofundado não é objeto deste trabalho.

#### 4.2.2 Escoamento em torno de duas partículas fixas

Este exemplo consiste em um problema transiente de escoamento de fluido por meio de um canal estreito que contém duas partículas esféricas fixas. As características geométricas bem como a malha utilizada neste exemplo podem ser observadas na Figura 44 e Figura 45.

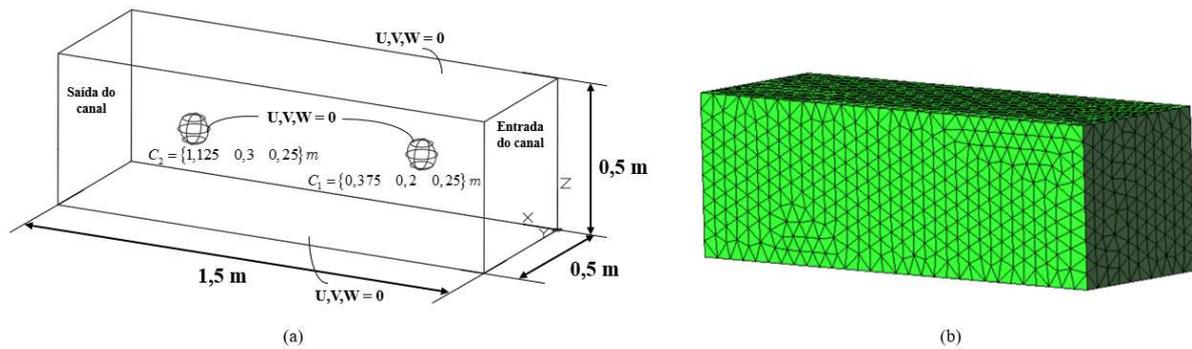


Figura 44: (a) Geometria e condições de contorno do exemplo 4.2.2; (b) Malha de elementos finitos usada no exemplo 4.2.2 (158057 elementos finitos tetraedros mistos com 213992 nós).

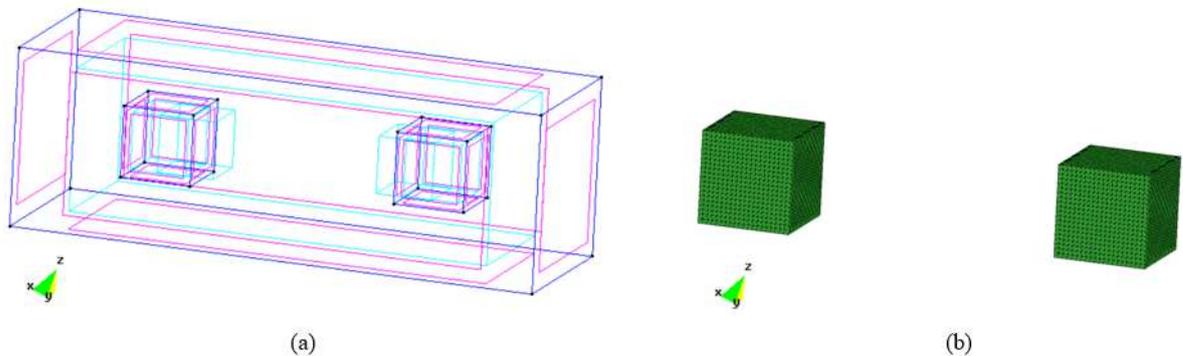


Figura 45: Detalhe da malha no em torno das partículas; (a) Modelagem da geometria no Gid; (b) Refinamento da malha na região das partículas ( $D_{10}$ );

O perfil de velocidade aplicado na entrada do canal de forma incremental entre os instantes  $0 \text{ s} \leq t \leq 4,0 \text{ s}$ , é o mesmo da equação (46) com  $U_m = 1,0 \text{ m/s}$  e  $H = 0,5 \text{ m}$ . A notação das componentes de velocidade adotada é a mesma do exemplo 2.6.1 e a condições de contorno aplicada na saída do canal é de tensão zero. Os parâmetros da análise utilizado neste exemplo são apresentados na Tabela 17.

| Parâmetros da análise           |                   |
|---------------------------------|-------------------|
| $d_{p1} = d_{p2}$ (cm)          | 10,0              |
| $u_0$ (m/s)                     | 0,0               |
| $\rho$ ( $\text{kg/m}^3$ )      | 1,0               |
| $\nu$ ( $\text{m}^2/\text{s}$ ) | 0,001             |
| $U_m$ (m/s)                     | 1,0               |
| Intervalo de tempo (s)          | $0 \leq t \leq 4$ |
| Integração temporal             | Newmark           |
| $\alpha_1 = \alpha_2$           | $10^4$            |
| $\Delta t$ (s)                  | 0,01              |

Tabela 17: Parâmetros utilizados no exemplo 4.2.2.

A Figura 46 e Figura 47 mostram os resultados obtidos para os campos de velocidade e pressão, respectivamente. Observa-se uma boa concordância nos resultados de velocidade com relação a referência. Os resultados de pressão apresentam uma pequena diferença nos seus valores com relação a referência, semelhante ao observado em 4.2.1. Uma forma de minimizar esses efeitos é a escolha adequada dos parâmetros de penalidade ( $\alpha_1$  e  $\alpha_2$ ), visto a sua influência direta na melhoria não só dos resultados dos campos de velocidade e pressão, como também na obtenção das forças hidrodinâmicas na interface fluido-partícula, como discutido em 4.2.1.

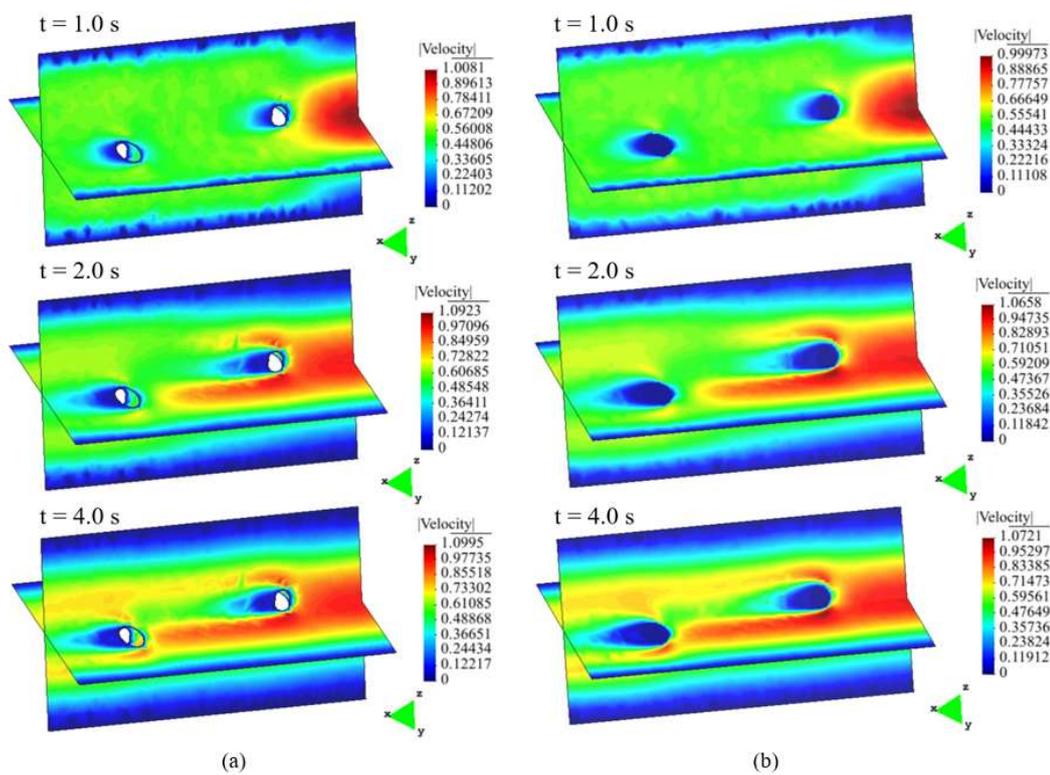


Figura 46: (a) Isocurvas de velocidade (modelagem convencional); (b) Isocurvas de velocidade (com fronteira imersa).

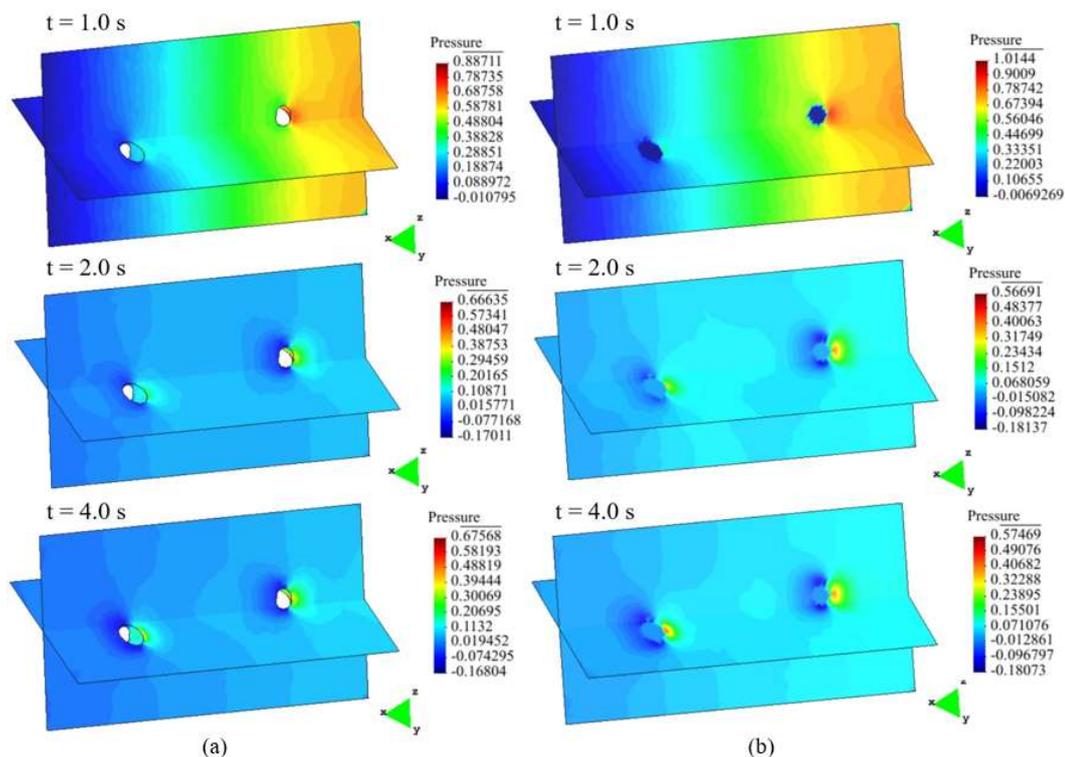


Figura 47: (a) Isocurvas de pressão (modelagem convencional); (b) Isocurvas de pressão (com fronteira imersa).

### 4.2.3 Escoamento em torno de um cilindro

Este exemplo é similar ao 2.6.2 a menos de o cilindro ter sido considerado como um corpo imerso. Dois cenários de análise são considerados neste exemplo como descrito a seguir.

- Cenário 1: Escoamento em torno de um cilindro em regime permanente tendo o fluido governado pela equação de Navier-Stokes. O objetivo deste cenário é avaliar a acurácia dos resultados, obtidos pelo método proposto, para dois níveis de refinamento da malha ( $D_{7,5}$  e  $D_{10}$ ) na vizinhança do cilindro além da variação dos parâmetros de penalidade;
- Cenário 2: Escoamento em torno de um cilindro em regime transiente tendo o fluido governado pela equação de Navier-Stokes. Já este cenário tem o objetivo de avaliar a acurácia do método proposto para um problema dependente do tempo, variando os coeficientes de penalidades entre  $10^3$  à  $10^7$  (malha  $D_{7,5}$ ).

Os parâmetros da análise e a geometria do problema são, novamente, apresentados na Figura 48 e Tabela 18 de ambos os cenários para facilitar o acompanhamento do leitor. A Figura 50 apresenta a malha Lagrangiana utilizada neste exemplo. A malha Euleriana ( $D_{7,5}$ ) considerada é ilustrada na Figura 49.

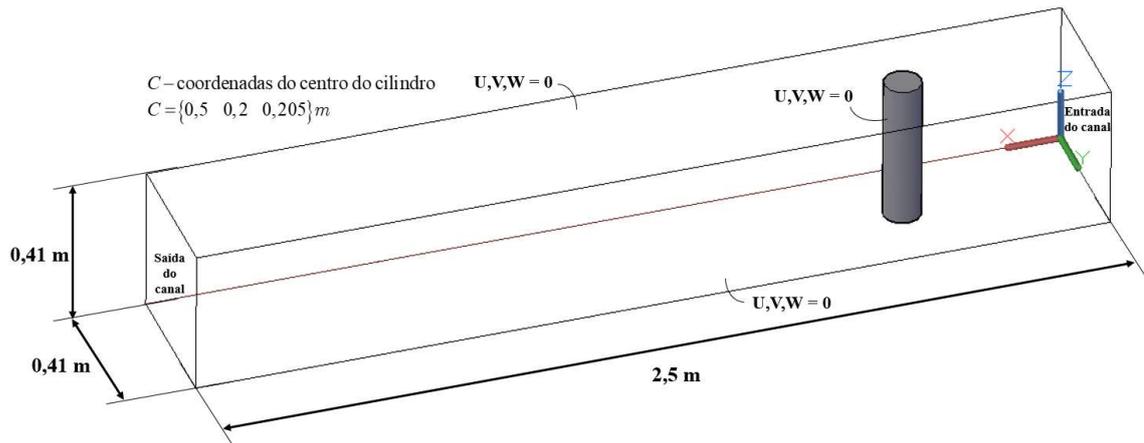


Figura 48: Desenho esquemático do exemplo 4.2.3 para os cenários 1 e 2.

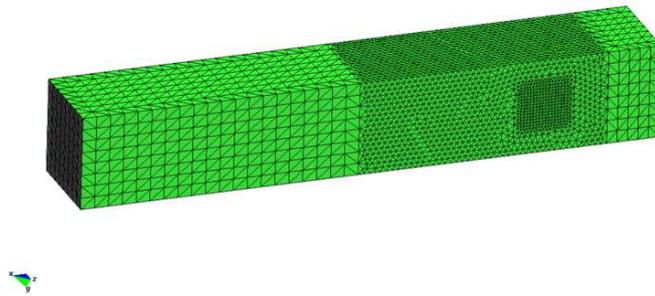


Figura 49: Malha de elementos finitos 3D utilizada no exemplo 4.2.3 (158082 elementos finitos tetraedros mistos com 220324 nós),  $D_{7,5}$ .

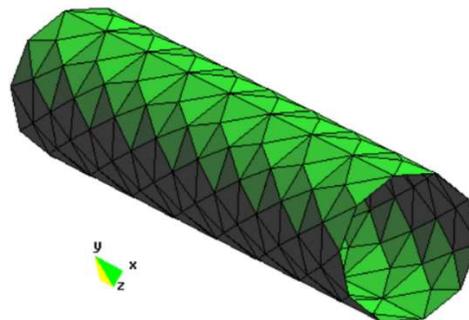


Figura 50: Malha Lagrangiana usada no exemplo 4.2.3 (320 elementos triangulares com 170 nós) para os cenários 1 e 2.

| Cenário 1                   |                    | Cenário 2                   |                     |
|-----------------------------|--------------------|-----------------------------|---------------------|
| Parâmetros da análise       |                    | Parâmetros da análise       |                     |
| $\rho$ (kg/m <sup>3</sup> ) | 1                  | $\rho$ (kg/m <sup>3</sup> ) | 1                   |
| $\nu$ (m <sup>2</sup> /s)   | 0,001              | $\nu$ (m <sup>2</sup> /s)   | 0,001               |
| $U_m$ (m/s)                 | 0,45               | $U_m$ (m/s)                 | 2,25                |
| Re                          | 20                 | Re                          | 100                 |
| $\alpha_1 = \alpha_2$       | $10^2$ à $10^{10}$ | Intervalo de tempo (s)      | $0 \leq t \leq 3,5$ |
|                             |                    | $\alpha_1 = \alpha_2$       | $10^4$ à $10^7$     |
|                             |                    | $u_0$ (m/s)                 | 0                   |
|                             |                    | Integração temporal         | Newmark             |
|                             |                    | $\Delta t$ (s)              | 0,005               |

Tabela 18: Parâmetros utilizados no exemplo 4.2.3 para os cenários 1 e 2.

A Tabela 19 apresenta os resultados obtidos para o cenário 1 referentes aos coeficientes de arrasto e sustentação. No que diz respeito aos resultados para a malha  $D_{7,5}$ , esta apresenta bons resultados associados ao coeficiente de arrasto,  $C_D$ , para valores de  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  na ordem de  $10^7$ . Com relação ao coeficiente de sustentação,  $C_L$ , observa-se um descolamento de seus valores com relação a referência. Isso pode ser explicado devido a este ter seu valor, praticamente, nulo para este exemplo o que acarreta imprecisão numérica em sua obtenção, principalmente, quando da utilização de métodos baseados em fronteira imersa. Uma das formas de melhorar os resultados para este coeficiente é aumentar o nível de refinamento da malha na vizinhança do cilindro, como apresenta a malha  $D_{10}$ . Para esta malha ( $D_{10}$ ), observa-se uma melhora significativa nos resultados para ambos os coeficientes para valores de  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  entre  $10^7$  à  $10^{10}$ .

| $(\alpha_1 = \alpha_2)^*$ | $D_{7,5}$     |               | $D_{10}$      |               |
|---------------------------|---------------|---------------|---------------|---------------|
|                           | $C_L$         | $C_D$         | $C_L$         | $C_D$         |
| $10^2$                    | 0,1778        | 4,4046        | -0,0685       | 4,9319        |
| $10^3$                    | 0,3239        | 4,7895        | -0,0042       | 5,1932        |
| $10^4$                    | 0,3906        | 5,1454        | -0,0195       | 5,4354        |
| $10^5$                    | 0,4636        | 5,5839        | -0,0577       | 5,6906        |
| $10^6$                    | 0,5876        | 5,9545        | -0,0389       | 5,9390        |
| $10^7$                    | <b>0,7161</b> | <b>6,0809</b> | <b>0,0118</b> | <b>6,0813</b> |
| $10^8$                    | 0,8138        | 6,0030        | <b>0,0250</b> | <b>6,1034</b> |
| $10^9$                    | 0,8657        | 5,9357        | <b>0,0172</b> | <b>6,1093</b> |
| $10^{10}$                 | 0,8751        | 5,9236        | <b>0,0123</b> | <b>6,1167</b> |
| [Schäfer e Turek]         | LS**          |               | 0,0100        | 6,2500        |
|                           | LI***         |               | 0,0080        | 6,0500        |

\* Ordem de grandeza dos coeficientes de penalidade

\*\* - Limite superior; \*\*\* - Limite inferior.

Tabela 19: Valores dos coeficientes de sustentação ( $C_L$ ) e arrasto ( $C_D$ ) para dois níveis de refinamento de malha e valores de  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$ .

A Figura 51 e Figura 52 ilustram os resultados obtidos para os campos de velocidade e pressão, respectivamente, para o cenário 2. O gráfico da Figura 53 apresenta a variação do coeficiente de arrasto para o modelo de referência e o modelo com fronteira imersa. Observa-se uma boa concordância do coeficiente de arrasto obtido via fronteira imersa com relação a referência (cerca de 3,8% de erro relativo) para  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  na ordem de  $10^4$ . Para outros valores de  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  há uma piora significativa nos resultados. Já os resultados obtidos para o coeficiente de sustentação, valores de  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  na ordem de  $10^3$  apresentam os melhores resultados. Os resultados mostram como os coeficientes  $C_D$  e  $C_L$  são sensíveis ao refinamento da malha e aos valores atribuídos aos coeficientes de penalidade, o que requer um estudo mais aprofundado.

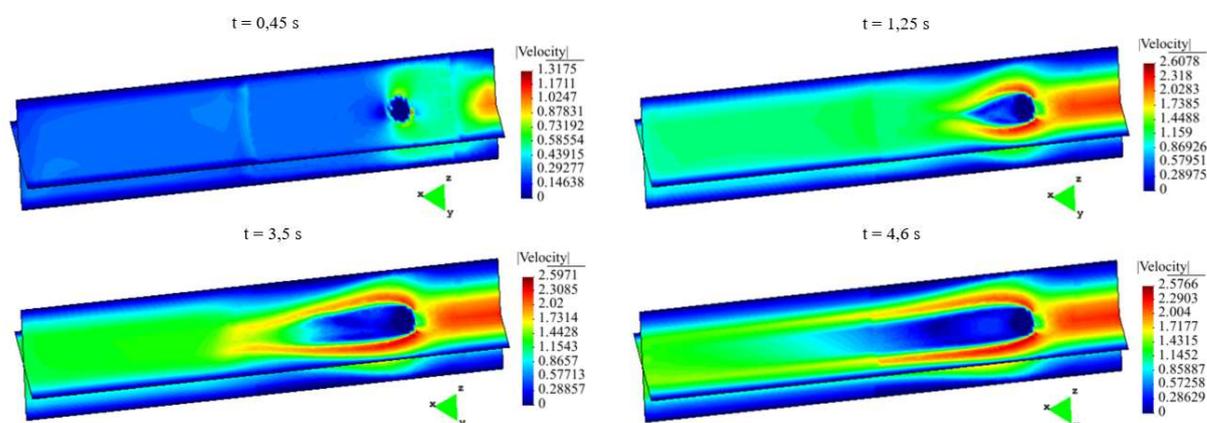


Figura 51: Isocurvas de velocidade do exemplo 4.2.3 (com fronteira imersa).

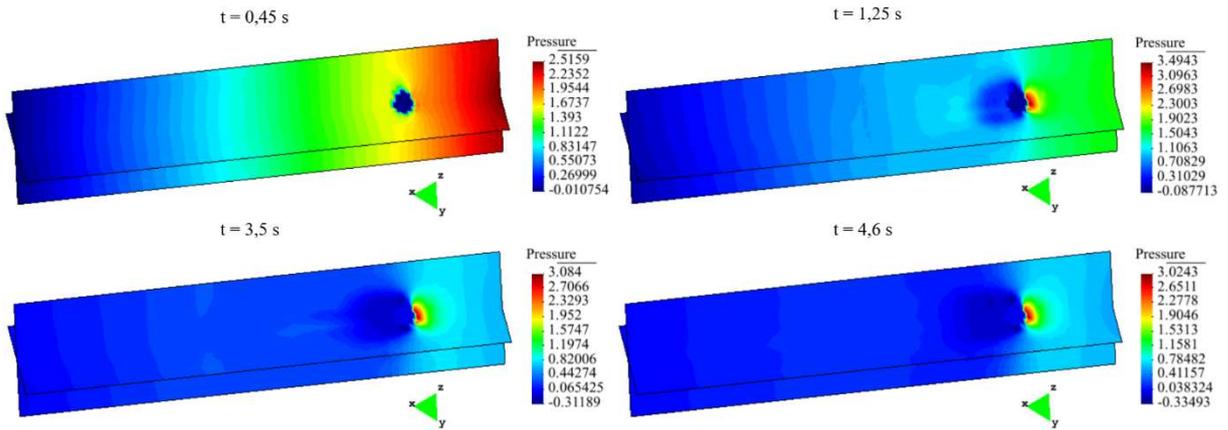


Figura 52: Isocurvas de pressão do exemplo 4.2.3 (com fronteira imersa).

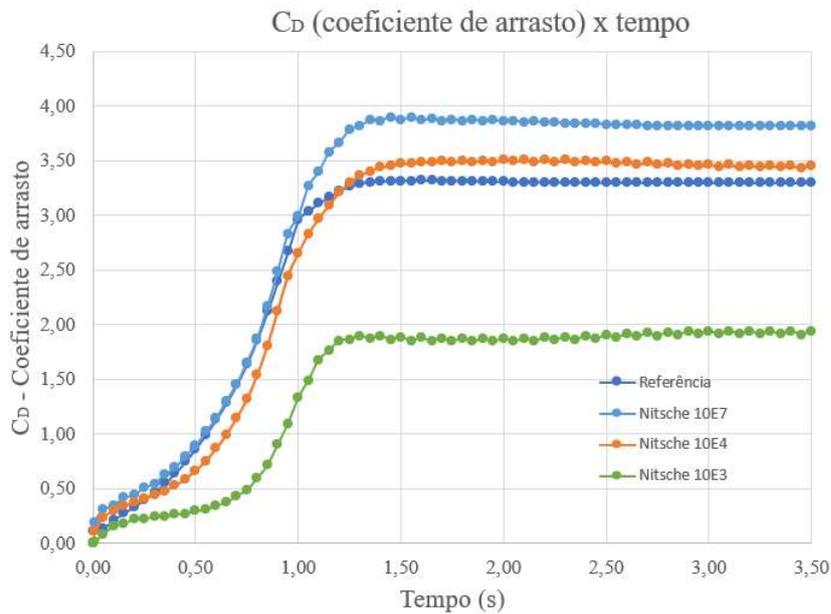


Figura 53: Variação do coeficiente de arrasto ao longo do tempo (exemplo 4.2.3).

|                     |         | $\alpha_1$ e $\alpha_2$ | $C_L$   | $C_D$  |
|---------------------|---------|-------------------------|---------|--------|
| Presente trabalho   | Nitsche | $10^3$                  | -0,0122 | 1,9336 |
|                     |         | $10^4$                  | -0,2361 | 3,4354 |
|                     |         | $10^7$                  | -0,2870 | 3,8162 |
|                     |         | Referência              | -0,0120 | 3,2931 |
| [Schäfer and Turek] | LS*     |                         | -0,0080 | 3,3100 |
|                     | LI**    |                         | -0,0110 | 3,2900 |

\* LS - Limite superior; \*\* LI - Limite inferior

Tabela 20: Comparação dos resultados obtidos do exemplo 4.2.3.

## 5 MÉTODO PROPOSTO PARA INTERAÇÃO FLUIDO-PARTÍCULA

As formulações matemáticas que governam as duas fases que se pretende desenvolver neste trabalho já foram, de forma isoladas, apresentadas nos capítulos 2 e 3 (fluido e partícula, respectivamente). De forma similar, no capítulo 4, o método da fronteira imersa também foi apresentado para contornos (ou sólidos) imersos fixos. De agora em diante, as partículas embebidas pelo fluido serão consideradas “livres” para se movimentarem e, com isso, interagirem com o fluido, de acordo com a sua natureza física. O desafio, portanto, é desenvolver uma metodologia capaz de integrar estas duas formulações de modo que a simulação de IFP seja possível e robusta o suficiente. O primeiro problema a ser considerado é como as condições de contorno são aplicadas na interface fluido-partícula. Isto já foi superado quando da consideração do método de Nitsche (ver capítulo 4). O segundo é como as ações do fluido sobre as partículas imersas são calculadas. Este também já foi superado pela metodologia proposta em 4.1.2. Porém, devido a consideração de partículas “livres”, alguns novos desafios (teóricos e computacionais) surgem e uma investigação cuidadosa é requerida de forma que a proposição de suas soluções seja possível. De forma geral, estes novos desafios podem ser apresentados por:

- Tratamento dos elementos de fluidos com “cortes duplos” (CD);
- Cálculo das FH na iminência de colisões entre partícula-corpo rígido (P-C) e partícula-partícula (P-P) no que concerne os elementos de fluido que estão na vizinhança das interfaces em colisão;
- Tratamento dos “nós sombras” que, em um instante  $t^n$ , pertencem ao domínio  $\Omega^-$  e, no instante seguinte,  $t^{n+1}$ , pertencem ao domínio  $\Omega^+$ ;
- Estratégia de solução para o acoplamento fluido-partícula.

Cada um dos itens supracitados é discutido a seguir, além da estrutura computacional que é concebida de forma a tornar possível o desenvolvimento de um código único próprio. Assim como mencionado no capítulo 4, algumas figuras são apresentadas no plano com o intuito de facilitar a compreensão do leitor e suas extrapolações para o espaço tridimensional são naturais.

### 5.1 Elementos de fluido com cortes duplos

Em problemas de IFP com várias partículas imersas livres, a tratativa dos elementos de

fluido que são cortados por superfícies molhadas  $\Gamma^i$  distintas é um problema que requer atenção. Neste trabalho, estes elementos são designados como elementos com “cortes duplos” (CD), ver Figura 54.

 - Elementos de fluido em cortes duplos

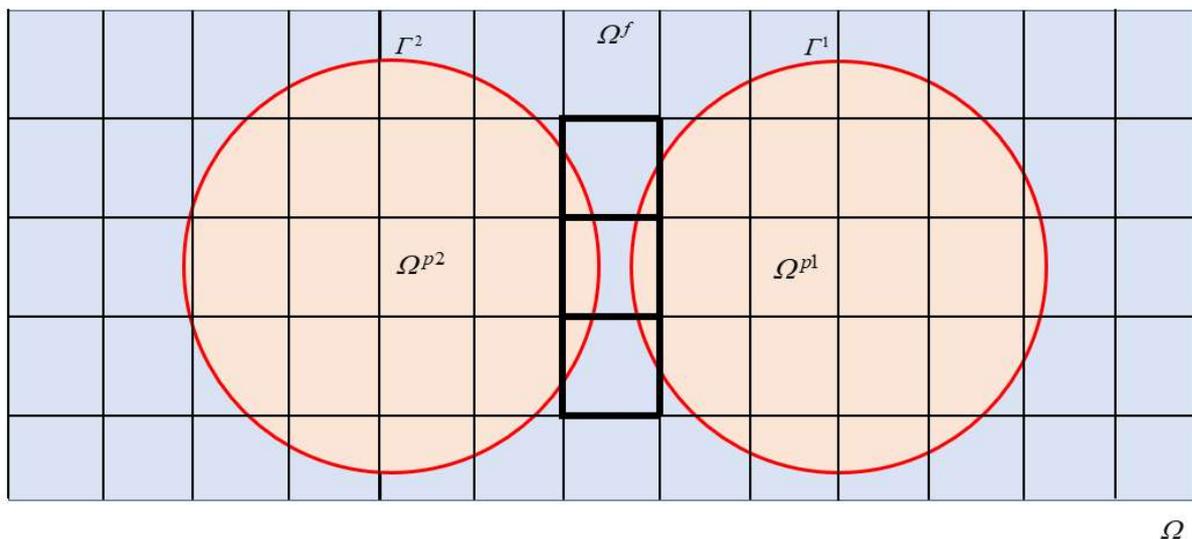


Figura 54: Elementos de fluido com cortes duplos (CD)

A metodologia proposta para este caso é, na realidade, uma extensão daquela proposta para CS (ver seção 4.1.3), isto é, mapeia-se todas as possíveis formas de interseções duplas que um elemento finito de fluido pode estar submetido. Da Figura 55 à Figura 58 são apresentadas as formas (casos) possíveis mapeadas de decomposição dessas regiões para CD.



Figura 55: Decomposição do domínio em células de integração para o elemento de fluido com CD (caso 01).

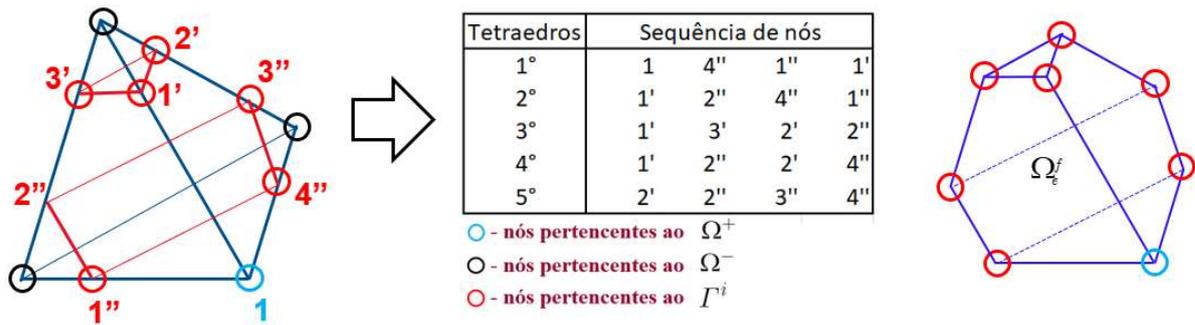


Figura 56: Decomposição do domínio em células de integração para o elemento de fluido com CD (caso 02).

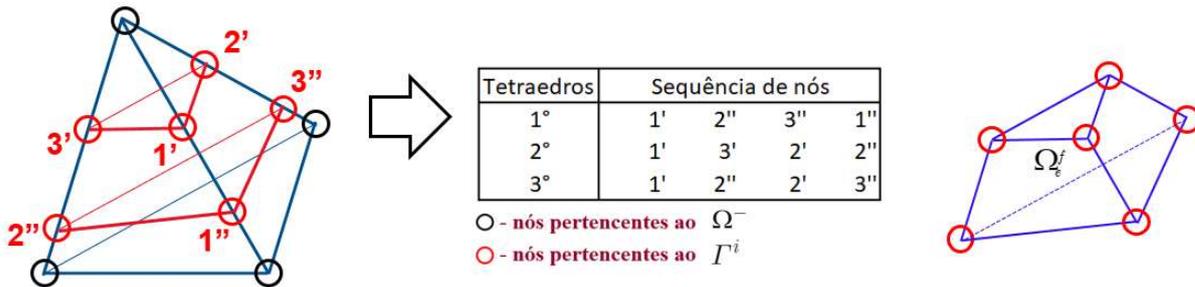


Figura 57: Decomposição do domínio em células de integração para o elemento de fluido com CD (caso 03).

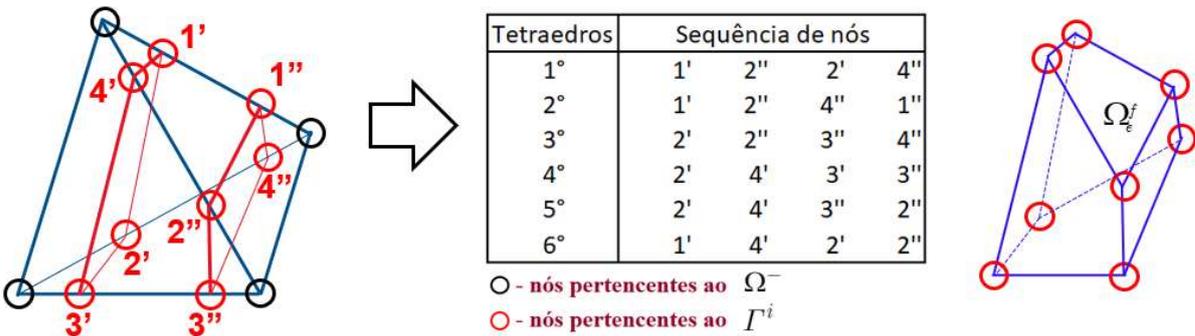


Figura 58: Decomposição do domínio em células de integração para o elemento de fluido com CD, caso 04.

Após a decomposição de  $\Omega_e^f$  em células de integração, realiza-se o mesmo procedimento descrito em 4.1.3 para o cálculo das integrais de volume em cada célula. Ressalta-se que elementos de fluido com cortes triplos ou superiores não são mapeados neste trabalho pois não há possibilidade de suas ocorrências devido ao nível de refinamento requerido durante a execução de um problema.

## 5.2 Cálculo das forças hidrodinâmicas na iminência de colisões

A utilização da metodologia proposta em 4.1.2 para o cálculo das forças hidrodinâmicas em cada partícula precisa ser adaptada quando há a presença de colisões. Para cada tipo de colisão, partícula-corpo rígido (P-C) e partícula-partícula (P-P), a proposta de solução é

diferente.

Para P-C, podem ocorrer duas condições:

- Condição 01: Elemento do fluido com corte simples. O 1º ponto de extrapolação ( $PE1$ ) encontrar-se fora do domínio  $\Omega^f$  (ver Figura 59(a), ponto  $C_1^i$ ). Neste caso, a distância  $\Delta x$  é reduzida, e passa a ser designada por  $\overline{\Delta x}$ , até que se encontre um novo ponto ( $\overline{PE1}$ ) que pertença a  $\Omega^f$  mais próximo da superfície molhada na direção do vetor  $\mathbf{n}$  (ver Figura 59(b), ponto  $C_1^i$ ). Com isso, os valores de pressão e de  $\nabla \mathbf{u}$  no centro do elemento  $\Gamma_k^i (C_1^i)$  são considerados como sendo os mesmos calculados em  $\overline{PE1}$ .
- Condição 02:  $PE1$  pertencer a  $\Omega^f$  e o 2º ponto de extrapolação ( $PE2$ ) não (ver Figura 59(a)), ponto  $C_2^i$ ). Neste caso não se obtém o  $PE2$  e utiliza-se os valores de pressão e  $\nabla \mathbf{u}$  obtidos em  $PE1$  como sendo os valores estimados no centro do elemento  $\Gamma_k^i (C_2^i)$ . A única diferença entre essas duas condições é que, para a segunda, o passo  $\Delta x$  não é alterado quando da obtenção do  $PE1$  (ver Figura 59(b), ponto  $C_2^i$ ). Uma forma alternativa de tratar esta segunda condição é considerar a redução do  $\Delta x$  e obter o  $PE2$  mais próximo possível do limite de  $\Omega^f$  para, em seguida, aplicar a extrapolação linear e obter os valores de pressão e  $\nabla \mathbf{u}$  em  $C_2^i$ . Contudo, isso tornaria o algoritmo mais complexo além de aumentar o custo computacional devido a determinação da nova distância reduzida  $\overline{\Delta x}$ . Portanto, optou-se por simplificar este algoritmo que, devido sua natureza, já é bem complexo.

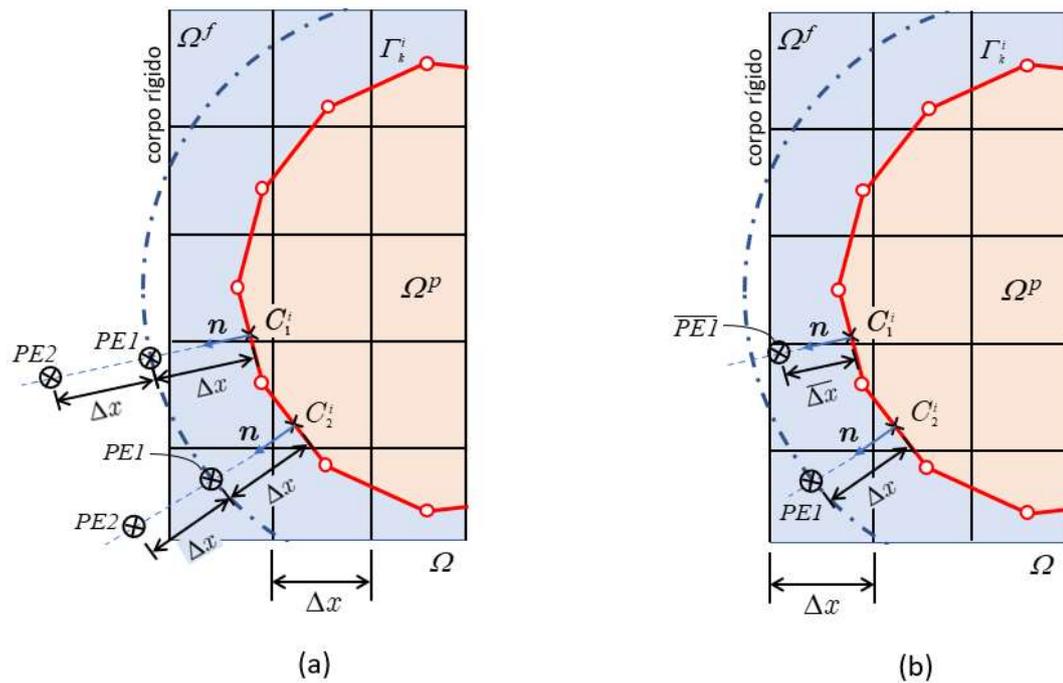


Figura 59: Esquema para cálculo de FH para os contatos partícula-corpo rígido; (a) condição original e (b) proposta de solução.

Para P-P, podem ocorrer dois casos a saber:

- Condição 01: Elemento do fluido com corte duplo sem interpenetração das partículas. Nesta condição, o passo  $\Delta x$  do elemento  $\Gamma_k^i$  é reduzido para  $\overline{\Delta x}$  até que se encontre um novo ponto  $\overline{PE1}$  que pertença a  $\Omega^f$  mais próximo possível da superfície molhada adjacente a  $\Gamma_k^i$  (ver Figura 60). De forma similar às colisões P-C, os valores de pressão e de  $\nabla \mathbf{u}$  no centro do elemento  $\Gamma_k^i$  ( $C_k^i$ ) são considerados como sendo os mesmos calculados em  $\overline{PE1}$ .
- Condição 02: Elemento em corte duplo com interpenetração das partículas. Neste caso, os elementos de  $\Gamma_k^i$ , de ambas as partículas, que se encontram na parte interpenetrada são desativados do cálculo das FH dessas partículas. Isso também acontece com relação ao elemento do fluido interpenetrado. Este elemento também é desativado, conseqüentemente, a sua contribuição nos cálculos das matrizes locais do sistema (116) é desconsiderada.

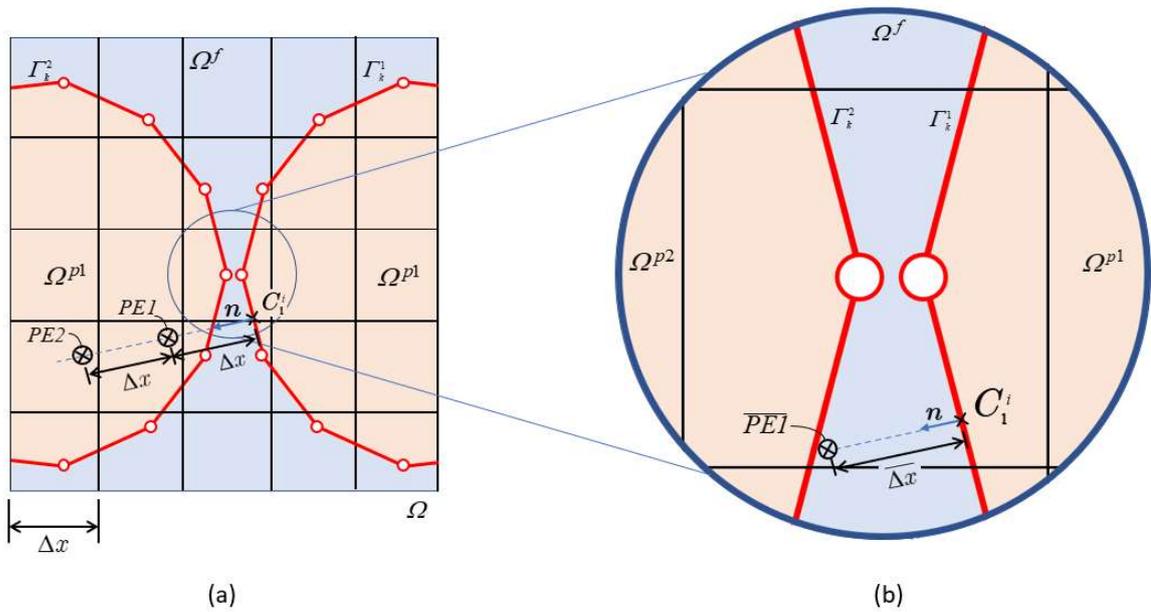


Figura 60: Esquema para cálculo de FH para os contatos partícula-partícula; (a) condição original e (b) proposta de solução.

### 5.3 Tratamento dos “nós sombras”

No cenário de problemas transientes de IFP o método proposto deve ser capaz de lidar com a condição de que as partículas podem se movimentar livremente no meio fluido. Esta possibilidade traz consigo alguns desafios importantes a serem tratados para a obtenção de uma boa acurácia na simulação deste tipo de problema. Além de se avaliar quais variáveis devem ser reinicializadas a cada passo de tempo, deve-se também ser observado como considerar os valores do campo de velocidade nos nós da malha do fluido que, em um instante  $t^n$ , pertencem ao domínio  $\Omega^-$  e, no instante seguinte,  $t^{n+1}$ , pertencem ao domínio  $\Omega^+$  (ver Figura 61). Neste trabalho, estes nós são chamados de “nós sombras”. A problemática que deve ser analisada é a seguinte: No instante de tempo  $t^n$ , o campo de velocidade dos nós sombras é desconhecido pois estes encontram-se no domínio  $\Omega^-$ . No passo de tempo seguinte ( $t^{n+1}$ ), com o movimento das partículas, estes nós passam a fazer parte do domínio  $\Omega^+$ , tendo com isso o seu campo de velocidade fisicamente não nulo. Como a solução do sistema de equações requer conhecer o campo de velocidade de todos os nós pertencentes a  $\Omega^+$  no instante  $t^n$ , como, então, considerar ou calcular este campo para os nós sombra, de forma a preservar as condições impostas pela equação de Navier-Stokes, se em  $t^n$  estes nós encontravam-se em  $\Omega^-$  (ver Figura 61). Observe que o problema se refere apenas ao conhecimento do campo de velocidade dos nós sombra em  $t^n$  e não ao campo de pressão destes nesse mesmo instante de tempo pois, de acordo com a

formulação utilizada para resolver o problema de fluido, o campo de pressão em  $t^n$  dos nós pertencentes ao domínio  $\Omega^+$  não é requerido.

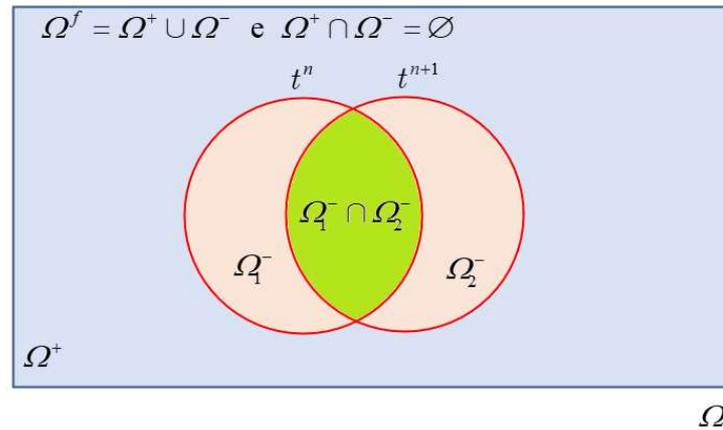


Figura 61: Representação da movimentação de uma partícula em dois passos de tempo consecutivos ( $t^n$  e  $t^{n+1}$ ).

Uma forma de tratar este problema é extrapolar para os nós-sombra os valores do campo de velocidade conhecidos dos nós adjacentes aos nós sombra no instante  $t^n$  (ver Löhner [137]). Além disso, alguns autores consideram a velocidade dos nós sombras como sendo a mesma da estrutura imersa (ver Cheny e Botella [138]). Essas alternativas, e muitas outras, utilizam de argumentos *ad hoc*, que muitas vezes, levam a boas aproximações do ponto de vista prático quando da utilização de passos de tempo pequenos e, conseqüentemente, pequenos deslocamentos da partícula entre eles. Alguns autores realizaram estudos mais aprofundados e propuseram métodos alternativos mais sofisticados (ver Benk [89], Baiges [139]). Neste trabalho, utilizou-se de experiência em trabalhos anteriores do grupo de pesquisa (Fernandes et al. [87], Gomes e Pimenta [86]) onde os valores do campo de velocidade dos nós sombras são considerados nulos no instante  $t^{n+1}$ , uma vez que o movimento das partículas ou corpos imersos, em cada passo de tempo, é pequeno e, portanto, o erro introduzido por esta consideração é limitado.

## 5.4 Estratégia de solução para o acoplamento fluido-partícula

De maneira geral, pode-se classificar as estratégias de solução para o acoplamento de problemas de IFP de duas formas:

- Acoplamento particionado: aquele que considera a solução de cada fase ou física do problema separadamente, para depois, de forma interativa, acoplá-las explicitamente ou implicitamente (ver Brenk [140], Degroote [141], Gerstenberger [142]). A grande

vantagem desta técnica é a possibilidade de se utilizar programas computacionais prontos, tanto para o fluido como para a partícula, sem a necessidade de ajustes;

- Acoplamento monolítico: aquele que considera a montagem do sistema de equações de forma única, isto é, o sistema contém as equações de ambas as fases do problema tendo, com isso, um acoplamento implícito (ver Wall et al. [77], Degroote [141], Gerstenberger [142]). Este tipo de acoplamento possui, no geral, uma taxa de convergência mais rápida quando comparado com o particionado. Em contrapartida, ele requer alterações nos códigos computacionais que regem as fases do problema de forma a obter um sistema único a ser resolvido.

Neste trabalho, optou-se pelo acoplamento particionado explícito (Figura 62) pois, além de ser uma técnica com boa eficiência computacional, a modelagem da partícula em si é simples quando comparado, por exemplo, com problemas de IFE, o que possibilita a obtenção de bons resultados com esta técnica.

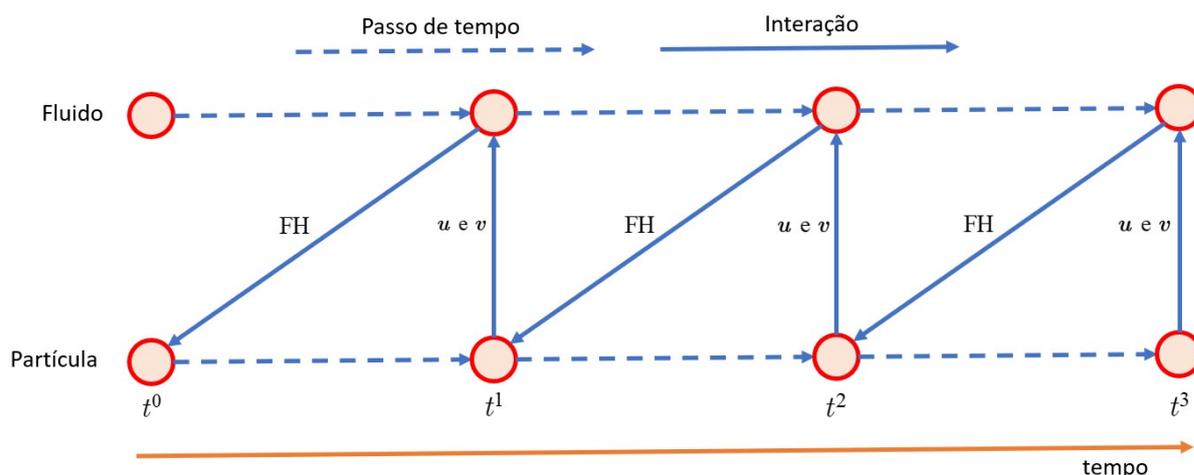


Figura 62: Esquema de acoplamento particionado explícito.

A seguir, é apresentada a estrutura geral do algoritmo de solução desenvolvido neste trabalho.

1. Leitura dos arquivos com os dados iniciais do problema (incluindo dados da malha do fluido e das partículas);
2. Identificação dos elementos de fluido cortados (incluindo a obtenção de  $\Gamma_p$ , ver Figura 33);
3. Obtenção dos pontos de extrapolação de cada  $\Gamma_k^i$ , conforme descrito em 4.1.2 e 5.2;
4. Criação dos chamados subdomínios (partição de  $\Omega^f$  em regiões) de forma a otimizar a identificação dos elementos de fluido cortados quando do movimento das partículas;

5. Identificação do(s) subdomínio(s) em que cada partícula está imersa;
6. Início do looping do tempo:
  - 6.1. Cálculo dos vetores e matrizes locais (a menos das matrizes locais convectivas) da malha do fluido e seus espalhamentos nos vetores globais e na matriz global ( $\mathbf{A}$ ), respectivamente, do problema;
  - 6.2. Início do looping das iterações (k) do método de Newton-Raphson:
    - 6.2.1. Alocação da matriz  $\mathbf{A}$  nas variáveis  $\mathbf{A}_C$  (matriz global  $\mathbf{A}$  com a contribuição das matrizes locais convectivas) e  $\mathbf{A}_T$  (matriz global  $\mathbf{A}$  com a contribuição das matrizes locais convectivas tangente)<sup>7</sup>;
    - 6.2.2. Cálculo das matrizes locais convectiva e convectiva tangente e seu espalhamento nas matrizes  $\mathbf{A}_C$  e  $\mathbf{A}_T$ , respectivamente;
    - 6.2.3. Aplicação das condições de contorno;
    - 6.2.4. Obtenção da solução do problema na iteração k;
    - 6.2.5. Cálculo dos erros relativos dos vetores solução em velocidade, em pressão e do vetor resíduo;
    - 6.2.6. Definição do erro máximo da iteração k (maior entre os valores calculados em 6.2.5) e sua comparação com a tolerância atribuída para a convergência do problema não-linear. Caso o erro máximo seja maior que a tolerância, o algoritmo retorna para o passo 6.2. Caso contrário, o looping 6.2 se encerra;
  - 6.3. Cálculo do vetor aceleração conforme eq. (16), necessário devido a integração temporal utilizada (Newmark);
  - 6.4. Cálculo das forças hidrodinâmicas e seus respectivos momentos em cada partícula conforme descrito em 4.1.2 e 5.2;
  - 6.5. Inicia-se os procedimentos para análise das partículas e calcula-se suas novas posições e velocidades conforme algoritmo descrito em 3.6;
  - 6.6. Reinicializa-se as variáveis para o novo passo de tempo;
  - 6.7. Identifica-se o(s) novo(s) subdomínio(s) que cada partícula está imersa;
  - 6.8. Repete-se os passos 2 e 3 para a nova posição das partículas;
  - 6.9. Trata-se os nós sombras conforme descrito em 5.3;

---

<sup>7</sup> As matrizes  $\mathbf{A}_C$  e  $\mathbf{A}_T$  foram criadas de forma a otimizar o código computacional, uma vez que as matrizes locais convectiva e convectiva tangente mudam para cada iteração k (método de Newton-Raphson). Com isso, o cálculo das outras matrizes que são invariantes com relação as iterações de Newton-Raphson não precisam ser recalculadas para cada k. Estas matrizes só precisam ser recalculadas no início de cada passo de tempo e, no algoritmo em questão, são armazenadas na matriz global  $\mathbf{A}$ .

- 6.10. Atualiza-se o contador do tempo. Caso o tempo atual for menor que o tempo final, o algoritmo retorna para o passo 6. Caso contrário, o looping 6 é encerrado.
7. Fim do algoritmo.

## 5.5 Estrutura do programa desenvolvido

O desenvolvimento de sistemas computacionais requer uma metodologia eficiente que oriente o desenvolvimento desde as primeiras ideias até o momento de programar o que foi projetado. Diversas metodologias vêm sendo propostas nos últimos anos, impulsionadas pela observação de falta de planejamento e da escolha de uma metodologia adequada para a elaboração e concepção de projeto de sistemas computacionais.

A história das linguagens de programação reflete a evolução de linguagens não-estruturadas para linguagens estruturadas e destas para as orientadas a objetos. Neste trabalho optou-se em se utilizar a linguagem de programação FORTRAN devido à sua eficiência para computação numérica.

Apesar de o FORTRAN ser uma linguagem, inicialmente, destinada para programação procedural, em versões recentes foram incluídas características que permitem suportar programação orientada a objeto. Características como herança, encapsulamento de dados, polimorfismo, são possíveis de serem trabalhadas hoje em dia com FORTRAN.

Portanto, visando ao desenvolvimento de um programa do “zero” capaz de dar suporte à implementações de diferentes formulações de métodos numéricos (MEF, MED, Método dos Elementos de Contorno, etc) e de suas diferentes aplicações (análise de fluidos, análise estrutural, análise de partículas, etc) é que surgiu a necessidade da elaboração de um código computacional amplo e robusto. Para tanto, foram elaborados alguns diagramas (Figura 63 à Figura 66) para melhor entendimento da estruturação do código.

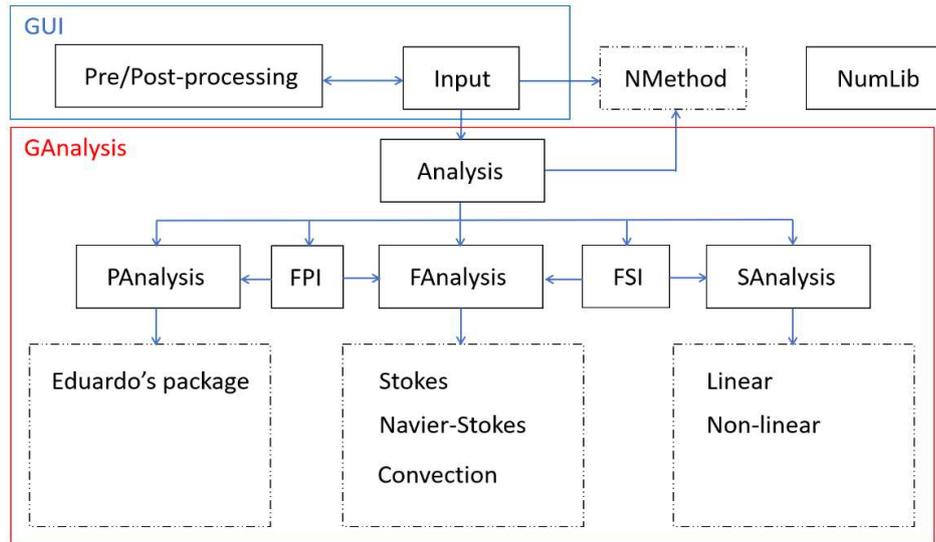


Figura 63: Diagrama que contém a relação geral entre os módulos da plataforma.

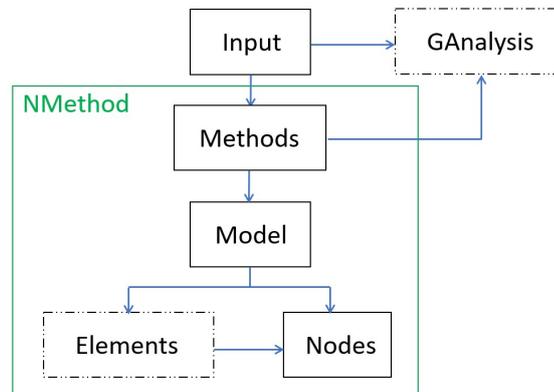


Figura 64: Detalhe do módulo *NMethod*.

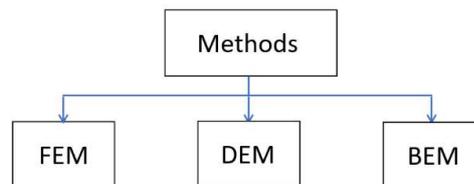


Figura 65: Diagrama que contém o módulo dos métodos numéricos.

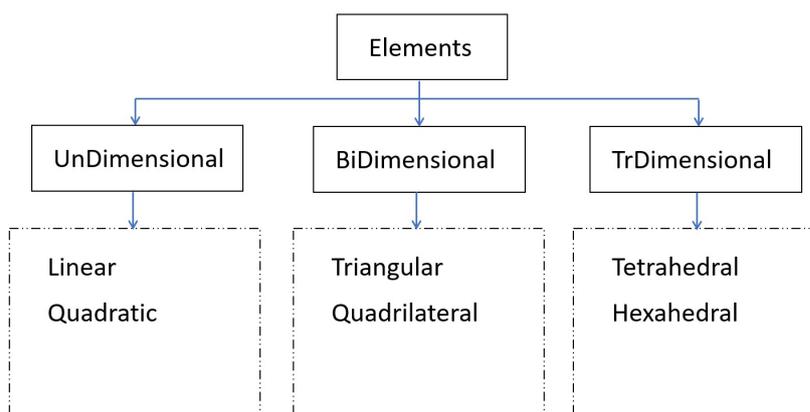


Figura 66: Utilização de herança para implementação dos diversos tipos de elementos.

Visando uma estrutura de desenvolvimento clara e robusta, o código computacional foi decomposto em quatro grandes módulos:

- Módulo *GUI (Guide User Interface)*: este pacote representa a interação entre o usuário e a plataforma. Nele, encontra-se o pré- e pós-processador. Atualmente o programa auxiliar *Gid* é utilizado para realizar a função de pré- e pós-processamento.
- Módulo *Analysis*: durante o processamento, diferentes tipos de análises poderão ser executadas, como análise linear de estruturas, análise de fluido estacionário, interação fluido estrutura, análise de partícula, etc. Portanto, este pacote contém os procedimentos de cada tipo de análise bem como a forma como tais análises são acionadas pelo restante do programa.
- Módulo *NMethod (Numerical Method)*: Este pacote representa as abstrações das diferentes soluções aproximadas possíveis de serem empregadas em *Analysis*, modelando o mundo real em elementos representativos de cada tipo de solução aproximada escolhida (exemplo, elementos finitos quando escolhido o MEF).
- Módulo *NumLib (Numerical Library)*: Este pacote disponibiliza as ferramentas numéricas requeridas pelo sistema (exemplo, operações matriciais e vetoriais) e pode ser acessado por todos os pacotes da plataforma de forma direta.

Outro aspecto computacional relevante neste trabalho foi a utilização de técnicas de computação paralela de alto desempenho, visando, fundamentalmente, a obtenção de solução computacional com tempo de processamento reduzido e com boa acurácia. Para tanto, utilizou-se a biblioteca de multi-processamento aberto (*OpenMP*, “*Open Multi-Processing*”) para introduzir a paralelização parcial ou localizada do código computacional (basicamente, o cálculo das matrizes locais e a montagem da matriz global do sistema de equações). Além desse aspecto, devido as simulações requererem a resolução de sistemas de equações expressivamente

grandes e caracterizadas por matrizes do tipo esparsas, optou-se em se utilizar técnicas de armazenamento de dados especiais (CSR, “*Compress Sparse Row*”) a fim de armazenar apenas os dados relevantes para a resolução do problema (dados não-nulos). Com isso, fez-se necessário a utilização de *solvers* específicos capazes de realizar operações com este tipo de armazenamento. Neste trabalho é utilizado o *solver* da biblioteca *Intel Math Kernel Library* (MKL) cujo manual pode ser acessado em Intel [143]. Ressalta-se que todo o algoritmo de armazenamento, montagem e aplicação das condições de contorno utilizando os conceitos de matrizes esparsas foram desenvolvidos pelo autor.

Com isso, pretende-se ao final desta tese, disponibilizar ao grupo de pesquisa uma ferramenta para simulação computacional robusta e reutilizável o suficiente para servir de base para contribuições futuras de outros pesquisadores e alunos.

## 5.6 Exemplos numéricos

Nesta última seção de exemplos são apresentados problemas transientes de escoamento de fluidos com a presença de partículas móveis (esféricas) com o intuito de verificar o método proposto neste trabalho, e sua implementação computacional no código descrito em 5.4. A exceção se faz apenas para o primeiro exemplo que trata de escoamento de fluido com duas partículas fixas em regime permanente (equação de Stokes) muito próximas uma da outra. A malha Lagrangiana utilizada para discretizar a superfície molhada de todas as partículas dos exemplos a seguir é a mesma de 4.2.1 (Figura 41). Com o intuito de se avaliar a eficiência do algoritmo proposto, os tempos de processamento médios necessários para rodar um passo de tempo e uma iteração foram computados para os exemplos 5.6.3, 5.6.4 e 5.6.5. O computador utilizado para rodar todos os exemplos desta tese foi um Intel Xeon X5650 de 2,66 GHz com dois processadores contendo 96 GB de memória instalada.

### 5.6.1 *Escoamento em canal curto com duas partículas próximas uma da outra*

Este exemplo se refere ao escoamento de um fluido em um canal curto com duas partículas fixas iguais com diâmetro  $d = 10$  cm, governadas pela equação de Stokes (regime permanente). As características geométricas bem como a malha utilizadas neste exemplo estão ilustradas na Figura 67 e Figura 68. A Tabela 21 apresenta os parâmetros estabelecidos para este exemplo. Na entrada do canal é aplicado um perfil de velocidade parabólico conforme equação (127) a seguir.

$$U(0, y, z) = \frac{16U_m yz(H_y - y)(H_z - z)}{(H_y \cdot H_z)^2}, V = W = 0, \quad (127)$$

onde  $U_m = 1,0 \text{ m/s}$ ,  $H_y = 0,4 \text{ m}$  e  $H_z = 0,2 \text{ m}$ . A notação das componentes de velocidade adotada é  $(u_1, u_2, u_3) = (U, V, W)$  e a condição de contorno aplicada na saída do canal é a de tensão zero.

O objetivo deste exemplo é validar o método proposto no que diz respeito a metodologia proposta para elementos com cortes duplos.

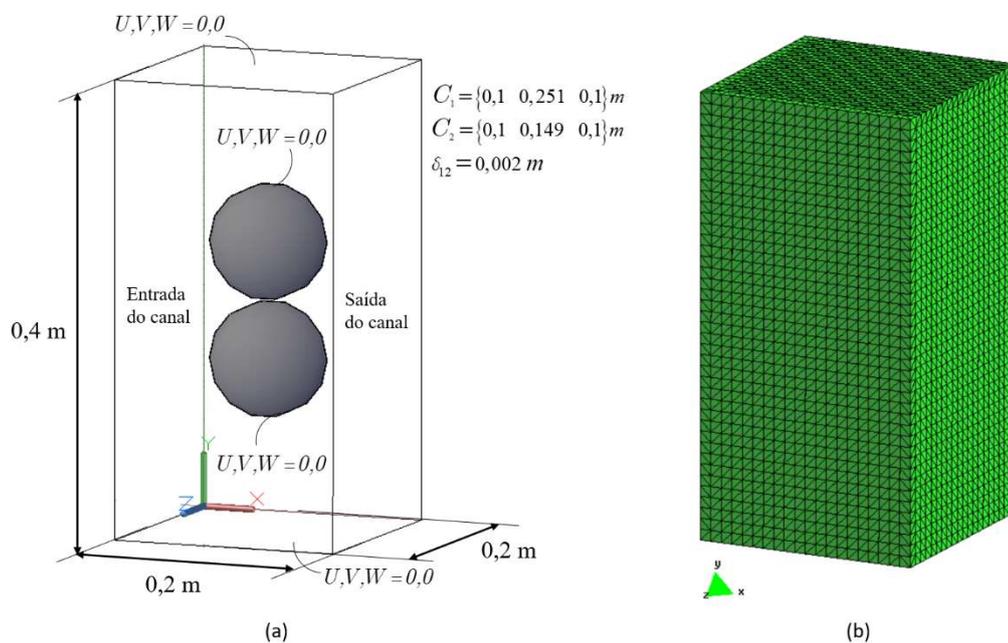


Figura 67: (a) Geometria do exemplo 5.6.1; (b) Malha de elementos finitos usada no exemplo 5.6.1 (98.400 elementos finitos tetraedros mistos com 139.523 nós).

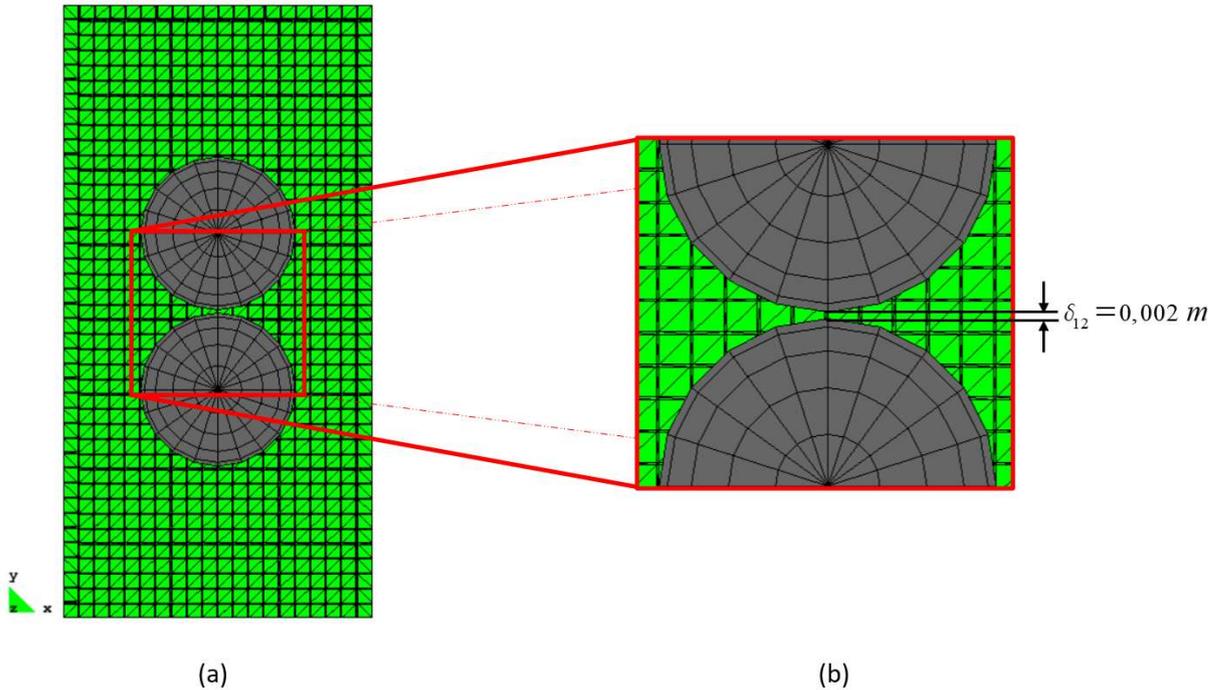


Figura 68: Detalhe da malha entre as duas partículas.

| Parâmetros da análise       |                 |
|-----------------------------|-----------------|
| $\rho$ (kg/m <sup>3</sup> ) | 1,0             |
| $\nu$ (m <sup>2</sup> /s)   | 0,001           |
| $U_m$ (m/s)                 | 1,0             |
| $d$ (cm)                    | 10              |
| $\alpha_1 = \alpha_2$       | $10^5$ à $10^7$ |

Tabela 21: Parâmetros utilizados no exemplo 5.6.1.

Da Figura 69 à Figura 71 são apresentados os resultados dos campos de velocidade e pressão, respectivamente. Observa-se uma boa concordância dos resultados do campo de velocidade em relação a referência. Para o campo de pressão, observa-se uma imprecisão de seu valor na região dos elementos cortados (ver Figura 72), evidenciando novamente, a necessidade de um bom nível de refinamento na vizinhança da superfície molhada. A Figura 72 também mostra que os valores do campo de pressão para os elementos cortados que possuem o seu domínio ( $\Omega_e^f$ ) quase que totalmente pertencente a  $\Omega^-$ , consegue-se obter melhores resultados. Esta figura, também evidencia que a região de perturbação citada por Chadil et al. [136] é, de fato, da ordem do tamanho do elemento cortado. A Figura 73 e Figura 74 mostram outros resultados, para o campo de velocidade, obtidos demonstrando que o método proposto consegue simular a física do problema de forma satisfatória.

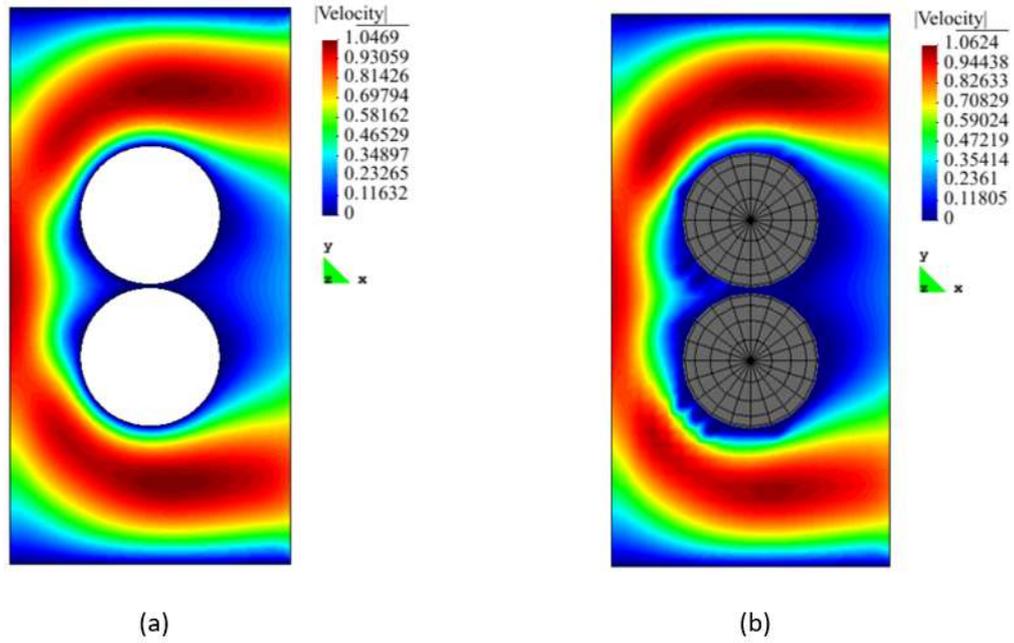


Figura 69: Resultados no plano xy para a malha  $D_{10}$  e  $\alpha_1 = \alpha_2 = 10^6$ ; (a) Isocurvas de velocidade (modelagem convencional); (b) Isocurvas de velocidade (com fronteira imersa).

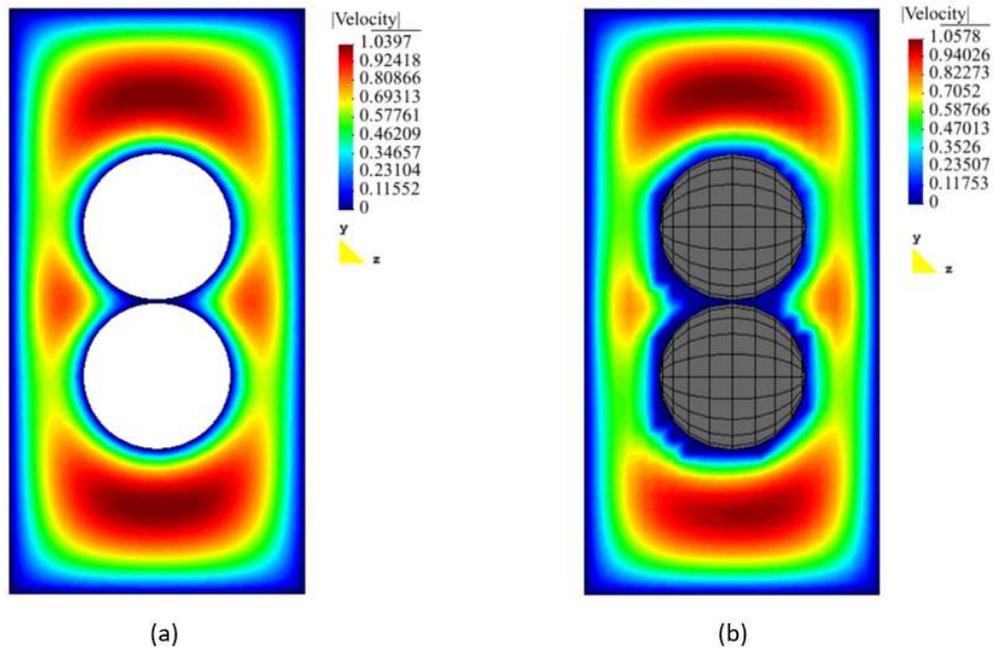


Figura 70: Resultados no plano yz para a malha  $D_{10}$  e  $\alpha_1 = \alpha_2 = 10^6$ ; (a) Isocurvas de velocidade (modelagem convencional); (b) Isocurvas de velocidade (com fronteira imersa).

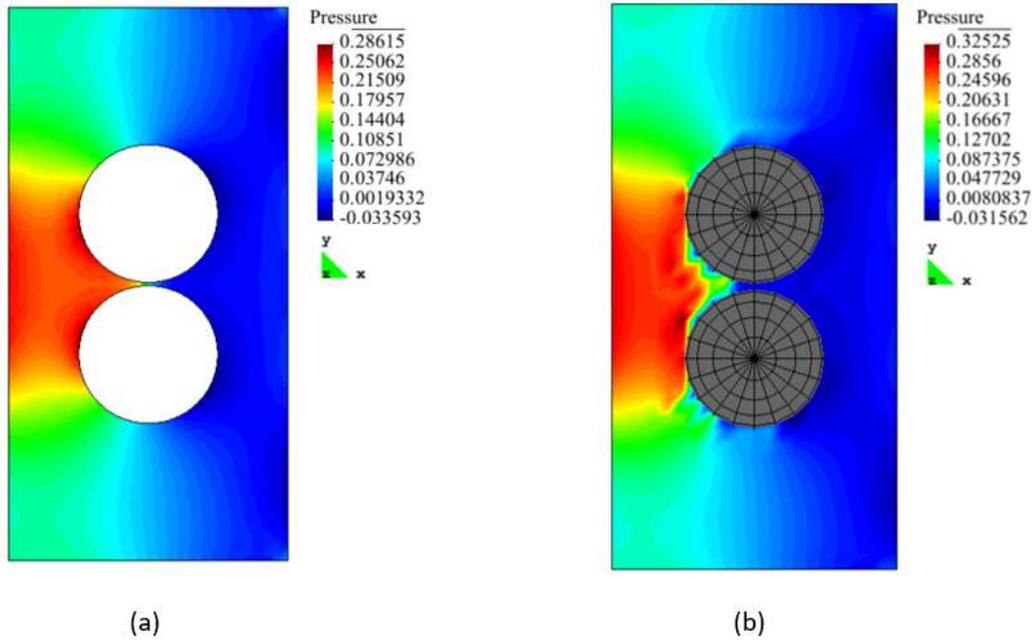


Figura 71: Resultados no plano xy para a malha  $D_{10}$  e  $\alpha_1 = \alpha_2 = 10^6$ ; (a) Isocurvas de pressão (modelagem convencional); (b) Isocurvas de pressão (com fronteira imersa).

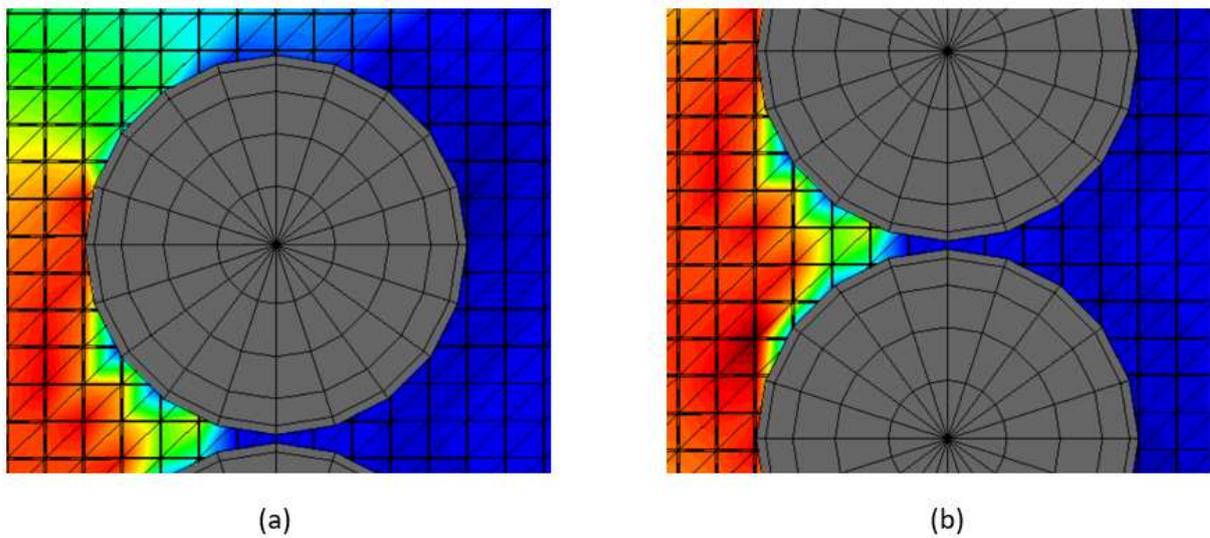


Figura 72: Detalhe do Resultado, na vizinhança das partículas, das isocurvas de pressão no plano xy para a malha  $D_{10}$  e  $\alpha_1 = \alpha_2 = 10^6$ .

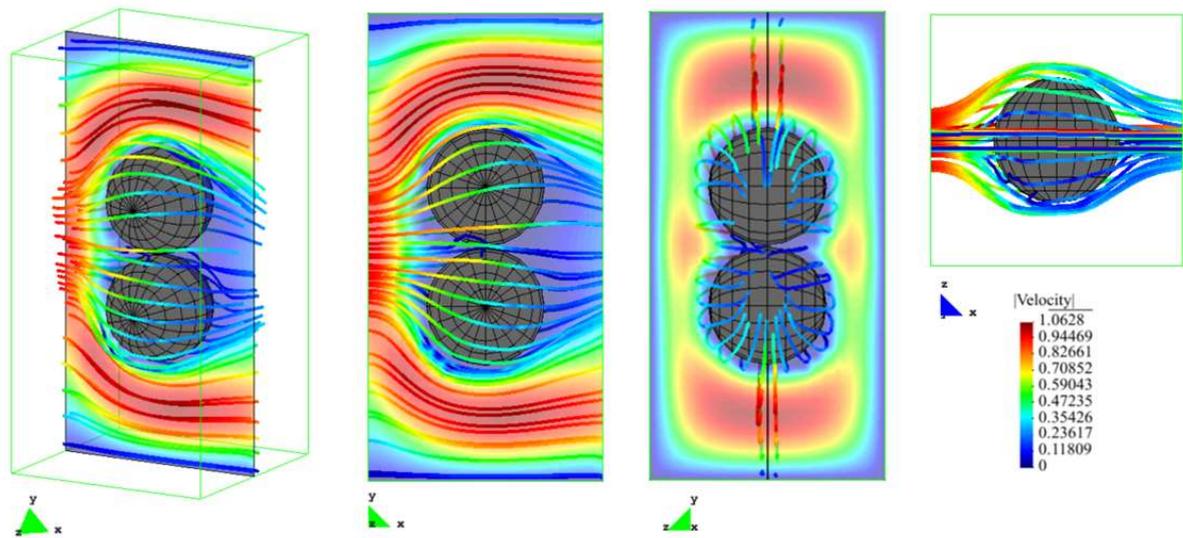


Figura 73: *Streamline* de velocidade, exemplo 5.6.1.

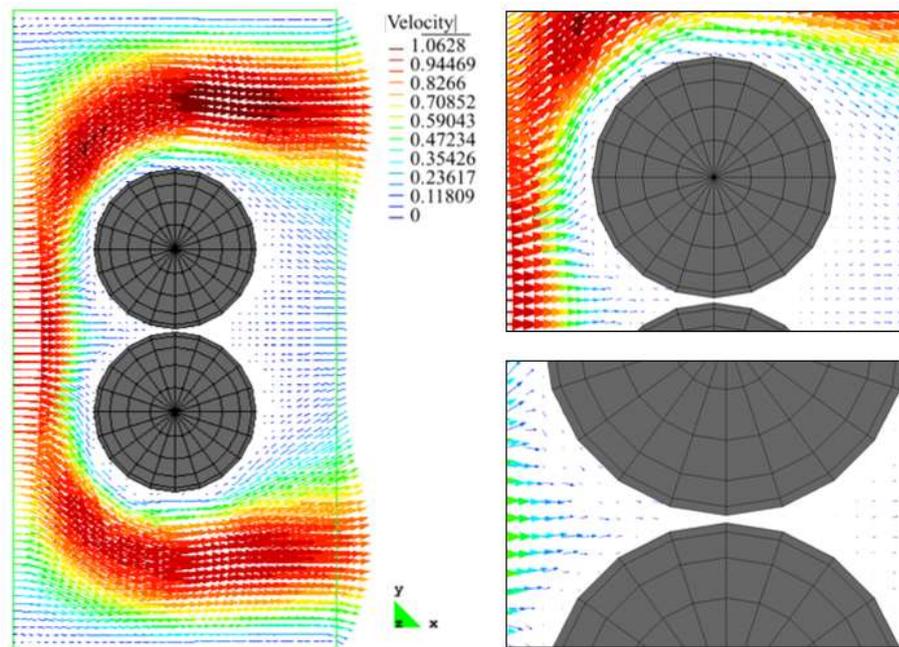


Figura 74: Vetores de velocidade em torno das partículas.

A Tabela 22 apresenta os valores dos coeficientes de sustentação e arrasto obtidos para diversos níveis de refinamento de malha tendo os valores de  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  variando entre  $10^5$  e  $10^7$ . Observa-se bons resultados obtidos tanto para  $C_L$  como para  $C_D$  para  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  igual a  $10^6$  com relação a referência (Tabela 23). Contudo, isso não significa que outros valores para os coeficientes de penalidades não possam ser usados como apresentado em outros exemplos. Enfatiza-se que, de uma forma geral, para a natureza dos problemas estudados neste trabalho, considera-se valores de  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  variando entre  $10^4$  e  $10^7$  como aqueles que podem conduzir aos melhores resultados.

Partícula 01

| $(\alpha_1 = \alpha_2)^*$ | D <sub>5</sub>    |                   | D <sub>7,5</sub>  |                   | D <sub>10</sub>   |                   |
|---------------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|
|                           | C <sub>L</sub>    | C <sub>D</sub>    | C <sub>L</sub>    | C <sub>D</sub>    | C <sub>L</sub>    | C <sub>D</sub>    |
| 10 <sup>5</sup>           | 2,3037E-01        | 6,3168E-01        | 1,2522E-01        | 6,8547E-01        | 1,3093E-01        | 6,8187E-01        |
| 10 <sup>6</sup>           | <b>1,5763E-01</b> | <b>7,3736E-01</b> | <b>1,5708E-01</b> | <b>7,3370E-01</b> | <b>2,1830E-01</b> | <b>7,3861E-01</b> |
| 10 <sup>7</sup>           | 1,2806E-01        | 7,4575E-01        | 1,8616E-01        | 7,7702E-01        | 2,4481E-01        | 7,4703E-01        |

\* Ordem de grandeza dos coeficientes de penalidade

Partícula 02

| $(\alpha_1 = \alpha_2)^*$ | D <sub>5</sub>     |                   | D <sub>7,5</sub>   |                   | D <sub>10</sub>    |                   |
|---------------------------|--------------------|-------------------|--------------------|-------------------|--------------------|-------------------|
|                           | C <sub>L</sub>     | C <sub>D</sub>    | C <sub>L</sub>     | C <sub>D</sub>    | C <sub>L</sub>     | C <sub>D</sub>    |
| 10 <sup>5</sup>           | -2,2011E-01        | 6,4748E-01        | -1,4842E-01        | 6,8738E-01        | -1,3259E-01        | 6,8123E-01        |
| 10 <sup>6</sup>           | <b>-3,0306E-01</b> | <b>7,3520E-01</b> | <b>-1,7576E-01</b> | <b>7,3318E-01</b> | <b>-2,1045E-01</b> | <b>7,2972E-01</b> |
| 10 <sup>7</sup>           | -3,0273E-01        | 7,4087E-01        | -2,0694E-01        | 7,7041E-01        | -2,2984E-01        | 7,3605E-01        |

\* Ordem de grandeza dos coeficientes de penalidade

Tabela 22: Valores de C<sub>L</sub> e C<sub>D</sub> para três níveis de refinamento de malha com  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  variados de 10<sup>5</sup> à 10<sup>7</sup>.

| Referência     |                |                |                |
|----------------|----------------|----------------|----------------|
| Partícula 1    |                | Partícula 2    |                |
| C <sub>L</sub> | C <sub>D</sub> | C <sub>L</sub> | C <sub>D</sub> |
| 1,6562E-01     | 7,2776E-01     | -1,6497E-01    | 7,3064E-01     |

Tabela 23: Valores de referência dos coeficientes de sustentação (C<sub>L</sub>) e arrasto (C<sub>D</sub>), exemplo 5.6.1.

### 5.6.2 Sedimentação de uma partícula imersa em um fluido

Este é um exemplo muito utilizado no meio acadêmico para validar simulações de problemas de IFP uma vez que existem vários estudos experimentais (Almedeij [144], Khan e Richardson [145], Brown e Lawler [146]) e numéricos (Avci e Wriggers [66], Fernandes et al. [87]) sobre este assunto. O problema consiste em se calcular a velocidade terminal da uma partícula em queda livre imersa em um fluido contido em um recipiente prismático de seção quadrada, conforme ilustrado na Figura 76. A partícula parte do repouso e a velocidade terminal é atingida quando a força resultante na partícula é zero, isto é, a força de arrasto do fluido é anulada pela força gravitacional. A geometria e a malha utilizada neste exemplo são apresentadas na Figura 75 e os dados desta análise encontram-se na Tabela 24. Optou-se em aumentar o refinamento da malha apenas na região do núcleo do canal (parte central quadrada com 0,01 m<sup>2</sup> de seção transversal) com uma malha estruturada (D<sub>5,55</sub>) de forma a reduzir o custo computacional (ver Figura 75(b)). Na região externa ao núcleo o tamanho médio dos elementos é da ordem de D<sub>2,5</sub>. Isso resultou em um problema com, aproximadamente, mais de quinhentos (500) mil graus de liberdade. As condições de contorno aplicadas neste exemplo são de velocidade prescrita igual a zero em todas as faces do recipiente a menos da face superior. A convergência do problema não linear nas iterações do método de Newton foi de TOL = 10<sup>-6</sup>.

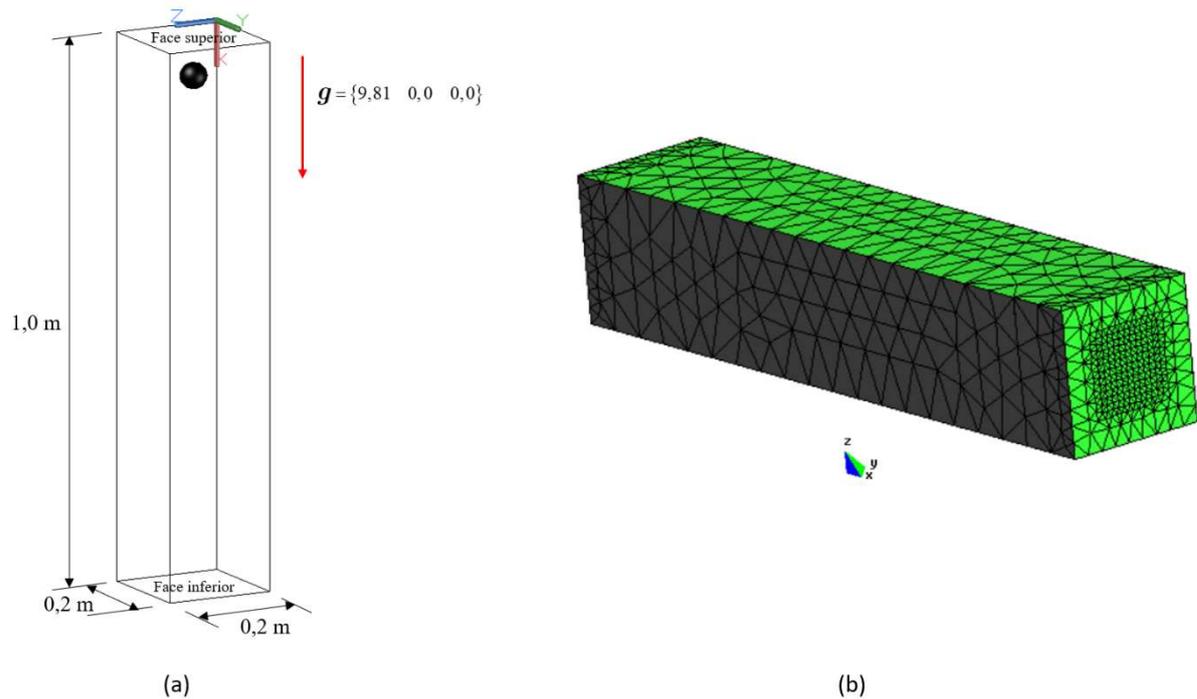


Figura 75: (a) Geometria do exemplo 5.6.2; (b) Malha de elementos finitos usada no exemplo 5.6.2 (158.354 elementos finitos tetraedros mistos com 117.330 nós),  $D_{5,55}$ .

| Parâmetros da análise - fluido |                 | Parâmetros da análise - partícula |                      |
|--------------------------------|-----------------|-----------------------------------|----------------------|
| $\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )    | 1,0             | m (g)                             | 1,3                  |
| $\nu$ (m <sup>2</sup> /s)      | 0,01            | $\nu$ (Poisson)                   | 0,3                  |
| u0 (m/s)                       | 0,0             | d (cm)                            | 5,0                  |
| Integração temporal            | Newmark         | C* (m)                            | (0,07;0,1;0,1)       |
| $\alpha_1 = \alpha_2$          | $3 \times 10^5$ | $\mu_d$                           | 0,0                  |
| $\Delta t$ (s)                 | 0,005 e 0,0025  | E (N/m <sup>2</sup> )             | $10^6$               |
|                                |                 | $\xi_n$                           | 0,0                  |
|                                |                 | v0 (m/s)                          | 0,0                  |
|                                |                 | Integração temporal               | Trapézio clássico    |
|                                |                 | $\Delta t$ (s)                    | $2,5 \times 10^{-6}$ |

\* Coordenadas iniciais do centro da partícula

Tabela 24: Parâmetros utilizados no exemplo.

Foram analisados dois casos de passo de tempo para o fluido, um com  $\Delta t = 0,005$  s e outro com  $\Delta t = 0,0025$  s. No caso geral, o  $\Delta t$  para a partícula é menor do que o do fluido. Neste caso particular, como não há colisão, os passos de tempo de ambas as fases poderiam ser iguais sem prejuízo na acurácia dos resultados. Os resultados são comparados com os valores provenientes de formulações originadas em experimentos da literatura. A Tabela 25 mostra os resultados dessas formulações, aplicadas para o exemplo em questão, das seguintes referências: 1 - Almedejij [144]; 2 - Khan e Richardson [145] e, 3 - Brown e Lawler [146].

| Referência | Vel. Terminal (m/s) |
|------------|---------------------|
| 1          | 1,518023217         |
| 2          | 1,577547935         |
| 3          | 1,586598776         |

Tabela 25: Valores de velocidade terminal (referências).

A Figura 76 e a Figura 77 ilustram os resultados para os campos de velocidade e pressão da partícula em diferentes instantes de tempo, para o caso  $\Delta t = 0,005$  s. Observa-se que a velocidade da partícula nos quatro primeiros instantes de tempo representados (0,2 à 0,425 s) aumenta até atingir 1,60 m/s. Após isso, a velocidade permanece constante em 1,60 m/s caracterizando, assim, o valor da velocidade terminal obtida pelo método proposto. Nota-se também pequenos deslocamentos transversais (direções y e z) ao longo do canal devido, entre outros fatores, da falta de simetria da malha e das forças hidrodinâmicas nessas direções não serem numericamente nulas. A Figura 78 ilustra a evolução da velocidade da partícula (componente vertical) com o tempo para os dois casos estudados. Observa-se que os resultados, para ambos os casos, são muito próximos das referências (Tabela 25). É possível também verificar que, a partir do instante de tempo aproximado de 0,65 s, a velocidade da partícula sofre uma perturbação quando da sua aproximação com o fundo do canal (face inferior). Esta perturbação pode estar relacionada com amortecimento do deslocamento da partícula devido ao efeito do deslocamento da massa de fluido entre a partícula e a parede de fundo do canal quando de suas aproximações. Para  $\Delta t = 0,0025$  s observa-se efeito similar, porém, somente a partir do instante de tempo aproximado de 0,70 s, isto é, muito mais próximo do fundo do canal. Outro aspecto que pode contribuir com essas perturbações é a utilização de malha refinada estruturada apenas ao longo do núcleo do canal, como pode ser observado na Figura 75(b). Nota-se que, com o acúmulo dos pequenos deslocamentos transversais ao longo do canal mencionados anteriormente, quando a partícula se aproxima do fundo do canal ela se encontra cada vez mais próxima da divisa entre a malha refinada estruturada e não estruturada (ver Figura 79), fazendo com que as extrapolações dos gradientes de velocidade e das pressões dos elementos vizinhos (para o cálculo da força hidrodinâmica) sofram influência dos elementos pertencentes a região menos refinada. Apesar dessas perturbações locais observadas, considera-se que os resultados são bastante expressivos qualitativamente e quantitativamente.

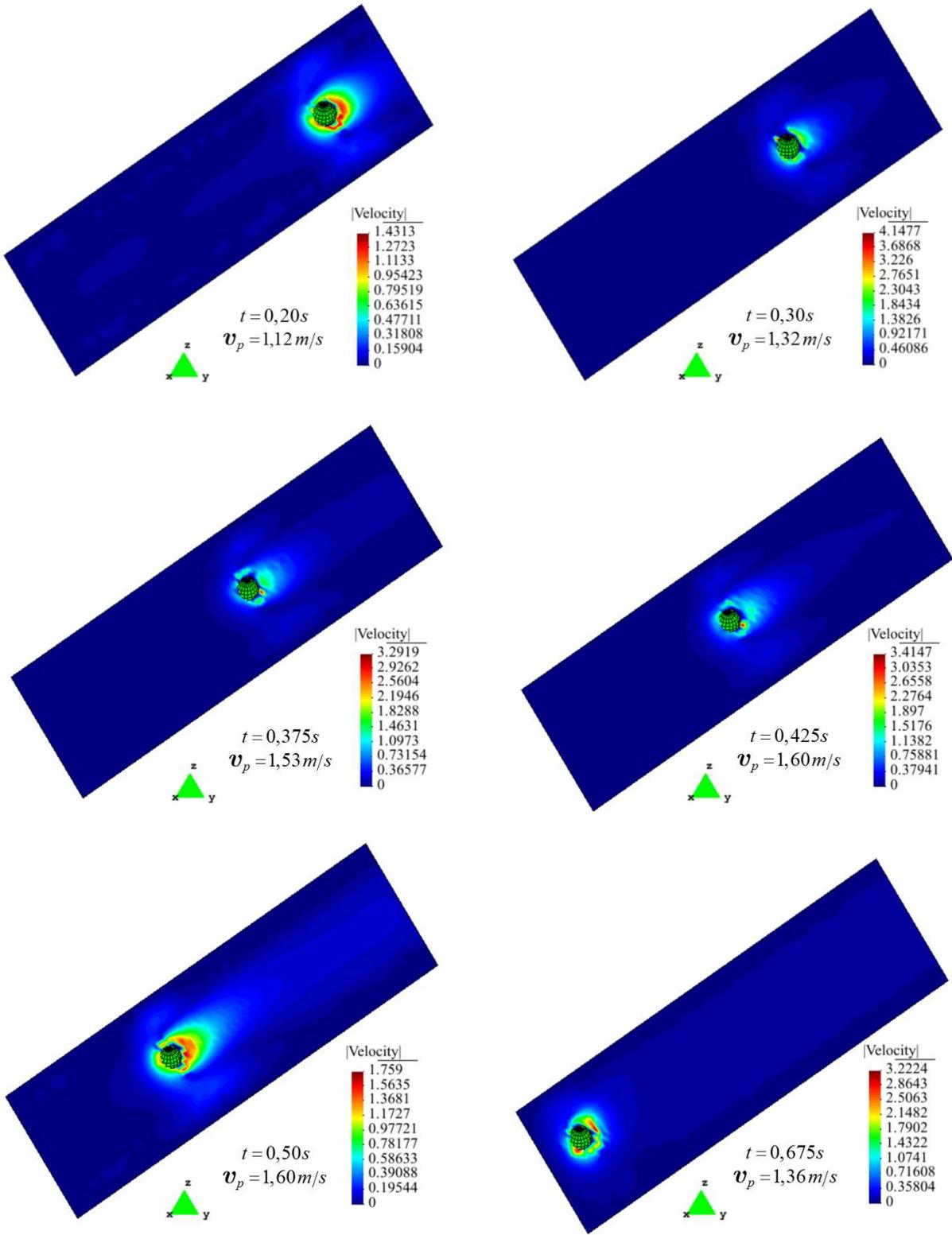


Figura 76: Evolução no tempo do campo de velocidade do exemplo 5.6.2 (vistas isométricas).

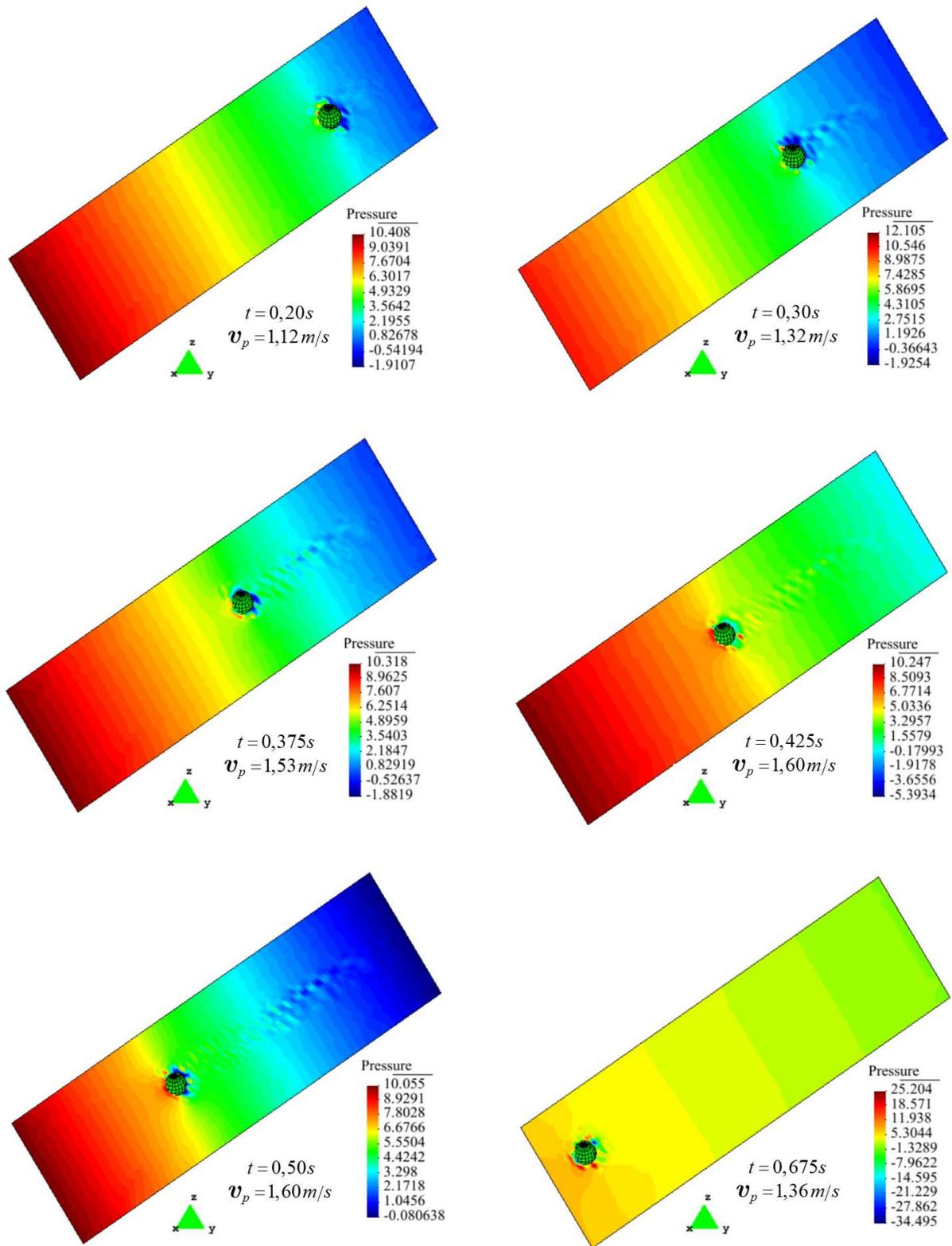


Figura 77: Evolução no tempo do campo de pressão do exemplo 5.6.2 (vistas isométricas).

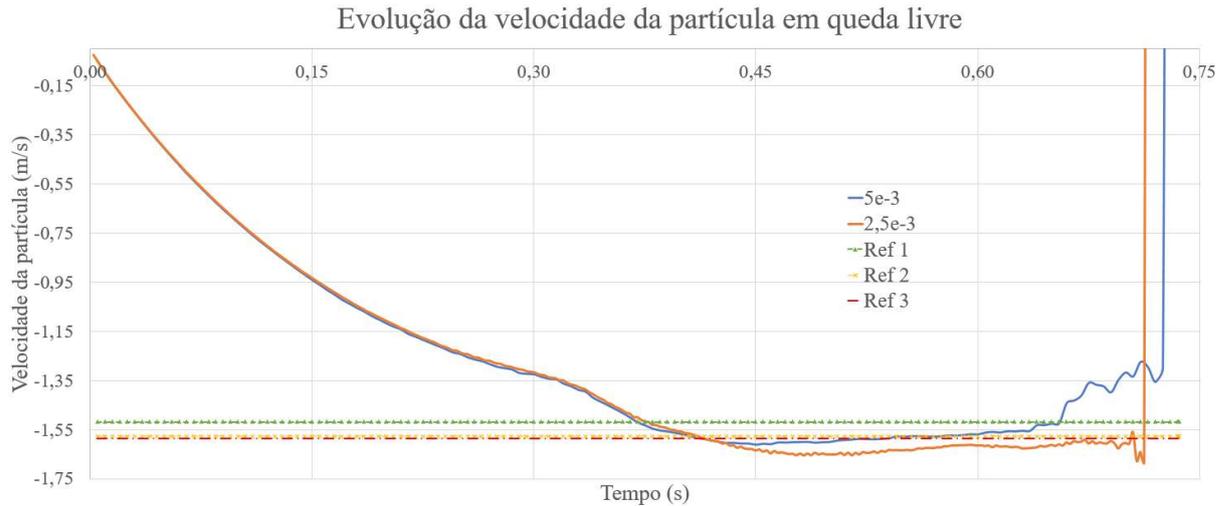


Figura 78: Histórico da velocidade (componente vertical) da partícula em queda livre.

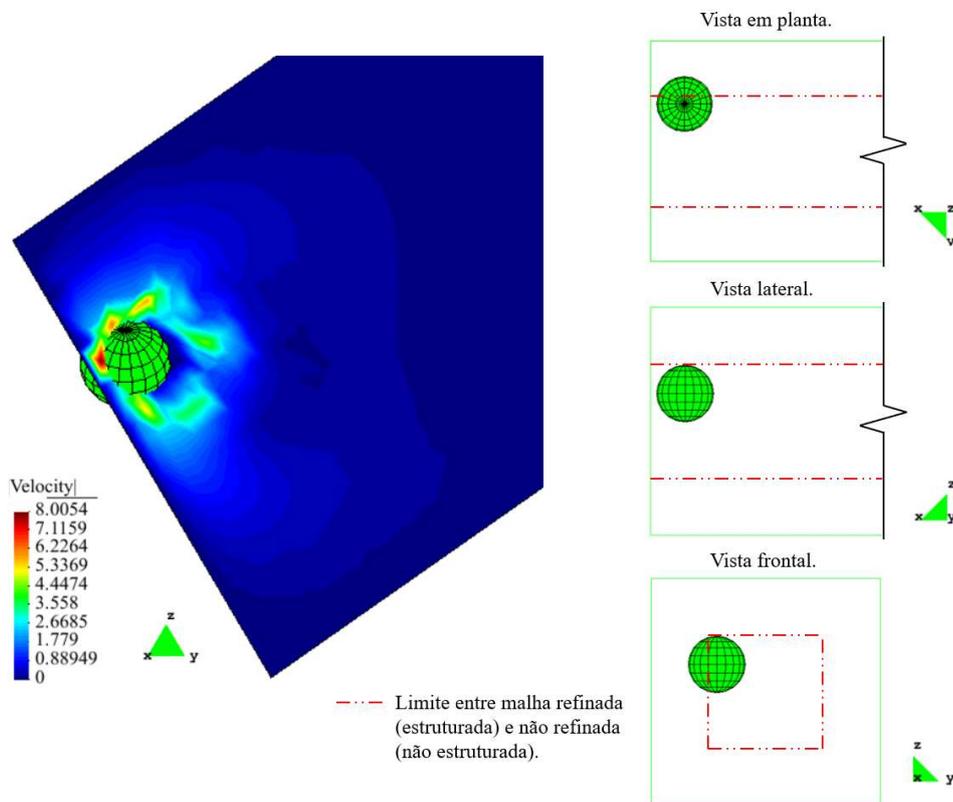


Figura 79: Detalhe do posicionamento da partícula próximo a parede de fundo do canal.

### 5.6.3 Escoamento em torno de uma partícula móvel

Este exemplo consiste no escoamento em torno de uma partícula móvel, inicialmente em repouso, no interior de um canal. A geometria e a malha utilizada neste exemplo são apresentadas na Figura 80. Os parâmetros do problema são ilustrados na Tabela 26.

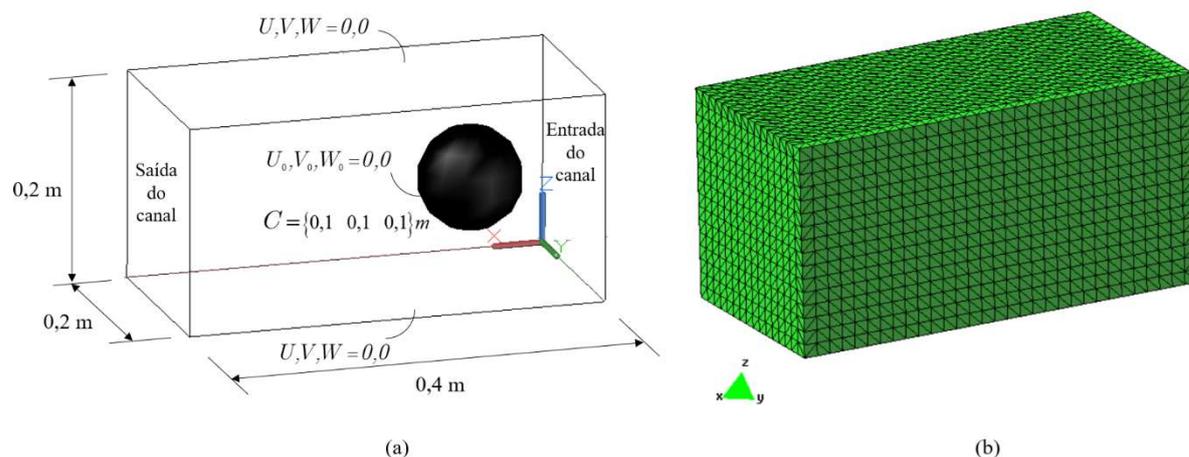


Figura 80: (a) Geometria e condições de contorno do exemplo 5.6.3; (b) Malha de elementos finitos usada no exemplo 5.6.3 (47.616 elementos finitos tetraedros mistos com 68.607 nós).

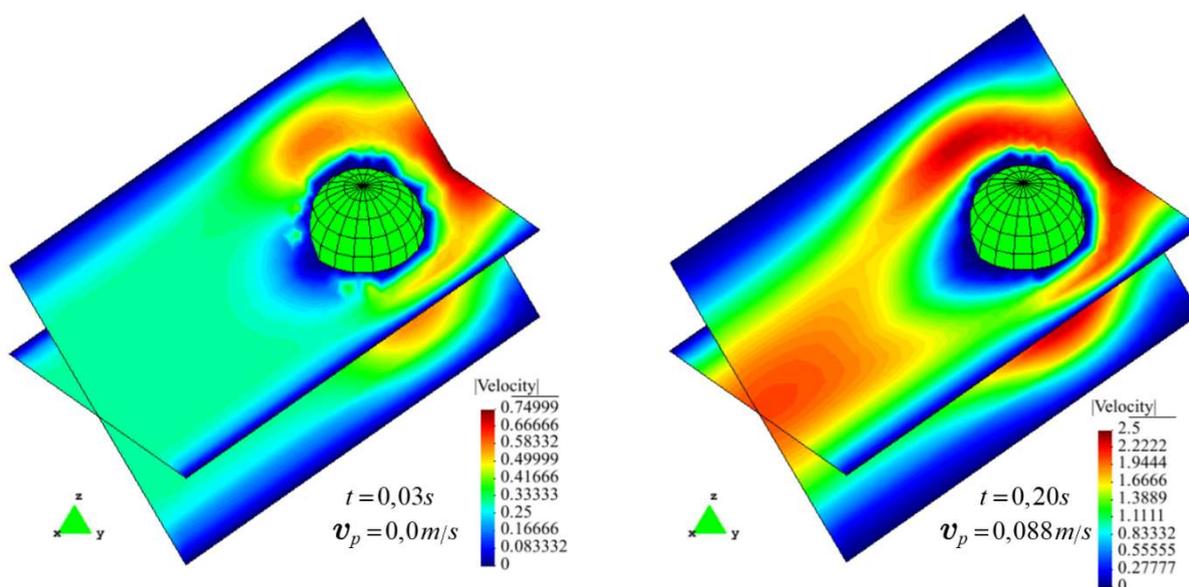
| Parâmetros da análise - fluido |                 | Parâmetros da análise - partícula |                      |
|--------------------------------|-----------------|-----------------------------------|----------------------|
| $\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )    | 1,0             | m (g)                             | 10,5                 |
| $\nu$ (m <sup>2</sup> /s)      | 0,01            | $\nu$ (Poisson)                   | 0,0                  |
| u0 (m/s)                       | 0,0             | d (cm)                            | 10,0                 |
| Integração temporal            | Newmark         | C* (m)                            | (0,1;0,1;0,1)        |
| $\alpha_1 = \alpha_2$          | $3 \times 10^6$ | $\mu_d$                           | 0,0                  |
| $\Delta t$ (s)                 | 0,01            | E (N/m <sup>2</sup> )             | $10^6$               |
|                                |                 | $\xi_n$                           | 0,0                  |
|                                |                 | Integração temporal               | Trapézio clássico    |
|                                |                 | $\Delta t$ (s)                    | $2,5 \times 10^{-6}$ |

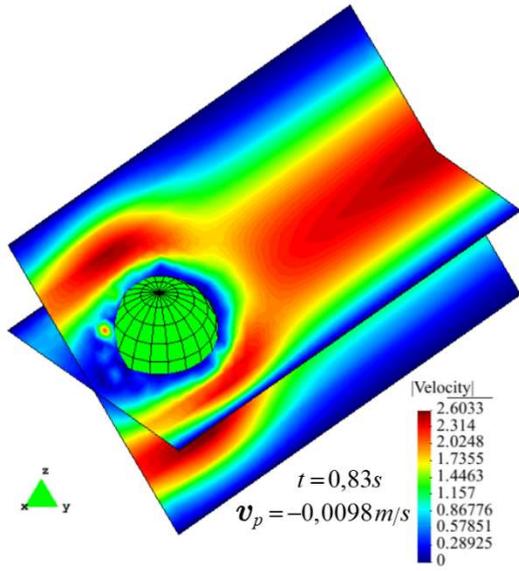
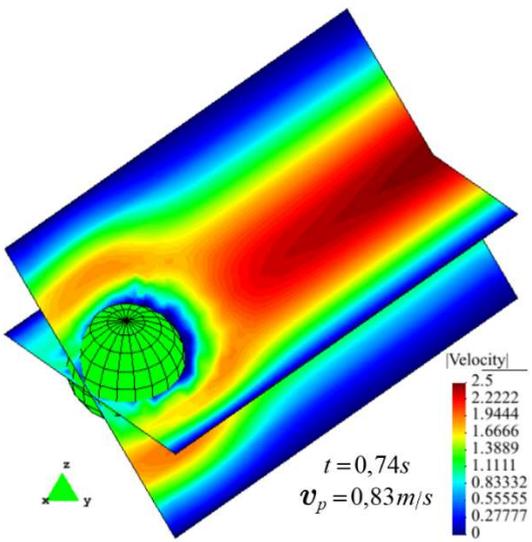
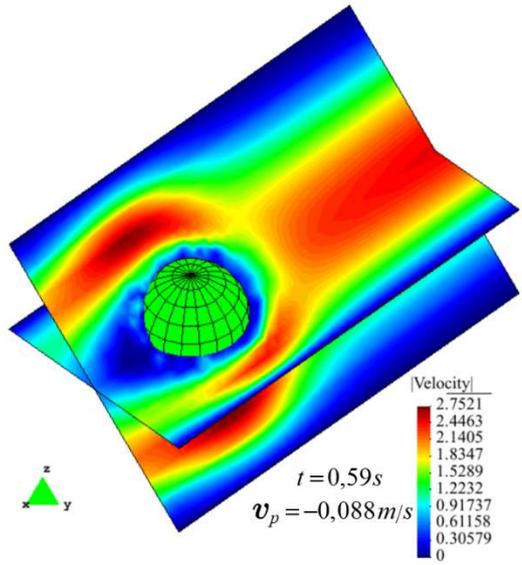
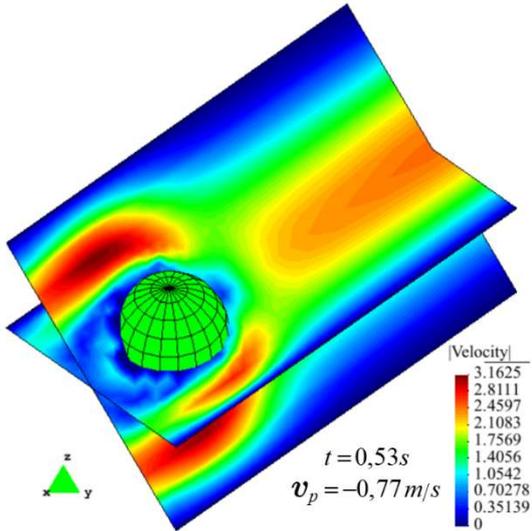
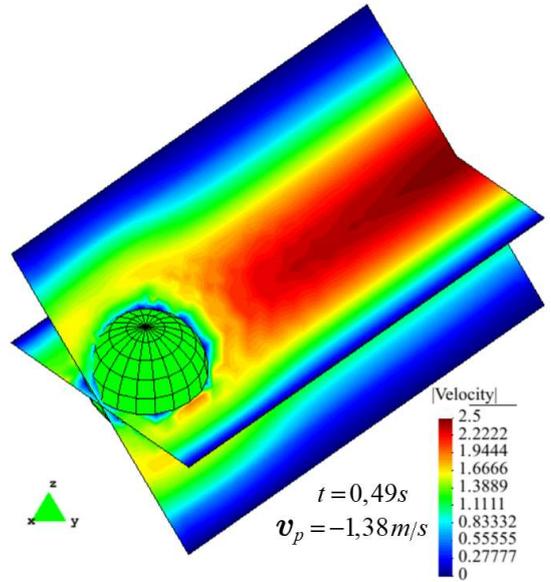
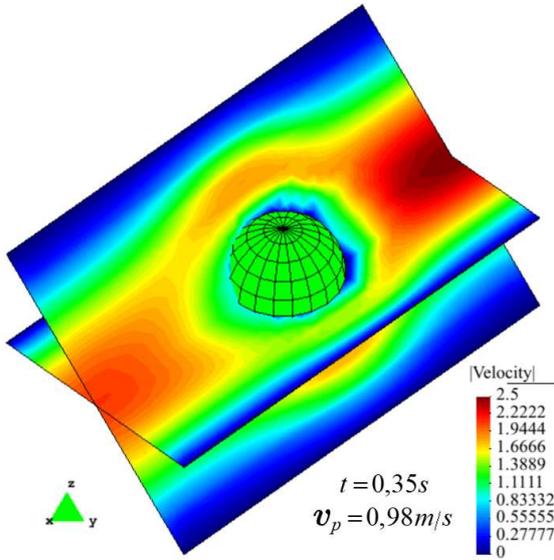
\* Coordenadas iniciais do centro da partícula

Tabela 26: Parâmetros utilizados no exemplo 5.6.3.

Na entrada do canal é aplicado um perfil de velocidade parabólico conforme equação (46) de forma incremental entre os instantes  $0 \text{ s} \leq \Delta t \leq 0,1 \text{ s}$ , com  $U_m = 2,5 \text{ m/s}$  e  $H = 0,2 \text{ m}$ . A partícula permanece fixa até o instante  $0,2 \text{ s}$ . Depois disso, ela é “solta” para escoar de acordo com sua interação com o fluido. A notação das componentes de velocidade adotada é  $(u_1, u_2, u_3) = (U, V, W)$  e as condições de contorno aplicadas nas laterais do canal é de velocidade do fluido nula. Na saída do canal considera-se uma superfície aberta com tensão zero aplicada. Contudo, para a partícula, esta superfície representa um anteparo que a impede de alcançar posições externas ao domínio do problema. A intenção deste exemplo é de se avaliar a robustez do algoritmo não somente em relação a suavização dos resultados quando do movimento da partícula, mas, também, quando do contato entre a partícula e um corpo rígido (anteparo).

A Figura 81 e Figura 82 ilustram a evolução dos campos de velocidade e pressão com o tempo, respectivamente. É possível observar que a partícula se choca com o anteparo algumas vezes durante o tempo de simulação. Os gráficos da Figura 83 a Figura 85, apresentam as evoluções da distância entre a partícula e o anteparo, da velocidade da partícula e da força resultante na partícula, todos na direção x. Através da Figura 84, pode-se perceber claramente a mudança de sentido da componente de velocidade da partícula na direção x, o que caracteriza a ocorrência de colisões. Além disso, a Figura 85 mostra o decaimento das forças hidrodinâmicas na partícula de acordo com a evolução de seu movimento. Somente após as colisões, elas voltam a aumentar para logo em seguida decair, como esperado fisicamente. Por meio desses gráficos é possível verificar a ocorrência de seis contatos partícula-anteparo. Os resultados mostram um movimento suave da partícula na direção do escoamento do fluido tendo esta passado por diversas configurações de intersecção partícula-elemento do fluido, mostrando a robustez do método proposto. A interação da partícula com o fluido fica mais evidente quando, após choques sucessivos, a partícula tem a sua velocidade e trajetória “amortecidas” pelo fluido, reduzindo a amplitude da sua trajetória cada vez que a colisão ocorre. Com isso, fica evidenciado que o método consegue simular a colisão entre a partícula e o anteparo de forma satisfatória mesmo com a distância entre ambos sendo, praticamente, nula. Portanto, a física deste problema foi simulada de forma satisfatória pelo método proposto.





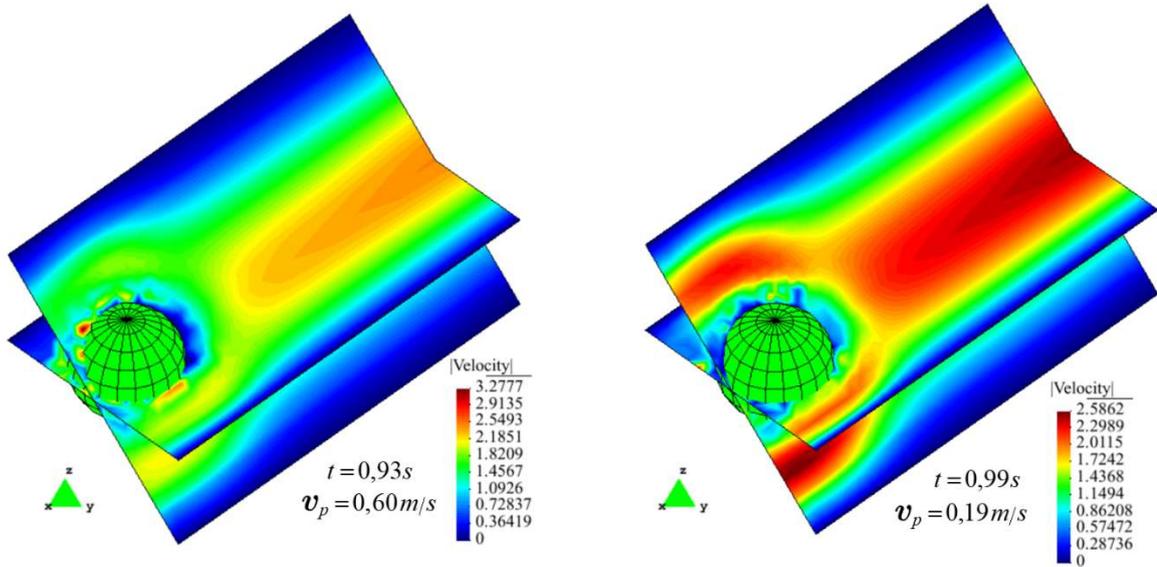
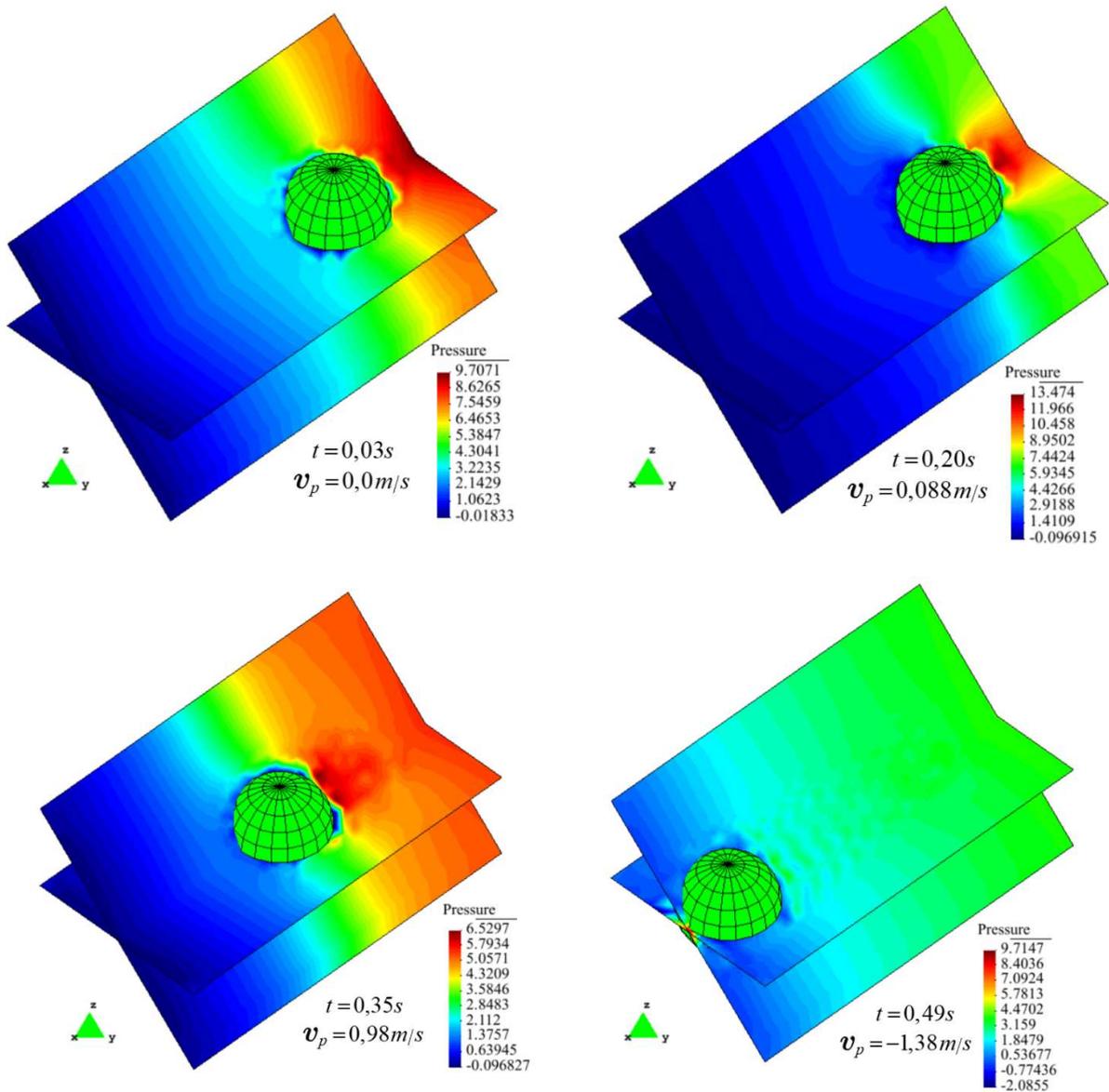


Figura 81: Evolução no tempo do campo de velocidade do exemplo 5.6.3 (vistas isométricas).



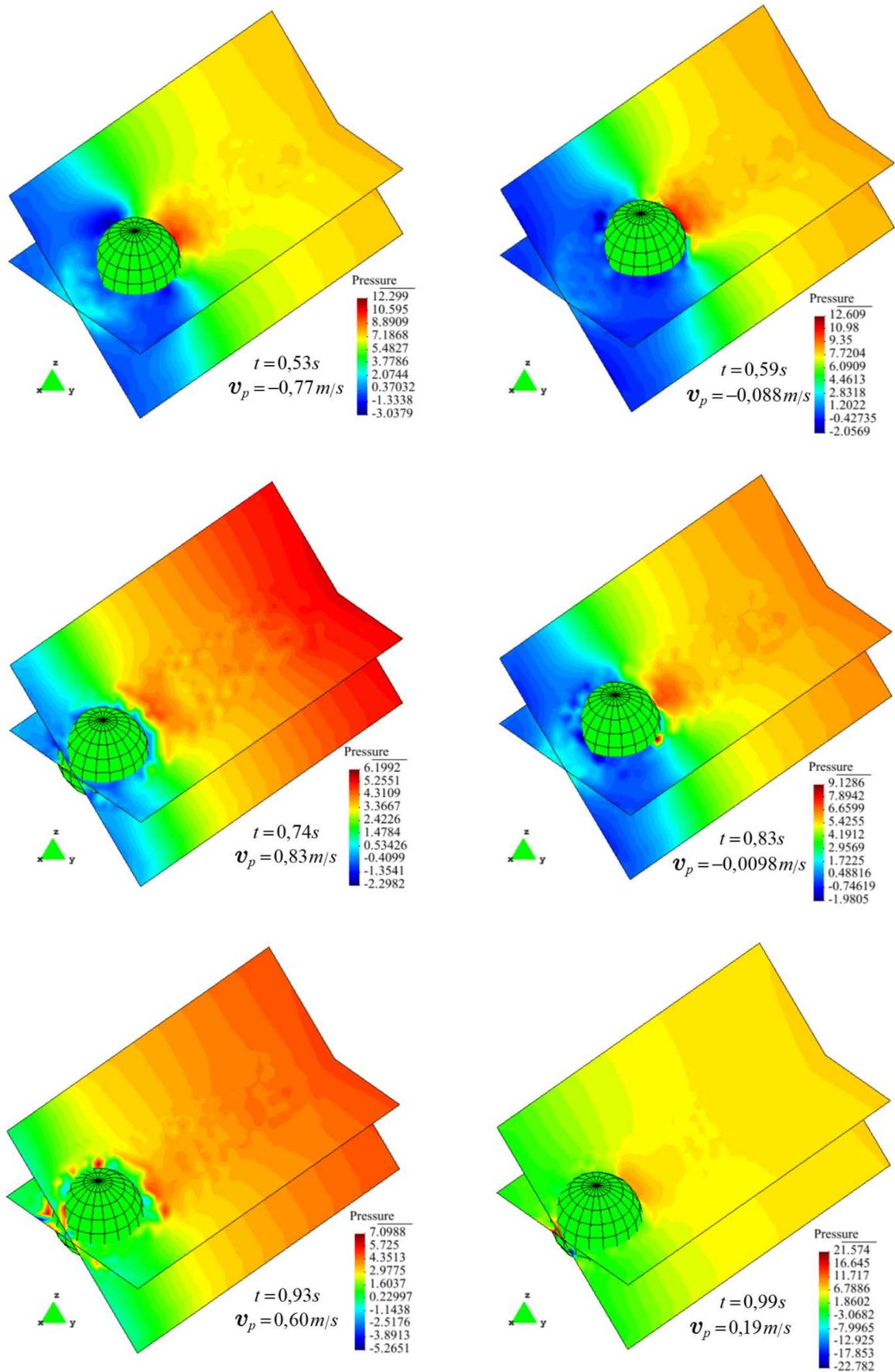


Figura 82: Evolução no tempo do campo de pressão do exemplo 5.6.3 (vistas isométricas).

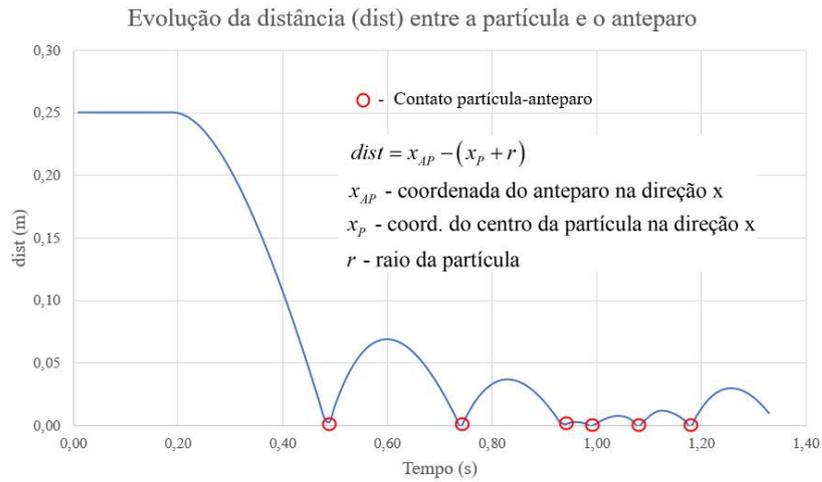


Figura 83: Histórico da distância (dist) entre a partícula e o anteparo do exemplo 5.6.3.

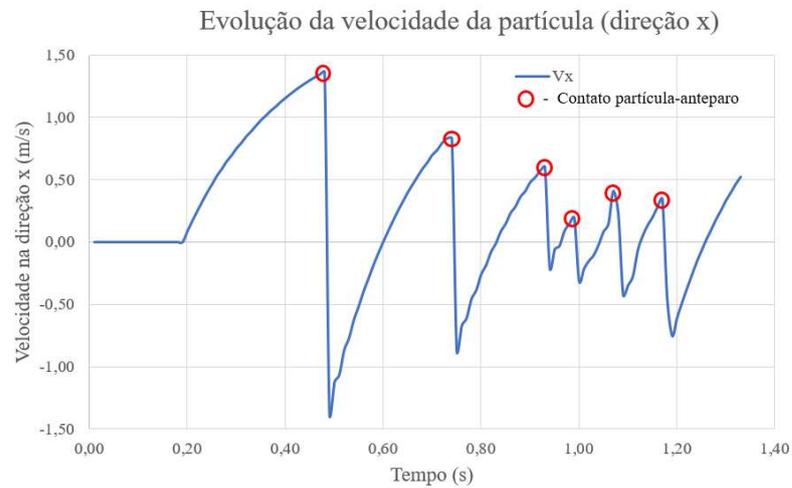


Figura 84: Histórico de velocidade da partícula (direção x) do exemplo 5.6.3.

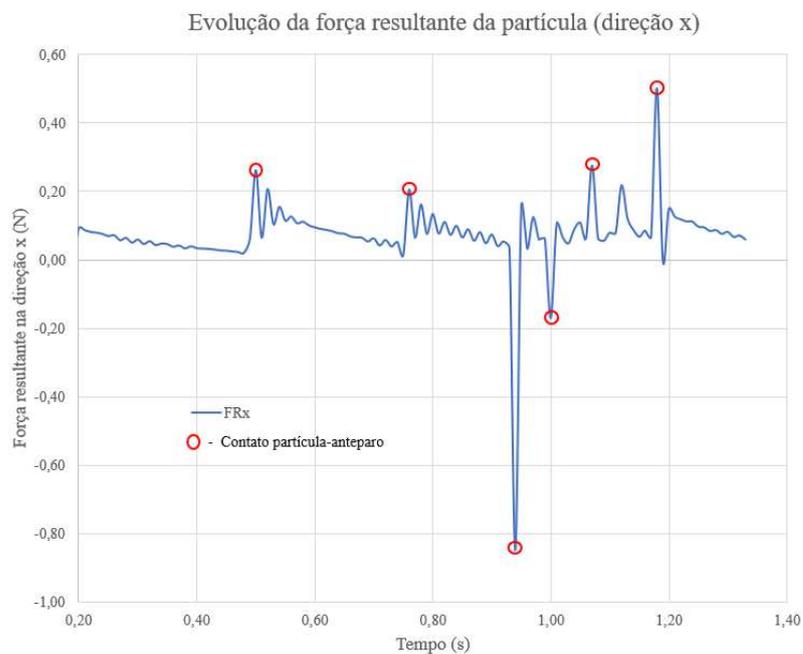


Figura 85: Histórico da força hidrodinâmica resultante na partícula (direção x) do exemplo 5.6.3.

Este exemplo, possui, aproximadamente, 215 mil graus de liberdade levando, em média, 10 minutos e 36 segundos para rodar um passo de tempo completo ( $\Delta t$ ) com 3 iterações (Newton-Raphson). Uma única iteração necessitou, em média, de 3 minutos para ser concluída. Importante ressaltar que, para esse exemplo, cada passo de tempo teve de 3 a 4 iterações para a obtenção da convergência da solução.

#### 5.6.4 Escoamento em torno de duas partículas móveis

Este exemplo simula o escoamento de fluido quando há a presença de duas partículas móveis. A geometria e a malha utilizada neste exemplo se encontram na Figura 86. A Tabela 27 apresenta os dados utilizados neste problema.

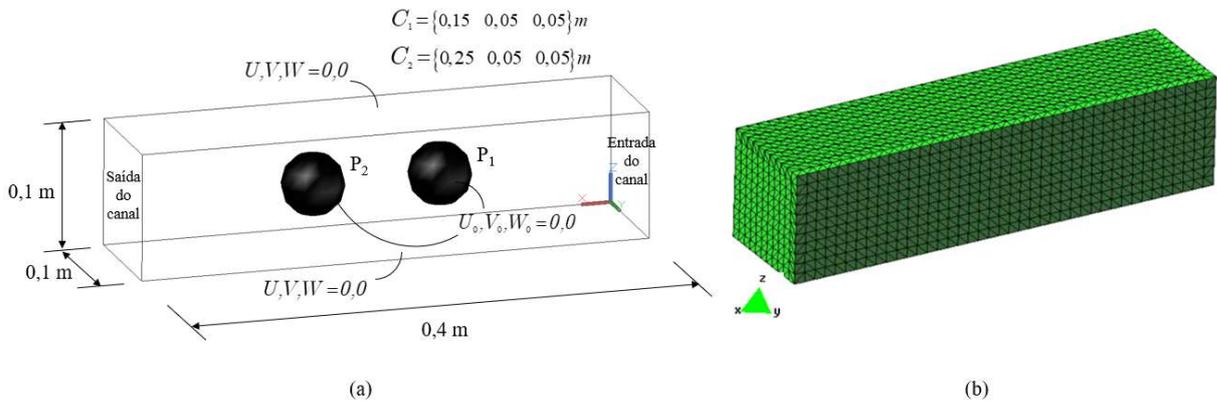


Figura 86: (a) Geometria e condições de contorno do exemplo 5.6.4; (b) Malha de elementos finitos usada no exemplo 5.6.4 (29.766 elementos finitos tetraedros mistos com 43.907 nós).

| Parâmetros da análise - fluido |                 | Parâmetros da análise - partícula |                      |
|--------------------------------|-----------------|-----------------------------------|----------------------|
| $\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )    | 1,0             | m (g)                             | 2,0                  |
| $\nu$ (m <sup>2</sup> /s)      | 0,01            | $\nu$ (Poisson)                   | 0,3                  |
| $u_0$ (m/s)                    | 0,0             | d (cm)                            | 5,0                  |
| Integração temporal            | Newmark         | $C_1^*$ (m)                       | (0,15;0,05;0,05)     |
| $\alpha_1 = \alpha_2$          | $3 \times 10^5$ | $C_2^*$ (m)                       | (0,25;0,05;0,05)     |
| $\Delta t$ (s)                 | 0,01 à 0,0025   | $\mu_d$                           | 0,0                  |
|                                |                 | E (N/m <sup>2</sup> )             | $10^6$               |
|                                |                 | $\xi_n$                           | 0,05                 |
|                                |                 | Integração temporal               | Trapézio clássico    |
|                                |                 | $\Delta t$ (s)                    | $2,5 \times 10^{-8}$ |

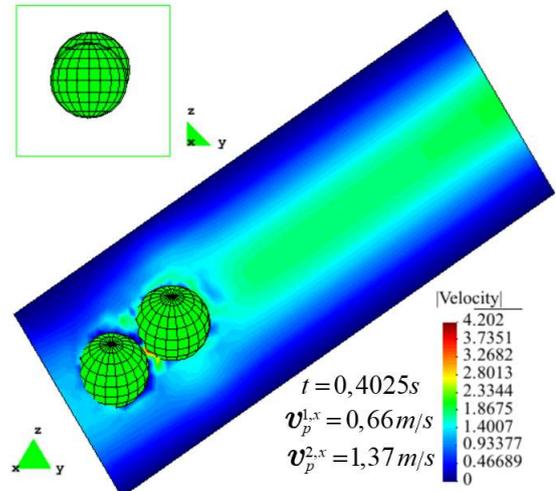
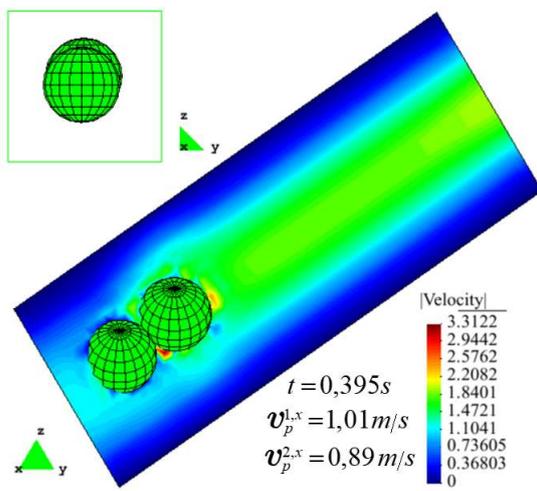
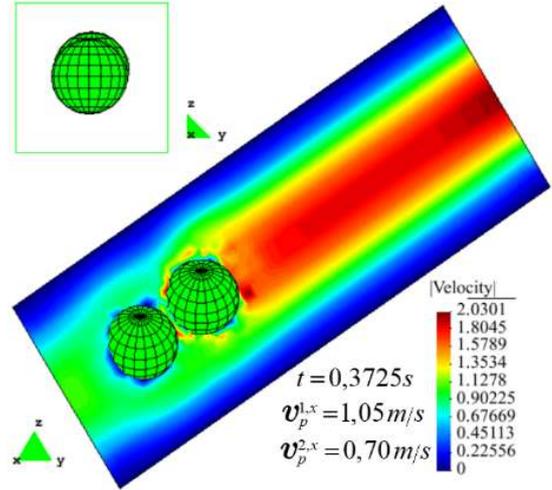
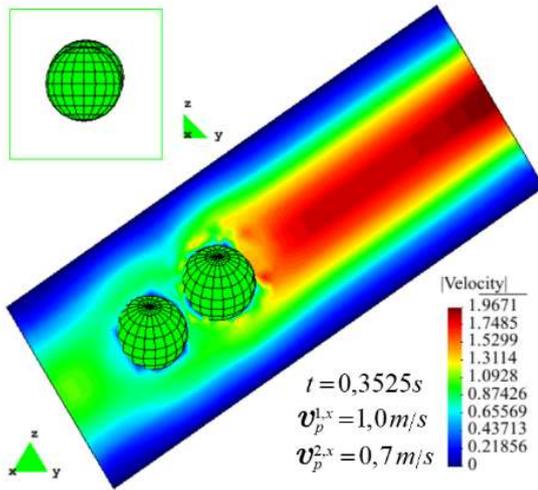
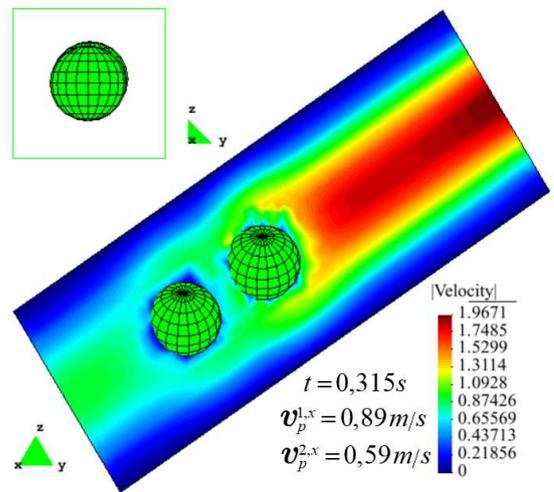
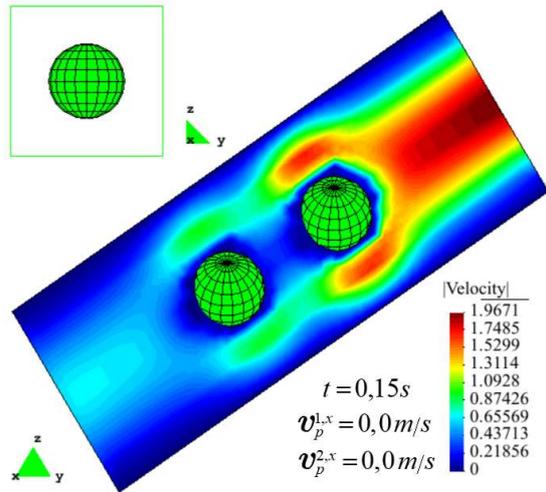
\* Coordenadas iniciais do centro da partícula

Tabela 27: Parâmetros utilizados no exemplo 5.6.4.

Análogo ao exemplo 5.6.3, aplica-se uma perfil de velocidade na entrada do canal de acordo com a equação (46) de forma incremental entre os instantes  $0 \text{ s} \leq \Delta t \leq 0,1 \text{ s}$ , com

$U_m = 2,0 \text{ m/s}$  e  $H = 0,1 \text{ m}$ . As partículas, inicialmente, encontram-se fixas até o instante de  $0,2\text{s}$  quando são “soltas” para se movimentarem de acordo com a interação fluido-partícula. Durante o intervalo de tempo  $0 \text{ s} \leq \Delta t \leq 0,2 \text{ s}$ , o passo de tempo adotado é de  $\Delta t = 0,01 \text{ s}$ . Após isso, utiliza-se  $\Delta t = 0,0025 \text{ s}$  para que os efeitos de colisões entre partícula-partícula e partícula-anteparo sejam capturados de forma mais precisa. A notação das componentes de velocidade, as condições de contorno e as considerações para a superfície rígida na saída do canal são as mesmas descritas em 5.6.3. Neste exemplo, pretende-se avaliar a robustez do algoritmo em diversas situações em que as partículas podem ser submetidas tais como: seus movimentos isolados, em contatos do tipo partícula-partícula e partícula-anteparo.

A Figura 87 e a Figura 88 ilustram a evolução das isocurvas de velocidade e pressão deste exemplo, respectivamente. Nelas é possível verificar a aproximação de  $P_1$  com relação a  $P_2$  entre os instantes  $0,2 \text{ s} \leq t \leq 0,395 \text{ s}$  para, logo em seguida, no instante  $t = 0,4025 \text{ s}$  ocorrer o primeiro choque entre elas caracterizado pela redução da velocidade de  $P_1$  e aumento da velocidade de  $P_2$ . Após isso,  $P_2$  choca-se com o anteparo em  $t = 0,4175 \text{ s}$  (detalhe na Figura 89), invertendo o sentido da sua velocidade, projetando-se novamente contra  $P_1$  em  $t = 0,425 \text{ s}$  (detalhe na Figura 90). É importante observar que o algoritmo proposto consegue simular choques entre partícula-partícula inclusive quando há a possibilidade de pequena interpenetração entre elas no passo de cálculo do fluido, como ilustrado na Figura 90. Essa interpenetração é uma medida de deformação local por encurtamento de seus raios de acordo com o modelo de contato descrito em 3.5.2. Esse ciclo se repete mostrando que o algoritmo proposto apresenta consistência física na simulação de IFP com diferentes tipos de contatos. Esses contatos ficam mais evidentes observando-se a Figura 91 e a Figura 92.



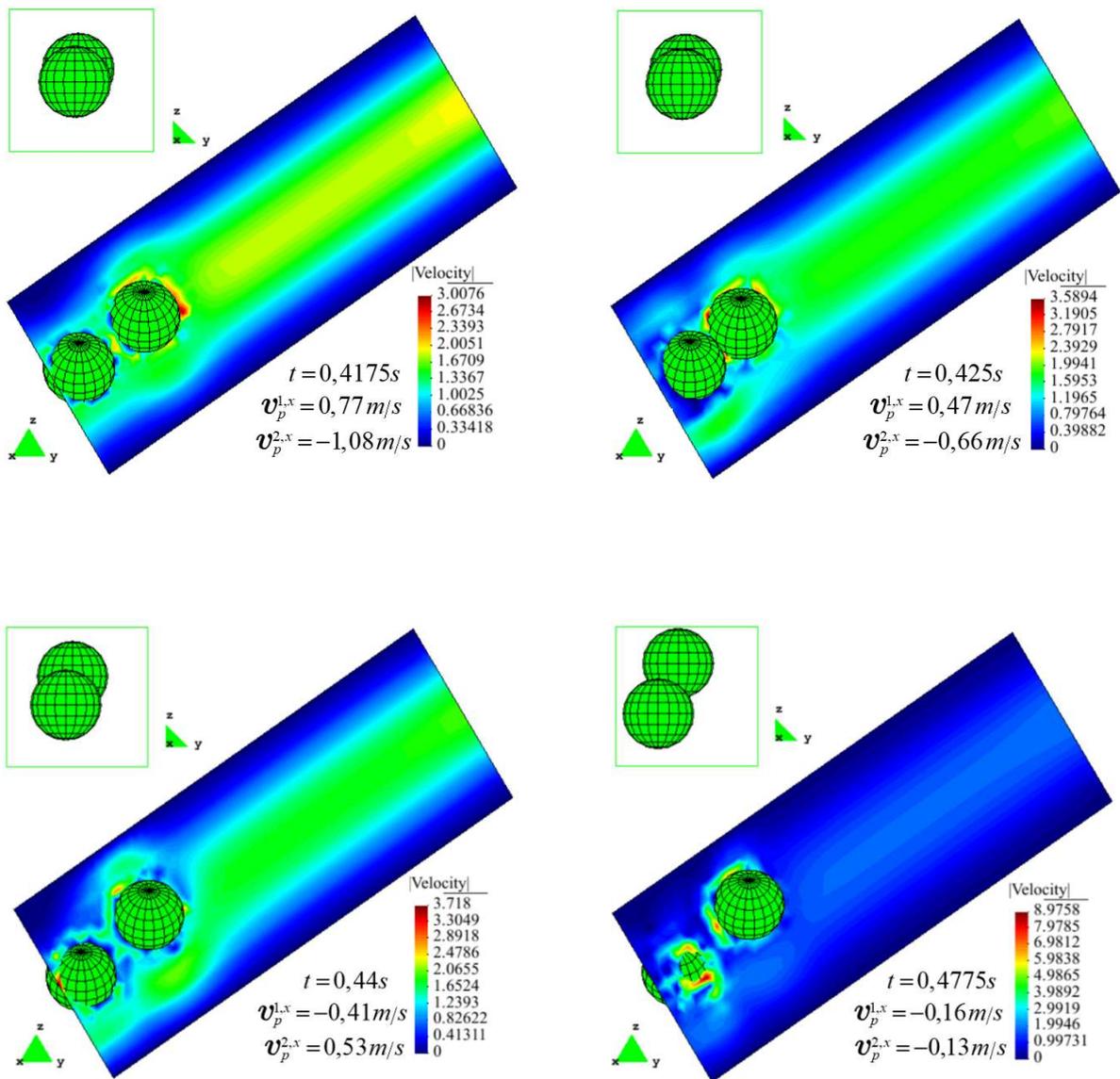
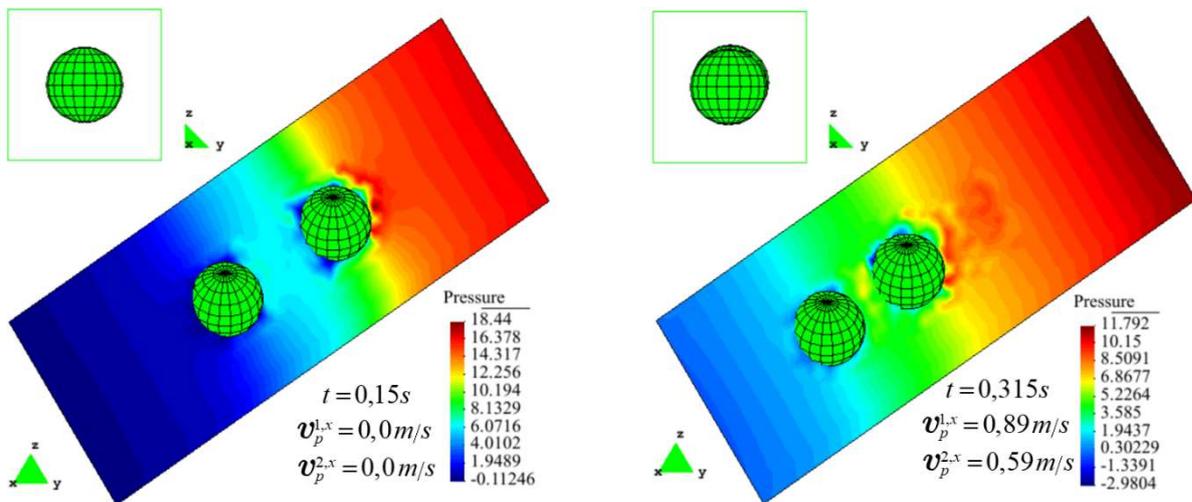
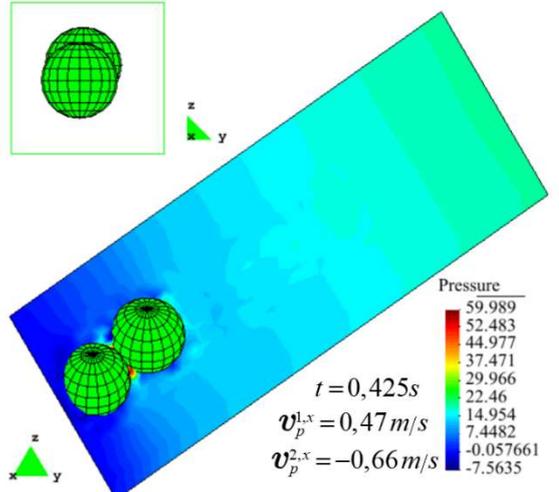
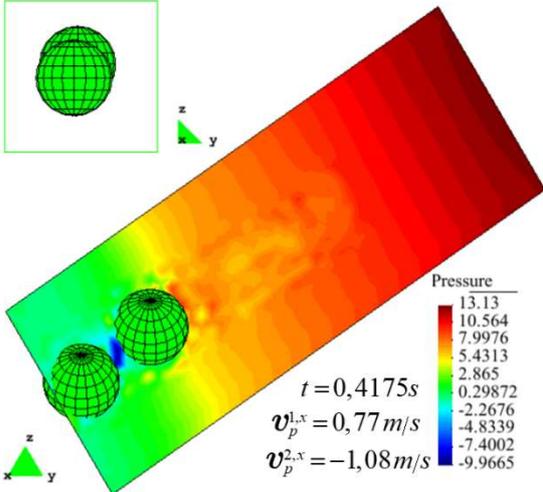
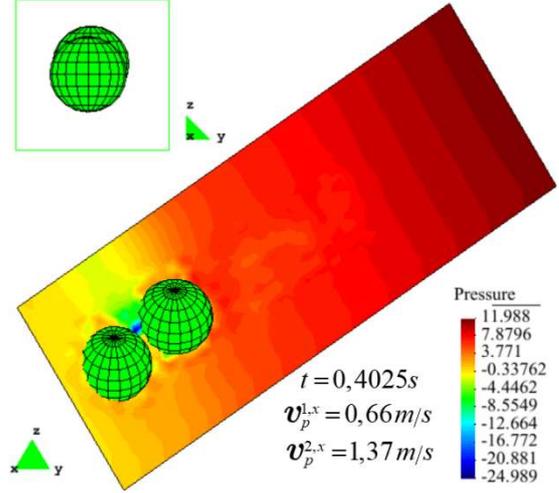
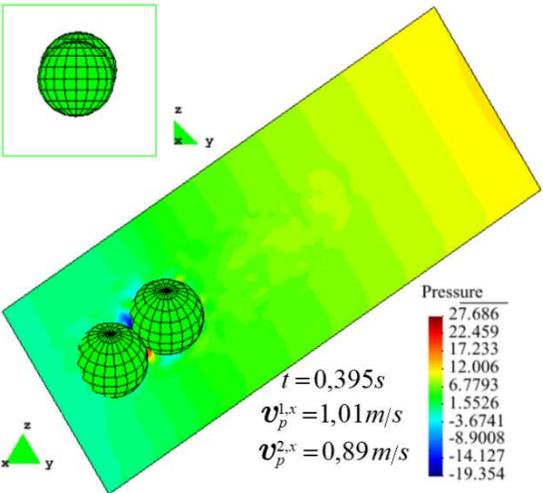
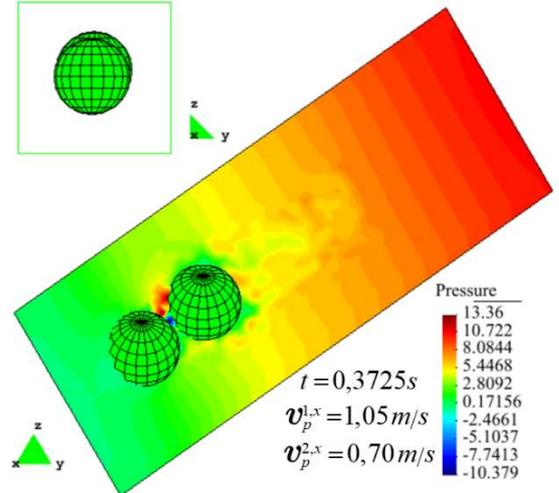
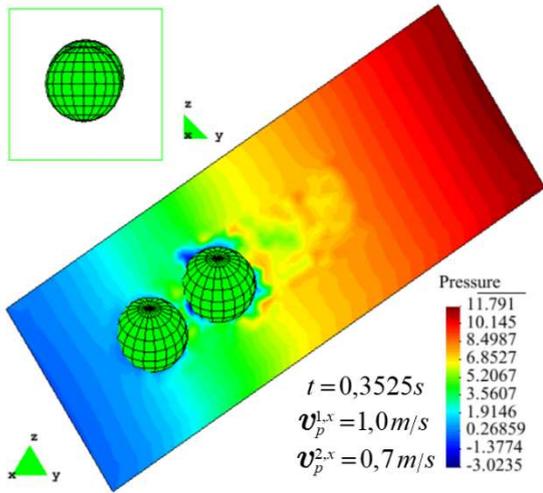


Figura 87: Evolução no tempo do campo de velocidade do exemplo 5.6.4 (vistas isométricas).





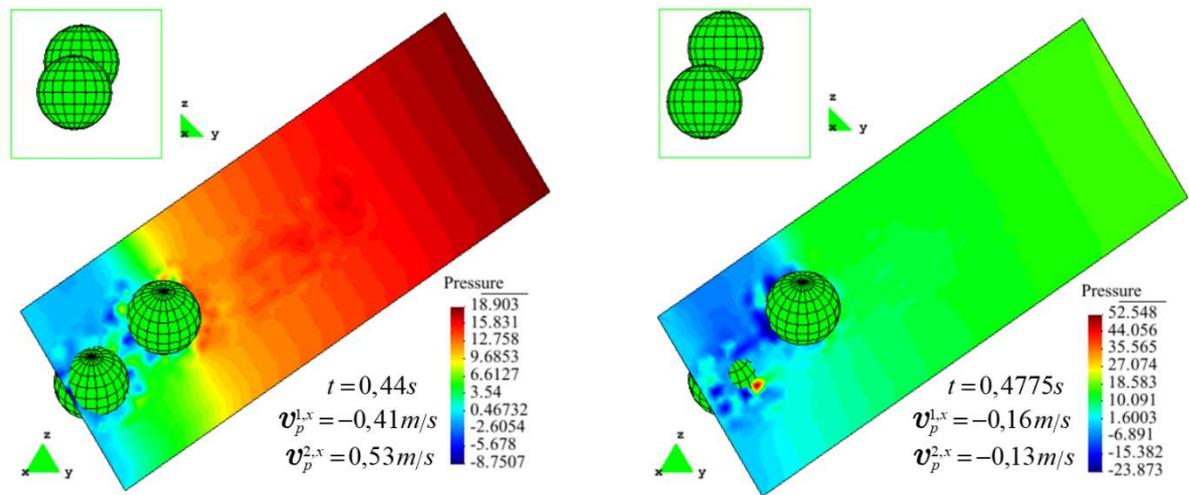


Figura 88: Evolução no tempo do campo de pressão do exemplo 5.6.4 (vistas isométricas).

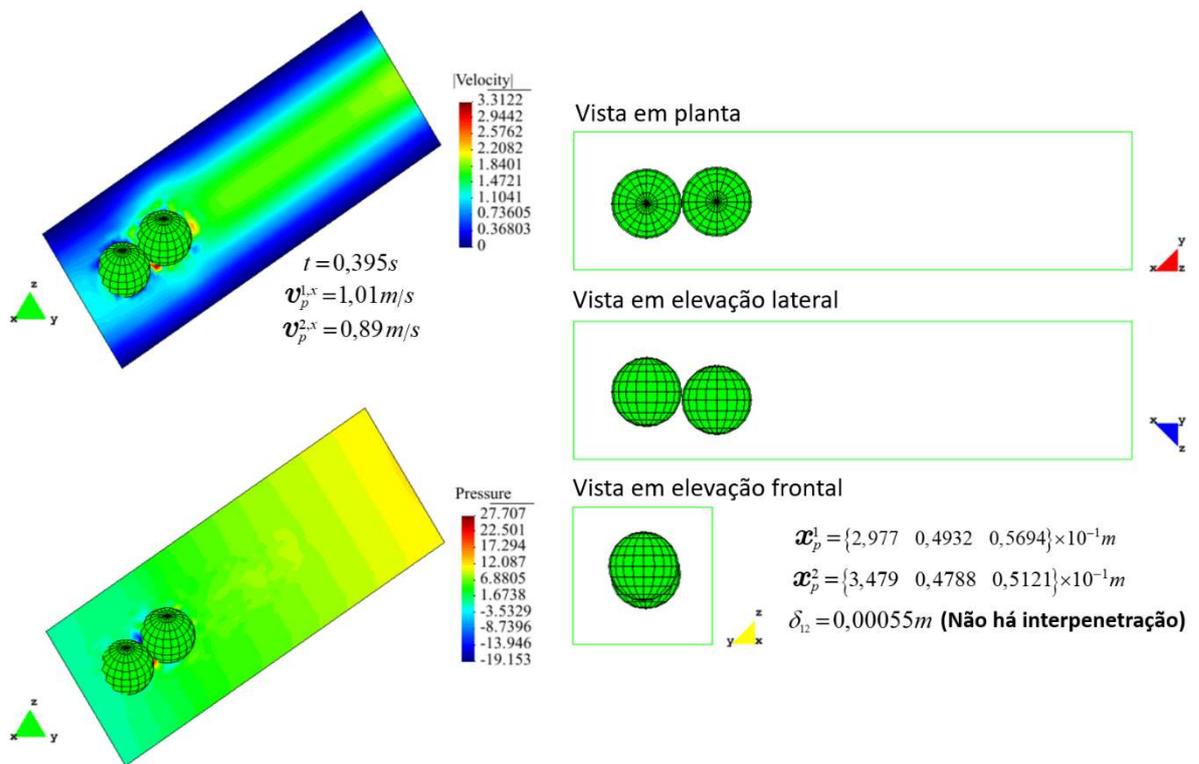


Figura 89: Detalhe do contato partícula-partícula sem interpenetração entre elas.

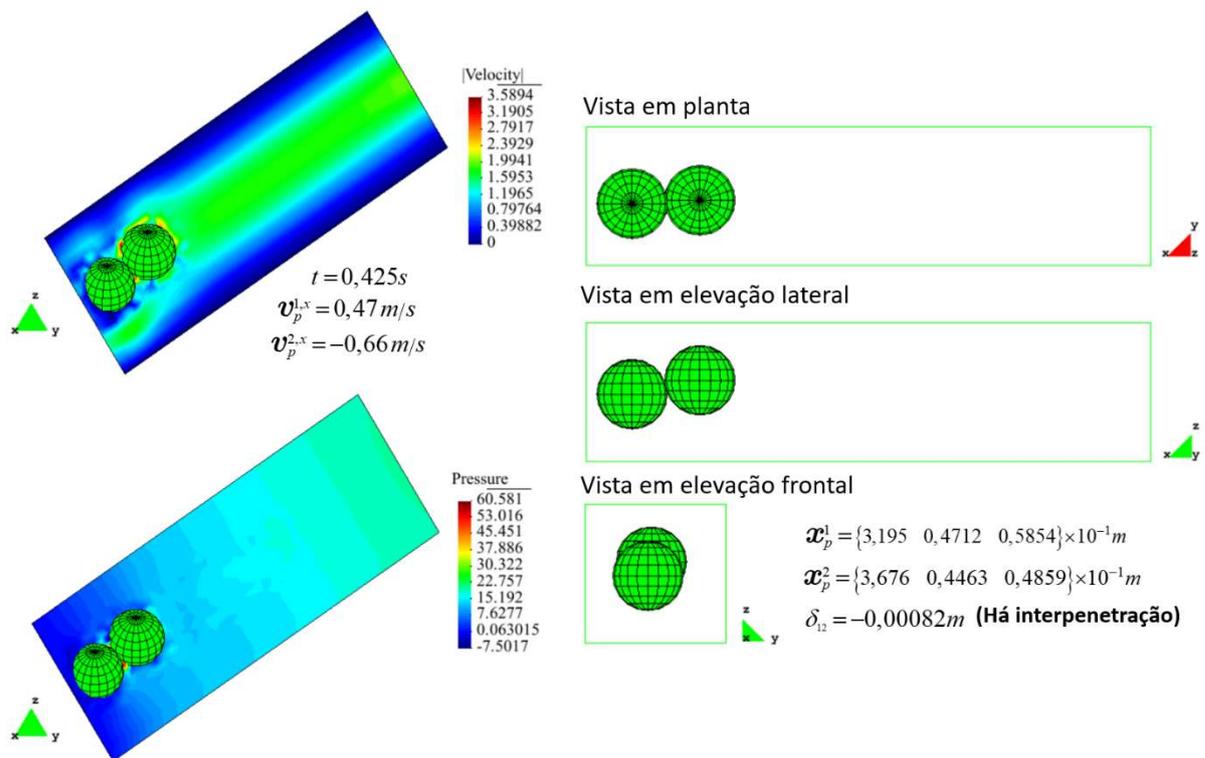


Figura 90: Detalhe do contato partícula-partícula com interpenetração entre elas.

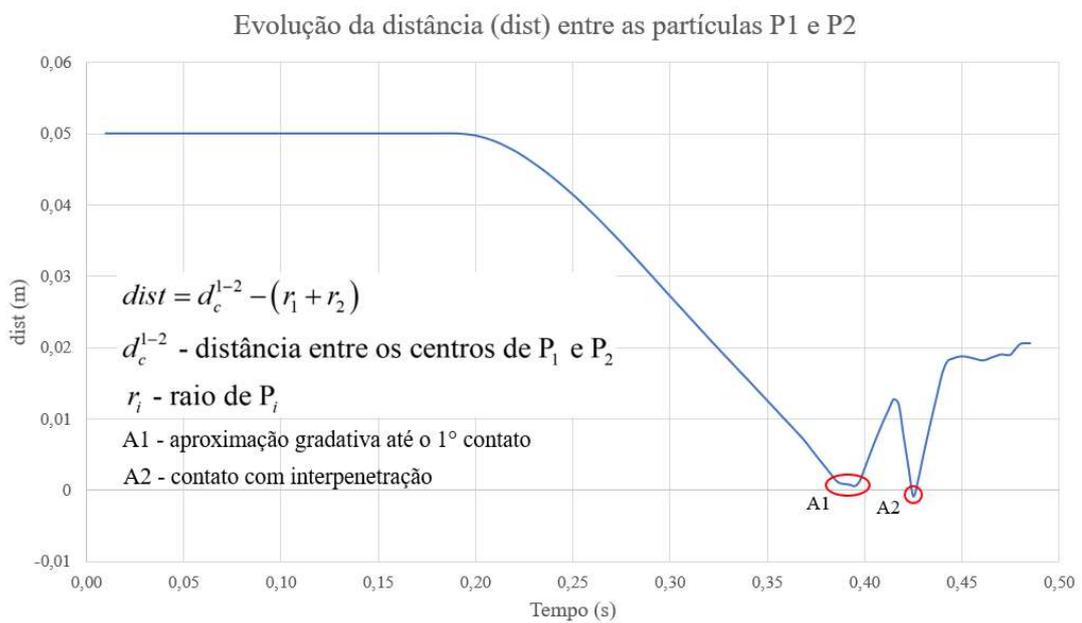


Figura 91: Histórico da distância (dist) entre as partículas do exemplo 5.6.4.

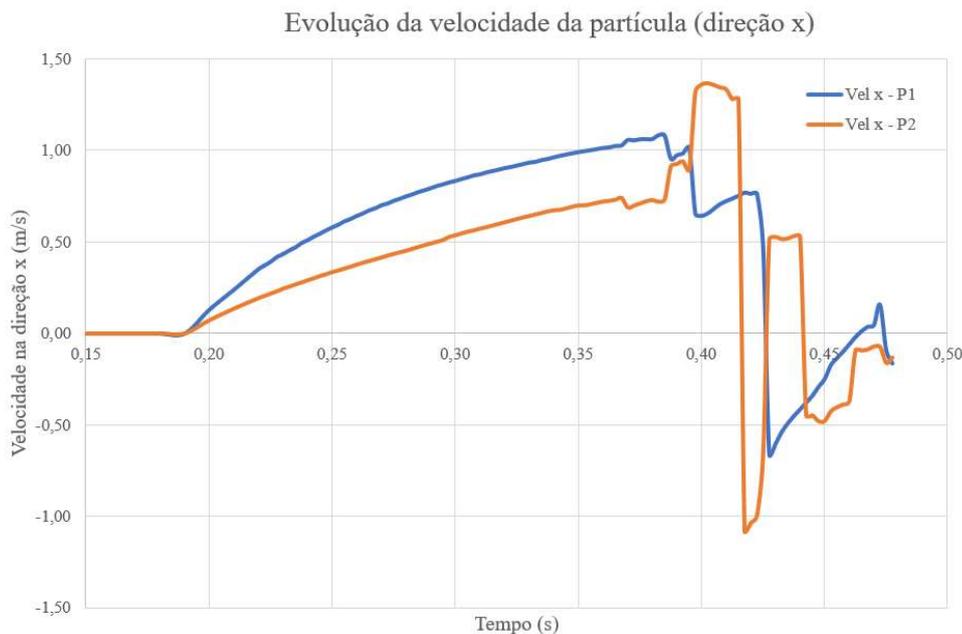


Figura 92: Histórico de velocidade das partículas (direção x) do exemplo 5.6.4.

Alguns aspectos são importantes de serem comentados com relação a este exemplo.

- Foi necessário reduzir significativamente o passo de tempo para rodar o algoritmo da partícula (na ordem de  $10^{-8}$  s) com relação ao exemplo 5.6.3. Sem essa redução não é possível garantir a convergência do método de integração temporal utilizado (trapézio clássico) quando da ocorrência de choques do tipo partícula-partícula;
- Durante a ocorrência de cortes duplos do elemento fluido, isto é, contatos do tipo partícula-partícula, conforme descrito em 5.2, observou-se a dificuldade na convergência do método de Newton para a obtenção da solução do problema não linear durante a execução do passo de tempo do fluido. Após a observação de várias simulações teste do problema, este foi contornado fazendo com que os termos estabilizadores introduzidos pelo método de Nitsche,  $\mathbf{E}_e$  e  $\mathbf{F}_e$  de (115), tivessem os seus parâmetros  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  reduzidos somente para os elementos de fluido em corte duplo. Com a análise de vários testes observou-se que, para garantir a convergência, esta redução deve ser no mínimo da ordem de  $10^{-2}$  do valor estabelecido inicialmente para  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$ ;
- Durante os contatos partícula-partícula, também foram observados concentração de pressão e picos na velocidade do fluido em alguns elementos do fluido cortados pelas partículas. Isso é devido a perturbação local causada pela própria natureza física das colisões além dos problemas também locais oriundos da imposição das condições de contorno de forma fraca via método de Nitsche. Esses efeitos podem ser minorados

densificando a malha do fluido em torno das partículas e diminuindo o  $\Delta t$  do fluido.

- Com aproximadamente 138 mil graus de liberdade, um passo de tempo completo deste exemplo levou, em média, 8 minutos e 53 segundos para rodar ( $\Delta t$ ) com 3 iterações. Uma única iteração necessitou, em média, de 1 minutos e 35 segundos para ser concluída. Ressalta-se que, para esse exemplo, cada passo de tempo teve de 3 a 4 iterações para a obtenção da convergência da solução.

### 5.6.5 Escoamento em torno de três partículas móveis

Este último exemplo é o mesmo apresentado em 5.6.4 acrescido a ele uma partícula móvel conforme Figura 93. Todos as informações necessárias para simular este exemplo podem ser obtidas em 5.6.4.

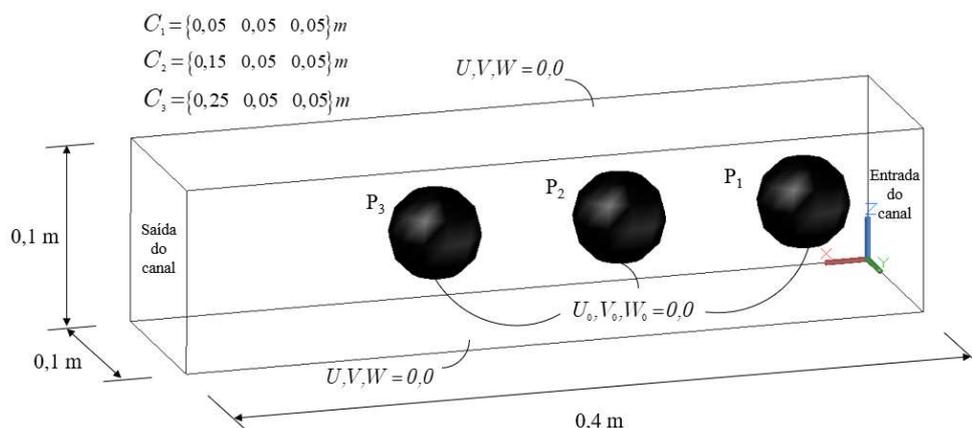
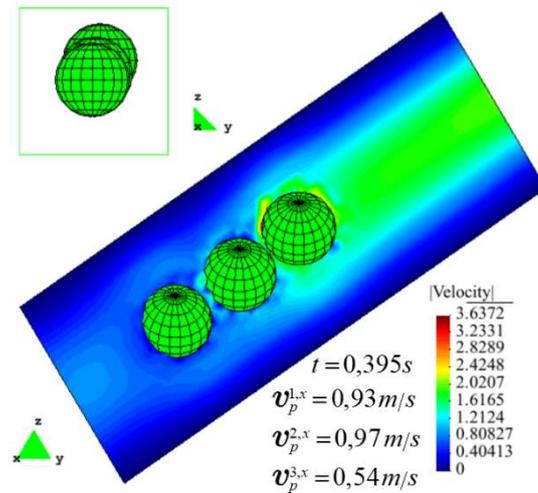
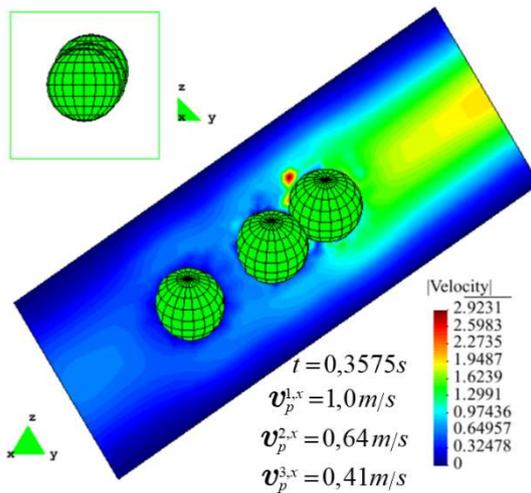
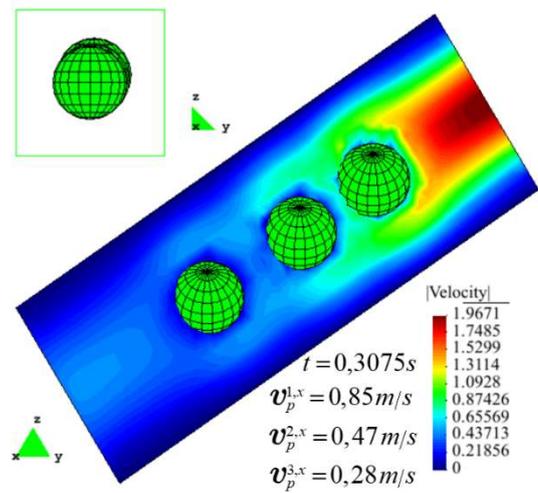
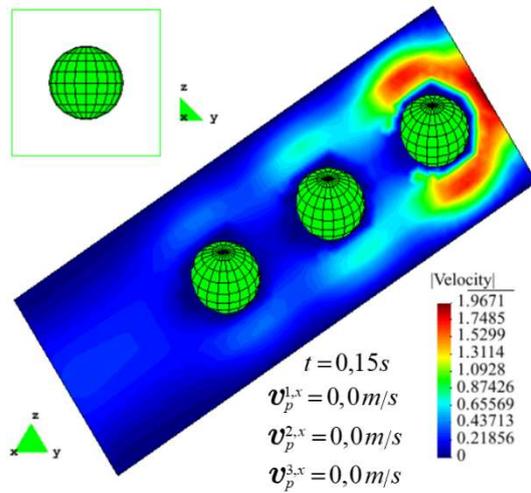


Figura 93: Geometria e condições de contorno do exemplo 5.6.5.

A Figura 94 e a Figura 95 ilustram a evolução dos campos de velocidade e de pressão deste exemplo, respectivamente. Assim como no exemplo 5.6.4, neste exemplo é possível observar a suavização do movimento das partículas como também a ocorrência de diversas configurações de contato. No intervalo  $0,2 \text{ s} \leq t \leq 0,35 \text{ s}$ , P<sub>1</sub> se aproxima de P<sub>2</sub> para, em seguida, ocorrer o primeiro contato desta simulação entre ambas as partículas em  $t = 0,3575 \text{ s}$ . Após isso, P<sub>1</sub> e P<sub>2</sub> ganham velocidade aproximando-se de P<sub>3</sub> para em  $t = 0,4575 \text{ s}$  haver a ocorrência do contato simultâneo entre as três partículas. No instante  $t = 0,49 \text{ s}$  há a ocorrência de contatos simultâneos entre P<sub>3</sub> e o anteparo e P<sub>3</sub> com P<sub>2</sub>. A Figura 96 e Figura 97 mostram de forma mais clara esses contatos. Além disso, é também possível se observar a ocorrência de contato prolongado entre P<sub>2</sub> e P<sub>3</sub> durante o intervalo A2 bem como vários contatos de curta duração no intervalo A3. Ambos os intervalos podem ser visualizados na Figura 97. A Figura 98 apresenta o histórico da componente de velocidade na direção x das partículas. Os

resultados deste exemplo mostram que o algoritmo proposto consegue simular de maneira satisfatória problemas de IFP mesmo com a presença de contatos complexos. Importante ressaltar que os aspectos comentados em 5.6.4 também se aplicam neste exemplo.



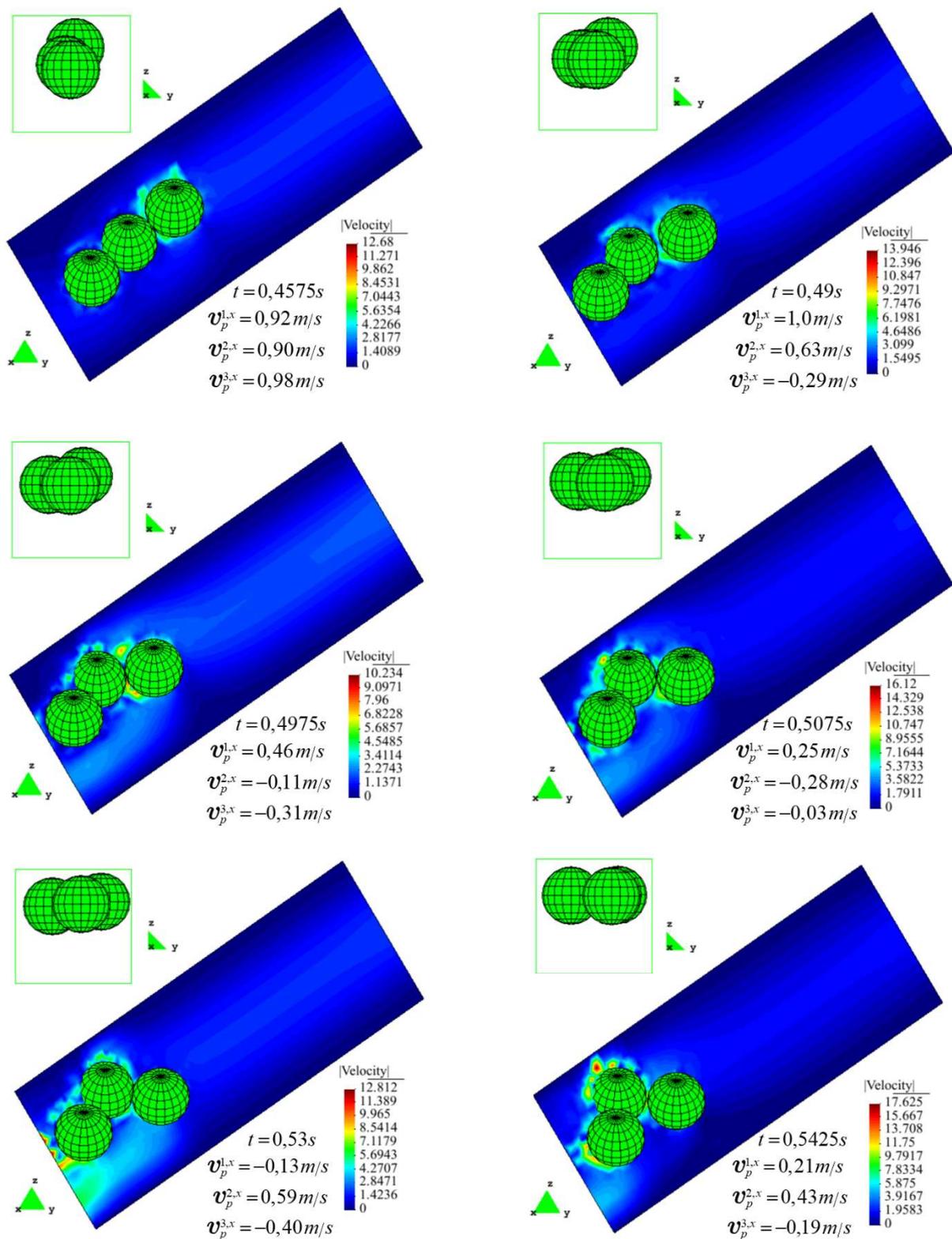
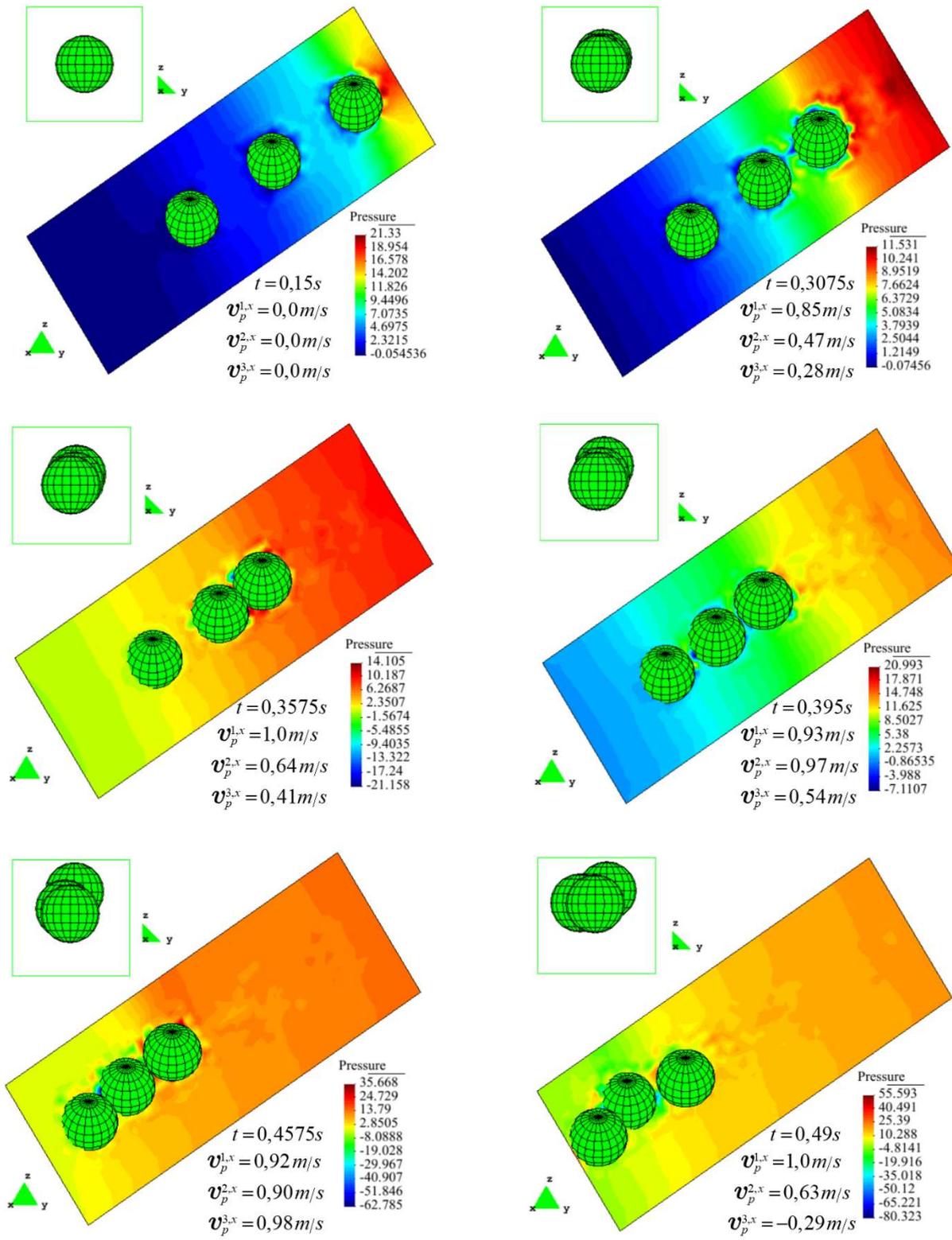


Figura 94: Evolução no tempo do campo de velocidade do exemplo 5.6.5 (vistas isométricas).



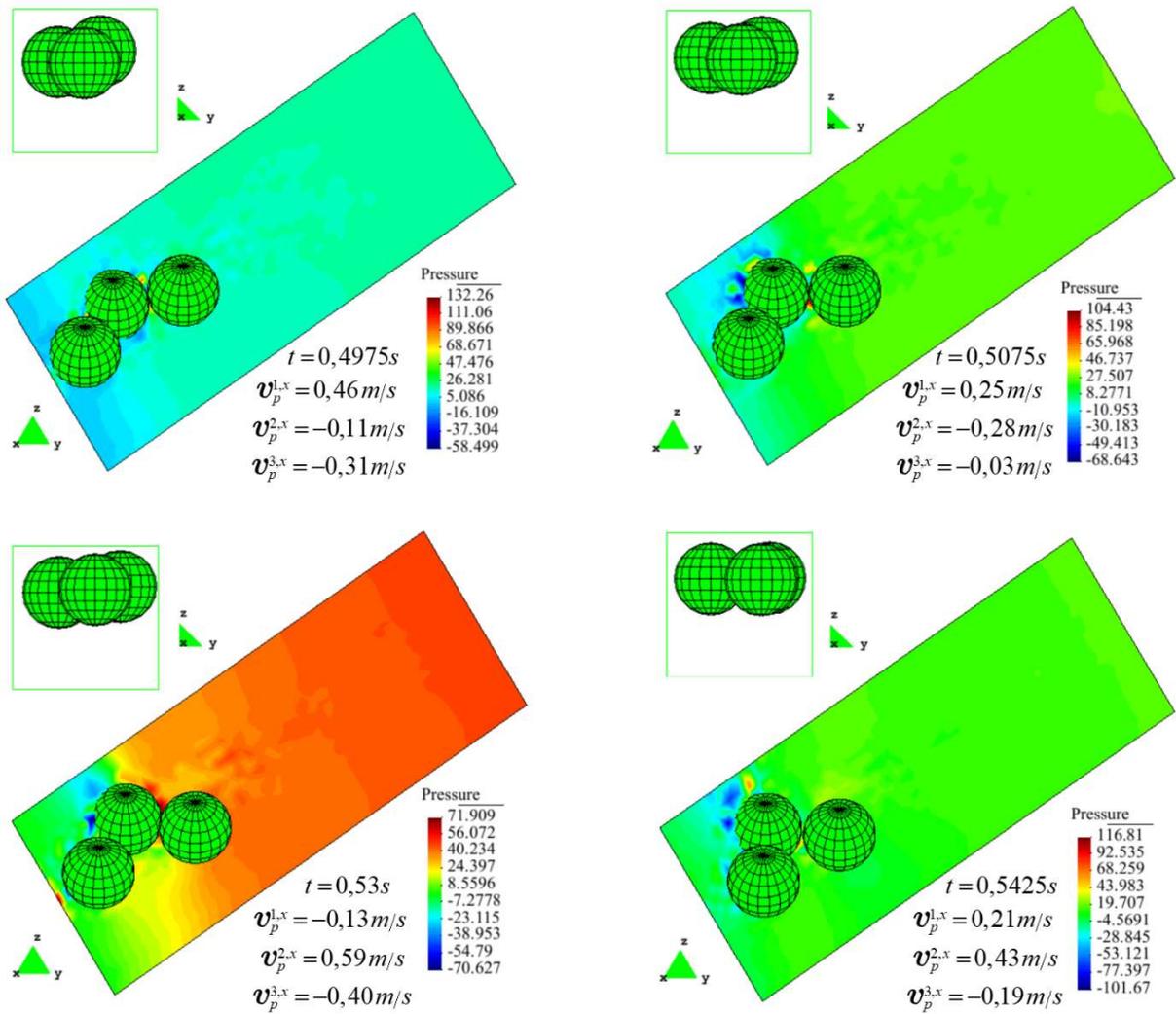


Figura 95: Evolução no tempo do campo de pressão do exemplo 5.6.5 (vistas isométricas).

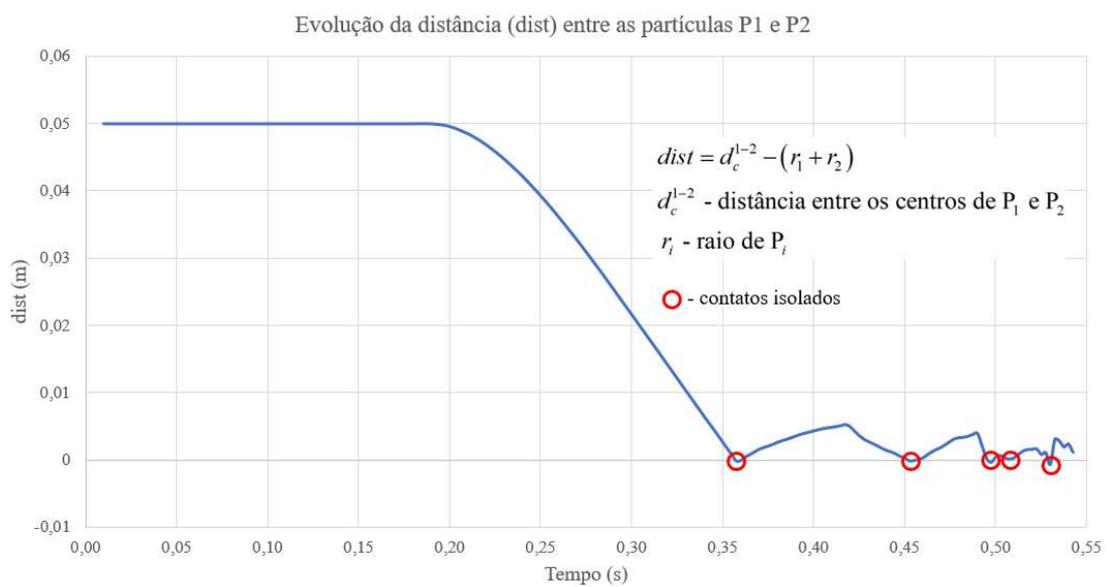


Figura 96: Histórico da distância (dist) entre as partículas  $P_1$  e  $P_2$  do exemplo 5.6.5.

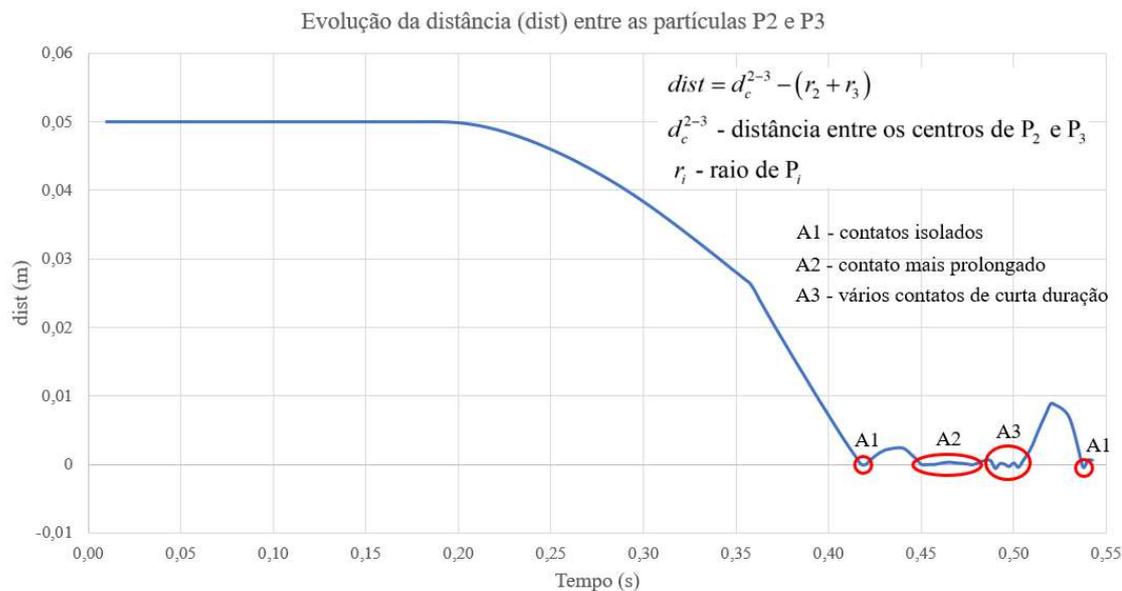


Figura 97: Histórico da distância (dist) entre as partículas P<sub>2</sub> e P<sub>3</sub> do exemplo 5.6.5.

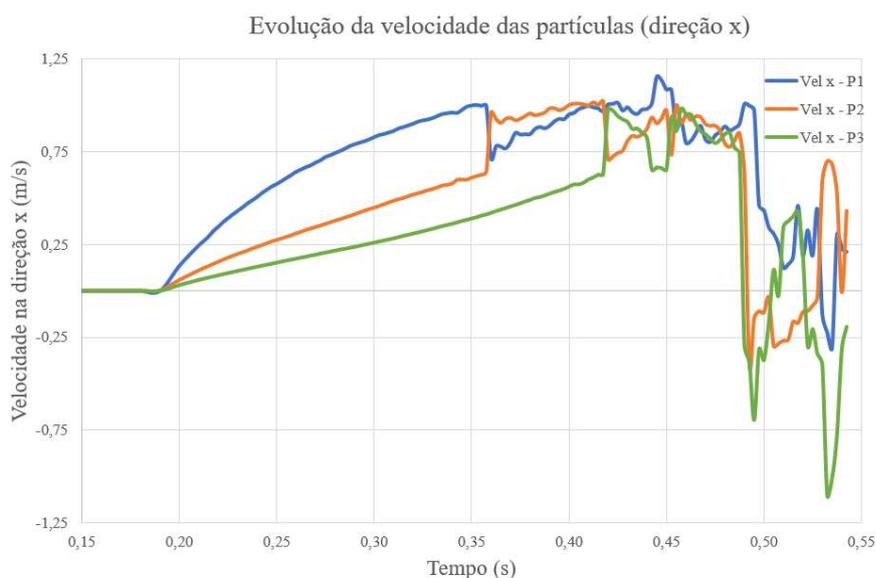


Figura 98: Histórico de velocidade das partículas (direção x) do exemplo 5.6.5.

Assim como o exemplo 5.6.4, este exemplo tem aproximadamente 138 mil graus de liberdade. Um passo de tempo completo deste exemplo levou, em média, 11 minutos e 15 segundos para rodar ( $\Delta t$ ) com 4 iterações. Uma única iteração necessitou, em média, de 1 minutos e 26 segundos para ser concluída. Ressalta-se que, para esse exemplo, cada passo de tempo teve de 3 a 4 iterações para a obtenção da convergência da solução. Observa-se que, apesar deste exemplo ter uma partícula a mais em relação ao exemplo 5.6.4, o tempo necessário para rodar uma iteração completa foi ligeiramente menor do que o 5.6.4. Isso se deve aos graus de liberdade dos elementos de fluido pertencentes ao domínio  $\Omega^-$  serem desativados, o que acarreta em um sistema ligeiramente menor a ser resolvido.

## 6 DISCUSSÃO, CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

Os resultados apresentados mostram que o objetivo proposto por esta tese de doutoramento foi atingido com êxito. O método proposto se mostrou robusto o suficiente para simular problemas de IFP com algumas partículas livres para se movimentarem de acordo com suas interações com o fluido podendo ocorrer contatos complexos isolados ou simultâneos entre elas e com as fronteiras do domínio do problema. Além disso, o método proposto foi capaz de simular movimentos suaves das partículas mesmo após a ocorrência de colisões complexas.

A utilização da biblioteca OpenMP possibilitou algum paralelismo de partes específicas do algoritmo o que garantiu uma eficiência computacional satisfatória com relação aos exemplos estudados. Contudo, para problemas com número de partículas e grau de liberdade elevados (a partir de 2 milhões aproximadamente), a utilização de computação paralela de alto nível, bibliotecas numéricas científicas consagradas e métodos de armazenamento de dados sofisticados são requeridos para viabilizar a análise.

A forma proposta de se calcular as forças hidrodinâmicas de arrasto na interface das partículas se mostrou adequada permitindo uma boa estimativa delas mesmo com a ocorrência de perturbações locais na vizinhança dos elementos cortados pelas partículas. No que se refere estritamente ao nível de refinamento da malha em torno dos sólidos imersos, quanto maior for a relação diâmetro da partícula e o tamanho do elemento cortado ( $d/h$ ), melhores serão as estimativas das forças hidrodinâmicas como um todo (tanto de arrasto e sustentação). Ao longo do desenvolvimento deste trabalho foi observado que a relação  $D_5$  é a mínima requerida para a obtenção de uma boa estimativa das forças hidrodinâmicas de arrasto e, relações maiores do que  $D_{10}$  não apresentam melhora significativa dessas forças. Contudo, para o nível de refinamento possível de ser estudado neste trabalho (devido a limitação de hardware e memória), os valores obtidos para as forças hidrodinâmicas de sustentação não foram totalmente adequados para sólido imerso com geometria esférica. Para esta geometria, observou-se que mesmo com um nível de refinamento da ordem de  $D_{17,5}$  não foi possível a obtenção de bons resultados para este coeficiente. O que impele a necessidade de uma avaliação ou investigação mais aprofundada para o cálculo dessas forças. Porém, ainda assim os exemplos apresentados no capítulo 5 se mostraram fisicamente consistentes visto que as forças hidrodinâmicas preponderantes são aquelas que se alinham com a direção do escoamento do

fluido, tendo, portanto, ordem de grandeza maior. Já para sólido imerso com geometria cilíndrica, o método proposto apresentou bons resultados para ambas as forças hidrodinâmicas para um nível de refinamento da ordem de  $D_{10}$ . Outro fator relevante no cálculo das forças hidrodinâmicas é a escolha adequado dos coeficientes de penalidades. Neste trabalho, valores entre  $10^4$  à  $10^7$  mostraram-se mais adequados para estimar essas forças. Contudo, os testes realizados ao longo do desenvolvimento deste trabalho bem como os exemplos apresentados neste texto não podem ser considerados conclusivos em relação a este assunto. O que é possível observar é a existência de um intervalo de valores para estes coeficientes que, a depender da geometria imersa (esférica, cilíndrica, etc), do regime do problema (permanente ou transiente) e do nível de refinamento da malha, consegue-se obter resultados satisfatórios. Outro fator importante com relação a estes coeficientes é a necessidade de redução de seus valores para os elementos com corte duplo. Sem essa redução, observa-se problema de convergência do método de Newton, para a solução do problema não-linear, no passo de tempo em que o corte duplo acontece. O valor estimado desta redução é da ordem de  $10^{-2}$  do valor previamente definidos para esses coeficientes. Este valor foi definido após a simulação de vários testes. Como possível melhoria a ser incorporada neste trabalho, um estudo mais aprofundado sobre esse assunto é encorajado.

Do ponto de vista prático, o tratamento dos nós sombras pode ser considerado adequado principalmente devido a utilização de passo de tempo pequenos para o fluido.

A escolha de um método explícito e particionado para acoplar as duas fases do problema mostrou-se adequado e importante, principalmente devido a sua eficiência computacional. Métodos implícitos particionados ou acoplados também podem ser facilmente adaptados e utilizados neste algoritmo.

Como legado final deste trabalho, uma plataforma computacional única robusta e reutilizável capaz de servir de base para futuras pesquisas do grupo não somente na área de problemas acoplados, mas também para simulações numéricas em geral é disponibilizada.

No geral, o algoritmo proposto é capaz de:

- No âmbito da análise de fluido: realizar simulações convencionais e com fronteira imersa tridimensionais de problemas estacionários (lineares e não lineares) e transientes (não lineares) para problemas com baixo a moderado número de Reynolds, utilizando elementos finitos mistos 3D (hexaédricos com vinte e sete nós e tetraédricos com dez nós) que satisfazem a condição LBB;
- No âmbito da análise de partículas: realizar simulações tridimensionais regidos pela mecânica das partículas levando-se em consideração a existência de contato com ou

sem atrito do tipo partícula-corpo rígido e partícula-partícula. Importante ressaltar que o algoritmo não está preparado para simular problemas com grande quantidade de partícula pois isto requereria a implementações de *solves* e armazenamento de dados especiais;

- No âmbito da análise de IFP: realizar simulações tridimensionais de interação fluido-partícula com a possibilidade de ocorrência de contatos complexos isolados e simultâneos.

Por fim, o autor acredita ter contribuído para a solidificação do grupo de pesquisa na área de simulação de problemas acoplados de Interação Fluido-Partícula do Laboratório de Mecânica Computacional (LMC) da Escola Politécnica da USP.

Como possíveis temas para trabalhos futuros, o autor sugere os seguintes assuntos como prosseguimento ao desenvolvimento aqui apresentado:

- Extensão deste trabalho para simulação de problemas tridimensionais com muitas partículas;
- Aplicação de técnicas de paralelização mais sofisticadas capaz de reduzir o tempo e utilização de memória de forma otimizada;
- Utilização de outras técnicas baseadas em fronteira imersa para o acoplamento entre o fluido e a partícula;
- Estudos específicos de estabilidade numérica e sua relação com a determinação dos parâmetros de penalidade para os elementos em corte duplo;
- Incorporação de superfície livre do fluido de forma a ampliar o espectro de problemas que podem ser resolvidos com este algoritmo.

## REFERÊNCIAS

- [1] U. Pesavento e Z. J. Wang, "Falling paper: Navier-Stokes solutions, model of fluid forces, and center of mass elevation," *Physical Review Letters*, vol. 93, pp. 144501/1-144501/4, 2004.
- [2] A. Andersen, U. Pesavento e Z. Jane Wang, "Unsteady aerodynamics of fluttering and tumbling plates," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 541, pp. 65-90, 2005.
- [3] C. Jin e K. Xu, "Numerical study of the unsteady aerodynamics of freely falling plates," *Communications in Computational Physics*, vol. 3, pp. 834-851, 2008.
- [4] C.-S. You, M.-J. Chern, D. Z. Noor e T.-L. Horng, "Numerical investigation of freely falling objects using direct-forcing immersed boundary method," *Mathematics*, pp. 1-21, 2020.
- [5] A. Belmonte, H. Eisenberg e E. Moses, "From flutter to tumble: inertial drag and froude similarity in falling paper," *Physical Review Letters*, vol. 81, pp. 345-348, 1998.
- [6] L. Mahadevan, W. S. Ryu e A. D. Samuel, "Tumbling cards," *Physics Fluids*, vol. 11, pp. 1-3, 1999.
- [7] A. B. Yu e B. H. Xu, "Particle-scale modelling of gas-solid flow in fluidisation," *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, pp. 111-121, 2003.
- [8] T. B. Anderson e R. Jackson, "A fluid mechanical description of fluidized beds. Equations of Motion," *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, pp. 527-539, 1967.
- [9] H. H. Hu, "Direct simulation of flows of solid-liquid mixtures," *International Journal of Multiphase Flow*, pp. 335-352, 1996.
- [10] R. Glowinski, T. W. Pan, T. I. Hesla, D. D. Joseph e J. Periaux, "A distributed Lagrange Multiplier/Fictitious Domain method for flows around moving rigid bodies," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 184, pp. 241-267, 2000.
- [11] P. Singh, D. D. Joseph, T. I. Hesla, R. Glowinski e T. W. Pan, "A distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method for viscoelastic particulate flows," *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, pp. 165-188, 2000.
- [12] T. E. Tezduyar, M. Behr e J. Liou, "A new strategy for finite element computations involving moving boundaries and interfaces - The deforming-spatial-domain/space-time procedure: I. The concept and the preliminary numerical tests," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 94, pp. 339-351, 1992.
- [13] T. E. Tezduyar, M. Behr, S. Mittal e J. Liou, "A new strategy for finite element computations involving moving boundaries and interfaces - The deforming-spatial-domain/space-time procedure: II. Computation of free-surface flows, two-liquid flows, and flows with drifting cylinders," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 94, pp. 353-371, 1992.
- [14] A. A. Johnson e T. E. Tezduyar, "Simulation of multiple spheres falling in a liquid-filled tube," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, pp. 351-373, 1996.
- [15] A. A. Johnson e T. E. Tezduyar, "3D simulation of fluid-particle interactions with the number of particles reaching 100," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, pp. 301-321, 1997.
- [16] D. Goldstein, R. Handler e L. Sirovich, "Modeling a non-slip flow boundary with an external force field," *Journal of Computational Physics*, pp. 354-366, 1993.

- [17] R. Glowinski, T. -W. Pan e J. Periaux, “A fictitious domain method for Dirichlet problems and applications,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, pp. 283-303, 1994.
- [18] V. Girault e R. Glowinski, “Error analysis of a fictitious domain method applied to a Dirichlet problem,” *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, pp. 487-514, 1995.
- [19] R. Glowinski, T. -W. Pan, T. Hesla e D. Joseph, “A distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flow,” *International Journal of Multiphase Flow*, pp. 755-794, 1999.
- [20] R. Tilch, A. Tabbal, M. Zhu, F. Decker e R. Löhner, “Combination of body-fitted and embedded grids for external vehicle aerodynamics,” *Engineering Computations*, pp. 28-41, 2008.
- [21] R. Leveque e Z. Li, “The immersed interface method for elliptic equations with discontinuous coefficients and singular sources,” *SIAM Journal on Numerical Analysis*, pp. 1019-1044, 1994.
- [22] L. Lee e R. J. Leveque, “An immersed interface method for incompressible Navier-Stokes equations,” *SIAM Journal on Scientific Computing*, pp. 832-856, 2003.
- [23] R. Mittal e G. Iaccarino, “Immersed boundary methods,” *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. vol. 37, pp. 239-261, 2005.
- [24] W. K. Liu, D. W. Kim e S. Tang, “Mathematical foundation of the immersed finite element method,” *Computational Mechanics*, pp. 211-222, 2005.
- [25] L. Zhang, A. Gerstenberger, X. Wang e W. Liu, “Immersed finite element method,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. vol. 193, pp. 2051-2067, 2004.
- [26] S. R. Idelsohn, J. Marti, A. Limache e E. Oñate, “Unified lagrangian formulation for elastic solids and incompressible fluids: Application to fluid–structure interaction problems via the PFEM,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, pp. 1762-1776, 2008.
- [27] S. R. Idelsohn, E. Oñate, F. D. Pin e N. Calvo, “Fluid–structure interaction using the particle finite element method,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, pp. 2100-2123, 2006.
- [28] S. R. Idelsohn, M. A. Storti e E. Oñate, “Lagrangian formulations to solve free surface incompressible inviscid fluid flows,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, pp. 583-593, 2001.
- [29] E. Oñate e J. García, “A finite element method for fluid-structure interaction with surface waves using a finite calculus formulation,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, pp. 635-660, 2001.
- [30] E. Oñate, S. R. Idelsohn, M. A. Celigueta e R. Rossi, “Advances in the particle finite element method for the analysis of fluid–multibody interaction and bed erosion in free surface flows,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, pp. 1777-1800, 2008.
- [31] E. M. B. Campello, “A description of rotations for DEM models of particle systems,” *Computational Particle Mechanics*, pp. 109-25, 2015.
- [32] E. M. B. Campello, *Um modelo computacional para o estudo de materiais granulares*, São Paulo, 2016.
- [33] E. M. B. Campello, “A computational model for the simulation of dry granular materials,” *International Journal of Non-linear Mechanics*, pp. 89-107, 2018.

- [34] J. A. Nitsche, "Über ein Variationsprinzip zur Lösung von Dirichlet-Problemen bei Verwendung von Teilräumen, die keinen Randbedingungen unterworfen sind," em *Abhandlungen aus dem Mathematischen Seminar der Universität Hamburg*, Hamburg, 1987.
- [35] J. Benk, M. Ulbrich e M. Mehl, "The Nitsche Method of the Navier-Stokes Equations for Immersed and Moving Boundaries," em *Seventh International Conference on Computational Fluid Dynamics (ICCFD7)*, Big Island, Hawaii, 2012.
- [36] J. T. Oden, "Finite-Element analogue of Navier-Stokes equation," *Journal of the Engineering Mechanics Division*, 1970.
- [37] C. Taylor and P. Hood, "A numerical solution of the Navier-Stokes equations using the finite element technique," *Computers & Fluids*, pp. 73-100, 1973.
- [38] R. T.-S. Cheng, "Numerical solution of the Navier-Stokes equations by the finite element method," *Physics of Fluids*, pp. 2098-2105, 1972.
- [39] C. R. Maliska, *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*, Rio de Janeiro: 2nd ed. Livros Técnicos e Científicos, 2004.
- [40] J. H. Ferziger e M. Peric, *Computational Methods for Fluids Dynamics*, 3rd ed. Springer, 2002.
- [41] A. N. Brooks e T. J. R. Hughes, "Streamline upwind/petrov-galerkin formulations for convective dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 32, pp. 199-259, 1982.
- [42] J. H. Argyris, J. S. Doltsinis, P. M. Pimenta e H. Wüstenberg, "Natural finite element techniques for viscous fluid motion," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, pp. 3-55, 1984.
- [43] A. Masud e C. Ramon, "A variational multiscale stabilized formulation for the incompressible Navier-Stokes equations," *Computational Mechanics*, 2009.
- [44] S. Charnyi, T. Heister, M. A. Olshanskii e L. G. Rebholz, "On conservation laws of Navier-Stokes Galerkin discretizations," *Journal of Computational Physics*, pp. 289-308, 2017.
- [45] F. Shakib, T. J. R. Hughes e Z. Johan, "A new finite element formulation for computational fluid dynamics: X. The compressible Euler and Navier-Stokes equations," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, pp. 141-219, 1991.
- [46] B. E. Abali, "An accurate finite element method for the numerical solution of isothermal and incompressible flow of viscous fluid," *Fluids*, 2019.
- [47] H. C. Gomes, *Método dos elementos finitos com fronteiras imersas aplicado a problemas de dinâmica dos fluidos e interação fluido-estrutura*, São Paulo: Tese (Doutorado), 2013.
- [48] F. Brezzi e M. Fortin, "Mixed and hybrid finite element methods," *Springer-Verlag New York*, 1991.
- [49] T. E. Tezduyar and Y. Osawa, "Finite element stabilization parameters computed from element matrices and vectors," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, pp. 411-430, 2000.
- [50] T. J. R. Hughes e L. P. Franca, "A new finite element formulation for computational fluid dynamics: VII. The Stokes problem with various well-posed boundary conditions: symmetric formulations that converge for all velocity/pressure spaces," *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, pp. 85-96, 1987.

- [51] T. J. R. Hughes, L. P. Franca e M. Balestra, “A new finite element formulation for computational fluid dynamics: V. Circumventing the Babuska-Brezzi conditions: A stable Petrov-Galerkin formulation of the Stokes problem accommodating equal-order interpolations,” *Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg.*, pp. 85-99, 1986.
- [52] T. E. Tezduyar, S. Mittal, S. E. Ray e R. Shih, “Incompressible flow computations with stabilized bilinear and linear equal-order-interpolation velocity-pressure elements,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, pp. 221-242, 1992.
- [53] P. A. Cundall, *A computer model for simulating progressive, large-scale movements in blocky rock systems*, Nancy, 1971.
- [54] P. A. Cundall, *A computer model for rock-mass behavior using interactive graphics for the input and output of geometrical data*, Minneapolis: Report MRD-2-74. University of Minnesota, 1974.
- [55] P. A. Cundall e O. D. L. Strack, “A discrete numerical model for granular assemblies,” *Géotechnique*, pp. 47-65, 1979.
- [56] A. A. Serrano e M. Rodriguez-Ortiz, *A contribution to the mechanics of heterogeneous granular media*, Cambridge, 1973.
- [57] C. Thornton, “Applications of DEM to process engineering problems,” *Engineering Computations*, pp. 289-297, 1992.
- [58] K. L. Jonhson, “Contact mechanics,” *Cambridge University Press*, 1985.
- [59] R. D. Mindlin e H. Deresiewicz, “Elastic spheres in contact under varying oblique forces,” *Journal of Applied Mechanics*, pp. 327-344, 1953.
- [60] A. Munjiza, D. R. J. Owen e N. Bicanic, “A combined finite/discrete element method in transient dynamics of fracturing solids,” *Engineering Computations*, pp. 145-174, 1995.
- [61] D. R. J. Owen e Y. T. Feng, “Parallelised finite/discrete element simulation of multi fracture solids and discrete systems,” *Engineering Computations*, pp. 557-576, 2001.
- [62] T. Zohdi, “Additive particle deposition and selective laser processing - A computational manufacturing framework,” *Computational Mechanics*, pp. 171-191, 2014.
- [63] E. M. B. Campello e O. D. Quintana-Ruiz, “On a simple, stable and efficient bond model for inter-particle adhesion,” *Computational Particle Mechanics*, 2021.
- [64] H. G. Matuttis, S. Luding e H. J. Herrmann, “Discrete element simulations of dense packings and heaps made of spherical and non-spherical particles,” *Powder Technology*, pp. 278-292, 2000.
- [65] J. Rojek, E. Onate, C. Labra e H. Kargl, “Discrete element simulation of rock cutting,” *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, pp. 996-1010, 2011.
- [66] B. Avcı e P. Wriggers, “A DEM-FEM coupling approach for the direct numerical simulation of 3D particulate flows,” *Journal of Applied Mechanics*, vol. vol. 79, 2012.
- [67] K. -W. Lim e J. E. Andrade, “Granular element method for three-dimensional discrete element calculations,” *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, pp. 167-188, 2014.
- [68] T. Zohdi, *Dynamics of charged particulate systems: modeling, theory and computation*, New York: Springer, 2012.
- [69] O. D. Quintana-Ruiz e E. M. B. Campello, “Discrete element modeling of selective laser sintering additive manufacturing processes,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2023.
- [70] T. Pöschel e T. Schwager, *Computational Granular Dinamics*, Berlin: Springer, 2004.

- [71] H. P. Zhu, Z. Y. Zhou, R. Y. Yang e A. B. Yu, “Discrete particle simulation of particulate systems: Theoretical developments,” *Chemical Engineering Science*, pp. 3378-3396, 2007.
- [72] H. P. Zhu, Z. Y. Zhou, R. Y. Yang e A. B. Yu, “Discrete particle simulation of particulate systems: A review of major applications and findings,” *Chemical Engineering Science*, pp. 5728-5770, 2008.
- [73] C. S. Peskin, “Flow patterns around heart valves: a numerical method,” *Journal of Computational Physics*, pp. 252-271, 1972.
- [74] C. S. Peskin, “Numerical analysis of blood flow in the heart,” *Journal of Computational Physics*, pp. 220-252, 1977.
- [75] T. B. Belytschko e J. M. Kennedy, “Computer models for subassembly simulation,” *Nuclear Engineering and Design*, pp. 17-38, 1978.
- [76] J. R. Hughes, W. K. Liu e T. K. Zimmermann, “Lagrangian-Eulerian finite element formulation for incompressible viscous flows,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, pp. 329-349, 1981.
- [77] W. A. Wall, A. Gerstenberger, P. Gamnitzer, C. Förster e E. Ramm, “Large deformation fluid-structure interaction – Advances in ALE Methods and new fixed grid approaches,” em *Fluid-Structure Interaction. Modelling, Simulation, Optimisation*, Springer, 2006, pp. 195-232.
- [78] E. Kuhl, S. Hulshoff e R. D. Borst, “An arbitrary Lagrangian Eulerian finite-element approach for fluid–structure interaction phenomena,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, pp. 117-142, 2003.
- [79] Q. Zhang e T. Hisada, “Analysis of fluid-structure interaction problems with structural buckling and large domain changes by ALE finite element method,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, pp. 6341-6357, 2001.
- [80] T. Sawada e T. Hisada, “Fluid–structure interaction analysis of the two-dimensional flag-in-wind problem by an interface-tracking ALE finite element method,” *Computers & Fluids*, pp. 136-146, 2007.
- [81] C. Farhat, P. Geuzaine e G. Brown, “Application of a three-field nonlinear fluid–structure formulation to the prediction of the aeroelastic parameters of an F-16 fighter,” *Computers & Fluids*, pp. 3-29, 2003.
- [82] P. L. Tallec e J. Mouro, “Fluid structure interaction with large structural displacements,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, pp. 3039-3067, 2001.
- [83] A. Gerstenberger e W. A. Wall, “An extended finite element method/Lagrange multiplier based approach for fluid-structure interaction,” *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, pp. 1699-1714, 2008.
- [84] A. Gerstenberger e W. A. Wall, “Enhancement of fixed-grid methods towards complex fluid-structure interaction applications,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, pp. 1227-1248, 2008.
- [85] A. Legay, J. Chessa e T. Belytschko, “An Eulerian-Lagrangian method for fluid-structure interaction based on level sets,” *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, pp. 2070-2087, 2006.
- [86] H. C. Gomes e P. M. Pimenta, “Embedded Interface with Discontinuous Lagrange Multipliers for Fluid-Structure Interaction Analysis,” *International Journal for Computational Methods in Engineering Science and Mechanics*, pp. 98-111, 24 04 2015.

- [87] A. C. Fernandes, H. C. Gomes, E. M. Campello, A. S. Müller e P. M. Pimenta, "A coupled FEM-DEM method for the modeling of fluids laden with particles," *Computational particle mechanics*, 2020.
- [88] A. J. Lew e G. C. Buscaglia, "A discontinuous-Galerkin-based immersed boundary method," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, pp. 427-454, 2008.
- [89] J. Benk, *Immersed boundary methods within a PDE toolbox on Distributed memory systems*, Munique: Tese de doutoramento., 2012.
- [90] P. Hansbo e M. Juntunen, "Weakly imposed dirichlet boundary conditions for the brinkman model of porous media flow," *Applied Numerical Mathematics*, pp. 1274-1289, 2009.
- [91] R. Becker, "Mesh adaptation for Dirichlet flow control via Nitsche's method," *Communications in Numerical Methods in Engineering*, pp. 669-680, 2002.
- [92] R. Codina e J. Baiges, "Approximate imposition of boundary conditions in immersed boundary methods," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, pp. 256-261, 2009.
- [93] E. Burman, "A penalty-free nonsymmetric Nitsche-type method for the weak imposition of boundary conditions," *Industrial and Applied Mathematics*, pp. 1959-1981, 2012.
- [94] A. Massing, M. G. Larson, A. Logg e M. E. Rognes, "A Nitsche-based cut finite element method for a fluid-structure interaction problem," *Communications in Applied Mathematics and Computational Science*, 2015.
- [95] K. O. L. F. Jayaweera e B. J. Mason, "The behavior of clusters of spheres falling in a viscous fluid," *Journal of Fluid Mechanics*, pp. 129-139, 1964.
- [96] A. Fortes, D. Joseph e T. Lundgren, "Nonlinear mechanics of fluidization of beds of spherical particles," *Journal of Fluid Mechanics*, pp. 467-483, 1987.
- [97] H. H. Hu e D. D. Joseph, "Direct simulation of fluid particle motions," *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, pp. 285-306, 1992.
- [98] A. A. Johnson e T. E. Tezduyar, "Advanced mesh generation and update methods for 3D flow simulations," *Computational Mechanics*, pp. 130-143, 1999.
- [99] T. I. Zohdi, *Introduction to the modeling and simulation of particulate flows*, Philadelphia: SIAM, 2007.
- [100] W. Dettmer and D. Peric, "An analysis of the time integration algorithms for the finite element solutions of incompressible Navier-Stokes equations based on a stabilised formulation," *Computer methods in applied mechanics and engineering*, pp. 1177-1226, 2002.
- [101] K. E. Jansen, C. H. Whiting e G. M. Hulbert, "A generalized-alpha method for integrating the filtered Navier-Stokes equations with a stabilized finite element method," *Computer method in applied mechanics and engineering*, pp. 305-319, 2000.
- [102] T. P. Fries e A. Zilian, "On time integration in the XFEM," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, pp. 69-93, 2009.
- [103] H. Bijl, M. H. Carpenter, V. N. Vatsa e C. A. Kennedy, "Implicit time integration schemes for the unsteady compressible Navier-Stokes equations: Laminar flow," *Journal of Computational Physics*, pp. 313-329, 2002.
- [104] A. H. van Zuijlen, A. de Boer e H. Bijl, "Higher-order time integration through smooth mesh deformation for 3D fluid-structure interaction simulations," *Journal of Computational Physics*, pp. 414-430, 2007.

- [105] N. M. Newmark, "A method of computation for structural dynamics," *Journal of the Engineering Mechanics Division*, pp. 67-94, Julho 1959.
- [106] J. Donea e A. Huerta, *The finite element method for flow problems*, John Wiley, 2003.
- [107] T. J. R. Hughes, *The finite element method: linear static and dynamic finite element analysis*, Mineola, NY: Dover Publications, 2000.
- [108] E. Burman e M. A. Fernández, "Stabilized finite element schemes for incompressible flow using velocity/pressure spaces satisfying the LBB-condition," em *Proceedings of the WCCM VI*, Beijing, 2004.
- [109] C. Wieners, Taylor-Hood elements in 3D. In: Wendland, W.; Efendiev, M. (eds) *Analysis and simulation of multifield problems. Lecture Notes in Applied and Computational Mechanics*, Berlin: Springer, 2003.
- [110] H. C. Gomes e P. M. Pimenta, "Extended finite element method applied to fluid-structure interaction problems," em *Proceedings of the 9th World Congress on Computational Mechanics and 4th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (WCCM/APCOM 2010)*, Sydney, 2010.
- [111] C. Förster, W. A. Wall e E. Ramm, "Stabilized finite element formulation for incompressible flow on distorted meshes," *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, pp. 1103-1126, 2009.
- [112] M.-C. Hsu, Y. Bazilevs, V. M. Calo, T. E. Tezduyar e T. J. R. Hughes, "Improving stability of stabilized and multiscale formulations in flow simulations at small time steps," *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, pp. 828-840, 2010.
- [113] Gid, "The personal pre and postprocessor. Version 9.0.2," *International Center for Numerical Methods in Engineering CIMNE*, 2008.
- [114] M. Schäfer e S. Turek, "Benchmark computations of laminar flow around a cylinder," *Numer. Fluid Mech.*, pp. 547-566, 1996.
- [115] S. Turek e M. Schäfer, "Recent benchmark computations of laminar flow around a cylinder," *Proceedings of the 3rd World Conference in Applied Computational Fluid Mechanics*, 1996.
- [116] E. Bayraktar, O. Mierka e S. Turek, "Benchmark computations of 3D laminar flow around a cylinder with CFX, OpenFOAM and FeatFlow," *International Journal of Comp. Science and Eng.*, pp. 253-266, 2012.
- [117] M. Braack e T. Richter, "Solutions of 3D Navier-Stokes benchmark problems with adaptive finite elements," *Computers & Fluids*, pp. 372-392, 2005.
- [118] H. Goldstein, *Classical Mechanics*, Addison-Wesley, 1980.
- [119] E. M. B. Campello, *Análise não linear de perfis metálicos conformados a frio*, São Paulo: Dissertação (Mestrado), 2000.
- [120] P. M. Pimenta e E. M. B. Campello, "Geometrically nonlinear analysis of thin-walled space frames," em *Proceedings of the European Conference on Computational Mechanics*, Cracow, 2001.
- [121] P. M. Pimenta, E. M. B. Campello e P. Wriggers, "An exact conserving algorithm for nonlinear dynamics with rotational DOFs and general hyperelasticity. Part 1: Rods," *Computational Mechanics*, pp. 715-732, 2008.
- [122] J. Argyris, "An excursion into large rotations," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, pp. 85-155, 1982.
- [123] H. Cheng e K. C. Gupta, "An historical note on finite rotations," *Journal of Applied Mechanics*, pp. 139-145, 1989.

- [124] A. Ibrahimbegovic, "On the choice of finite rotation parameters," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, pp. 49-71, 1997.
- [125] M. Ritto-Correa e D. Camotim, "On the differentiation of the Rodrigues formula and its significance for the vector-like parameterization of Reissner-Simo beam theory," *International Journal for Numerical Method in Engineering*, pp. 1005-1032, 2002.
- [126] P. M. Pimenta e E. M. B. Campello, "Finite rotation parameterizations for the nonlinear static and dynamic analysis of shells," em *Proceedings of the 5th International Conference on Computation of Shell and Spatial Structures*, Salzburg, 2005.
- [127] C. T. Crowe, J. D. Schwarzkopf, M. Sommerfeld e Y. Tsuji, *Multiphase flows with droplets and particles*, Boca Raton: CRC Press, 2012.
- [128] T. Zohdi, "A direct particle-based computational framework for electrically-enhanced thermo-mechanical sintering of powdered materials," *Mathematics and Mechanics of solids*, pp. 93-113, 2014.
- [129] P. Wriggers, *Computational contact mechanics*, Berlin: John-Wiley, 2002.
- [130] S. Z. Husain e J. M. Floryan, "Immersed boundary conditions method for unsteady flow problems described by the Laplace operator," *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, pp. 1765-1786, 2008.
- [131] I. Babuska, U. Banerjee e J. E. Osborn, "Meshless and Generalized Finite Element Methods: A Survey of Some Major Results, in Meshfree Methods for Partial Differential Equations," em *Lect. Notes Comput. Sci. Eng.*, New York, Springer, 2002, pp. 1-20.
- [132] A. Huerta, T. Belytschko, T. Fernandez-Mendez e T. Rabczuk, "Meshfree Methods," em *Encyclopedia of Computational Mechanics*, Wiley, 2004.
- [133] A. Hansbo e P. Hansbo, "A finite element method for the simulation of strong and weak discontinuities in solid mechanics," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2004.
- [134] P. Hansbo, "Nitsche's method for interface problems in computational mechanics," *Chimera*, pp. 1-27, 2005.
- [135] M. Juntunen e R. Stenberg, "Nitsche's method for general boundary conditions," *Math. Comp.*, pp. 1353-1374, 2009.
- [136] M. A. Chadil, S. Vincent e J. L. Estivalèzes, "Accurate estimate of drag forces using particle-resolved direct numerical simulations," *Acta Mech*, 2019.
- [137] R. Löhner, J. R. Cezbral, F. F. Camelli, J. D. Baum e E. L. Mestreau, "Adaptive embedded/immersed unstructured grid techniques," *Archives of Computational Methods in Engineering*, pp. 279-301, 2007.
- [138] Y. B. O. Cheny, "The LS-STAG method: A new immersed boundary/levelset method for the computation of incompressible viscous flows in complex moving geometries with good conservation properties," *Journal of Computational Physics*, 2008.
- [139] J. Baiges, *The Fixed-Mesh ALE method applied to multiphysics problems using stabilized formulations*, Catalonia, Espanha: Qualificação (Tese de doutoramento), 2010.
- [140] M. Brenk, *Algorithmic Aspects of Fluid-Structure Interactions on Cartesian Grids*, Technische Universität München: PhD thesis, 2007.
- [141] J. Degroote, *Development of algorithms for the partitioned simulation of strongly coupled fluid-structure interaction problems*, Ghent University. Faculty of Engineering: Dissertation, 2010.

- [142] A. Gerstenberger, *An XFEM based fixed-grid approach to fluid-structure interaction*, Technische Universität München: Dissertation, 2010.
- [143] Intel, “Resource & Design Center,” [Online]. Available: <http://developer.intel.com>. [Acesso em 05 04 2021].
- [144] J. Almedeij, “Drag coefficient of flow around a sphere: matching asymptotically the wide trend,” *Powder Technology*, pp. 218-223, Sep 2008.
- [145] A. R. Khan e J. F. Richardson, “The resistance to motion of a solid sphere in a fluid,” *Chemical Engineering Communications*, pp. 135-150, 1987.
- [146] P. P. Brown e D. F. Lawler, “Sphere drag and settling velocity revisited,” *Journal of Environmental Engineering*, pp. 222-231, Mar 2003.