

# Uma Abordagem Computacional a Alguns Problemas de Dinâmica de Fluidos Biológicos

Alexandre M. Roma

## Resumo

O objetivo deste trabalho é expor o *Método da Fronteira Imersa*, um método versátil que 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 uma possível discretização numérica apresentada. Dificuldades em utilizá-lo e implementações alternativas, apropriadas para aplicações específicas, são também comentadas. O problema do estudo da hemodinâmica cardíaca aparece como motivação histórica para a origem do método e como principal aplicação.

**Palavras-chaves:** biofluido dinâmica, fluidos incompressíveis, interfaces elásticas, refinamento adaptativo de malhas, método da fronteira imersa.

## 1 Introdução

Diversos problemas em dinâmica de fluidos biológicos envolvem interações entre um fluido viscoso incompressível, não estacionário, e um tecido biológico visco-elástico, 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 [20], [21] 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. 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 em seu próprio lugar." [20]). Por este motivo, posteriormente, o método de Peskin tornou-se conhecido como *Método da Fronteira Imersa*.

Na Seção 2, o modelo matemático é desenvolvido enfatizando 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 computacional 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.

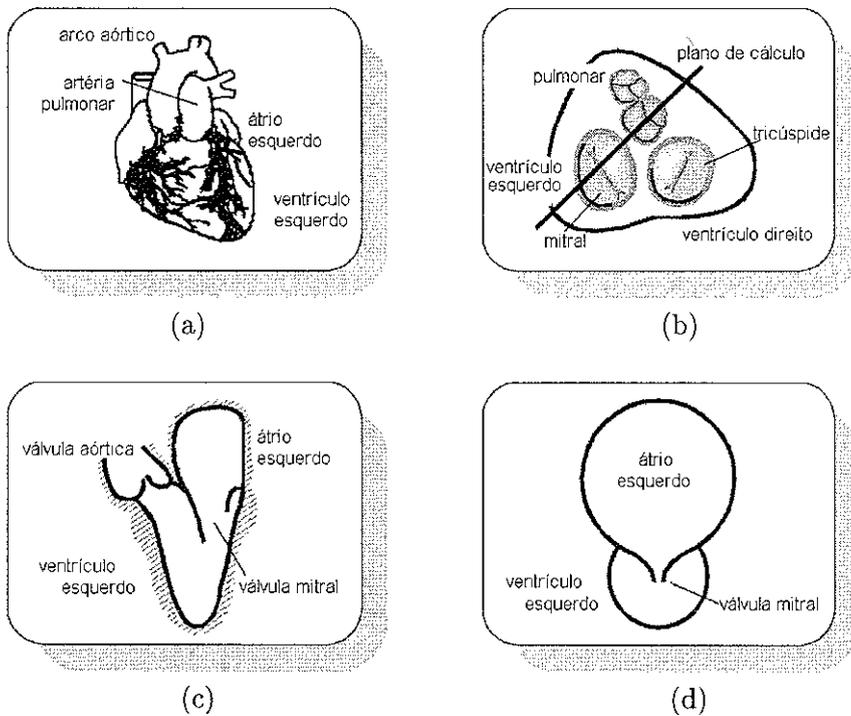


Figura 1: (a) Vista frontal do coração, (b) sua vista superior com átrios removidos, (c) seção transversal de seu lado esquerdo e (d) modelo geométrico bidimensional idealizado que esta seção transversal inspira.

## 2 Modelo Matemático

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

$$\rho \left( \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) + \nabla p = \mu \Delta \mathbf{u} + \mathbf{f} \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2)$$

onde  $\rho$  é a densidade de massa e  $\mu$  a viscosidade do fluido, ambas consideradas constantes. Matematicamente, a fronteira imersa se faz presente apenas por intermédio do termo forçante  $\mathbf{f}$ , uma distribuição singular

resultante da ação de tensões elásticas. Escritas em coordenadas *Eulerianas*, as equações (1)-(2) estão definidas num domínio retangular  $\Omega$ , 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

$$\mathbf{X}(s, t) = (X_1(s, t), X_2(s, t)), \quad s \in S, \quad (3)$$

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

$$\frac{d}{dt} \int_{s_1}^{s_2} m(s) \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{X}(s, t) ds = [T(s, t)\boldsymbol{\tau}(s, t)]_{s_1}^{s_2} + \int_{s_1}^{s_2} [-\mathbf{F}(s, t)] ds, \quad (4)$$

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,  $\boldsymbol{\tau}$  é a tangente unitária à direção da fronteira imersa,

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{\partial \mathbf{X} / \partial s}{\|\partial \mathbf{X} / \partial s\|}, \quad (5)$$

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 (4), é dada pela Lei de Hooke generalizada

$$T = T(\|\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s}\|, s, t). \quad (6)$$

Uma vez que a fronteira imersa, por hipótese, tem massa desprezível, o lado esquerdo da equação (4) se anula. Após aplicar o Teorema Fundamental do Cálculo e rearranjar os termos, a equação (4) pode ser

reescrita como

$$\int_{s_1}^{s_2} [\mathbf{F} - \frac{\partial}{\partial s}(T\boldsymbol{\tau})] ds = 0. \quad (7)$$

Como  $s_1$  e  $s_2$  foram tomados arbitrariamente (o segmento de fronteira imersa é arbitrário), obtém-se de (7) a densidade de força elástica para a fronteira imersa

$$\mathbf{F} = \frac{\partial}{\partial s}(T\boldsymbol{\tau}) = \frac{\partial T}{\partial s}\boldsymbol{\tau} + T\frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial s} = \frac{\partial T}{\partial s}\boldsymbol{\tau} + T\left\|\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s}\right\|K\mathbf{n}, \quad (8)$$

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

A densidade de força elástica (8) é expressa em termos das coordenadas Lagrangeanas; entretanto, na equação (1) 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  $\Omega$  (Figura 2) é dada por

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

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

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

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = \int_S \mathbf{F}(s, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s, t)) ds. \quad (9)$$

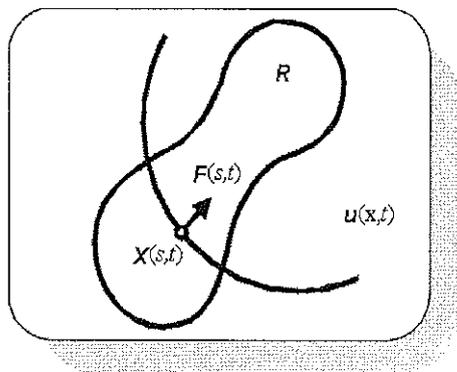


Figura 2: Ação da força elástica  $F$  numa região arbitrária  $R$  do domínio  $\Omega$ .

Observe que em (9), a densidade de força  $f$  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,  $f$  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

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}(s, t), t) = \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s, t)) d\mathbf{x}. \quad (10)$$

As equações (9)-(10) 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 (9) “espalha” as tensões elásticas que agem sobre a fronteira elástica para o resto do domínio; por esta razão é denominada como *passo de espalhamento*. A equação (10) “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

$$\rho\left(\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla\mathbf{u}\right) + \nabla p = \mu\Delta\mathbf{u} + \mathbf{f} \quad (11)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (12)$$

onde

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = \int_S \mathbf{F}(s, t)\delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s, t)) ds \quad (13)$$

$$\mathbf{F}(s, t) = \frac{\partial}{\partial s}(T\boldsymbol{\tau}) \quad (14)$$

com

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{X}(s, t) = \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)\delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s, t)) d\mathbf{x}, \quad (15)$$

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

### 3 Método Computacional

Diversas discretizações têm sido propostas para as equações (11)-(15). No espaço, em geral, as equações do fluido (11)-(12) são resolvidas numa malha computacional Euleriana regular e fixa, obtida dividindo-se o domínio  $\Omega$  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  $\mathbf{x}_{i,j} = (x_0 + ih, y_0 + jh)$ ,  $0 \leq i, j \leq N$ , 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  $\mathbf{X}_k$ ,  $0 \leq k \leq M$ . A Figura 3 mostra uma discretização espacial típica para o problema.

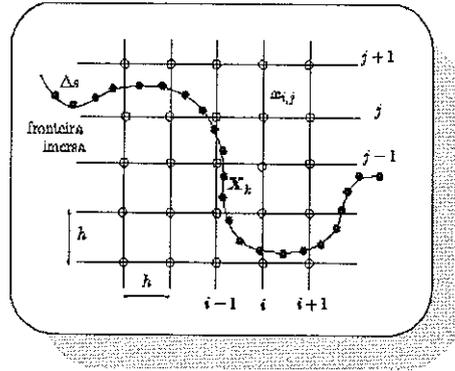


Figura 3: Malhas Euleriana ("o") e Lagrangeana ("•").

O sistema de incógnitas  $(u_{i,j}, X_k)$ ,  $0 \leq i, j \leq N$ ,  $0 \leq k \leq M$ , deve ser determinado nos instantes  $t^n = n \Delta t$ , onde  $\Delta t$  é o passo de integração no tempo. No trabalho de Peskin e Printz [27], a discretização das equações de Navier-Stokes, (11)-(12), é dada por

$$\rho \left( \frac{u^{n+1,0} - u^n}{\Delta t} \right) = f^n, \quad (16)$$

$$\rho \left( \frac{u^{n+1,1} - u^{n+1,0}}{\Delta t} + u^n D_x^0 u^{n+1,1} \right) = \mu D_x^+ D_x^- u^{n+1,1}, \quad (17)$$

$$\rho \left( \frac{u^{n+1,2} - u^{n+1,1}}{\Delta t} + v^n D_y^0 u^{n+1,2} \right) = \mu D_y^+ D_y^- u^{n+1,2}, \quad (18)$$

com as novas pressão e velocidade dadas pela resolução de

$$u^{n+1,2} = u^{n+1} + \frac{\Delta t}{\rho} G p^{n+1}, \quad (19)$$

$$D \cdot u^{n+1} = 0, \quad (20)$$

enquanto que a discretização das equações de interação fluido-fronteira imersa, (13)-(15), é dada por

$$f_{i,j}^n = \sum_k F_k^n \delta_h(x_{i,j} - X_k^n) \Delta s, \quad (21)$$

$$X_k^{n+1} = X_k^n + \Delta t \sum_{i,j} u_{i,j}^{n+1} \delta_h(x_{i,j} - X_k^n) h^2. \quad (22)$$

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

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

$$D_x^- \phi_{i,j} = \frac{\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j}}{h},$$

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

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 operadores diferenciais gradiente e divergente são respectivamente

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

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 (21)-(22), o delta de Dirac é aproximado pela função  $\delta_h$ . Uma escolha particularmente simples é dada pelo produto

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

onde

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

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

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 [22]. Alternativas a esta escolha podem ser encontradas em [2], [31].

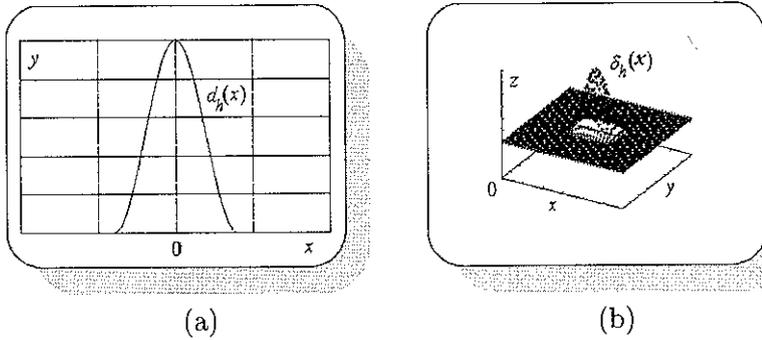


Figura 4: Discretizações: (a) delta de Dirac em uma e (b) em duas dimensões.

O esquema numérico visto, (16)-(22), desacopla as equações em cada uma das direções dos eixos coordenados, sendo de segunda 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 (21), e as equações (16)-(18) 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, (20), em (19), obtendo-se assim a equação de Poisson

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

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 (19). Finalmente, a nova velocidade é então empregada para mover a fronteira imersa por intermédio de (22), completando assim o passo no tempo.

## 4 Limitações, Dificuldades e Implementações Alternativas

O Método da Fronteira Imersa tem se mostrado ser excelente nas análises *qualitativas* de problemas bastante complexos envolvendo estruturas elásticas imersas num fluido. Embora os resultados sejam muito promissores, existem ainda certas limitações e dificuldades relacionadas à sua aplicação, as quais o têm impedido até o momento, por exemplo, de ser empregado mais sistematicamente como ferramenta auxiliar no projeto assistido por computador de válvulas cardíacas artificiais.

Dentre as principais limitações e dificuldades relacionadas à utilização do método, é possível apontar:

- os problemas de *estabilidade numérica*, como no caso das discretizações *explícitas* do método;
- as dificuldades em se capturar *detalhes geométricos* da fronteira imersa, como no caso do projeto de próteses cardíacas contendo um detalhamento preciso da geometria;
- as dificuldades em se representar adequadamente *camadas limite* mais finas, como no caso da simulação cardíaca, onde os cálculos precisam ser efetuados para números de Reynolds não fisiológicos - vinte e cinco vezes menor que o número de Reynolds encontrado num coração canino!

Como apontado por Tu e Peskin [33], e por Mayo e Peskin [15], quando as forças elásticas são calculadas empregando-se a configuração geométrica da fronteira imersa no início do passo no tempo,  $X^n$ , o método torna-se instável se a fronteira for muito rígida ou se o passo no tempo for muito grande (este é o caso do esquema numérico explícito (16)-(22), visto na seção anterior). Da prática, sabe-se que o passo no tempo neste caso deve satisfazer a uma restrição do tipo *parabólica*,  $\Delta t \leq O(h^2)$ , onde  $h$  é o espaçamento da malha que discretiza o domínio. Esta restrição é muito forte do ponto de vista do custo computacional, geralmente requerendo passos no tempo diminutos para impedir a manifestação de instabilidades.

Como uma alternativa à formulação explícita, calcula-se a força elástica não a partir de  $X^n$  mas a partir de  $X^*$ , uma *estimativa* de  $X^{n+1}$ , a

configuração geométrica da fronteira imersa no final do  $n$ -ésimo passo de integração no tempo. Esta discretização do Método da Fronteira Imersa, conhecida como formulação *aproximadamente implícita*, foi empregada pela primeira vez por Peskin [20] para simular a interação sangue-válvula mitral. Embora esta formulação, de fato, melhore o problema de estabilidade do método, ela não o resolve completamente.

As forças elásticas podem também ser calculadas *implicitamente*, utilizando-se diretamente a configuração geométrica da fronteira imersa no final do  $n$ -ésimo passo de integração no tempo,  $X^{n+1}$ . Embora esta abordagem implícita permita, em geral, que passos maiores de integração no tempo sejam empregados, um custo computacional freqüentemente maior é necessário.

Tu e Peskin [33] compararam a estabilidade de três discretizações do Método da Fronteira Imersa. Uma explícita, uma aproximadamente implícita e uma terceira, implícita *no cálculo das forças elásticas*, as quais foram empregadas para o mesmo problema-teste: a interação entre uma curva simples, fechada, imersa num escoamento de Stokes (os termos inerciais foram desprezados). Significativamente mais cara que as outras duas, a formulação implícita apresentou excelentes propriedades de estabilidade, parecendo ser incondicionalmente estável para o problema-teste empregado.

No contexto das equações completas de Navier-Stokes, Mayo e Peskin [15] introduziram dois esquemas do tipo implícito: um implícito apenas no cálculo das forças elásticas, como no trabalho de Tu e Peskin mencionado anteriormente, e o outro *totalmente implícito*. O primeiro deles, apesar de possuir uma região de estabilidade maior que a do método aproximadamente implícito, ainda não se mostrou incondicionalmente estável; por outro lado, o esquema totalmente implícito apresentado foi sempre capaz de preservar a estabilidade. Ainda neste contexto, empregando um esquema numérico baseado no esquema de Crank-Nicholson, Roma [30] propôs um *outro* esquema numérico do tipo implícito, onde apenas os termos não lineares foram tratados de forma explícita. Este esquema, que possui uma condição de estabilidade do tipo *hiperbólica*,  $\Delta t \leq O(h)$ , será comentado mais adiante.

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. As formulações implícitas são importantes por abrandarem condições de estabilidade como, por exemplo, a do caso 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 [24] 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 estendida inevitavelmente a todo o domínio computacional e, como consequência, 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 [30], [31]).

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  $l = 1, 2, \dots, l_{+fino}$ . Cada nível de refinamento  $l$  é formado por um conjunto de malhas retangulares  $G_{l,k}$ ,  $k = 1, 2, \dots, n_l$ , 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 (11)-(15) 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)).

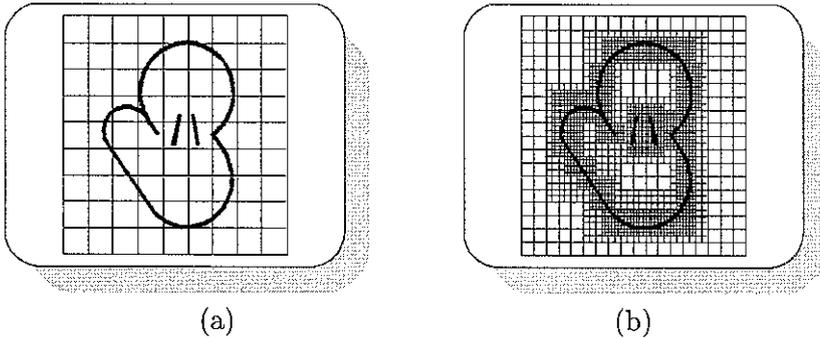


Figura 5: Discretização espacial do domínio: (a) Malha Uniforme e (b) Malha Composta.

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.

Nesta abordagem adaptativa, a discretização no tempo das equações de Navier-Stokes (11)-(12), inspirada no esquema de Crank-Nicholson,

é dada por

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \frac{\nabla p^{n+\frac{1}{2}}}{\rho} = \frac{\mu}{\rho} \Delta \left( \frac{\mathbf{u}^{n+1} + \mathbf{u}^n}{2} \right) - [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\mathbf{f}^{n+\frac{1}{2}}}{\rho}, \quad (23)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0, \quad (24)$$

onde o termo não linear  $[(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]^{n+\frac{1}{2}}$  é calculado explicitamente no tempo  $t^{n+\frac{1}{2}} \doteq t_0 + (n + \frac{1}{2})\Delta t$  e a densidade de força elástica é dada por  $\mathbf{f}^{n+\frac{1}{2}} = (\mathbf{f}^n + \mathbf{f}^{n+1})/2$ .

As equações de interação entre o fluido e a fronteira imersa são discretizadas no tempo por

$$\frac{\mathbf{X}^{n+1} - \mathbf{X}^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} [\mathbf{u}^n \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}^n) + \mathbf{u}^{n+1} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}^{n+1})] d\mathbf{x} \quad (25)$$

$$\mathbf{f}^{n+1} = \int_S \mathbf{F}^{n+1}(s) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}^{n+1}) ds. \quad (26)$$

A mais importante peculiaridade desta implementação adaptativa é que o esforço computacional é reservado apenas para as regiões do escoamento que realmente o necessitam, fornecendo assim a solução a um custo computacional potencialmente bem menor. Testes numéricos indicam que tal abordagem é capaz de incrementar a precisão do método, sendo que os resultados obtidos em malhas com refinamento localizado é tão preciso quanto aqueles obtidos em malhas uniformes construídas com o espaçamento do nível *mais fino* empregado. Maiores detalhes sobre as discretizações no espaço e no tempo, sobre o esquema numérico iterativo empregado na resolução destas equações em malhas compostas, e sobre a estratégia de refinamento podem ser encontrados em [30], [31].

Nem todos os problemas de interesse, envolvendo um fluido e estruturas elásticas nele imersas, podem ser abordados diretamente com as formulações matemática e computacional até aqui apresentadas. Em alguns casos, o problema requer que fluido seja *injetado e removido* do domínio (e.g., sangue circulando em artérias). Existe uma outra implementação alternativa capaz de descrever condições de entrada e de

saída de fluido no domínio cuja exposição foi reservada para a seção a seguir, onde ela aparecerá naturalmente no contexto de hemodinâmica em tubos flexíveis.

## 5 Algumas Aplicações Importantes

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 [22], em 1977, o estendeu 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 [28]). Em 1983, McQueen e Peskin [16] empregaram o modelo estendido 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), respectivamente).

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 consequência, 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 patentear 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* [26], [25]. Este modelo inclui diversas estruturas cardíacas obtidas diretamente por intermédio de modelagem matemática [24], [18], [23]. 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

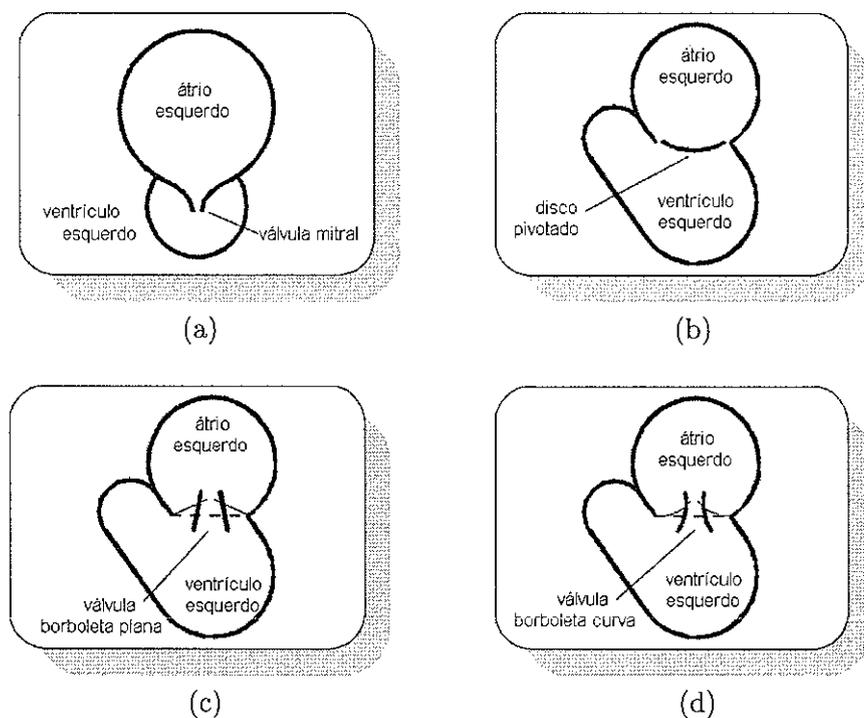


Figura 6: Diversos modelos bidimensionais do lado esquerdo do coração empregados por Peskin na década de 70 - (a) - e por Peskin e McQueen na década de 80 - (b), (c) e (d).

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 Assistência 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 sanguíneos, auxiliando a circulação sanguínea 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).

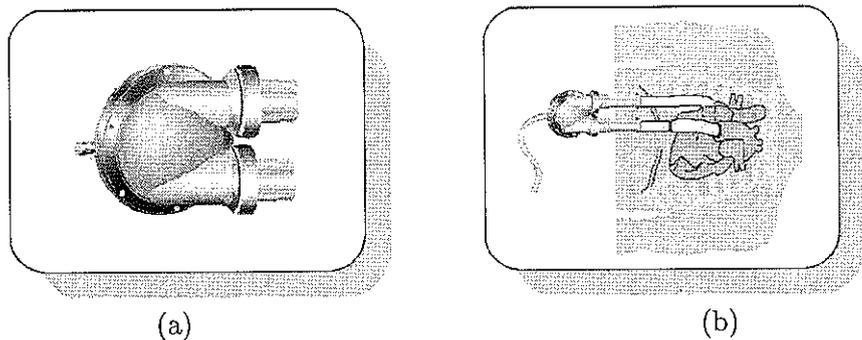


Figura 7: DAV do InCor, FM-USP: (a) unidade de bombeamento e (b) implantado.

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 [19].

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 biofluidodinâmica 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 [29] 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, (11)-(15), 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).

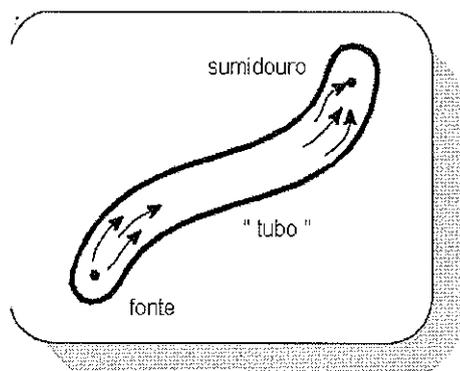


Figura 8: Introdução de uma fonte e de um sumidouro.

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, (12), que ao invés de ser escrita como  $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ , passa a ser escrita como

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \psi(\mathbf{x}, t) = \psi_1(\mathbf{x}) q_1(t), \quad (27)$$

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

$$F(s, t) = -K(\mathbf{X}(s, t) - \mathbf{X}(s, 0)), \quad (28)$$

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 (28) deve ser empregada no lugar de (14) 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 [22], Rosar [32], Arthurs e colaboradores [2], e Remigio e Roma [29].

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 sanguínea [13], a locomoção de animais aquáticos [12], [11], [9], a fluido dinâmica do ouvido interno [8], o escoamento tridimensional em tubos colapsáveis [32], o escoamento ao redor de cilindros [14] e o escoamento em arteríolas, incluído 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, algumas dificuldades em utilizá-lo e idéias alternativas para implementá-lo.

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.

Dentre as dificuldades mais marcantes na utilização do método encontram-se os problemas de estabilidade e de precisão numéricas. Várias formulações implícitas que procuram amenizar esse problema foram comentadas. No caso específico da precisão numérica, uma versão adaptativa que emprega um esquema do tipo implícito e discretização espacial em malhas compostas foi descrita. Diversas referências bibliográficas foram incluídas.

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 sanguíneo, 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.

Finalizando, são muitas as frentes nas quais se pode atuar e se contribuir efetivamente na área de simulação numérica de problemas envolvendo a interação fluido-estrutura: na modelagem matemática, no

desenvolvimento de algoritmos eficientes, na implementação computacional, na análise numérica e nas aplicações. Em se tratando do Método da Fronteira Imersa, estas frentes se abrem num vasto e convidativo leque de possibilidades.

## 7 Agradecimentos

Agradeço a Santos Alberto Enriquez Remigio, aluno de doutoramento do IME-USP, pelos esboços de algumas das ilustrações utilizadas aqui, e ao colega Dr. Sérgio Bernardo Volchan, PUC-Rio, pelo incentivo dado à elaboração deste trabalho.

## Referências

- [1] Affeld, K. Virchow Klinikum, Medizinische Fakultät der Humboldt-Universität zu Berlin, Spandauer 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.
- [4] 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.
- [9] 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] 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.
- [14] 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.
- [15] Mayo, A.A. & Peskin, C.S. An implicit numerical method for fluid dynamics problems with the immersed elastic boundaries. *Contemporary Mathematics*, 141:261–277, 1993.
- [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. *Scandinavian 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] 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 Assist Device: São Paulo Heart Institute VAD. *Artificial Organs*, 19(3):274-279, 1995.
- [20] 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.
- [21] Peskin, C.S. Flow patterns around heart valves: A numerical method. *J. Comp. Phys.*, 10:252-271, 1972.
- [22] Peskin, C.S. Numerical analysis of blood flow in the heart. *J. Comp. Phys.*, 25:220-252, 1977.
- [23] Peskin, C.S. Fiber architecture of the left ventricular wall: An asymptotic analysis. *Communications on Pure & Applied Mathematics*, 42:79-113, 1989.
- [24] 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.
- [25] 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.
- [26] 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.
- [27] 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.

- 
- [28] Printz, B.F. *Computer Modeling of Blood Flow through the Heart During the Complete Cardiac Cycle*. PhD thesis, City University of New York, 1992.
- [29] Remigio, S.A.E. & Roma, A.M. Two-dimensional numerical simulations of incompressible flows in arbitrary, flexible channel-like domains, Preprint, 2000.
- [30] 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.
- [31] Roma, A.M.; Peskin, C.S.; Berger, M.J. An adaptive version of the immersed boundary method. *J. Comp. Phys.*, 153:509-534, 1999.
- [32] 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.
- [33] Tu, C. & Peskin, C.S. Stability and instability in the computation of flows with moving immersed boundaries: a comparison of three methods. *SIAM J. Sci. Stat. Comp.*, 13:1361-1376, 1992.

Instituto de Matemática e Estatística  
Universidade de São Paulo  
Caixa Postal 66281  
05315-970 São Paulo - SP  
[www.ime.usp.br/~roma](http://www.ime.usp.br/~roma)