Uma Rápida Introdução à Dinâmica de Fluidos Computacional: Modelagem, Simulação Computacional e Aplicações

Alexandre M. Roma¹ www.ime.usp.br/~roma

68<u>o</u> Seminário Brasileiro de Análise IME-USP, 12 a 14 de Novembro de 2008.

Resumo

O objetivo deste minicurso é o de introduzir de maneira rápida e pragmática aspectos importantes por onde passa o processo de modelagem matemática e de simulação computacional na área de dinâmica de fluidos computacional. Em particular, será visto o *Método da Fronteira Imersa*, um método versátil o qual propõe um modelo matemático e um método computacional para se estudar problemas que envolvem interações entre fluidos e estruturas elásticas neles imersas. O modelo matemático básico é descrito em detalhes e um exemplo de discretização numérica apresentado.

Palavras-chave: equações de Navier-Stokes, biofluido dinâmica, método da fronteira imersa, fluidos incompressíveis, interfaces elásticas, refinamento adaptativo de malhas, SAMRAI, VisIt, Subversion, Doxygen.

¹Universidade de São Paulo - Instituto de Matemática e Estatística. Caixa Postal 66281. São Paulo, SP 05315-970. BRAZIL.

1 Introdução

Dinâmica de Fluidos Computacional é uma área vasta e que possui muitas ramificações tanto de interesse prático quanto teórico. Como o tempo é limitado (e sempre seria nesta área), o melhor a fazer é procurar dar uma visão geral de algumas das equações que compõem o modelo matemático, uma noção do que vem a ser resolução numérica e simulação computacional destas equações e, talvez um pouco mais ambiciosamente, arriscar um palpite pessoal do que seria uma conduta, uma metodologia de trabalho para abordar problemas extremos nesta área.

Para dar uma forma mais concreta a todo este volume imenso de informação, procurase expor de forma clara e didática um grupo pequeno de aspectos pertinentes à área os quais, de alguma forma ainda, ainda matém relação visível entre si, contando de forma coerente uma pequena "estória" do início ao fim.

Neste texto ligeiro, apresentar-se-á uma dedução simples dos princípios de conservação de massa e da quantidade de movimento linear empregando-se o Teorema de Transporte de Reynolds. A abordagem é matemática e requer alguma intuição, pouca física e elementos de um curso de Cálculo mais avançado (provavelmente do segundo ano de graduação). Logo após, deduzir-se-á matematicamente o significado de um escoamento incompressível chegando-se às equações de Navier-Stokes que modelam o escoamento incompressível, transiente, de um fluido viscoso.

Para motivar e mostrar como aplicar estas equações num caso particular empolgante, optou-se por dar um "aroma" de biofluido dinâmica a uma parte destas notas. Em particular, apresentar-se-á o *Método da Fronteira Imersa* cuja serventia principal é a modelagem matemática e a simulação computacional de interações entre um fluido e estruturas nele imersas (flexíveis ou não).

Grande parte do texto apresentado a seguir foi inspirado em trabalhos (excelentes) de colegas que se esmeiraram em escrever notas para outros minicursos no passado [13, 19, 36, 20]. Uma outra parte, não menos significativa, foi baseada (por vezes inclusive transcrita) num trabalho publicado no *Matemática Universitária* [33].

1.1 Motivação científica

Diversos problemas envolvendo dinâmica de fluidos na área biológica envolvem interações entre um fluido viscoso incompressível, não estacionário, e um tecido biológico viscoelástico, cuja configuração geométrica, propriedades elásticas, ou ambas, podem variar ao longo do tempo (e.g., a interação entre sangue, musculatura e válvulas cardíacas).

Em 1972, Peskin [22], [23] introduziu um modelo matemático e um método computacional para estudar o escoamento sangüíneo ao redor da válvula mitral. Em contraste com outros autores, ele não fez qualquer hipótese particular sobre a geometria desse escoamento para observar o movimento da válvula. Partindo apenas das leis de Newton e de características físicas e fisiológicas do fluido, da musculatura e da válvula cardíacas, Peskin deduziu as equações dinâmicas do movimento, as quais descrevem a forte interação existente entre a válvula e o escoamento sangüíneo.

A Figura 1 mostra a motivação científica por trás do modelo geométrico bidimensional do lado esquerdo do coração utilizado por Peskin em suas primeiras simulações na década de 70.



Figura 1: (a) Vista frontal do coração, (b) sua vista superior com átrios removidos, (c) seção transversal de seu lado esquerdo e (d) modelo geométrico bidimensional idealizado que esta seção transversal inspira.

O modelo bidimensional original (Figura 1-(d)) incluía apenas o átrio e o ventrículo esquerdos e uma válvula mitral simétrica, composta apenas por dois folhetos.

Para simplificar a implementação computacional do método, todas as estruturas cardíacas foram assumidas com mesma densidade e completamente imersas em sangue (como afirma Peskin: "... um coração pulsando num aquário de fluido, ao invés de <u>em seu próprio lugar</u>." [22]). Por este motivo, posteriormente, o método de Peskin tornou-se conhecido como *Método da Fronteira Imersa*.

Na Seção 2, o modelo matemático será apresentado enfatisando-se as equações que descrevem a interação entre o fluido e a fronteira elástica imersa. Na Seção 3, uma possível discretização das equações é dada, ilustrando desta forma como o método com-

putacional pode ser obtido. Ao longo das Seções 4 e 5, mais detalhes e outras possíveis discretizações alternativas são incluídos, em meio a comentários sobre as dificuldades inerentes ao método e algumas aplicações. A Seção 6 encerra este trabalho, resumindo seus principais aspectos.

2 Modelo matemático

O escoamento de um fluido pode ser modelado por meio de uma transformação matemáticaFNK,Nachbin. No instante inicial de observação (e.g. t = 0), considere a partícula material de fluido que se encontra na posição $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$. Transcorrido algum tempo, num instante de tempo posterior t, esta mesma partícula encontra-se em $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$. A nova posição \mathbf{x} ocupada pela partícula é uma função do tempo (e da posição inicial $\boldsymbol{\xi}$),

$$x_i = x_i(t; \boldsymbol{\xi}), \quad i = 1, 2, 3.$$
 (1)

A transformação (1) que leva o ponto $\boldsymbol{\xi}$ no ponto \mathbf{x} fornece a forma paramétrica da curva no espaço que representa trajetória percorrida pela partícula material que estava inicialmente na posição $\boldsymbol{\xi}$ (o parâmetro é o tempo t). A velocidade da partícula ao longo de sua trajetória é dada por

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt}(t;\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{u}(t,\mathbf{x}(t;\boldsymbol{\xi})), \qquad (2)$$

onde $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$, e a aceleração por

$$\frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2}(t; \boldsymbol{\xi}) = \frac{d \mathbf{u}}{dt}(t, \mathbf{x}(t; \boldsymbol{\xi})).$$
(3)

Aplicado-se para cada coordenada a Regra da Cadeia no lado direito de (3), chega-se a

$$\frac{du_i}{dt}(t, \mathbf{x}(t; \boldsymbol{\xi})) = \left[\frac{\partial u_i}{\partial t} + \nabla u_i \cdot \frac{d\mathbf{x}}{dt}\right](t, \mathbf{x}(t; \boldsymbol{\xi})) = \left[\frac{\partial u_i}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla u_i\right](t, \mathbf{x}(t; \boldsymbol{\xi})), \quad i = 1, 2, 3, (4)$$

ou ainda, numa notação vetorial mais compacta,

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt}(t,\mathbf{x}(t;\boldsymbol{\xi})) = \left[\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u}\cdot\nabla)\mathbf{u}\right](t,\mathbf{x}(t;\boldsymbol{\xi})).$$
(5)

Como a expressão acima é valida para toda partícula material, é possível, sem prejuízo da clareza, simplificar a notação omitindo a posição inicial da partícula. De (5), define-se o operador diferencial *derivada material*

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \tag{6}$$

que também aparece na literatura com o nome de *derivada de transporte*. O transporte é feito pelo vetor velocidade **u**. O termo $\mathbf{u} \cdot \nabla$ é conhecido como termo convectivo.

Existem duas maneiras de se descrever o escoamento de um volume de fluido que ocupa uma região no espaço. Na descrição denominada *lagrangiana* as partículas que compõem o volume são acompanhadas em seu movimento ao longo do tempo. As coordenadas iniciais ξ_i são as chamadas *coordenadas lagrangianas*. Numa outra descrição denominada *euleriana*, observa-se a variação das propriedades numa região do espaço (num volume) fixado, imóvel ao longo do tempo. As coordenadas x_i são as coordenadas eulerianas. A relação

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt}(t) = \mathbf{u}(t, \mathbf{x}), \qquad (7)$$

para a qual a velocidade do lado direito está definido numa região fixada no espaço, faz a conexão entre a descrição lagrangiana (lado esquerdo) e a descrição euleriana (lado direito).

As mudanças de propriedades físicas do fluido podem ser monitoradas ao longo das trajetórias das partículas que o compõem. Como exemplo, se ρ é a massa específica (massa por unidade de volume) então a função $\rho(t, \mathbf{x}(t; \boldsymbol{\xi}))$ é a massa específica no instante t da partícula material que ocupa a posição \mathbf{x} e que partiu da posição $\boldsymbol{\xi}$ (a massa específica que um observador "viajando" junto com a partícula percebe). Esta é a descrição lagrangiana da variação da massa específica. A taxa de variação no tempo da massa específica ao longo da trajetória é dada pela derivada material e se escreve como

$$\frac{D\rho}{Dt}(t, \mathbf{x}(t; \boldsymbol{\xi})) = \left[\frac{\partial\rho}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\rho\right](t, \mathbf{x}(t; \boldsymbol{\xi})).$$
(8)

A descrição euleriana é dada por $\rho(t, \mathbf{x})$, isto é, a massa específica da partícula de fluido que ocupa a posição \mathbf{x} no instante t. As descrições lagrangiana e euleriana, na verdade, podem ser empregadas com qualquer propriedade da partícula material, quer seja uma grandeza escalar como a massa específica, a energia, a pressão, etc., quer seja uma grandeza vetorial como a quantidade de movimento linear, a quantidade de movimento angular, o fluxo de calor, etc.

2.1 Teorema de transporte de Reynolds

Sejam $\varphi(t, \mathbf{x})$ uma função escalar ou vetorial representando alguma grandeza física do fluido (por unidade de volume) e $\Omega(t)$ um volume fechado de partículas materiais o qual se move com o escoamento do fluido. Nestas condições, a função

$$\phi(t) = \int_{\Omega(t)} \varphi(t, \mathbf{x}) \, d\mathbf{x},\tag{9}$$

depende do tempo e sua derivada no tempo é dada por

$$\frac{d\phi}{dt}(t) = \frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \varphi(t, \mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega(t)} \left[\frac{D\varphi}{Dt} + \varphi \nabla \cdot \mathbf{u}\right](t, \mathbf{x}) \, d\mathbf{x}, \,. \tag{10}$$

O resultado acima é conhecido como "Teorema de Transporte de Reynolds" (ou, simplesmente, "Teorema de Transporte").

A demonstração, dada a seguir, requer condições mínimas de regularidade da fronteira de Ω para que se possa aplicar o Teorema da Divergência (Teorema de Gauss) e de suavidade dos campos envolvidos.

Demonstração: Dado que a região Ω é variável no tempo não é possível simplesmente passar a derivada para dentro do sinal de integração. Esta derivação fica simplificada se for feita uma mudança de variável de forma a manter o dominío de integração fixo. Assim sendo,

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \varphi(t, \mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = \frac{d}{dt} \int_{\Omega_0} \varphi(t, \mathbf{x}(t; \boldsymbol{\xi})) \, J(t, \boldsymbol{\xi}) \, d\boldsymbol{\xi} \,, \tag{11}$$

onde $J(t, \boldsymbol{\xi})$ é o determinante Jacobiano da transformação,

$$J(t, \boldsymbol{\xi}) = \det(\frac{\partial x_i}{\partial \xi_j}), \quad 1 \le i, j \le 3.$$

Observe que em (11) $\Omega_0 = \boldsymbol{\xi}(\Omega)$ pois assume-se tacitamente que, dada a posição atual da partícula é possível retraçar seu caminho de volta à sua posição de partida, isto é, matematicamente, que $\mathbf{x}(t;\boldsymbol{\xi})$ é invertível e se pode calcular $\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\xi}(t;\mathbf{x})$). Nestas condições, o jacobiano da transformação nunca se anula (por existir a transformação inversa!), e mais, como $J(0,\boldsymbol{\xi}) = 1$ para todo $\boldsymbol{\xi} \in \Omega_0$, então o determinante acima é sempre positivo (por isso não se tomou o valor absoluto).

De (11), usando a derivação do produto,

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_0} \varphi(t, \mathbf{x}(t; \boldsymbol{\xi})) J(t, \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} = \int_{\Omega_0} \left[\frac{d}{dt} \varphi(t, \mathbf{x}(t; \boldsymbol{\xi})) J(t, \boldsymbol{\xi}) + \varphi(t, \mathbf{x}(t; \boldsymbol{\xi})) \frac{d}{dt} J(t, \boldsymbol{\xi}) \right] d\boldsymbol{\xi}.$$
(12)

Usando a multilinearidade de J, tem-se

$$\frac{d}{dt}J(t,\boldsymbol{\xi}) = \begin{cases}
\frac{d}{dt}(\partial x_1/\partial\xi_1) & \partial x_1/\partial\xi_2 & \partial x_1/\partial\xi_3 \\
\frac{d}{dt}(\partial x_2/\partial\xi_1) & \partial x_2/\partial\xi_2 & \partial x_2/\partial\xi_3 \\
\frac{d}{dt}(\partial x_3/\partial\xi_1) & \partial x_3/\partial\xi_2 & \partial x_3/\partial\xi_3
\end{cases} +
\begin{cases}
\frac{\partial x_1}{\partial\xi_1} & \frac{d}{dt}(\partial x_2/\partial\xi_2) & \partial x_1/\partial\xi_3 \\
\frac{\partial x_2}{\partial\xi_1} & \frac{d}{dt}(\partial x_3/\partial\xi_2) & \partial x_2/\partial\xi_3 \\
\frac{\partial x_3}{\partial\xi_1} & \frac{d}{dt}(\partial x_3/\partial\xi_2) & \partial x_3/\partial\xi_3
\end{cases} +
\begin{cases}
\frac{d}{dt}(\partial x_1/\partial\xi_1) & \partial x_1/\partial\xi_2 & \frac{d}{dt}(\partial x_1/\partial\xi_3) \\
\frac{\partial x_2}{\partial\xi_1} & \frac{\partial x_1}{\partial\xi_1} & \frac{d}{dt}(\partial x_3/\partial\xi_2) & \partial x_3/\partial\xi_3
\end{cases} +
\begin{cases}
\frac{\partial x_1}{\partial\xi_1} & \frac{\partial x_1}{\partial\xi_1} & \frac{\partial x_1}{\partial\xi_2} & \frac{d}{dt}(\partial x_2/\partial\xi_3) \\
\frac{\partial x_3}{\partial\xi_1} & \frac{d}{dt}(\partial x_3/\partial\xi_2) & \frac{\partial x_3}{\partial\xi_3}
\end{cases} +
\end{cases} (13)$$

Trocando-se a ordem das derivações e a lembrando da definição da velocidade da partícula chega-se a

$$\frac{d}{dt}J = \frac{\partial u_1}{\partial x_1}J + \frac{\partial u_2}{\partial x_2}J + \frac{\partial u_3}{\partial x_3}J$$
(14)

ou, mais compactamente,

$$\frac{d}{dt}J = \left(\nabla \cdot \mathbf{u}\right)J \tag{15}$$

Como a primeira parcela do lado direito de (12) não é nada mais que a derivada material de φ , das observações anteriores, chega-se a

$$\int_{\Omega_0} \left[\frac{d}{dt}\varphi(t, \mathbf{x}(t; \boldsymbol{\xi})) J(t, \boldsymbol{\xi}) + \varphi(t, \mathbf{x}(t; \boldsymbol{\xi})) \frac{d}{dt} J(t, \boldsymbol{\xi})\right] d\boldsymbol{\xi} = \int_{\Omega_0} \left[\frac{D}{Dt}\varphi + \varphi(\nabla \cdot \mathbf{u})\right] J d\boldsymbol{\xi}$$
(16)

que, retornando ao domínio de integração original, fornece

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \varphi(t, \mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega(t)} \left[\frac{D\varphi}{Dt} + \varphi(\nabla \cdot \mathbf{u}) \right] d\mathbf{x}. \tag{17}$$

2.2 Conservação da massa

O Teorema de Transporte de Reynolds é uma das abordagens que se pode usar para deduzir as equações do escoamento. Como exemplo, considerando novamente a massa específica ρ , vê-se que a massa total de fluido numa região material Ω é dada por

$$m(t) = \int_{\Omega(t)} \rho(t, \mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \,, \tag{18}$$

e que, por conseguinte, sua taxa de variação no tempo se escreve como

$$\frac{dm}{dt}(t) = \frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \rho(t, \mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega(t)} \left[\frac{D\rho}{Dt} + \rho(\nabla \cdot \mathbf{u})\right] d\mathbf{x} \tag{19}$$

pela aplicação do Teorema de Transporte de Reynolds. Como massa não pode ser criada ou destruída dentro de Ω , tem-se

$$0 = \frac{dm}{dt}(t) = \frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \rho(t, \mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega(t)} \left[\frac{D\rho}{Dt} + \rho(\nabla \cdot \mathbf{u})\right] d\mathbf{x}.$$
 (20)

Segue da continuidade do integrando e da arbitrariedade na escolha de $\Omega(t)$ que

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho(\nabla \cdot \mathbf{u}) = 0, \qquad (21)$$

a forma diferencial do Princípio de Conservação de Massa.

2.3 Conservação da quantidade de movimento linear

Da segunda Lei de Newton, a resultante das forças que agem num corpo é igual à taxa de variação no tempo da quantidade de movimento linear. Para um domínio material,

$$\mathbf{p} = \int_{\Omega(t)} \rho \mathbf{u} \, d\mathbf{x} \,, \tag{22}$$

onde **p** é a quantidade total de movimento linear das partículas em $\Omega(t)$, ρ é a massa específica e **u** é o campo de velocidades definido em Ω . A aplicação da segunda Lei de Newton às partículas de fluido em $\Omega(t)$ resulta em

$$\mathbf{F}(t,\mathbf{x}) = \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \rho \mathbf{u} \, d\mathbf{x} \,, \tag{23}$$

que, pelo uso do Teorema do Transporte de Reynolds, pode ser reescrita como

$$\mathbf{F}(t,\mathbf{x}) = \int_{\Omega(t)} \mathbf{f} \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega(t)} \left[\frac{D(\rho \mathbf{u})}{Dt} + (\rho \mathbf{u})(\nabla \cdot \mathbf{u}) \right] d\mathbf{x} \,. \tag{24}$$

Em (24) admitiu-se a existência de uma "densidade de força por volume", **f**. Uma vez mais, usando a continuidade do integrando e a arbitrariedade de escolha de $\Omega(t)$, tem-se

$$\mathbf{f} = \frac{D(\rho \mathbf{u})}{Dt} + (\rho \mathbf{u})(\nabla \cdot \mathbf{u}), \qquad (25)$$

que expressa a forma diferencial do *Princípio de Conservação da Quantidade de Movimento Linear*. Ao se empregar o Princípio de Conservação de Massa em (25), chega-se a

$$\mathbf{f} = \rho [\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}].$$
(26)

É possível mostrar que se o fluido é viscoso,na ausência de outras forças externas,

$$\rho[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}] = \mathbf{f} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u}, \qquad (27)$$

onde p é a pressão e μ é a viscosidade dinâmica.

2.4 Escoamentos incompressíveis

O volume da região $\Omega(t)$ é dado pela integral

$$V_{\Omega(t)} = \int_{\Omega(t)} 1 d\mathbf{x}.$$
 (28)

A aplicação do Teorema do Transporte de Reynolds, neste caso, fornece

$$\frac{dV_{\Omega(t)}}{dt}(t) = \frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} 1 d\mathbf{x} = \int_{\Omega(t)} \nabla \cdot \mathbf{u} \, d\mathbf{x}.$$
(29)

Um escoamento é dito ser incompressível se e só se o volume ocupado pelas partículas não se altera ao longo do tempo e, portanto, a integral em (29) é zero. Uma vez mais, pela continuidade do integrando e pela arbitrariedade da região considerada, temos a incompressibilidade do escoamento se e só se

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \tag{30}$$

2.5 Interação entre um fluido e estruturas nele imersas

No Método da Fronteira Imersa, o escoamento não estacionário de um fluido viscoso incompressível é modelado pelas equações de Navier-Stokes,

$$\rho(\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) + \nabla p = \mu \Delta \mathbf{u} + \mathbf{f}$$
(31)

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \qquad (32)$$

onde ρ é a densidade de massa e μ a viscosidade do fluido, ambas consideradas constantes. Matematicamente, a fronteira imersa se faz presente apenas por intermédio do termo forçante **f**, uma distribuição singular resultante da ação de tensões elásticas. Escritas em coordenadas *Eulerianas*, as equações (31)-(32) estão definidas num domínio retangular Ω , onde uma condição inicial e condições de contorno periódicas para a velocidade **u** são adotadas por simplicidade. A pressão *p* não demanda nenhum tipo de condição para que o problema esteja bem posto.

A interação dinâmica entre o fluido e a fronteira imersa pode ser obtida aplicando-se a Segunda Lei de Newton. Se a fronteira imersa for suficientemente delgada e se sua massa puder ser desprezada, ela pode ser vista matematicamente puramente como um "gerador de forças" que não introduz massa nem cobre qualquer região do escoamento (e.g., uma "fatia" de um folheto de uma válvula cardíaca).

A posição da fronteira imersa, descrita em coordenadas Lagrangeanas, é dada por

$$\mathbf{X}(s,t) = (X_1(s,t), X_2(s,t)), \quad s \in \mathcal{S},$$
(33)

onde s é o parâmetro Lagrangeano. Se $\mathbf{F}(s,t)$ é a densidade de força elástica aplicada pela fronteira imersa no fluido, a equação de equilíbrio de força num segmento arbitrário de fronteira imersa $\mathbf{X}(s,t)$, $s_1 \leq s \leq s_2$, pode ser escrita como

$$\frac{d}{dt} \int_{s_1}^{s_2} m(s) \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{X}(s,t) \, ds = [T(s,t)\tau(s,t)]_{s_1}^{s_2} + \int_{s_1}^{s_2} [-\mathbf{F}(s,t)] \, ds \,, \tag{34}$$

onde m(s) representa a densidade de massa unidimensional da fronteira imersa, T é a tensão aplicada nas extremidades do segmento de fronteira imersa considerado devida às propriedades elásticas da sua parte restante, τ é a tangente unitária à direção da fronteira imersa,

$$\tau = \frac{\partial \mathbf{X}/\partial s}{\|\partial \mathbf{X}/\partial s\|},\tag{35}$$

e $(-\mathbf{F})$ é a *reação* do fluido sobre o segmento de fronteira imersa em resposta à *ação* de \mathbf{F} sobre o fluido. A tensão que age na fronteira imersa, T, presente em (34), é dada pela Lei de Hooke generalizada

$$T = T(\|\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s}\|, s, t) \,. \tag{36}$$

Uma vez que a fronteira imersa, por hipótese, tem massa desprezível, o lado esquerdo da equação (34) se anula. Após aplicar o Teorema Fundamental do Cálculo e rearranjar os termos, a equação (34) pode ser reescrita como

$$\int_{s_1}^{s_2} \left[\mathbf{F} - \frac{\partial}{\partial s} (T\tau) \right] ds = 0.$$
(37)

Como s_1 e s_2 foram tomados arbitrariamente (o segmento de fronteira imersa é arbitrário), obtém-se de (37) a densidade de força elástica para a fronteira imersa

$$\mathbf{F} = \frac{\partial}{\partial s}(T\tau) = \frac{\partial T}{\partial s}\tau + T\frac{\partial \tau}{\partial s} = \frac{\partial T}{\partial s}\tau + T\|\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s}\|K\mathbf{n},$$
(38)

onde $K = \|\frac{\partial \tau}{\partial s}\|/\|\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s}\|$ é a curvatura e $\mathbf{n} = \frac{\partial \tau}{\partial s}/\|\frac{\partial \tau}{\partial s}\|$ é a normal unitária à fronteira imersa.

A densidade de força elástica (38) é expressa em termos das coordenadas Lagrangeanas; entretanto, na equação (31) do fluido ela é escrita em termos das coordenadas Eulerianas. Para mudar a densidade de força elástica das coordenadas Lagrangeanas para as Eulerianas, basta lembrar que a força elástica total que age numa região arbitrária \mathbf{R} do domínio Ω (Figura 2) é dada por

$$\begin{split} \int_{\mathbf{R}} \mathbf{f}(\mathbf{x},t) \, d\mathbf{x} &= \int_{\{s: \, \mathbf{x}(s,t) \in \mathbf{R}\}} \mathbf{F}(s,t) \, ds \\ &= \int_{\mathcal{S}} \mathbf{F}(s,t) \, \omega_{\mathbf{R}}(\mathbf{X}(s,t)) \, ds \\ &= \int_{\mathcal{S}} \mathbf{F}(s,t) \left[\int_{\mathbf{R}} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s,t)) \, d\mathbf{x} \right] \, ds \\ &= \int_{\mathbf{R}} \int_{\mathcal{S}} \mathbf{F}(s,t) \, \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s,t)) \, ds \, d\mathbf{x}, \end{split}$$

onde $\omega_{\mathbf{R}}(\mathbf{x}) = 1$, para $\mathbf{x} \in \mathbf{R}$ e 0 caso contrário, e δ é a "função" delta de Dirac em duas dimensões.



Figura 2: Ação da força elástica \mathbf{F} numa região arbitrária \mathbf{R} do domínio Ω .

Embora estas manipulações sejam formais, elas motivam uma expressão para a densidade de força no fluido devida à fronteira elástica imersa em coordenadas Eulerianas. Como \mathbf{R} é uma região arbitrária, essa expressão é dada por

$$\mathbf{f}(\mathbf{x},t) = \int_{\mathcal{S}} \mathbf{F}(s,t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s,t)) \, ds.$$
(39)

Observe que em (39), a densidade de força \mathbf{f} tem suporte apenas sobre a fronteira imersa, isto é, ela vale zero em todos os pontos do domínio excetuando-se os pontos da fronteira imersa. Outro fato importante que deve ser observado é que, uma vez que o delta bidimensional de Dirac é integrado apenas uma vez, \mathbf{f} tem o mesmo tipo de singularidade definida para uma função delta de Dirac em uma dimensão. Sendo o fluido viscoso, os pontos da fronteira imersa acabam por mover-se com a sua velocidade local ("nonslip condition"). Matematicamente, esta condição pode ser expressa em termos do campo de velocidades como

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{X}(s,t) = \mathbf{u}(\mathbf{X}(s,t),t).$$

Uma vez mais, uma troca entre coordenadas é necessária. Desta vez, deve-se encontrar uma expressão para a velocidade Lagrangeana dos pontos da fronteira imersa em termos das coordenadas Eulerianas do fluido. Empregando formalmente as propriedades da função delta de Dirac, tem-se

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}(s,t),t) = \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{x},t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s,t)) \, d\mathbf{x}.$$
(40)

As equações (39)-(40) descrevem a interação entre o fluido e a fronteira imersa; elas empregam o delta de Dirac para alternar entre a formulação Euleriana, usada para o fluido, e a Lagrangeana, usada para fronteira imersa. A equação (39) "espalha" as tensões elásticas que agem sobre a fronteira elástica para o resto do domínio; por esta razão este é denominada como passo de espalhamento. A equação (40) "interpola" nos pontos da fronteira imersa as velocidades definidas no domínio; é o passo de interpolação.

Em resumo, as equações que modelam a interação entre o fluido e a fronteira elástica imersa são

$$\rho(\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) + \nabla p = \mu \Delta \mathbf{u} + \mathbf{f}$$
(41)

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \tag{42}$$

onde

$$\mathbf{f}(\mathbf{x},t) = \int_{\mathcal{S}} \mathbf{F}(s,t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s,t)) \, ds \tag{43}$$

$$\mathbf{F}(s,t) = \frac{\partial}{\partial s}(T\tau) \tag{44}$$

 com

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{X}(s,t) = \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{x},t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s,t)) \, d\mathbf{x} \,, \tag{45}$$

as quais fornecem uma formulação mista Euler-Lagrangeana para o problema.

3 Exemplo simples de um método computacional

Diversas discretizações têm sido propostas para as equações (41)-(45). No espaço, em geral, as equações do fluido (41)-(42) são resolvidas numa malha computacional Euleriana regular e fixa, obtida dividindo-se o domínio Ω em N partes iguais em ambas as direções. Nesta malha, determinam-se $\mathbf{u}_{i,j} = (u_{i,j}, v_{i,j})$ e $p_{i,j}$, a velocidade e a pressão nos nós $\mathbf{x}_{i,j} = (x_0 + ih, y_0 + jh), \ 0 \le i, j \le N$, onde h é o espaçamento. A fronteira imersa, por sua vez, é discretizada empregando-se uma malha computacional Lagrangeana, uma coleção finita de pontos móveis $\mathbf{X}_k, \ 0 \le k \le M$. A Figura 3 mostra uma discretização espacial típica para o problema.



Figura 3: Malhas Euleriana ("\o") e Lagrangeana ("\o").

O sistema de incógnitas $(\mathbf{u}_{i,j}, \mathbf{X}_k)$, $0 \le i, j \le N$, $0 \le k \le M$, deve ser determinado nos instantes $t^n = n \Delta t$, onde Δt é o passo de integração no tempo. No trabalho de Peskin e Printz [29], a discretização das equações de Navier-Stokes, (41)-(42), é dada por

$$\rho\left(\frac{\mathbf{u}^{n+1,0}-\mathbf{u}^n}{\Delta t}\right) = \mathbf{f}^n, \qquad (46)$$

$$\rho\left(\frac{\mathbf{u}^{n+1,1} - \mathbf{u}^{n+1,0}}{\Delta t} + u^n D_x^0 \mathbf{u}^{n+1,1}\right) = \mu D_x^+ D_x^- \mathbf{u}^{n+1,1}, \qquad (47)$$

$$\rho\left(\frac{\mathbf{u}^{n+1,2} - \mathbf{u}^{n+1,1}}{\Delta t} + v^n D_y^0 \mathbf{u}^{n+1,2}\right) = \mu D_y^+ D_y^- \mathbf{u}^{n+1,2}, \qquad (48)$$

com as novas pressão e velocidade dadas pela resolução de

$$\mathbf{u}^{n+1,2} = \mathbf{u}^{n+1} + \frac{\Delta t}{\rho} \, G \, p^{n+1} \,, \tag{49}$$

$$\mathbf{D} \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0, \tag{50}$$

enquanto que a discretização das equações de interação fluido-fronteira imersa, (43)-(45), é dada por

$$\mathbf{f}_{i,j}^{n} = \sum_{k} \mathbf{F}_{k}^{n} \,\delta_{h}(\mathbf{x}_{i,j} - \mathbf{X}_{k}^{n}) \,\Delta s, \qquad (51)$$

$$\mathbf{X}_{k}^{n+1} = \mathbf{X}_{k}^{n} + \Delta t \sum_{i,j} \mathbf{u}_{i,j}^{n+1} \delta_{h}(\mathbf{x}_{i,j} - \mathbf{X}_{k}^{n}) h^{2}.$$
 (52)

Os operadores de diferenças finitas usados para aproximar as primeiras derivadas no espaço empregam as aproximações para frente, para trás e centrada, respectivamente

$$D_x^+ \phi_{i,j} = \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}}{h}, \qquad D_x^- \phi_{i,j} = \frac{\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j}}{h}, \qquad D_x^0 \phi_{i,j} = \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}}{2h},$$

sendo definidos de forma semelhante para as derivadas na direção y, denotados por D_y^+ , D_y^- e D_y^0 . Em termos destes operadores, as discretizações dos operdadores diferenciais gradiente e divergente são respectivamente

$$G \phi_{i,j} = (D_x^0 \phi_{i,j}, D_y^0 \phi_{i,j})$$
 e $\mathbf{D} \cdot \mathbf{u}_{i,j} = D_x^0 u_{i,j} + D_y^0 v_{i,j}$

O operador Laplaciano discretizado, L, resulta da aplicação do operador divergente no operador gradiente,

$$\mathbf{D} \cdot G \,\phi_{i,j} = L \,\phi_{i,j} = \frac{\phi_{i+2,j} + \phi_{i-2,j} + \phi_{i,j+2} + \phi_{i,j-2} - 4\phi_{i,j}}{4h^2}$$

Note que nas equações (51)-(52), o delta de Dirac é aproximado pela função δ_h . Uma escolha particularmente simples é dada pelo produto

$$\delta_h(\mathbf{x}_{i,j}) = d_h(x_i) \, d_h(y_j) \,,$$

onde

$$d_h(x) = \begin{cases} \frac{1}{4h} \left(1 + \cos(\frac{\Pi x}{2h}) \right), & |x| < 2h, \\ 0, & |x| \ge 2h. \end{cases}$$

Os gráficos das funções $d_h(x)$ e $\delta_h(\mathbf{x})$ são mostrados pela Figura 4-(a) e (b), respectivamente.



Figura 4: Discretizações: (a) delta de Dirac em uma e (b) em duas dimensões.

A escolha desta função particular para aproximar a função delta de Dirac é motivada por um conjunto de propriedades de compatibilidade discretas descritas por Peskin [24]. Alternativas a esta escolha podem ser encontradas em [2], [34].

O esquema numérico visto, (46)-(52), desacopla as equações em cada uma das direções dos eixos coordenados, sendo de sengunda ordem no espaço e de primeira ordem no tempo. Na determinação de $(\mathbf{u}_{i,j}, \mathbf{X}_k)$ em cada instante no tempo, o método emprega a configuração geométrica da fronteira imersa no início do passo, \mathbf{X}^n , para calcular a força elástica \mathbf{F}^n , a qual modela o problema em consideração. Em seguida, esta força elástica é espalhada aos pontos da malha computacional do fluido próximos à fronteira imersa empregando-se (51), e as equações (46)-(48) são resolvidas, determinando-se um campo de velocidades provisório $\mathbf{u}^{n+1,2}$.

A ação da força elástica é notada instantaneamente em todo o domínio por intermédio do campo de pressão. Matematicamente, isto pode ser observado impondo-se a incompressibilidade do fluido, (50), em (49), obtendo-se assim a equação de Poisson

$$\frac{\Delta t}{\rho} \, \mathbf{D} \cdot G \, p^{n+1} = \mathbf{D} \cdot \mathbf{u}^{n+1,2} \,,$$

para a qual condições periódicas de contorno são utilizadas. Uma vez calculada a pressão p^{n+1} , determina-se a seguir a velocidade \mathbf{u}^{n+1} a partir de (49). Finalmente, a nova velocidade é então empregada para mover a fronteira imersa por intermédio de (52), completando assim o passo no tempo.

4 Refinamento adaptativo

O Método da Fronteira Imersa tem se mostrado ser excelente nas análises *qualitativas* de problemas bastante complexos envolvendo estruturas elásticas imersas num fluido.

Normalmente, a captura de detalhes geométricos mais sutis da fronteira imersa, a representação satisfatória de camadas limite finas e de outras peculiaridades do escoamento, podem ser resolvidas a contento apenas se a malha computacional empregada na discretização espacial for suficientemente fina. Os esquemas temporais implícitos são importantes por abrandarem condições de estabilidade como, por exemplo, a do esquema temporal explícito $\Delta t \leq O(h^2)$, permitindo desta forma que malhas de integração relativamente mais finas possam ser empregadas na discretização espacial.

Peskin e McQueen [26] concluíram que a demanda por malhas mais finas no Método da Fronteira Imersa tem como uma de suas causas *fenômenos locais*, os quais têm lugar nas vizinhanças da fronteira imersa (e.g., forças singulares). A grosso modo, aplicando um método de segunda ordem para resolver as equações de Navier-Stokes para um problema-teste tridimensional, eles observaram que o método claramente apresentava um comportamento de segunda ordem *longe* dos pontos da fronteira imersa, este comportamento sendo alterado para primeira ordem quando pontos da malha próximos à fronteira imersa eram considerados na análise.

Quando *malhas uniformes* são utilizadas na discretização espacial, a necessidade de se empregar malhas mais finas, mesmo que ditada por fenômenos localizados ao redor da fronteira imersa, acaba sendo extendida inevitavelmente a todo o domínio computacional e, como conseqüência, a malha resultante poderá exceder as capacidades de processamento e armazenamento do computador, inviabilizando assim a resolução do problema.

A existência de fenômenos locais e a necessidade de mais pontos na malha para capturar detalhes do escoamento ao redor da fronteira imersa, sugerem um possível remédio para o problema: a utilização de uma técnica de refinamento adaptativo de malhas [3], [4], [5], [6], [7]. Da fusão entre o Método da Fronteira Imersa e a técnica de refinamento adaptativo de malhas, resultou o Método da Fronteira Imersa Adaptativo (AMR Immersed Boundary Method [32], [34]).

Empregando as malhas compostas descritas por Berger e Colella [6], regiões refinadas são recobertas por uma seqüência de malhas encaixadas, contidas em níveis hierárquicos progressivamente mais finos $l = 1, 2, \ldots, l_{+\text{fino}}$. Cada nível de refinamento l é formado por um conjunto de malhas retangulares $G_{l,k}$, $k = 1, 2, \ldots, n_l$, isto é,

$$\{\text{nível } l\} = \bigcup_k G_{l,k} \,,$$

com $G_{l,j} \cap G_{l,k} = \emptyset$, $j \neq k$ (duas malhas diferentes contidas no mesmo nível de refinamento não se intersectam), as quais possuem o mesmo espaçamento h_l , e cujos lados estão alinhados com as direções dos eixos cartesianos.

Capaz de se adaptar acompanhando dinamicamente o movimento da fronteira imersa ao longo do tempo, a malha composta fornece a base onde as equações (41)-(45) são

discretizadas no espaço. A Figura 5 ilustra a diferença entre as discretizações de um domínio empregando-se uma malha uniforme (Figura 5-(a)) e uma malha composta (Figura 5-(b)).



Figura 5: Discretização espacial do domínio: (a) Malha Uniforme e (b) Malha Composta.

Embora em dinâmica de gases o refinamento no tempo acompanha naturalmente o refinamento no espaço, esta não é a abordagem empregada na implementação adaptativa do método. Todas as malhas, em todos os níveis de refinamento, evoluem no tempo com o mesmo passo de integração, aquele utilizado no nível mais fino de refinamento. No caso de escoamentos incompressíveis, não existe um limite finito para a velocidade de propagação de perturbações. Uma vez que cada parte do escoamento influencia simultaneamente todas as outras partes (por intermédio do campo de pressões), não é claro como diferentes passos no tempo poderiam ser empregados nos diversos níveis de refinamento.

5 Algumas aplicações importantes em biomedicina

Ainda hoje, o problema de simulação da hemodinâmica cardíaca é uma das mais importantes aplicações do Método da Fronteira Imersa. Proposto no início dos anos 70, o modelo geométrico original do lado esquerdo do coração, Figura 6-(a), evoluiu para modelos mais completos e sofisticados. Peskin [24], em 1977, o extendeu incluindo uma descrição mais precisa do átrio e do ventrículo, do trato de saída e da entrada pulmonar, obtendo assim um modelo mais aprimorado do lado esquerdo do coração excetuando-se a válvula aórtica (esta válvula, assim como o início da própria aorta, só foi introduzida em 1992 por Printz [30]). Em 1983, McQueen e Peskin [16] empregaram o modelo extendido no projeto assistido por computador de próteses da válvula mitral do tipo "disco pivotado" (Figura 6-(b)). Poucos anos depois, em 1985, eles o reutilizaram [17], desta vez no estudo da performance de válvulas do tipo "borboleta", planas e curvas, ainda para a posição mitral (Figura 6-(c) e (d), respecivamente).



Figura 6: Diversos modelos bidimensionais do lado esquerdo do coração empregados por Peskin na década de 70 - (a) - e por Peskin e McQueen na década de 80 - (b), (c) e (d).

A conclusão mais importante deste estudo foi que a introdução de uma curvatura

nos folhetos, mesmo que pequena, produz uma melhora substancial na performance das válvulas do tipo borboleta. Como conseqüência, uma das maiores empresas fabricantes de próteses cardíacas, a St. Jude Medical, decidiu explorar esta nova concepção de folhetos curvos, levando Peskin e McQueen a patentearem esta idéia.

Mais tarde, entre os finais dos anos 80 e 90, Peskin e McQueen concentraram um grande esforço no desenvolvimento de um modelo tridimensional do *coração completo* [28], [27]. Este modelo inclui diversas estruturas cardíacas obtidas diretamente por intermédio de modelagem matemática [26], [18], [25]. Até há alguns anos atrás, uma simulação deste modelo tridimensional levava cerca de uma semana num Cray C-90, no Centro de Supercomputação de Pittsburgh. Com a paralelização e o aprimoramento do código, atualmente, ela leva menos de um dia, estando o modelo muito perto de ser utilizado com diversas finalidades práticas tais como o estudo de ataques cardíacos, o desenvolvimento de marca-passos, de defibriladores e, é claro, de próteses cardíacas.

Um outro problema em hemodinâmica, bem menos explorado do ponto de vista de simulação numérica, é o estudo da performance dos *Dispositivos de Assitência Ventricular* (DAV's). Este é um problema em bioengenharia que tem um alto impacto social, onde o Método da Fronteira Imersa poderá vir a ser utilizado com sucesso.

DAV's são empregados para manter em níveis apropriados a pressão e o fluxo sangüíneos, auxiliando a circulação sangüínea durante o ciclo cardíaco. Alguns deles, os DAV's paracorpóreos, podem auxiliar um ou ambos os ventrículos por semanas, meses e, outros, até mesmo por anos! Isto explica o uso crescente destes dispositivos como opção terapêutica para pacientes na fila de espera de transplantes cardíacos [10].

Um DAV paracorpóreo baseado numa membrana livre movimentada por um mecanismo pneumático foi desenvolvido pelo Instituto do Coração (InCor), da Faculdade de Medicina da Universidade de São Paulo. Ele é composto por uma *unidade de bombeamento*, Figura 7-(a), e por uma *unidade de propulsão e de controle* (não mostrada).



Figura 7: DAV do InCor, FM-USP: (a) unidade de bombeamento e (b) implantado.

Fabricado em resina epoxi, o corpo rígido da unidade de bombeamento pode ser

dividido em duas metades. Uma membrana de poliuretano separa estas duas metades, compondo as câmaras pneumática e sangüínea. Desta forma, cada câmara tem dois lados: um, a membrana de poliuretano, e outro, o corpo de resina epoxi. A câmara sangüínea tem duas aberturas, uma para a entrada e outra para a saída de sangue, nas quais anéis estão colocados. Estes anéis servem como base para fixação de válvulas de pericárdio bovino. A câmara pneumática possui apenas uma abertura utilizada pela unidade de propulsão e de controle, a qual fornece ondas de ar comprimido. Mais detalhes sobre o desenho, a confecção e o procedimento de teste, podem ser encontrados no trabalho de Oshiro e colaboradores em [21].

Como se observa na Figura 7-(b), a unidade de bombeamento do DAV é conectada ao coração do paciente por tubos flexíveis. Algumas questões importantes podem ser levantadas quanto à biofluido dinâmica deste problema [1]:

> 1. Em termos de formato, qual seria o mais apropriado para a seção transversal dos tubos? Em particular, seria a circular a melhor? Se não o for, estaria ela próxima da melhor?

> 2. Existem quaisquer vantagens no uso de estreitamentos nos tubos? De que tipo? Onde eles deveriam ser posicionados?

Este problema, em três dimensões, é bastante complexo e difícil de ser abordado diretamente. Empregando uma seção longitudinal, Remigio e Roma [31] realizaram um estudo preliminar em duas dimensões, assumindo que o tubo flexível esteja completamente apoiado sobre um único plano. Para este estudo, o modelo matemático visto para o Método da Fronteira Imersa, (41)-(45), foi alterado introduzindo-se uma *fonte* e um *sumidouro*, elementos utilizados para descrever as condições de entrada e de saída de fluido no domínio elástico (Figura 8).



Figura 8: Introdução de uma fonte e de um sumidouro.

A versão bidimensional do problema, de um ponto de vista mais amplo, pode ser entendida como sendo *o estudo de um escoamento incompressível ao longo de um canal arbitrário com paredes flexíveis*. A incorporação de fontes e de sumidouros no modelo matemático é feita por intermédio da equação de continuidade, (42), que ao invés de ser escrita como $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$, passa a ser escrita como

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \psi(\mathbf{x}, t) = \psi_1(\mathbf{x}) q_1(t) , \qquad (53)$$

onde $\psi_1(\mathbf{x})$ é uma função que especifica a distribuição espacial da fonte e do sumidouro, e $q_1(t)$ é o fluxo de fluido injetado e removido. Note que, para preservar a incompressibilidade no domínio é necessário que se tenha $\int_{\Omega} \psi_1(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 0$.

Com o intuito de capturar a ação dos pontos do tubo que estão fora do plano de estudo sobre os pontos da seção longitudinal, Remigio e Roma modelaram a força elástica como sendo um tipo de "força restauradora" a qual obedece a Lei de Hooke

$$\mathbf{F}(s,t) = -K\left(\mathbf{X}(s,t) - \mathbf{X}(s,0)\right), \tag{54}$$

onde K é a constante elástica e $\mathbf{X}(s,0)$ é a posição de equilíbrio que se deseja (por conveniência, a configuração geométrica inicial). Note que (54) deve ser empregada no lugar de (44) com o intuito de preservar, até certo ponto, os efeitos tridimensionais. O tipo de força adotado, faz com que um ponto da fronteira imersa que está fora da posição desejada de equilíbrio, para ela retorne. Detalhes sobre a introdução de fontes e de sumidouros no Método da Fronteira Imersa, incluindo as alterações no método computacional, podem ser encontrados para diferentes aplicações nos trabalhos de Peskin [24], Rosar [35], Arthurs e colaboradores [2], e Remigio e Roma [31].

Para concluir, é interessante mencionar que o método tem encontrado um vasto campo de aplicações também fora da área de hemodinâmica. Como exemplos, é possível mencionar o agregamento e a adesão de plaquetas durante a coagulação sangüínea [14], a locomoção de animais aquáticos [12], [11], [9], a fluido dinâmica do ouvido interno [8], o escoamento tridimensional em tubos colapsáveis [35], o escoamento ao redor de cilindros [15] e o escoamento em arteríolas, incluido modelos de transporte de massa [2].

6 Conclusão

Com base na quantidade e na variedade de problemas aos quais ele se aplica, abrangendo desde problemas em hemodinâmica a problemas em locomoção de microrganismos, é possível dizer que o Método da Fronteira Imersa é um método robusto e bastante geral. Foram vistos aqui a origem, o modelo matemático e o método computacional que formam as bases deste método.

As equações que descrevem a interação entre um fluido incompressível e uma fronteira elástica nele imersa, expostas em detalhes, constituem o núcleo do modelo matemático. Elas são formadas pelas equações de Navier-Stokes às quais um termo forçante singular, oriundo na fronteira elástica, é introduzido na equação da conservação do momento linear. As equações restantes do modelo vêm da imposição da aderência entre o fluido e a fronteira imersa, fazendo com que esta se movimente com a velocidade local do fluido. Uma possível discretização para estas equações é apresentada empregando um esquema numérico explícito no cálculo das forças elásticas.

A captura de detalhes geométricos finos da fronteira imersa pode ser feita empregandose uma versão adaptativa do método a qual emprega a discretização espacial em malhas compostas.

Em termos de aplicações, foi dada atenção especial à hemodinâmica, em particular à modelagem matemática do lado esquerdo do coração e de sua interação com o escoamento sangüíneo, tendo sido esta a motivação científica que levou à introdução do método há quase trinta anos atrás. Dentre outras possibilidades, os modelos do coração podem ser empregados no estudo do movimento das válvulas cardíacas, tanto naturais quanto artificiais, e no estudo de diversas cardiopatias como, por exemplo, as causas e as conseqüências de ataques cardíacos. Ainda em hemodinâmica, apontou-se também seu uso como uma opção no estudo da performance de Dispositivos de Assistência Ventricular (DAV's), um problema em bioengenharia de impacto social bastante grande. Neste caso, uma abordagem bidimensional simplificada foi apresentada para o estudo do escoamento em tubos flexíveis, incluindo as alterações necessárias ao método para que condições de entrada e de saída de fluido sejam incorporadas ao modelo matemático.

São muitas as frentes nas quais se pode atuar e se contribuir efetivamente na área de simulação computacional em dinâmica de fluidos. Problemas mais complexos como o do estudo da hemodinâmica cardíaca requerem via de regra um ambiente de trabalho que permita que o desenvolvimento seja feito de forma eficiente e, frequentemente, coletivamente por um grupo de pesquisa.

Dentre os recursos disponíveis, é possível enfatizar a biblioteca $SAMRAI^2$ e o visualizador VisIt³. A biblioteca SAMRAI dá suporte a processamento paralelo à resolução numérica de equações a derivadas parciais com refinamento adaptativo de malhas. Além disso, o SAMRAI é integrado ao visualizador VisIt.

É recomendável o uso de ambientes integrados de desenvolvimento (Integrated De-

²https://computation.llnl.gov/casc/SAMRAI/

³https://wci.llnl.gov/codes/visit/home.html

 $velopment \ Environment$) como o Eclipse⁴.

Finalmente, para se trabalhar em grupo nesta área tão exigente, é de bom tom se empregar recursos como o Subversion⁵ e o documentador automático $Doxygen^{6}$.

7 Agradecimentos

Agradeço aos organizadores do 68º Seminário Brasileiro de Análise pela oportunidade e pelo convite gentil em ministrar este minicurso, oferecendo a oportunidade e o incentivo à elaboração deste manuscrito.

 $^{^4}_{5}$ http://www.eclipse.org/downloads/

⁶http://www.stack.nl/ dimitri/doxygen/

Referências Bibliográficas

- Affeld, K. Virchow Klinikum, Medizinische Fakultät der Humboldt-Universität zu Berlin, Spandaver Damm 130, D-14050 Berlin, Germany. Personal Communication, 1996.
- [2] Arthurs, K.M.; Moore, L.C.; Peskin, C.S.; Pitman, E.B. & Layton, H.E. Modeling arteriolar flow and mass transport using the immersed boundary method. J. Comp. Phys., 147:402–440, 1998.
- [3] Bell, J.; Berger, M.J.; Saltzman, J. & Welcome, M. Three-dimensional adaptive mesh refinement for hyperbolic conservation laws. SIAM J. Sci. Comp., 15(1):127– 138, January 1994.
- Berger, M.J. Adaptive Mesh Refinement For Hyperbolic Partial Differential Equations. PhD thesis, Stanford University, 1982.
- [5] Berger, M.J. Data structures for adaptive grid generation. SIAM J. Sci. Stat. Comp., 7(3):904–916, July 1986.
- [6] Berger, M.J. & Colella, P. Local adaptive mesh refinement for shock hydrodynamics. J. Comp. Phys., 82:64–84, 1989.
- [7] Berger, M.J. & Rigoutsos, I. An algorithm for point clustering and grid generation. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics*, 21(5):1278–1286, September/October 1991.
- [8] Beyer, R.P. A computational model of the cochlea using the immersed boundary method. J. Comp. Phys., 98:145–162, 1992.
- Bottino, D.C. An Immersed Boundary Model of Ameboid Deformation and Locomotion. PhD thesis, Tulane University, 1998.
- [10] Cestari, I.A.; Hayashida, S.A.; Moreira, L.F.P.; Bonísio, A.; Maizatto, M.; Ibañez, J.F.; Stolf, N.A.G. & Leirner, A.A. Avaliação do desempenho in vivo do dispositivo de assistência ventricular (dav) incor. In Proceedings of the 11th IMACS World Congress on System Simulation and Scientific Computation Vol.3, 1998.
- [11] Fauci, L.J. Interaction of oscillating filaments a computational study. J. Comp. Phys., 86:294–313, 1990.

- [12] Fauci, L.J. & Peskin, C.S. A computational model of aquatic animal locomotion. J. Comp. Phys., 77:85–108, 1988.
- [13] Ferreira, V.G.; Navarro, H.A.; Kaibara, M.K. Modelagem matemática e simulação numérica em dinâmica dos fluidos. Technical Report Volume 15, Sociedade Brasileira de Matemática, São Carlos, SP, Junho 2005.
- [14] Fogelson, A.L. A mathematical model and numerical method for studying platelet adhesion and aggregation during blood clotting. J. Comp. Phys., 56:111–134, 1984.
- [15] Lai, M-C. Simulations of the flow past an array of circular cylinders as a test of the immersed boundary method. PhD thesis, University of New York, 1998.
- [16] McQueen, D.M. & Peskin, C.S. Computer-assisted design of pivoting disc prosthetic mitral valves. The Journal of Thoracic and Cardiovascular Surgery, 86(1):126–135, July 1983.
- [17] McQueen, D.M. & Peskin, C.S. Computer-assisted design of butterfly bileaflet valves for the mitral valves. *Sandinavian Journal of Thoracic Cardiovascular Surgery*, 19:139–148, 1985.
- [18] McQueen, D.M. & Peskin, C.S. A Three-Dimensional Method for Blood Flow in the Heart: (II) Contractile Fibers. J. Comp. Phys., 82(2):289–297, April 1989.
- [19] Melo, S.T.; Moura Neto, F. Mecânica dos fluidos e equações diferenciais. Technical report, IMPA - Instituto de Matemática Pura e Aplicada.
- [20] Nachbin, A. Aspectos de modelagem matemática em dinâmica dos fluidos. Technical report, IMPA - Instituto de Matemática Pura e Aplicada.
- [21] Oshiro, M.S; Hayashida, S.A.; Maizatto, M.J.S.; Marques, E.F.; Stolf, N.A.G.; Jatene, A.D. & Leirner, A.A. Design, Manufacturing, and Testing of Paracorporeal Pulsatile Ventricular Assit Device: São Paulo Heart Institute VAD. Artificial Organs, 19(3):274–279, 1995.
- [22] Peskin, C.S. Flow Patterns Around Heart Valves: A Digital Computer Method for Solving the Equations of Motion. PhD thesis, Albert Einstein College of Medicine -Yeshiva University, July 1972. University Microfilms # 72–30, 378.
- [23] Peskin, C.S. Flow patterns around heart valves: A numerical method. J. Comp. Phys., 10:252–271, 1972.
- [24] Peskin, C.S. Numerical analysis of blood flow in the heart. J. Comp. Phys., 25:220– 252, 1977.
- [25] Peskin, C.S. Fiber architecture of the left ventricular wall: An asymptotic analysis. Communications on Pure & Applied Mathematics, 42:79–113, 1989.
- [26] Peskin, C.S. & McQueen, D.M. A Three-Dimensional Computational Method for Blood Flow in the Heart: (I) Immersed Elastic Fibers in a Viscous Incompressible Fluid. J. Comp. Phys., 81:372–405, 1989.

- [27] Peskin, C.S. & McQueen, D.M. Fluid dynamics of the heart and its valves. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1996. Edited by Othmer, H.G., Adler, F.R., Lewis, M.A., and Dallon, J.C.
- [28] Peskin, C.S. & McQueen, D.M. A general method for the computer simulation of biological systems interacting with fluids. In SEB Symposium on Biological Fluid Dynamics, Leeds, England, July 5–8, 1994.
- [29] Peskin, C.S. & Printz, B.F. Improved volume conservation in the computation of flows with immersed elastic boundaries. J. Comp. Phys., 105:33–46, 1993.
- [30] Printz, B.F. Computer Modeling of Blood Flow through the Heart During the Complete Cardiac Cycle. PhD thesis, City University of New York, 1992.
- [31] Remigio, S.A.E. & Roma, A.M. Two-dimensional numerical simulations of incompressible flows in arbitrary, flexible channel-like domains, Preprint, 2000.
- [32] Roma, A.M. A Multilevel Self-adaptive Version of the Immersed Boundary Method. PhD thesis, Courant Institute of Mathematical Sciences – New York University, January 1996. University Microfilms # 9621828.
- [33] Roma, A.M. Uma abordagem computacional a alguns problemas de dinâmica de fluidos biológicos. *Matemática Universitária*, 30:15–39, 2001.
- [34] Roma, A.M.; Peskin, C.S.; Berger, M.J. An adaptive version of the immersed boundary method. J. Comp. Phys., 153:509–534, 1999.
- [35] Rosar, M.E. A Three-Dimensional Computer Model for Fluid Flow Through a Collapsible Tube. PhD thesis, Courant Institute of Mathematical Sciences – New York University, June 1994.
- [36] Santos, L.C.C. Introdução à mecânica dos fluidos computacional. Technical report, Universidade de São Paulo.