



**Universitat**  
de les Illes Balears

**TREBALL DE FI DE GRAU**

**INTERACCIÓ FLUID-ESTRUCTURA**

**Alex Serra Nieto**

**Grau de Física**

**Facultat de Ciències**

**Any Acadèmic 2022-2023**

# INTERACCIÓ FLUID-ESTRUCTURA

**Alex Serra Nieto**

**Traball de Fi de Grau**

**Facultat de Ciències**

**Universitat de les Illes Balears**

**Any Acadèmic 2022-2023**

Paraules claus del treball:

elasticitat, model Neo-Hooke, hidrodinàmica, elements finits, interacció fluid-estructura, mètodes *IBM* de frontera submergida, simulació de vesícules

*Nom Tutor/Tutora del Treball: Carles Bona Casas*

*Nom Tutor/Tutora (si procedeix): \_\_\_\_\_*

Autoritz la Universitat a incloure aquest treball en el repositori institucional per consultar-lo en accés obert i difondre'l en línia, amb finalitats exclusivament acadèmiques i d'investigació.

Autor	Tutor
Si No	Si No
<input checked="" type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>

## Abstract

Els darrers desenvolupaments en l'àmbit de la dinàmica de fluids han augmentat la capacitat predictiva de les simulacions a nivell cel·lular als àmbits de la biofísica i la medicina. A aquest treball, es fa una revisió de les teories fonamentals que governen els comportaments elàstics dels sòlids i la hidrodinàmica dels fluids, així com una introducció als sistemes on es mesclen aquests materials i s'ha de parlar d'interacció fluid-estructura. Una vegada presentats aquests darrers tipus de problemes, es presenta una sèrie d'estratègies computacionals per simular-los mitjançant mètodes d'elements finits, i es tracta un cas a mode d'exemple: s'estudia el moviment característic de vesícules (que simulen, en aquest cas, glòbuls vermells) i la relació que té el fibrinogen amb els agrupaments i la rigidesa dels glòbuls vermells, així com els paràmetres físics del problema en els que realment es veu reflectida la presència d'aquesta darrera proteïna, i la rellevància dels petits canvis a cada magnitud fonamental present.

## Abstract

Recent developments in the field of fluid dynamics have increased the predictive capacity of cellular-level simulations in the fields of biophysics and medicine. This work includes a review of the fundamental theories governing the elastic behavior of solids and the hydrodynamics of fluids. Additionally, it introduces systems where these materials are combined, which need a discussion about fluid-structure interaction. Once these kind of problems are introduced, a series of computational strategies is introduced to simulate them using finite element methods. As an example, a specific case has been studied: the characteristic movement of vesicles (which, in this project, simulate red blood cells) and the relationship between fibrinogen and the aggregation and stiffness of red blood cells. Furthermore, the physical parameters of the problem, in which the presence of this last protein is reflected, and the relevance of small changes in the fundamental magnitudes of the problem, are studied.

## Abstract

Los avances recientes en el campo de la dinámica de fluidos han aumentado la capacidad predictiva de las simulaciones a nivel celular en los campos de la biofísica y la medicina. Este trabajo incluye una revisión de las teorías fundamentales que rigen el comportamiento elástico de los sólidos y la hidrodinámica de los fluidos. Además, introduce sistemas en los que se combinan estos materiales, lo que hace necesaria una discusión de la interacción fluido-estructura. Una vez presentados estos tipos de problemas, se introducen una serie de estrategias computacionales para simularlos mediante métodos de elementos finitos. Para ilustrar estos modelos, se presenta un caso práctico: el movimiento característico de las vesículas (que, en este caso, simulan los glóbulos rojos) y la relación entre el fibrinógeno y el agrupamiento y la rigidez de los glóbulos rojos. Además, se examinan los parámetros físicos del problema en los que realmente se refleja la presencia de esta última proteína, y la relevancia de los pequeños cambios en cada magnitud fundamental del presente.

# Índex

<b>1</b>	<b>Marc teòric</b>	<b>6</b>
1.1	Introducció: la matèria, la seva composició i la hipòtesi del continu . . . . .	6
1.2	Comportament dels sòlids: l'elasticitat . . . . .	8
1.2.1	El tensor de deformacions $u_{ik}$ . . . . .	8
1.2.2	El tensor d'esforços $\sigma_{ik}$ . . . . .	9
1.2.3	Termodinàmica de la deformació lineal . . . . .	9
1.2.4	Deformacions lineals: la llei de Hooke generalitzada . . . . .	10
1.2.5	Deformacions realistes: elasticitat no lineal, tensors de Piola-Kirchhoff . . . . .	10
1.2.6	L'equació constitutiva: el model Neo-Hooke . . . . .	12
1.3	Comportament dels fluids . . . . .	13
1.3.1	Conservació de la massa . . . . .	14
1.3.2	Conservació del moment lineal . . . . .	14
1.3.3	Dificultat de les equacions i condicions de contorn . . . . .	14
1.4	FSI: Interacció fluid-estructura . . . . .	15
1.4.1	Punt de vista del problema: Euler, Lagrange i ALE . . . . .	16
1.4.2	Interfície $\Gamma_{FS}$ i interacció . . . . .	17
1.5	Mètode de frontera submergida: <i>IBM</i> . . . . .	17
1.5.1	Comparació entre els mètodes de forçament . . . . .	18
1.5.2	Visió general dels forçaments continus . . . . .	18
1.5.3	Equacions emprades al mètode de frontera elàstica submergida . . . . .	19
<b>2</b>	<b>Marc computacional</b>	<b>21</b>
2.1	Discretització de les equacions . . . . .	21
2.2	Enfocaments monolític i per parts . . . . .	21
2.3	Estratègies d'iteració i convergència per l'enfocament per parts . . . . .	22
2.4	Tècniques de malla . . . . .	23
<b>3</b>	<b>Anàlisi d'un cas concret: els glòbuls vermells</b>	<b>25</b>
3.1	Els glòbuls vermells i el fibrinogen . . . . .	25
3.2	El mètode <i>DCIB</i> i els seus avantatges . . . . .	26
3.3	La simulació: equacions, magnituds i domini . . . . .	26
3.4	Resultats . . . . .	27
3.4.1	Cas 1: $\dot{\gamma} = 160s^{-1}$ , $\kappa = 2 \cdot 10^{-10}g\text{ cm}^2/s^2$ , $\lambda = 3.76$ . . . . .	27
3.4.2	Cas 2: $\dot{\gamma} = 160s^{-1}$ , $\kappa = 2 \cdot 10^{-10}g\text{ cm}^2/s^2$ , $\lambda = 5$ . . . . .	28
3.4.3	Cas 3: $\dot{\gamma} = 160s^{-1}$ , $\kappa = 2 \cdot 10^{-9}g\text{ cm}^2/s^2$ , $\lambda = 5$ . . . . .	29
3.5	Conclusions i perspectives de futur . . . . .	30



<b>4</b>	<b>Annex</b>	<b>33</b>
4.1	Sòlids	33
4.1.1	La traça del tensor de deformacions	33
4.1.2	El tensor de deformacions en coordenades cilíndriques i esfèriques	33
4.1.3	Interpretació del tensor d'esforços $\sigma_{ik}$	34
4.1.4	Demostració de les equacions termodinàmiques pels tensors $u_{ik}$ i $\sigma_{ik}$	35
4.1.5	Demostració de la Llei de Hooke generalitzada	36
4.1.6	Relació entre el gradient de deformacions i el vector desplaçaments	36
4.1.7	Relació entre els tensors $E_{ij}$ i $F_{ij}$	37
4.1.8	Tractant amb el tensor $E_{ij}$	37
4.1.9	Relació entre $dV$ i $dV'$	38
4.1.10	Relació entre $dA$ i $dA'$	38
4.1.11	El primer tensor d'esforços de Piola-Kirchhoff en funció de $\sigma_{ik}$	39
4.1.12	Equacions d'equilibri en termes dels tensor de Piola-Kirchhoff	39
4.1.13	Equacions d'equilibri per deformacions homogènies	39
4.1.14	Equacions d'equilibri en components cartesianes	41
4.2	Fluids	41
4.2.1	Conservació del moment: desenvolupament de les equacions	41
4.2.2	Conservació de l'energia	42
4.3	Part computacional	43
4.3.1	Navier-Stokes en 2D: el teorema de Gauss per polígons	43
4.3.2	Equacions de Navier-Stokes en 2D	45
4.3.3	Simulacions senceres pels tres casos del doblet de vesícules	46
4.3.4	Nombres de Reynolds emprats (en sistema CGS)	49

# Capítol 1

## Marc teòric

### 1.1 Introducció: la matèria, la seva composició i la hipòtesi del continu

Des del desenvolupament dels marcs teòrics de la mecànica estadística i la mecànica quàntica a principis del segle passat, la naturalesa discreta de la matèria ha quedat amplament demostrada. La realitat està composta pel que anomenem quarks, àtoms i molècules (del llatí *moles*, massa; i *-culum*, petit), responsables de les propietats macroscòpiques dels sistemes que formen. La física dels medis continus s'ocupa de la descripció sistemàtica de la matèria a escales de longitud molt grans comparades amb la molecular, normalment fins a 8 ordres de magnitud de diferència. Així doncs, aquesta gran diversitat d'escala aïlla les teories entre elles i, tot i saber que la descripció quàntica de les partícules que formen un sistema és més que vàlida, no es fan servir les equacions d'Schrödinger o de Dirac per tractar problemes com els que es desenvoluparan a aquest treball. Alguns sectors moderns de la nano-ciència i la biofísica exploren la frontera entre aquests dominis, però les lleis i fenòmens que s'estudiaran a aquest treball parteixen d'un intent de traduir la mecànica clàssica newtoniana per partícules puntuals a un cas on es tracta amb un cos compost, a on les interaccions entre els components no es poden menysprear. El món microscòpic incideix en el macroscòpic quasi únicament a través de constants materials, com ho són els coeficients d'elasticitat i viscositat, que caracteritzen les interaccions entre quantitats macroscòpiques de matèria. La descripció d'un continu macroscòpic ha de ser estadística, però les fluctuacions aleatòries estan fortament suprimides per la gran quantitat de molècules presents a qualsevol objecte d'aquesta magnitud.

Per aconseguir entendre en profunditat les característiques d'aquests sistemes, s'ha de considerar també la interacció entre els components que els formen. Així doncs, a part de la omnipresent gravetat, les forces presents a la física de medis continus són de naturalesa electromagnètica, i es solen recollir en les anomenades forces de van der Waals. De manera general i sense aprofundir-hi, aquestes forces són fortament repulsives quan les molècules estan forçades a estar més properes entre si que el que les seves mides naturals permeten, i moderadament atractives quan les molècules es separen. Un model matemàtic senzill per aquest tipus de potencial és el de Lennard-Jones, proposat el 1924 i amb unes característiques que s'adeqüen a la descripció anterior:

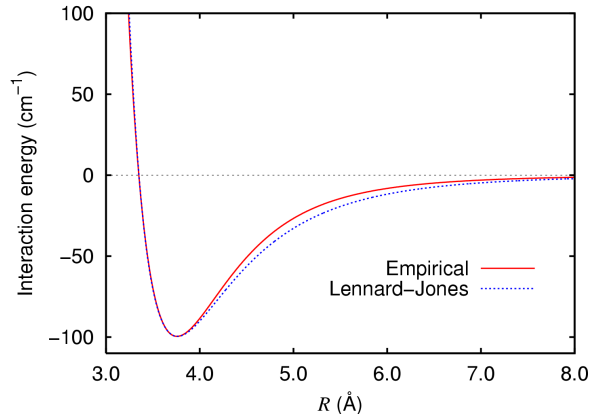


Figura 1.1: Potential de Lennard-Jones pel dímer d'argó [13].

Les molècules es poden organitzar de diferents maneres per minimitzar l'energia i construir estructura. Així, els tres estats clàssics de la matèria representen la competició entre una contribució negativa de la part atractiva intermolecular, i la contribució positiva cinètica resultant de l'excitació tèrmica. Així, trobam tres configuracions clàssiques<sup>1</sup> en funció de la intensitat de cada contribució:

- Sòlids: Al aquests materials, la part atractiva del potencial és tan potent que l'excitació tèrmica no la pot superar, i la temperatura provoca petits moviments harmònics de les molècules al voltant d'un punt d'equilibri. Si s'apliquen forces externes suficientment intenses, aquest sòlid comença a deformar-se de manera elàstica (el cos pot tornar a la seva forma original una vegada la força desapareix), fins que eventualment es deforma de manera plàstica (el cos es queda deformat permanentment) o fins i tot es romp. Als sòlids cristal·lins, les partícules s'empaqueten en patrons repetitius i ordenats, el que permet fer un estudi rigorós de les seves propietats a partir d'unitats bàsiques d'aquesta periodicitat, les cel·les unitàries.
- Líquids: A aquests materials, la part atractiva és menor que als sòlids, però segueix sent difícil que una molècula abandoni les circumdants a través d'una superfície de fluid. Els líquids tenen la capacitat de fluir, un procés que es pot entendre com una fracturació contínua; i, sota l'acció de forces externes com la gravetat, s'adapten a la forma del recipient que els conté. Careixen de memòria de forma, són poc compressibles i poden presentar processos de difusió, a on les partícules de matèria es mouen des de regions concentrades a regions poc concentrades fins assolir una distribució uniforme.
- Gasos: Als gasos, l'excitació tèrmica venç a l'atracció intermolecular, i les partícules es mouen i col·lisionen de manera lliure, així que aquests careixen de volum i forma definits, i es veuen poc afectats per la força de la gravetat, ja que les molècules es troben en moviment caòtic constant. Els gasos s'expandeixen fins omplir els recipients tancats que els contenen de manera ràpida, i poden fluir ràpidament per adaptar-se si aquest recipient canvia de manera sobtada (per exemple, per acció d'un pistó).

La termodinàmica clàssica fa servir la còmoda idea dels cossos homogenis fets de mols de matèria, on la granularitat molecular pot ser menyspreada. Quan s'estudia la física d'un continu, com pot ser un sòlid elàstic o un fluid, els quals pateixen variacions espacials de les seves quantitats termodinàmiques (densitat, pressió, temperatura...), es planteja una important qüestió a nivell teòric: cal analitzar la longitud característica d'aquestes variacions i la quantitat de molècules necessàries per definir aquestes quantitats de manera suficientment precisa. El nombre de molècules tractat justificarà l'ús d'una descripció

<sup>1</sup>Realment, existeixen molts estats d'agregació addicionals, com poden ser els condensats quàntics, els estats d'alta energia, els superfluids, cristalls líquids...

continua en funció de la precisió desitjada, ja que com la matèria no es contínua, la física del continu sempre serà una aproximació. Aquesta descripció permet l'ús de recursos matemàtics basats en funcions contínues i/o derivables, les quals faciliten amplament l'anàlisi dels problemes tractats. Així doncs, ja que a aquest treball es tracten problemes amb longituds característiques suficientment grans per validar aquesta hipòtesi, s'ofereix a continuació un desenvolupament dels models emprats a l'hora de tractar amb dos problemes amb medis continus: els sòlids elàstics i els fluids [10].

## 1.2 Comportament dels sòlids: l'elasticitat

Quan s'aplica una força a un sòlid, aquest pateix una deformació, la qual canvia la seva forma i el seu volum. Aquests canvis es modelen matemàticament de manera tensorial. Així doncs, s'aconsegueix un marc teòric independent del sistema de referència emprat i que és capaç d'arribar a resultats escalars i vectorials partint d'unes quantes definicions i consideracions inicials.

### 1.2.1 El tensor de deformacions $u_{ik}$

Si s'anomena  $x_i$  a les components d'un cert punt del sòlid, i  $x'_i$  a les components del punt post-deformació (que, de manera trivial, depenen de les anteriors  $x_i$ ), es pot construir l'anomenat **vector desplaçament**, que és funció de les coordenades  $x_i$  i es defineix de manera senzilla com:

$$u_i = x'_i - x_i \quad (1.2.1)$$

Es prenen ara dos punts molt propers. Si el vector que els uneix tenia unes coordenades  $dx_i$ , el corresponent vector post-deformació ve definit per  $dx'_i = dx_i + du_i$ . Ara, es pot definir la distància entre els dos punts com  $dl = \sqrt{dx_1^2 + dx_2^2 + dx_3^2}$ , i la corresponent post deformació com  $dl' = \sqrt{dx_1'^2 + dx_2'^2 + dx_3'^2}$ . Ara, fent servir el conveni de suma d'Einstein <sup>2</sup>, i fent servir la regla de la cadena per escriure el diferencial  $du_i = \partial u_i / \partial x_k \cdot dx_k$ , s'arribar a expressar el quadrat de la distància post-deformació com:

$$dl'^2 = dl^2 + 2 \frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_i dx_k + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} dx_k dx_l$$

Com al segon terme es suma sobre els índexs  $i$  i  $k$ , i al tercer es pot intercanviar  $i$  i  $l$  sense afectar a l'expressió, s'obté:

$$dl'^2 = dl^2 + \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right) dx_i dx_k \equiv dl^2 + 2u_{ik} dx_i dx_k \quad (1.2.2)$$

On finalment s'ha definit l'anomenat tensor de deformacions  $u_{ik}$  com:

$$u_{ik} \equiv \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_l}{\partial x_i} \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right) \quad (1.2.3)$$

D'aquesta definició ja es pot extreure qualche conclusió interessant sobre aquesta magnitud. Es descriu la deformació local a cada punt del sòlid amb 6 quantitats independents: les components d'un tensor 3x3 **simètric**, és a dir,  $u_{ik} = u_{ki}$ , que serà diagonalitzable en qualsevol punt (tot i que pel fet de ser diagonal a un punt del sòlid no té perquè ser-ho a un altre). Aquesta diagonalització fa veure que es pot entendre qualsevol deformació com una combinació de deformacions (estirament/compressió) en les direccions els tres eixos principals del tensor (els vectors propis de la seva representació matricial diagonal), tal com el sentit comú ens indicava des d'un principi. A continuació, si interessa aconseguir una fórmula més senzilla pel tensor de deformacions (tot i que a aquest treball es farà feina amb deformacions no lineals),

<sup>2</sup>Donada una expressió lineal escrita com un sumatori, s'omet la lletra  $\Sigma$  i es condensa la notació, entenent que l'expressió restant implica una suma sobre tots els possibles valors dels índexs repetits presents.

s'hi pot arribar fent una suposició de deformacions petites i negligint el darrer sumand no lineal, el qual és diferencial de segon ordre. Així, arribam a la forma més comú d'aquest tensor, que ara té una definició purament lineal:

$$u_{ik} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) \quad (1.2.4)$$

La traça d'aquest tensor proporciona una mesura directa del canvi relatiu del volum del sòlid tractat amb aproximació de primer ordre. Si es defineix l'element de volum  $dV = dx_1 dx_2 dx_3$  i el seu corresponent  $dV'$  i s'opera amb les definicions anteriors 4.1.1, s'arriba a :

$$\frac{dV' - dV}{dV} = u_{ii} \quad (1.2.5)$$

Aquest tensor  $u_{ik}$  es pot explicitar per diferents sistemes de referència comuns, com són el cartesià, el cilíndric o l'esfèric, i s'arriba a expressions més concretes però molt menys compactes, que es poden trobar a l'annex 4.1.2[15].

### 1.2.2 El tensor d'esforços $\sigma_{ik}$

Les forces internes que, després d'una deformació, fan tendir el cos a la seva forma original s'anomenen esforços interns. Com ja s'ha comentat, són conseqüència de les forces intermoleculares, les quals tenen un rang d'acció molt curt. Llevat de certs casos especials (on les deformacions originen camps elèctrics, als cossos anomenats piro i piezoelèctrics), es tractarà amb un rang d'acció zero, és a dir, que la força provocada per les parts del voltant d'una part del cos només actuarà sobre la superfície d'aquella part. Si es pren amb una magnitud vectorial  $\vec{F}$  que mesura la força per unitat de volum (amb components  $F_i$ ), es pot expressar la força total exercida a una part del sòlid com una integral de volum, la qual es pot reduir a una integral de superfície mitjançant el Teorema de Stokes:

$$\int F_i dV = \int \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} dV = \oint_S \sigma_{ik} dS_k \quad (1.2.6)$$

A on  $dS_k$  són les components del vector element de superfície, i  $\sigma_{ik}$  és un cert tensor del qual la força per unitat de superfície n'és la divergència, és a dir:

$$F_i = \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} \Leftrightarrow dF = \sigma \cdot dS \quad (1.2.7)$$

Aquest darrer tensor  $\sigma_{ik}$  és el que s'anomena tensor d'esforços. Integrant-lo (o reduint l'anàlisi a seccions als plans) es poden calcular les forces anteriorment esmentades, i se'n pot fer una anàlisi gràfica com la que es pot trobar a l'annex 4.1.3, així com un argument de simetria (presentat a la mateixa secció de l'annex) per justificar:

$$\sigma_{ik} = \sigma_{ki} \quad (1.2.8)$$

De manera similar a com s'ha fet pel tensor de deformacions, un tensor simètric sempre es podrà diagonalitzar, i els vectors propis del procés representaran les direccions principals de l'esforç. A més, altra vegada, el fet de diagonalitzar aquest tensor en un punt no assegura que es conservi diagonal a qualsevol altre [15].

### 1.2.3 Termodinàmica de la deformació lineal

Una vegada definides aquestes quantitats matemàtiques, adients per resoldre problemes de medis continus, se'ns planteja la situació de combinar-les en equacions que relacionin les deformacions amb els esforços que les causen, i viceversa. Seguint la demostració que es pot trobar a l'annex 4.1.4, s'arriba a les següents expressions pels tensors anteriorment definits:

$$\sigma_{ik} = \left( \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial u_{ik}} \right)_S = \left( \frac{\partial F}{\partial u_{ik}} \right)_T \quad (1.2.9)$$

$$u_{ik} = - \left( \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{ik}} \right)_T \quad (1.2.10)$$

### 1.2.4 Deformacions lineals: la llei de Hooke generalitzada

Per poder fer servir aquest darrers resultats per casos particulars i relacionar els dos tensors anteriors, fa falta conèixer l'energia lliure  $F$  del cos com una funció del tensor de deformacions  $u_{ik}$ . Per aconseguir-ho, es realitza una expansió de l'energia lliure en potències del tensor, els coeficients de la qual seran les constants de Lamé,  $\lambda$  i  $\mu$ . Aquesta expansió i posterior demostració es pot trobar a l'annex 4.1.5.

Finalment, agrupant termes i recuperant el paràmetre  $\lambda$ , s'arriba a la **Llei de Hooke tensorial**:

$$\sigma_{ik} = \left( K - \frac{2\mu}{3} \right) u_{ll} \delta_{ik} + 2\mu u_{ik} = \lambda u_{ll} \delta_{ik} + 2\mu u_{ik} \quad (1.2.11)$$

El que permet relacionar els dos tensors  $\sigma_{ik}$  i  $u_{ik}$  per a un cos isotròpic. Per obtenir la relació inversa, es parteix de 1.2.11 i s'hi substitueix la traça (que s'anul·la pel segon terme)  $\sigma_{ii} = 3K u_{ii} \rightarrow u_{ii} = \sigma_{ii}/3K$ , llavors:

$$u_{ik} = \delta_{ik} \sigma_{ll} \frac{1}{9K} + (\sigma_{ik} - \frac{1}{3} \delta_{ik} \sigma_{ll}) / 2\mu \quad (1.2.12)$$

D'aquesta darrera expressió es veu que les deformacions petites són proporcionals a les forces aplicades, el que sempre ha representat la Llei de Hooke. Aquesta darrera relació general es pot concretar per casos com compressions hidrostàtiques pures, deformacions homogènies, cisalles pures...

Finalment, si es pren el resultat del teorema d'Euler per funcions homogènies,  $u_{ik} \partial F / \partial u_{ik} = 2F$  i s'hi fa servir l'expressió 1.2.9:

$$F = \frac{1}{2} \sigma_{ik} u_{ik} \quad (1.2.13)$$

Tot seguit, s'hi substitueix  $u_{ik}$  expressat com una combinació lineal de les components del tensor  $\sigma_{ik}$ . Aplicant altre cop el teorema d'Euler,  $\sigma_{ik} \partial F / \partial \sigma_{ik} = 2F$ , i comparant amb l'expressió 1.2.13:

$$u_{ik} = \frac{\partial F}{\partial \sigma_{ik}} \quad (1.2.14)$$

On hem arribat a una darrera fórmula per calcular el tensor de deformacions a partir de l'energia lliure expressada en termes del tensor d'esforços, la qual es vàlida sempre que es pugui fer servir la llei de Hooke, és a dir, per **deformacions petites**<sup>3</sup>[9]. De manera adicional, s'ofereix a l'annex un desenvolupament de les equacions d'equilibri per casos lineals 4.1.13.

### 1.2.5 Deformacions realistes: elasticitat no lineal, tensors de Piola-Kirchhoff

La majoria de sòlids tractats en àmbits biofísics sofreixen deformacions de més del 5% sota esforços, el qual requereix fer un anàlisi en el marc no lineal del tensor de deformacions 1.2.3. Es defineix la magnitud tensor gradient de deformacions (que, com es pot veure, és un tensor no simètric), definida a partir de la relació diferencial entre les coordenades dels punts pre- i post-deformació:

$$F_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial x'_j} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial x'_1} & \frac{\partial x_1}{\partial x'_2} & \frac{\partial x_1}{\partial x'_3} \\ \frac{\partial x_2}{\partial x'_1} & \frac{\partial x_2}{\partial x'_2} & \frac{\partial x_2}{\partial x'_3} \\ \frac{\partial x_3}{\partial x'_1} & \frac{\partial x_3}{\partial x'_2} & \frac{\partial x_3}{\partial x'_3} \end{pmatrix} \quad (1.2.15)$$

<sup>3</sup>En canvi,  $\sigma_{ik} = \partial F / \partial u_{ik}$  és una fórmula general de la termodinàmica.

Aquest darrer tensor  $F_{ij}$  es pot relacionar de manera senzilla amb el vector de desplaçaments  $\vec{u}$ , amb un senzill raonament que es pot trobar a l'annex 4.1.6:

$$F_{ij} = \delta_{ij} + \frac{\partial u_i}{\partial x'_j} \quad (1.2.16)$$

D'altra banda, aquesta formulació permet reflexar qualsevol deformació com una combinació rotació i estirament. Així doncs, es postulen dues versions del mateix tipus d'anàlisi, a on es pren una matriu de rotacions  $R_{ij}$  i dos tensors que representen estiraments,  $U_{ij}$  i  $V_{ij}$ . Es tindrà una versió a on primer es fa un estirament i després una rotació, i una altra on, de manera contrària, primer es rota i després s'estira:

$$F_{ij} = R_{ik}U_{kj} \quad (1.2.17)$$

$$F_{ij} = V_{ik}R_{kj} \quad (1.2.18)$$

De manera trivial, aquest tensor de rotacions és ortogonal,  $R^T R = \mathbb{1}$ , o bé  $R_{ki}R_{kj} = \delta_{ij}$ . Aquesta propietat juga un paper important a la definició d'equacions constitutives, les quals relacionen de manera fenomenològica la tensió i la deformació per diferents materials. Una vegada es tenen totes aquestes definicions, es poden estudiar les grans deformacions, o el que és equivalent, l'elasticitat no lineal. Així doncs, es prenen els elements de línia  $ds^2$ :

$$\begin{aligned} ds^2 &= dx dx = dx_i dx_i = dx_1 dx_1 + dx_2 dx_2 + dx_3 dx_3 \\ ds'^2 &= dx dx = dx'_i dx'_i = dx'_1 dx'_1 + dx'_2 dx'_2 + dx'_3 dx'_3 \\ ds^2 - ds'^2 &= dx_i dx_i - dx'_i dx'_i \equiv 2dx'_i E_{ij} dx'_j \end{aligned} \quad (1.2.19)$$

A aquesta darrera definició, on s'ha inclòs un nou tensor de grans deformacions  $E_{ij}$ , hi veim la necessitat d'expressar  $ds^2$  en termes de les coordenades deformades, per tant hem de recórrer al tensor gradient de deformacions, que compleix:

$$dx_k = dx'_i F_{ki} \longleftrightarrow dx_k = F_{kj} dx'_j \quad (1.2.20)$$

Tractant l'equació 1.2.19 amb aquesta darrera propietat, seguint un procediment que es pot trobar a l'annex 4.1.7 s'arriba a:

$$E_{ij} = \frac{1}{2} (F_{ki} F_{kj} - \delta_{ij}) \quad (1.2.21)$$

Seguint el procediment de l'annex 4.1.8, s'arriba a la versió final per la definició del tensor de grans deformacions:

$$E_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x'_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x'_i} + \frac{\partial u_k}{\partial x'_i} \frac{\partial u_k}{\partial x'_j} \right) \quad (1.2.22)$$

Comparant aquesta darrera expressió amb el tensor de deformacions 1.2.3, es pot veure que s'obtenen expressions molt similars però a aquesta darrera es deriva respecte les coordenades deformades. Això implica que, per fer concordar les magnituds i poder fer una teoria basada en el concepte d'energia, caldrà definir un tensor d'esforços nou (definit en base a les coordenades  $x'_i$ ), i arribar a una nova equació d'equilibri d'esforços [8].

Abans que res, cal relacionar les magnituds de volum (útils per tractar amb esforços) a les diferents coordenades deformades i sense deformar. Seguint el procediment que es pot trobar a l'annex 4.1.9, s'arriba a la següent relació (allà on  $J$  és el jacobià del canvi de coordenades) pel diferencial de volum:

$$dV = \det F dV' \equiv J dV' \rightarrow dV' = J^{-1} dV \rightarrow J^{-1} = \frac{dV'}{dV} \quad (1.2.23)$$

D'altra banda, també convé relacionar les àrees. Seguint el procediment que es pot trobar a l'annex 4.1.10, s'arriba a:

$$J(F_{it})^{-1} n'_i dA' = n_t dA \quad (1.2.24)$$

Ara fent una definició similar a 1.2.7, però amb les coordenades  $x'_i$ :

$$dP_i = (T_{ij}n'_j)dA' \quad (1.2.25)$$

Allà on s'ha fet servir un nou tensor  $T_{ij}$ , anomenat **primer tensor d'esforços de Piola-Kirchhoff**. Ara, interessa relacionar aquesta darrera quantitat amb el tensor d'esforços anterior  $\sigma_{ij}$ . Seguint el procediment que es pot trobar a l'annex 4.1.11, s'arriba a les dues següents equacions equivalents:

$$T_{ij} = \sigma_{ik}J(F_{jk})^{-1} \quad (1.2.26)$$

$$\sigma_{ik} = T_{ij}F_{kj}J^{-1} \quad (1.2.27)$$

D'altra banda, el **segon tensor d'esforços de Piola-Kirchhoff** es defineix mesurant la pressió infinitesimal en el sistema de coordenades  $x'_i$ :

$$dP'_i = (S_{ij}n'_j)dA' \quad (1.2.28)$$

Seguint un procediment similar a 4.1.11, allà on es fan aparèixer el jacobí i el tensor gradient de deformacions per relacionar coordenades en els dos sistemes i relacionar aquest tensor amb l'anterior tensor d'esforços  $\sigma_{ij}$ , s'arriba a les següents equacions equivalents:

$$S_{ij} = (F_{ir})^{-1}\sigma_{rk}J(F_{jk})^{-1} \quad (1.2.29)$$

$$\sigma_{rk} = F_{ri}S_{ij}F_{kj}J^{-1} \quad (1.2.30)$$

Amb aquesta darrera equació i 1.2.26, es poden relacionar els dos tensors d'esforç de Piola-Kirchhoff mitjançant el gradient de deformacions:

$$F_{ri}S_{ij}F_{kj}J^{-1} = \sigma_{rk} = F_{kj}T_{rj}J^{-1} \longrightarrow F_{ri}S_{ij} = T_{rj} \quad (1.2.31)$$

Finalment, i seguint el procediment que es pot trobar a l'annex 4.1.12, s'arriba a l'equació d'equilibri en termes d'aquest tensor de Piola-Kirchhoff:

$$\frac{\partial T_{ij}}{\partial x'_j} + \rho' b'_i - \rho' \frac{d^2 x'_i}{dt^2} = 0 \quad (1.2.32)$$

Substituint la relació 1.2.31 dins aquesta darrera equació, s'arriba a l'equació d'equilibri en termes del segon tensor de Piola-Kirchhoff:

$$\frac{\partial (F_{ki}S_{kj})}{\partial x'_j} + \rho' b'_i - \rho' \frac{d^2 x'_i}{dt^2} = 0 \quad (1.2.33)$$

## 1.2.6 L'equació constitutiva: el model Neo-Hooke

Una vegada es tenen totes aquestes quantitats definides, es cerca construir una teoria per l'elasticitat per grans deformacions en base a l'energia. Així doncs, es defineix l'elasticitat com la capacitat d'un material d'acumular (que no dissipar) energia sota una deformació. Si es defineix una funció d'energia de deformació  $W$  en funció de les deformacions principals  $\lambda_i$ :  $W = W(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$  Es poden escriure [8] els tensors d'esforços com:

$$S_i = \frac{1}{\lambda_i} \frac{\partial W}{\partial \lambda_i} \quad , \quad T_i = \frac{\partial W}{\partial \lambda_i} \quad , \quad \sigma_i = J^{-1} \lambda_i \frac{\partial W}{\partial \lambda_i} \quad (1.2.34)$$

A on només es fa servir un índex per aquests tensors, ja que la derivada de  $W$  respecte les deformacions principals dóna els esforços principals, dels quals només n'hi ha tres. Si es pren el model d'Ogden [8] per la funció d'energia de deformació  $W$ , allà a on les constants  $\alpha$  i  $\mu$  queden pendents de determinar en funció del material i el nombre de sumands del sumatori  $p$ :

$$W = W(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = \sum_{p=1}^N \frac{\mu_p}{\alpha_p} (\lambda_1^{\alpha_p} + \lambda_2^{\alpha_p} + \lambda_3^{\alpha_p} - 3) \quad (1.2.35)$$



Ara, es pren una versió concreta d'aquest sumatori, allà on  $N = 1$  i  $\alpha_p = 2$ :

$$W = \frac{\mu_P}{2} (\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2 - 3) \quad (1.2.36)$$

Ara, ja es pot aplicar l'equació 1.2.34 per trobar les components diagonals d'aquests tensors de Piola-Kirchhoff. Així doncs:

$$S_i = \frac{1}{\lambda_i} \frac{\partial W}{\partial \lambda_i} = \mu_P \left( \frac{\lambda_1}{\lambda_1} + \frac{\lambda_2}{\lambda_2} + \frac{\lambda_3}{\lambda_3} \right) = 3\mu_P$$

$$T_i = \frac{\partial W}{\partial \lambda_i} = \mu_P \lambda_1 + \mu_P \lambda_2 + \mu_P \lambda_3 = \mu_P \sum_{i=1}^3 \lambda_i$$

A on la constant  $\mu_P$  queda pendent per determinar en funció del material. D'altra banda, si interessa relacionar aquesta funció  $W$  amb els tensor de deformacions, postulam una expansió en termes del tensor de deformacions  $u_{ij}$ :

$$W = C_0 + C_{ij}u_{ij} + \frac{1}{2}C_{ijkl}u_{ij}u_{kl}$$

On s'empra un tensor  $C_{ijkl}$  de 81 components potencialment diferents (les quals requereixen molts d'experiments a casos generals). Es presenta a continuació sense demostrar (veure [8]) la relació entre aquest tensor de coeficients elàstics i la funció  $W$ , pels casos lineal i no lineal:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}u_{kl} = \frac{\partial W}{\partial u_{ij}} \longrightarrow C_{ijkl} = \frac{\partial^2 W}{\partial u_{ij} \partial u_{kl}} \quad (1.2.37)$$

$$C_{ijkl}(E_{ij}) = \frac{\partial^2 W}{\partial E_{ij} \partial E_{kl}} \quad (1.2.38)$$

### 1.3 Comportament dels fluids

La manera en la que un líquid es mou sempre ha resultat un tema fascinant per l'ésser humà, i pot semblar una situació molt més difícil de descriure de manera matemàtica que les deformacions de les quals s'ha xerrat fins ara al treball. Tot i així, les eines i quantitats que es fan servir són en molts casos les mateixes, i per a molts de fenòmens que ens apareixen de manera natural podem trobar qualche tipus de paral·lelisme amb l'elasticitat dels sòlids.

De manera general, els fluids no suporten esforços tangencials a la seva superfície en repòs, llavors flueixen. Si es fa el que s'anomena una **descripció Euleriana** (veure secció 1.4.1) del fluid, es tria un marc de referència fix sobre el qual canvien els camps, llavors la trajectòria juga un paper menor. Així doncs, es tractarà amb un camp de velocitats  $\vec{v}(\vec{r}, t)$  de tal manera que:

$$\delta \vec{v} = \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} \delta t + \frac{\partial \vec{v}}{\partial \vec{r}} \delta \vec{r} \quad \rightarrow \quad \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \vec{v}$$

Aquesta darrera expressió s'anomena derivada con mòbil, i inclou un terme no lineal convectiu. Els problemes amb parts no lineals dificulten molt l'anàlisi matemàtica, ja que impossibiliten l'ús del principi de superposició, i solen ser responsables de moviments caòtics i impredecibles. Així doncs, aquest terme aparentment inofensiu acabarà impossibilitant la resolució analítica de les equacions que governen els fluids, i provocarà el pas a mètodes de resolució aproximats.

### 1.3.1 Conservació de la massa

Si es pren una equació general de balanç d'una certa quantitat B (on se'n iguala el ritme volumètric a la suma del flux que surt d'una superfície i el ritme de creació/destrucció en el volum):

$$\frac{\partial B}{\partial t} = - \oint_s \rho B (\vec{v} \cdot \vec{n}) dS + \int_V r_B dV \quad (1.3.1)$$

Es tractarà amb la massa, que es relaciona amb la densitat com:

$$\frac{\partial m}{\partial t} = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV \quad (1.3.2)$$

Si es combinen les dues expressions anteriors, i s'anul·la el ritme  $r_B$  per velocitats petites, s'arriba a l'**equació de continuïtat**:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (1.3.3)$$

La qual ens permet veure que, per casos on  $\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0$ , es tracta amb fluids incompressibles, a on la densitat és una constant. Aquesta darrera expressió representa la conservació de la massa o del cabdal, ja que implica que qualsevol canvi de densitat local a un volum implica una massa en moviment cap a fora/dins del volum estudiat [10].

### 1.3.2 Conservació del moment lineal

Traduint les quantitats típiques de massa i velocitat a un cert volum de fluid, es té que el moment lineal és:

$$\vec{P} = \int_V \rho \vec{v} dV \quad (1.3.4)$$

Se'n pot descriure la variació temporal amb l'equació general de balanç 1.3.1, relacionant-lo així amb les forces presents al sistema:

$$\frac{\partial \vec{P}}{\partial t} = \int_V \frac{\partial(\rho \vec{v})}{\partial t} dV = - \oint_S \rho \vec{v} (\vec{v} \cdot \vec{n}) dS + \sum \vec{F} + \int_V r_P dV \quad (1.3.5)$$

Tractant aquesta equació amb el procediment que es pot trobar a l'annex 4.2.1, s'obtenen (juntament amb l'equació 1.3.3) les **equacions de Navier-Stokes per un flux newtonià incompressible** [10]:

$$\rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \rho (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} = -\vec{\nabla} p + \eta \vec{\nabla}^2 \vec{v} + \vec{f}_v \quad (1.3.6)$$

De manera addicional i per reunir totes les expressions generals de la dinàmica de fluids, es pot trobar una secció sobre la conservació de l'energia a l'annex 4.2.2.

### 1.3.3 Dificultat de les equacions i condicions de contorn

S'ha obtingut un sistema d'equacions en derivades parcials no lineals, per les quals no es disposa d'una solució general. Fins i tot si es pren un fluid amb densitat constant, les equacions completes (incloent-hi ja la de continuïtat) representen un gran repte matemàtic<sup>4</sup>. El sistema d'equacions en coordenades

<sup>4</sup>De fet, aquest sistema d'equacions forma part d'una llista de problemes anomenats "Els problemes del mil·leni", la resolució dels quals està premiada amb un gran reconeixement i un milió de dòlars. Actualment, dels set problemes llistats l'any 2000, només se'n ha resolt un, la Conjectura de Poincaré [12].

cartesianes i amb un camp  $\vec{u} = (u, v, w)$  és el següent:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \\ \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \eta \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + g_x \\ \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + \eta \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) + g_y \\ \frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + \eta \left( \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) + g_z \end{array} \right. \quad (1.3.7)$$

Així doncs, només es podrà arribar a expressions analítiques de les variables per casos específics, allà on les propietats del problema permetran simplificar i/o menysprear qualche terme. D'altra banda, una manera molt més potent per tractar amb aquestes equacions és recórrer als mètodes numèrics per arribar a una solució aproximada, entrant així dins el terreny de la dinàmica de fluids computacional o *CFD*.

Per un fluid restringit a parets rígides de vector normal  $\vec{n}$ , es compleix:

$$\overrightarrow{v_{fluid}} \cdot \vec{n} = \overrightarrow{v_{paret}} \cdot \vec{n} \quad (1.3.8)$$

Particularment, si  $\overrightarrow{v_{paret}} = 0$  es tendrà  $\overrightarrow{v_{fluid}} \cdot \vec{n} = 0$ . A més, hi ha dos casos recurrents:

- Per fluids ideals, allà on la viscositat és nul·la, no hi ha forces tangencials a les parets, i la situació s'anomena "*slip boundary conditions*"
- Per fluids reals, la viscositat no és nul·la prop de la paret i la velocitat del fluid allà és la mateixa que la de la paret, i la situació s'anomena "*no-slip boundary conditions*"

Una quantitat molt útil a l'hora de fer servir aquestes equacions tan complicades és el nombre de Reynolds, que ajuda a saber la importància dels termes no lineals i caracteritza el flux tractat com a **laminar** o **turbulent**:

$$R_E = \frac{\text{inèrcia}}{\text{viscositat}} = \frac{\rho(\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \vec{v})}{\eta \vec{\nabla}^2 \vec{v}} \approx \frac{\rho v^2 / L}{\eta v / L^2} \approx \frac{\rho v L}{\eta} \quad (1.3.9)$$

Si  $R_E \ll 1$ , la viscositat domina i el flux s'anomena laminar. D'altra banda, si  $R_E \gg 1$ , la inèrcia domina el moviment i el flux s'anomena turbulent.

Als fluxos laminars, el moviment del fluid és ordenat, estratificat i suau. El flux és en làmines paral·leles sense mescla i cada partícula segueix una trajectòria anomenada línia de corrent. Aquest règim és típic de fluids a velocitats molt baixes o amb viscositats molt altes. D'altra banda, els fluxos turbulents estan caracteritzats per canvis caòtics en la pressió i la velocitat, i són típics de situacions on la velocitat és molt alta o la viscositat és molt baixa [21].

## 1.4 FSI: Interacció fluid-estructura

A sistemes amb interacció fluid-estructura, també anomenada FSI (*Fluid-Structure Interaction*), es tracta el comportament d'un flux fluid intern o circumdant a una o més estructures sòlides. Aquest tipus de sistemes tenen una gran importància en diversos camps científics com són la física, l'enginyeria o la medicina. L'aerodinàmica i hidrodinàmica d'un vehicle, el desplaçament dels espermatozoides, sedimentacions, moviment de recipients plens de líquids, o fins i tot la capacitat deformadora d'un eritròcit travessant un capil·lar són només uns quants exemples de la gran quantitat de situacions que requereixen tenir en compte aquestes interaccions per arribar a resultats suficientment precisos.

L'estudi matemàtic exhaustiu d'aquest tipus de problemes és encara un repte, ja que la seva forta no linealitat dificulta molt la resolució de les equacions fonamentals que es fan servir. D'altra banda, els

experimentos de laboratori tenen certes limitacions, i no sempre serveixen per arribar a conclusions generals. Per aquests motius, es pot fer servir una altra eina molt potent per estudiar aquests problemes: la simulació numèrica. Gràcies als avenços de la tecnologia informàtica, aquests mètodes són cada vegada més precisos, fiables i complicats. La tasca de fabricar un codi apte per aquest tipus de simulacions pot resultar molt complicada per mor de la combinació de diversos formalismes físics a dins un sol problema. Abans que res, però, convé escollir el punt de vista matemàtic que es tendrà de cara a la descripció del sòlid i del fluid, així com el mètode computacional que es farà servir per fer anant avançar el sistema en el temps [20].

### 1.4.1 Punt de vista del problema: Euler, Lagrange i ALE

- Quan es pren de vista un **punt de vista Eulerià**, les funcions depenen d'una posició fixa i del temps, suposant així un sistema de referència fix. L'observador es troba a un cert punt de l'espai euclidi, i sempre observa un mateix punt, independentment d'on es mouen les partícules observades. Per una mateixa evolució, diferents partícules poden ocupar la posició observada, llavors aquest punt de vista no pot oferir informació sobre el canvi en les quantitats físiques d'una partícula. Als problemes amb interacció fluid-estructura s'acaba necessitant fer una descripció del moviment dels dominis i malles computacionals presents (i no només de partícules i punts aïllats). Així doncs, una malla computacional Euleriana es pot interpretar com un conjunt d'observadors distribuïts pel domini i connectats per formar una malla de nodes. Si les partícules del domini es mouen, una malla Euleriana no varia les posicions dels seus nodes en el temps. Aquest comportament de la malla no depèn dels moviments a gran escala de les partícules, i es sol escollir per problemes anomenats CFD (*Computational Fluid Dynamics*), a on les partícules de fluid es mouen per tot el domini. No obstant, aquest punt de vista té els seus inconvenients, com pot ser una falta de precisió a casos on la malla computacional és molt més gruixuda que les dimensions del moviment en si.
- Quan es pren un punt de vista **Lagrangià**, l'observador es concentra en una partícula específica i la segueix en el temps i en l'espai. Així, ja que la partícula es mou, es poden avaluar els canvis en les magnituds físiques per dos instants diferents. El moviment de la partícula observada es pot descriure amb el que s'anomenen coordenades materials a l'espai euclidi,  $(X, Y, Z)$ , que identifiquen la partícula dins d'una configuració de referència (que es sol triar a  $t = 0$ ). Ara, la informació obtinguda només serveix per la partícula observada, així que no apareixen fluxos convectius de les quantitats mesurades i no es pot aconseguir una descripció general de qualsevol punt del domini. Si es té una malla Lagrangiana, es pren una referència (com pot ser el principi d'una simulació), a on els nodes estan a les posicions de les partícules de material. Quan el temps avança i les partícules es mouen, els nodes es mouen amb elles, deformant així la malla inicial. Un inconvenient molt important és que aquest plantejament pot provocar que moviments irregulars distorsionin massa la malla, provocant així una pèrdua de precisió computacional. No obstant, aquest mètode permet seguir moviments a petita escala de les partícules presents sense la necessitat d'un pas de malla extremadament petit, el qual la perspectiva Euleriana requereix per donar resultats precisos. Per tots aquests motius, aquest punt de vista és el més comú alhora d'atacar problemes anomenats CSM (*Computational Solid Mechanics*).
- Així doncs, s'ha justificat l'ús de cada tipus de punt de vista pels problemes on es tracta per separat amb un sòlid o amb un fluid. Quan es tracta amb un problema d'interacció fluid-estructura, s'ha de recórrer a una descripció híbrida, i cal introduir nous conceptes com són la interfície, moviments relatius, alineaments entre els materials... Un observador ALE (*Arbitrary Lagrangian-Eulerian*) pot triar de manera arbitrària, com el seu nom indica, si moure el punt en el que es fixa. Així doncs, l'observador es pot moure independentment del moviment de les partícules presents al domini. En aquest cas, la restricció que s'aplica és no deformar els nodes de la malla "massa", és a dir, evitar les pèrdues de precisió esmentades anteriorment. Cal introduir una incògnita nova: el moviment

relatiu entre l'observador ALE i el material. A més, per no introduir *gaps* (espais buits entre la superfície banyada i la malla de fluid) els nodes d'interfície entre fluid i sòlid sempre s'han de moure amb la interfície. Així doncs, es pren un punt de vista Lagrangià per la interfície i un punt de vista Eulerià per la resta del domini [16].

### 1.4.2 Interfície $\Gamma_{FS}$ i interacció

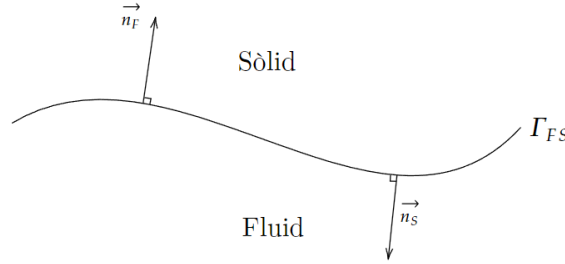


Figura 1.2: Esquema de la situació explicada i notació emprada

La zona que delimita i separa el sòlid del fluid es de vital importància al problema tractat. Com s'ha explicat anteriorment, mai es solapen els dos dominis, i qualsevol punt tractat forma part del sòlid, el líquid o la interfície  $\Gamma_{FS}$ . Es faran servir unes condicions de frontera anomenades *no-slip conditions* a la interfície, és a dir, que no hi ha una velocitat relativa entre fluid i paret. Així doncs, els desplaçaments de sòlid  $\vec{u}$  i les velocitats de fluid  $\vec{v}$  es relacionaran com:

$$\vec{x}_F \Big|_{\Gamma_{FS}} = \vec{u}_S \Big|_{\Gamma_{FS}} \quad (1.4.1)$$

$$\vec{v}_F \Big|_{\Gamma_{FS}} = \frac{\partial \vec{u}_S}{\partial t} \Big|_{\Gamma_{FS}} \quad (1.4.2)$$

De manera addicional, es necessita un equilibri de forces a la interfície per que aquesta no s'acabi rompent per mor de les forces resultants. Així, cal relacionar el segon tensor d'esforços de Piola-Kirchhoff en coordenades materials als dos costats de la interfície amb els corresponents vectors normals, seguint la filosofia de la fórmula 1.2.7:

$$\vec{S}_F \cdot \vec{n}_F \Big|_{\Gamma_{FS}} = -\vec{S}_S \cdot \vec{n}_S \Big|_{\Gamma_{FS}} \quad (1.4.3)$$

Així doncs, s'igualen els mòduls d'aquestes dues forces de sentit contrari, provocant així una situació anomenada **acoblament dinàmic**, ja incloent-hi els esforços viscosos i no viscosos.

La metodologia emprada consisteix en la resolució semi-simultània de les equacions, redirigint els resultats de les unes a les altres en un ordre predeterminat i incloent-hi les restriccions que imposen les condicions de contorn del cas concret. Així doncs, es prenen els conjunts d'equacions d'elasticitat i de **Navier-Stokes** i s'acoblen mitjançant les magnituds comunes: l'esforç del fluid sobre la paret i el desplaçament del sòlid a la seva interfície. Les diferents castes d'iteracions, malles, aproximacions i mètodes de resolució d'equacions emprats es descriuen al bloc computacional d'aquest treball.

## 1.5 Mètode de frontera submergida: *IBM*

Si es volen evitar l'actualització i el seguiment constants de la malla, els quals requereixen de processos computacionals complicats i difícils d'implementar, es poden cercar tècniques alternatives. Així doncs,

enlloc d'estar considerant en tot moment com varia la malla en funció de les condicions de contorn a la interfície (procés el qual segueixen la majoria d'observadors *Alternative Lagrangian-Eulerian*) es pot emprar un mètode de frontera submergida o *IBM (Immersed Boundary Methods)*, proposat per primera vegada per Michael Peskin el 1972.

A aquests models, es considera qualsevol obstacle i estructura present com una part del domini fluid, i se'n computen els efectes sobre el flux manipulant les equacions d'una manera adequada. De manera general, aquests mètodes es poden dividir en **forçaments discrets** (a on es discretitzen les equacions i després s'hi forcen les condicions de frontera) i **forçaments continus** (a on les condicions s'integren a les equacions i després aquestes es discretitzen) [4].

### 1.5.1 Comparació entre els mètodes de forçament

Als mètodes de forçaments discrets es sol ignorar la posició del sòlid per muntar el sistema d'equacions, i després es tracta amb les cel·les circumdants a la interfície per forçar-hi lleis de conservació i les condicions de contorn mitjançant interpolacions. Així doncs, no cal resoldre les equacions als nodes a on es troba el sòlid, i es fa un seguiment més precís de la interfície (adequat per sistemes amb alt nombre de Reynolds), a costa d'introduir la interfície directament a les pròpies equacions discretitzades, el qual suposa un esforç computacional més potent que els mètodes amb forçaments continus. A més, es requereix d'una malla molt més complexa (veure 2.4), a on el sòlid es localitza en tot moment i els polígons s'hi adapten, podent donar lloc així a cel·les a on sigui difícil avaluar les magnituds desitjades.

En canvi, si es pren un mètode basat en forçaments continus, es pot fer servir una malla independent del moviment del sòlid, que es modela com una força extra al sistema d'equacions. Tot i requerir de la resolució de les equacions a nodes pels quals el sòlid està passant (el qual pot donar problemes a fluxos d'alt nombre de Reynolds), aquest darrer factor afavoreix els casos on es tractin interfícies que separen dos fluids de diferents densitats i viscositats (com poden ser, per exemple, els casos d'un glòbul vermell o un vacúol). Així doncs, tot i que no ofereixen un seguiment tan precís de la interfície, aquests tipus de mètodes són més senzills d'implementar i poden tractar sense problema grans deformacions de membrana. Per tots aquests darrers motius, el mètode de forçament escollit a la part posterior d'aquest treball és el forçament continu [5].

### 1.5.2 Visió general dels forçaments continus

Es considera una generalització de les equacions tractades i de les condicions de frontera explicades a l'apartat 1.4, allà on ara es té una quantitat d'interès  $\vec{u}$ , una interfície  $\partial S$ , un operador diferencial adient  $\mathcal{L}$ :

$$\mathcal{L}(\vec{u}) = 0 \tag{1.5.1}$$

$$\vec{u} = \vec{u} \Big|_{\partial S} \tag{1.5.2}$$

Si es fa servir un mètode de forçaments continus, es pren un terme de forçament  $\vec{F}$  (que o bé és el resultat d'aplicar l'operador diferencial, o modifica a aquest darrer). La discretització d'aquestes darrera equació (representada per claudàtors) incloent ja el terme de forçament i el nou operador  $\hat{\mathcal{L}}$  és, doncs:

$$[\hat{\mathcal{L}}]([\vec{u}]) = [\vec{F}] \tag{1.5.3}$$

Així doncs, s'aconsegueix un camp solució  $[\vec{u}]$ , també vàlid a la interfície  $\partial S$ . Tot i que aquest mètode no té la capacitat d'influir o fixar els valors solució a diferents nodes del domini, el terme de forçament permet incloure diferents propietats complexes del material a les equacions (com són les propietats elàstiques que interessin a aquest treball) i el fet de no actualitzar la malla permet no fer servir interpolacions que depenen de la posició de la interfície  $\partial S$ . Malauradament, aquest mètode del forçament continu presenta problemes alhora de tractar amb els nodes a les fronteres del fluid, llavors es sol combinar amb un mètode de forçaments discrets, que sí és capaç d'aproximar la solució als límits del domini. [4]

### 1.5.3 Equacions emprades al mètode de frontera elàstica submergida

A continuació, es presenta un model capaç de simular interaccions entre un líquid incompressible i un cos elàstic a una malla cartesiana (que no correspon a la geometria real del sistema), tot fent servir les estratègies de forçaments continus descrites a l'apartat anterior. Es pren el conjunt d'equacions de Navier-Stokes per un fluid incompressible(1.3.3, 4.2.4), així com unes equacions adequades pel sòlid: es descriu la posició d'un punt amb  $\vec{X}(\vec{q}, t)$  (allà on  $\vec{q}$  són les coordenades del punt a l'estat inicial del sòlid), així com unes condicions inicials a  $t = 0$  :

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \left( \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \vec{u} \right) - \eta \vec{\nabla}^2 \vec{u} + \vec{\nabla} p = \vec{f} \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0 \\ \frac{\partial \vec{X}(\vec{q}, t)}{\partial t} = \vec{u}(\vec{X}(\vec{q}, t), t) \quad a \quad \partial S \\ \vec{u}(\vec{x}, 0) = \vec{u}_0(\vec{x}) \\ \vec{X}(\vec{q}, 0) = \vec{X}_0(\vec{q}) \quad a \quad S \end{array} \right. \quad (1.5.4)$$

També es requereix d'unes condicions de contorn a la interfície  $\partial S$  i una equació constitutiva pel material tractat, la qual en relaciona esforços (és a dir, el forçament) amb deformacions, així com s'ha explicat a la secció 1.2.6. Així doncs, es té una força extra  $\vec{F}$  causada per la presència del sòlid al medi, la qual depèn de les coordenades del punt i de la configuració inicial, i és rellevant a la interfície, així que es fa servir una delta de Dirac per localitzar-la dins tota la superfície integrada:

$$\vec{F}(\vec{x}, t) = \int_S \vec{\mathcal{F}}(\vec{q}, t) \delta(\vec{x} - \vec{X}(\vec{q}, t)) \vec{d}q \quad (1.5.5)$$

Allà on  $\vec{\mathcal{F}}$  representa una densitat de força que el cos aplica als seus voltants (que es calcula seguint la teoria de la secció 1.2.6), i la delta de Dirac segueix la definició:

$$\delta(f) = \int \delta(x) f(x) dx = f(0) \quad (1.5.6)$$

Seguint els conceptes de forçament tractats a la secció anterior, es presentarà un sistema complet d'equacions, no sense abans tractar-les per, així com s'ha indicat anteriorment, també representar el cos com canvis a algunes magnituds del fluid. Això darrer es fa mitjançant canvis en la densitat i en la viscositat (per poder incloure un sòlid compostat d'una membrana i un interior líquid, de l'estil d'un vacúol), fent-ne una descripció dinàmica de l'estil:

$$\rho(\vec{x}, t) = \rho_0 + \int_S M(\vec{q}) \delta(\vec{x} - \vec{X}(\vec{q}, t)) \vec{d}q \quad (1.5.7)$$

Així doncs, s'arriba al sistema complet d'equacions que governen el sistema al mètode de frontera elàstica submergida per un fluid incompressible:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \left( \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \vec{u} \right) - \eta \vec{\nabla}^2 \vec{u} + \vec{\nabla} p = \vec{f} + \vec{F} \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0 \\ \rho(\vec{x}, t) = \rho_0 + \int_S M(\vec{q}) \delta(\vec{x} - \vec{X}(\vec{q}, t)) \vec{d}q \\ \eta(\vec{x}, t) = \eta_0 + \int_S \dots \\ \vec{F}(\vec{x}, t) = \int_S \mathcal{F}(\vec{q}, t) \delta(\vec{x} - \vec{X}(\vec{q}, t)) \vec{d}q \\ \frac{\partial \vec{X}(\vec{q}, t)}{\partial t} = \vec{u}(\vec{X}(\vec{q}, t), t) \quad a \quad \partial S \\ \vec{u}(\vec{x}, 0) = \vec{u}_0(\vec{x}) \\ \vec{X}(\vec{q}, 0) = \vec{X}_0(\vec{q}) \quad a \quad S \end{array} \right. \quad (1.5.8)$$

Segons la discretització del problema, aquesta  $\delta$  de Dirac pot suposar un problema. Així doncs, per mètodes de diferències finites, es requereix d'una suavització d'aquesta darrera, per mantenir la suavitat de les funcions resposta en tot moment. Tot i no ser el cas tractat a aquest treball (a on s'apliquen mètodes d'elements finits), aquesta funció de probabilitat es pot substituir i suavitzar incloent uns pesos dependents de la finura de la malla  $w$  i una certa distribució  $\tilde{\delta}$ , pendent de triar en funció del cas tractat:

$$\widetilde{F}(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^K w(\vec{q}_i) \mathcal{F}(\vec{q}_i, t) \tilde{\delta}(\vec{x} - \vec{X}(\vec{q}_i, t)) \quad (1.5.9)$$

Es té un sistema d'equacions complex, a on el terme de forçament  $\vec{F}$  es discretitza d'igual manera que les forces  $\vec{f}$  a cada node de la malla computacional, igual que l'excés de densitat massica  $M$ ; però que ja és un conjunt de processos adequat per ser implementat a un ordinador: la influència i posició de la interfície es veuen reflectits al terme de forçament, el qual implica un canvi en la densitat. Així doncs, aquestes dues quantitats són les úniques que es van modificant al sistema d'equacions (tot i que, òbviament, els valors de les altres quantitats presents van variant), suposant així les úniques passes computacionals feixugues [4].

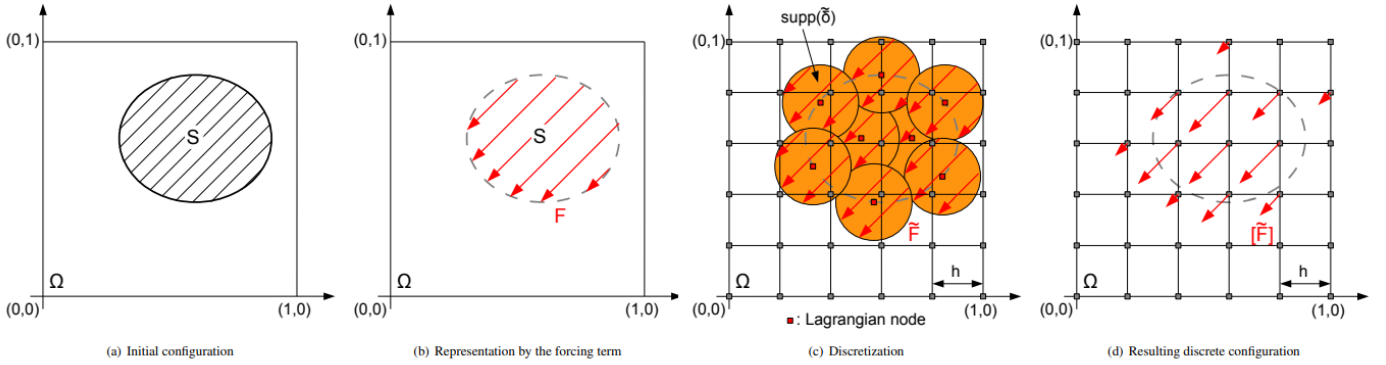


Figura 1.3: Passes esquemàtiques del tractament computacional del sòlid [4]: es pren la influència del cos a l'entorn i es modela amb el forçament  $\vec{F}$ , el qual s'inclou a les equacions que són posteriorment discretitzades. Així doncs, finalment, es pren un forçament a on estaria el cos i als nodes del seu entorn, i es resol un problema de fluids amb forces presents, a on la posició de la interfície com a tal no entra al sistema en cap moment.



## Marc computacional

### 2.1 Discretització de les equacions

Si es vol fer servir un ordinador per resoldre un problema físic, s'han d'adaptar les equacions diferencials que el governen a la manera discreta en què un programa treballa. Així doncs, es prenen expressions que tracten amb variables contínues, com poden ser la posició, la temperatura o el temps, i s'adapten a la naturalesa d'un ordinador.

L'anàlisi numèrica, que és el nom que es dona a la branca de les matemàtiques que s'encarrega de dissenyar algorismes per resoldre problemes de manera aproximada, precedeix els avenços tecnològics actuals, i molts dels matemàtics més prolífics de la història han treballat en aquest camp: el mètode de Newton, el mètode de reducció de Gauss o el mètode d'Euler són només algunes de les tècniques que es fan servir a l'anàlisi numèrica. Fins i tot el càlcul d'una derivada, que suposa un problema elemental sobre el paper, es pot complicar a l'hora d'implementar-lo a un ordinador, a on no es pot estendre el límit d'un denominador fins a zero i s'ha de recórrer a una aproximació en funció dels valors de la funció a derivar als punts circumdants al desitjat [19].

La discretització i tractament computacional de les equacions d'elasticitat i de Navier-Stokes és un problema del qual se'n podrien escriure llibres sencers, a on es tractarien problemes com les condicions de contorn, la convergència dels algorismes, mètodes de relaxació, mètodes espectrals, l'algorisme de Thomas per matrius tridiagonals, optimitzacions de les malles i del codi, i un llarg etcètera de diversos apartats l'objectiu dels quals és facilitar el gran repte que és aconseguir resultats prou bons d'aquestes difícilíssimes equacions que, per a bé o per a mal, regeixen tants fenòmens presents al nostre dia a dia. S'ofereix, a manera d'exemple, un argument introductori a la discretització de les equacions de Navier-Stokes en dues dimensions, a mode d'exemple representatiu de les estratègies i filosofies que es segueixen als programes fets servir a la part posterior d'aquest treball. Aquesta discretització basada en el Teorema de Gauss per a polígons es pot trobar a l'annex 4.3.1 [7].

### 2.2 Enfocaments monolític i per parts

Una primera distinció important entre les maneres d'abordar una simulació d'aquesta mena és la manera en la qual els comportaments sòlid i el líquid es retroalimenten a mesura que el temps avança. Així doncs, es sol diferenciar entre dos enfocaments principals: el monolític i el particionat.

- L'enfocament **particionat** es basa en resoldre per separat tres blocs de *software* (sòlid, fluid i el seu acoblament). El bloc de l'acoblament s'encarrega de transmetre les forces entre el sòlid i el fluid, transmetent l'esforç del fluid sobre la paret (suposant així una característica dinàmica) cap al bloc

del sòlid i la deformació que pateix aquest darrer a la interfície cap al bloc del fluid (suposant així una característica cinemàtica). Així doncs, els nodes de la malla que formen la interfície són els únics que intercanvien informació entre blocs.

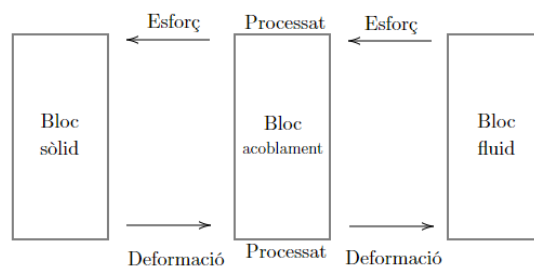


Figura 2.1: Esquema dels blocs de l'enfocament particionat i del transport d'informació entre ells

Un gran avantatge de fer servir aquest enfocament és el fet de poder fer servir blocs de codi pel sòlid i el fluid comercials ja existents, els quals ofereixen un nivell de resolució molt alt, i permeten estalviar el temps que requeriria el desenvolupament d'un codi completament nou. No obstant, poden sorgir problemes a l'hora d'adaptar aquests codis amb el bloc d'acoblament de manera eficient. A més, la posició de la interfície no es coneix a priori i és variable en el temps, el qual implica fer-ne un seguiment que pot ser feixuc i conduir a errors. Finalment, el fet d'evolucionar ambdós sistemes per separat impedeix fer prediccions llunyanes en el temps sense haver d'intercanviar un gran volum d'informació, el qual limita l'avenç temporal que es pot realitzar amb cada iteració de la simulació [20][16].

- L'enfocament **monolític** es basa en resoldre totes les equacions de manera simultània, és a dir, resoldre un sol sistema d'equacions global que simula el sòlid, el fluid i la seva interacció. Així doncs, cal fer servir un codi global, que inclogui tota la física present al sistema. Les condicions d'interfície van implícites al procés de resolució, i aquest enfocament té la capacitat d'aconseguir resultats més precisos (el sistema es resol de manera exacta, i els errors venen donats pels propis mètodes de resolució numèrics) a costa de fabricar un codi més complex. Així doncs, crear un codi amb enfocament monolític requereix de més temps, experiència i coneixement computacional [20][16].

Cal esmentar que aquestes no són les dues úniques maneres de construir blocs de codi que resolguin aquests tipus de problemes, ni són contràries l'una de l'altra. Amb els ràpids avenços tecnològics, s'han desenvolupat altres tècniques mixtes, a on la frontera entre monolític i particionat es torna menys clara. A més, existeixen diverses definicions per aquests darrers enfocaments a la literatura, segons l'àmbit en el qual es fan servir.

## 2.3 Estratègies d'iteració i convergència per l'enfocament per parts

Alhora d'arribar a solucions de les equacions dinàmiques en l'enfocament particionat, sorgeix el dubte de com fer evolucionar el temps i quantes vegades cal computar les magnituds desitjades de cada bloc a cada passa temporal per aconseguir resultats prou precisos. Així doncs, els diferents enfocaments que sorgeixen d'intentar contestar aquests dubtes es solen classificar en el que s'anomenen les **estratègies d'acoblament feble i fort**:

- **Acoblament feble:** A aquest tipus d'enfocament del problema, el sistema de fluid i sòlid es resol un nombre fix de vegades per bot temporal de manera particionada, i no sol bastar per recrear l'exactitud de l'enfocament monolític. Tot i així, si la interacció entre els dos sistemes és feble, aquest tipus d'iteració pot ser suficient per aconseguir resultats bons. Així doncs, per fluxos amb nombre de Reynolds baix, on la velocitat és baixa i la viscositat és alta, i amb sòlids poc elàstics, un acoblament feble permet estalviar recursos computacionals i tenir un control absolut de l'evolució temporal del sistema.
- **Acoblament fort:** D'altra banda, si es desitja fer un anàlisi més precís (o el propi problema ho requereix, pel fet de tenir una forta interacció i nombres de Reynolds elevats) es pot triar un enfocament on es subitera a cada bot temporal, és a dir, es fan múltiples càlculs de la solució i de la interacció a mesura que el sistema avança una passa en el temps. Així, es pot triar el que s'anomena un criteri de convergència per la condició d'interfície 1.4.3, aconseguint així que estratègies particionades puguin recrear la solució monolítica amb una precisió arbitrària escollida a priori. Òbviament, aquest tipus d'acoblements consumeixen més recursos computacionals, i no permeten saber de forma anticipada el temps que tardarà el programa en arribar a una solució acceptable. Tot i així, aquest tipus de resolució encara sol resultar més ràpida i eficient a nivell de recursos que la monolítica, la qual requereix un gran esforç computacional per crear un codi nou que resolgui simultàniament tot el problema [16].

Aquests dos mètodes d'iteració per estratègies per parts es poden esquematitzar de manera senzilla en el següent arbre de decisions [18]:

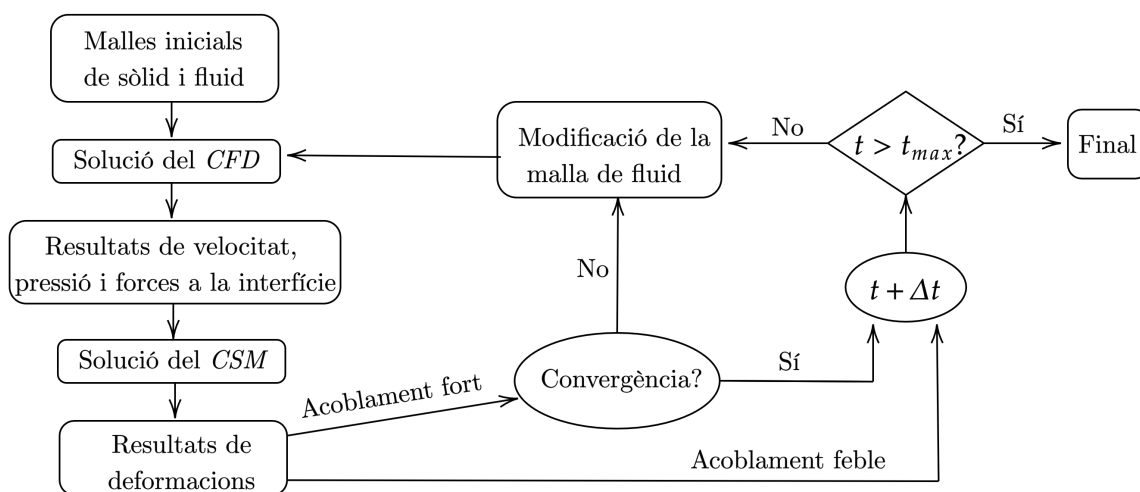


Figura 2.2: Esquema del procés lògic seguit als dos enfocaments d'acoblament explicats per mètodes particionats. *CFD*= *Computational Fluid Dynamics*, *CSM*=*Computational Solid Mechanics*.

## 2.4 Tècniques de malla

Com ja s'ha esmentat amb anterioritat, la resolució numèrica del problema *FSI* passa per definir una malla de nodes, els quals permeten avaluar les funcions incògnita a diferents punts del domini. La primera pregunta que cal respondre alhora de construir aquesta xarxa és si el fluid i el sòlid s'han d'alinear a la interfície, i si les condicions d'acoblament entre els dos dominis es transmeten com un moviment d'interfície

o com lligadures sobre les equacions que governen el sistema. Les dues principals maneres de tractar amb la malla són el que s'anomenen les malles *conforming* i *non-conforming*.

- Mètodes de malla conforme: A aquest tipus de malla, les condicions d'interfície 1.4.2 són una condició de contorn física, llavors es considera la ubicació de la interfície com una part de la solució i es requereix de malles que s'ajustin a la interfície en tot moment. Per mor d'aquesta darrera condició, es requereix d'una actualització constant de la malla a mesura que el sistema evoluciona en el temps, la qual pot implicar un cost computacional més elevat i una complicació dels polígons emprats a la simulació. En general, aquests tipus de malla s'empren a simulacions amb observadors ALE, i també poden servir per fer mètodes d'interfície submergida de forçament discret (veure 1.5.1)
- Mètodes de malla no-conforme: En canvi, a aquest altre tipus de malla es tracta la localització de la interfície i les condicions 1.4.2 com lligadures imposades sobre les equacions del model, de tal manera que s'asseguri que les equacions emprades segueixin sent vàlides. D'aquesta manera, es poden resoldre el sòlid i el fluid, ja sigui de manera conjunta o separada, sense haver de re-formar la malla després de cada passa temporal.

La majoria dels enfocaments per parts fan servir malles de tipus conforme, a on la malla s'ajusta al moviment del sòlid. D'altra banda, els mètodes immersos monolítics (veure 1.5), que representen la majoria dels darrers avenços en el camp de la interacció fluid-estructura, es basen en l'ús de mètodes de malla no-conforme. Aquesta diferència entre les dues principals estratègies de mallat es pot veure a la següent figura, a on un cos esfèric es desplaça per un domini rectangular [20][16]:

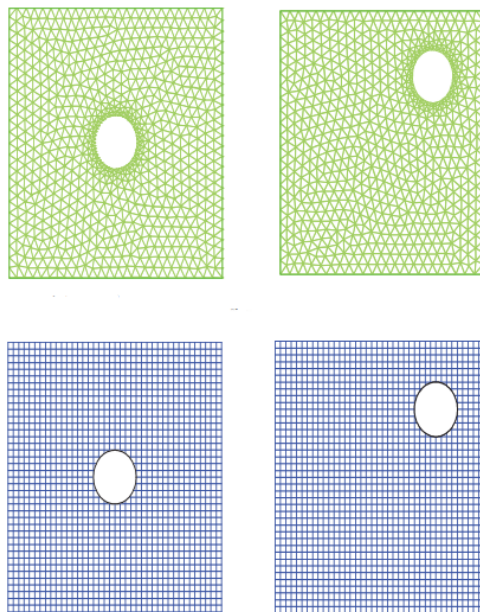


Figura 2.3: Exemples de malla conforme(verd) i no-conforme(blau) pel moviment d'un cos esfèric dins un fluid. A l'esquerra, es té  $t = t_1$ , i a la dreta,  $t = t_2 > t_1$  [20].

## Anàlisi d'un cas concret: els glòbuls vermells

Una vegada es té tota la teoria d'elasticitat, dinàmica de fluids i del tractament computacional de la seva interacció adequada, es planteja l'objectiu d'aconseguir recrear i simular casos d'interacció *FSI* reals. Concretament, a aquest treball s'ha fet feina amb vesícules, és a dir, estructures fetes d'un citoplasma envoltat d'una bicapa de fosfolípids, la qual admet deformacions però és inextensible.

La forma i el comportament de les vesícules està quasi completament marcada pel seu entorn, així que magnituds com la rigidesa de curvatura, la tensió superficial, la pressió osmòtica, la viscositat o la diferència de pressions són crucials per entendre l'evolució d'aquests sistemes. A més, la presència de camps o potencials d'interacció elèctrics també pot provocar forces extra al sistema, les quals no sempre poden ser negligides si es vol arribar a un resultat realista des del punt de vista biològic. També es pot tractar amb sistemes de múltiples vesícules (com pot ser, per exemple, un doblet) i estudiar-ne el comportament sota diferents potencials d'interacció, condicions de contorn, canvis en els paràmetres de rigidesa  $\kappa$  i viscositat  $\eta$ , diferents nombres de Reynolds  $R_E$ ... [11]

### 3.1 Els glòbuls vermells i el fibrinogen

Seguint la definició anterior, es modelen els glòbuls vermells com vesícules que contenen un citoplasma de diferent viscositat i densitat que el plasma sanguini exterior. Tot i que aquestes cèl·lules tenen una gran varietat de formes i mides, es pren un model generalista, a on el glòbul vermell té forma de disc bicòncav i té un tamany d'aproximadament  $7\mu m$  de diàmetre. Així doncs, per fer-ne simulacions en dues dimensions, es prenen unes formes inicials com les que es poden veure a la figura adjunta, a on, lògicament, la membrana passa a ser unidimensional. D'altra banda, es tracta amb fibrinogen, una proteïna soluble del plasma sanguini responsable de la formació de coàguls, ja que es pot transformar en fibrina mitjançant la trombina, i així formar capes de plaquetes. Tot i no implementar aquesta proteïna de manera física, se'n té en compte la presència mitjançant canvis en els paràmetres del sistema, per així estudiar-ne la influència en els agrupaments de glòbuls vermells. Així doncs, no es discuteix el mecanisme d'agrupament en presència de fibrinogen, sinó que se'n cerca la causa física real: augments de la rigidesa de la membrana, un augment de la viscositat del plasma, una mescla d'efectes amb diferents pesos [17]... Tot i que aquests agrupaments es veuen afectats per altres fenòmens, com pot ser la interacció elèctrica entre membranes, aquest treball es limita a l'estudi dels efectes hidrodinàmics de la presència d'aquesta proteïna.

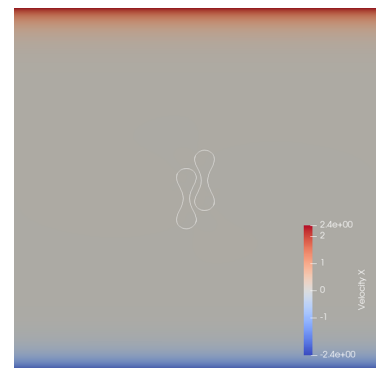


Figura 3.1: Model senzill 2D per un doblet de glòbuls vermells.

## 3.2 El mètode *DCIB* i els seus avantatges

La condició d'incompressibilitat o de camp solenoïdal ( $\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0$ ) 1.3.3 és difícil de mantenir quan es fa una simulació d'interacció fluid-estructura de frontera submergida, i proporciona errors importants en molt dels mètodes emprats, ja siguin amb elements o diferències finites, el qual provoca l'ús de tècniques mitigadores, però que no solucionen el problema d'arrel, o d'altres solucions més difícils, però que dificulten l'aplicabilitat del mètode (com per exemple, reduint-lo a dominis periòdics) resultant a costa d'assegurar que es compleix la condició desitjada.

Al mètode emprat a aquest treball s'empra una tècnica anomenada *divergence-conforming B-splines*, la qual empra una versió general de les funcions de Raviart-Thomas que assegura la condició de camp solenoïdal a cada punt, així com diverses propietats numèriques (continuitat interelemental d'ordre superior, no negativitat...), que el fan idoni per tractar amb casos de frontera submergida a on el sòlid té una co-dimensió nul·la, és a dir, es veu només representat per un forçament, que és justament el mètode per frontera elàstica que s'havia explicat a 1.5.3. Així doncs, el mètode s'anomena *DCIB: divergence-conforming immersed boundary*, i aconseguix solucionar aquest problema del camp solenoïdal a la vegada que resulta especialment apte per casos amb frontera elàstica submergida [6].

Finalment, de tots els mètodes i estratègies introduïts a la part computacional del treball, cal especificar quins es fan servir al mètode *DCIB* emprat:

- El problema es resol des d'un punt de vista **Eulerià**, a on es té un conjunt d'observadors fixos que formen una malla de nodes, pels quals les partícules de fluid van evolucionant en el temps.
- Es fa servir un mètode **monolític**, a on tot el problema es resol al mateix codi i no s'ha d'acoblar cap solució de bloc de *software* independent.
- Es fa servir una malla **no-conforme**, a on la malla no es va actualitzant amb el moviment del sòlid i la influència d'aquest darrer es veu representada per lligadures sobre les equacions.
- S'empra un mètode de **frontera submergida de forçaments continus**, a on les forces que el sòlid exerceix al seu voltant s'inclouen a les equacions i aquestes són discretitzades a posteriori.

## 3.3 La simulació: equacions, magnituds i domini

S'estudia la interacció de dues vesícules a un domini quadrat finit (que s'ha pres d'aproximadament 0.02 *cm* de costat, amb mides superiors a les realistes per aconseguir simulacions més curtes) amb un gradient de velocitats (mesurat pel que s'anomena un *shear rate*  $\dot{\gamma}$ , escollit aquí de 160  $s^{-1}$ ) a on les parets superior i inferior tenen velocitats diferents i contràries, condició que es va estenent al domini (*no-slip condition*) a mesura que el temps avança. Com s'ha esmentat a la secció anterior, es té un domini periòdic que facilita la simulació, és a dir, que tot el que "surta" per la dreta, "entra" per l'esquerra i es fa servir el sistema d'equacions 1.5.8, tot especificant la força  $\vec{\mathcal{F}}$  (que havia quedat pendent, en funció del material) que la vesícula bidimensional exerceix als seus voltants derivada a [2]:

$$\vec{\mathcal{F}} = \left( \kappa \frac{d^2 C}{ds^2} + \kappa \frac{C^3}{2} - C\xi \right) \vec{n} + \frac{d\xi}{ds} \vec{t} \quad (3.3.1)$$

Allà on  $\kappa$  és la rigidesa de la vesícula,  $C$  la seva curvatura, i  $\xi$  és un multiplicador de Lagrange que assegura que la vesícula segueixi sent inextensible. Per evitar inestabilitats numèriques, es pot substituir aquesta darrera variable per:

$$\xi = 4C_I \Omega (\Omega^2 - 1) \quad (3.3.2)$$

Allà on  $C_I$  és el mòdul de dilatació i  $\Omega$  és la relació d'estirament (un quocient entre les longituds finals i inicials). A més, en tot moment es considera un paràmetre  $\lambda$ , que mesura la relació entre les viscositats del citoplasma i del plasma sanguini exterior:

$$\lambda = \frac{\eta_{int.}}{\eta_{ext.}} \quad (3.3.3)$$

Es poden trobar els nombres de Reynolds emprats a cada simulació a l'annex 4.3.4. Tot i poder obtenir resultats numèrics, es considera l'*output* gràfic per facilitar la interpretació dels resultats. Així doncs, s'aconsegueix una evolució de les dues vesícules en el temps (que a les simulacions realitzades, ha estat d'aproximadament 0.2 segons), a partir d'una situació inicial com la de la figura 3.1 així com unes línies de camp calculades com integrals de convolució del camp de velocitats, del qual també se'n ofereix la magnitud en una escala de color [6].

## 3.4 Resultats

### 3.4.1 Cas 1: $\dot{\gamma} = 160s^{-1}$ , $\kappa = 2 \cdot 10^{-10}g\ cm^2/s^2$ , $\lambda = 3.76$

A la primera simulació presentada, es pren una relació entre viscositats  $\lambda$  menor a la considerada real, que està al voltant de 5. Així doncs, es pren un plasma més viscos (fet que representa, en aquest cas, una concentració de fibrinogen superior a la estàndard), que passa de tenir  $\eta = 0.01P$  a  $\eta = 0.0133P$ . Com s'ha esmentat, la posició inicial és la de la figura 3.1, i s'aplica un gradient de velocitats a les parets per provocar una mena de flux de Couette. L'evolució completa del doblet es pot trobar a l'annex 4.3.3.

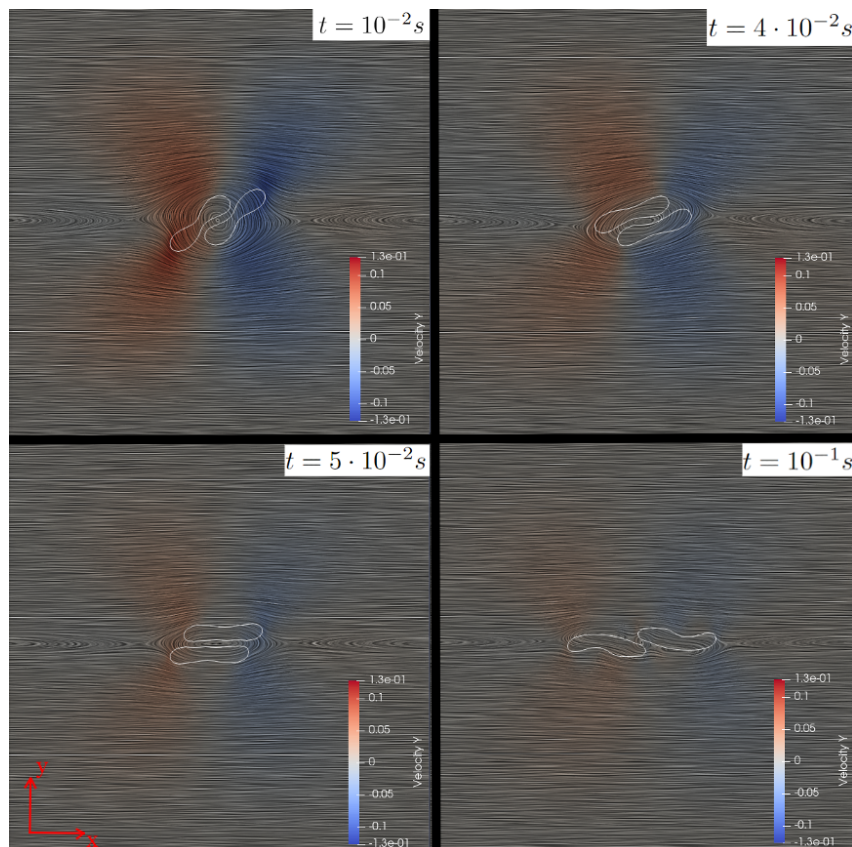


Figura 3.2: Evolució del doblet de vesícules amb les condicions del **cas 1**.



Es poden observar diversos fenòmens afavorits per l'augment de viscositat del plasma. Com reflexa la magnitud de la velocitat vertical, aquestes dues vesícules es troben i s'envolten l'una a l'altra, a la vegada que fan un moviment anomenat **tank treading**: com el seu nom indica, la membrana de la cèl·lula fa un moviment de tipus roda de tanc, on la paret es mou però la vesícula en si no es mou del lloc, reduint així el fregament amb el flux i mantenint a la vegada la seva forma bicòncava. La velocitat vertical també provoca una lleu deformació del doblet, i es pot observar que el doblet es manté agrupat fins aproximadament  $t \approx 10^{-1}s$ .

### 3.4.2 Cas 2: $\dot{\gamma} = 160s^{-1}$ , $\kappa = 2 \cdot 10^{-10}g\ cm^2/s^2$ , $\lambda = 5$

A la segona simulació, es manté la mateixa rigidesa de la vesícula  $\kappa$  i el mateix *shear rate*  $\dot{\gamma}$ , mentre que no s'augmenta la viscositat del plasma ( $\eta = 0.1P$ ) i es presenta un valor suposadament real per la relació de viscositats  $\lambda$ . L'evolució completa del segon doblet es pot trobar al final de l'annex.

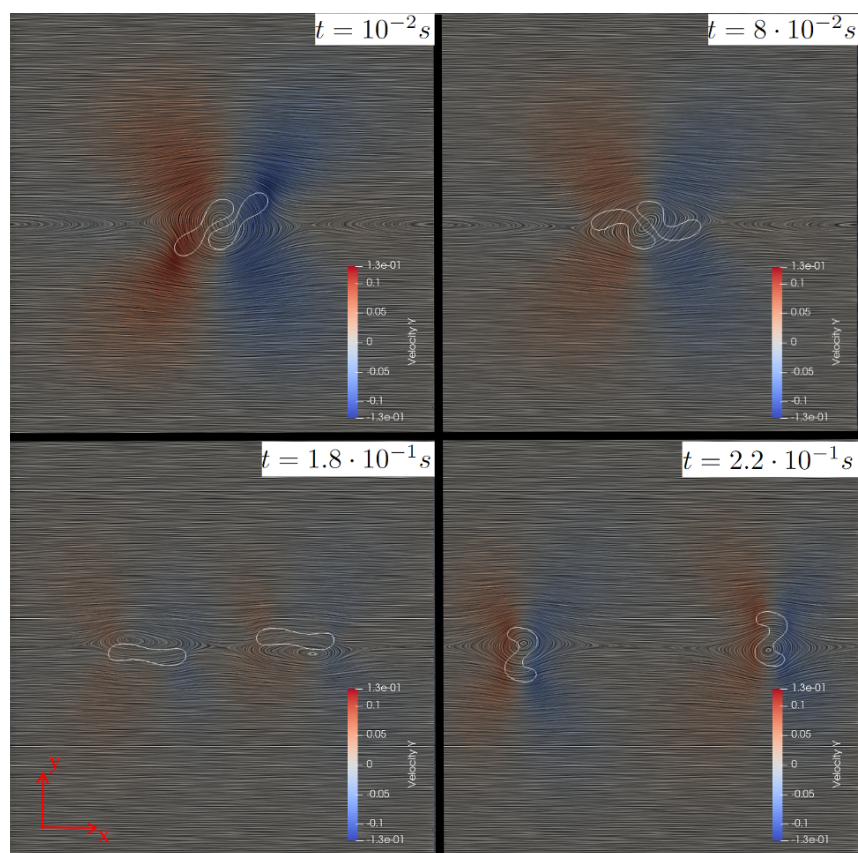


Figura 3.3: Evolució del doblet de vesícules amb les condicions del **cas 2**.

A aquesta altra simulació, s'han pogut observar els efectes de mantenir una viscositat del plasma menor. Altra vegada, les partícules parteixen d'una posició inicial com la de la figura 3.1, i es comencen a enrevoltar a la vegada que es deformen per mor de la seva interacció. Les velocitats verticals (veure  $t = 8 \cdot 10^{-2}s$ ) provoquen un moviment anomenat **tumbling**: com el seu nom indica, les cèl·lules tenen un moviment més caòtic i irregular, i perden la seva forma bicòncava, augmentant així el fregament i perdent eficiència en el transport d'oxigen. Una vegada es separen, i cada una acaba a cada costat del domini, segueixen mantenint aquest moviment de *tumbling* (veure  $t = 2.2 \cdot 10^{-1}s$ ). Aquest comportament és característic de fluxos més intensos, és a dir, amb nombres de Reynolds superiors: la reducció de



viscositat  $\eta$  augmenta el valor del quocient 1.3.9. Finalment, es pot observar un augment del temps que les vesícules passen agrupades, fins aproximadament  $t \approx 1.4 \cdot 10^{-1} s$ , fet que pot estar provocat pel canvi de  $\lambda$ : si és prou elevada, es passa a un tipus de flux més dominat per la inèrcia, més turbulent, i s'afavoreix el moviment de *tumbling*.

### 3.4.3 Cas 3: $\dot{\gamma} = 160 s^{-1}$ , $\kappa = 2 \cdot 10^{-9} g \text{ cm}^2/s^2$ , $\lambda = 5$

A la tercera simulació, es presenta un cas amb la mateixa viscositat realista de plasma que a l'anterior  $\lambda = 5$ , però amb un augment d'un ordre de magnitud de la rigidesa de la bicapa de la vesícula  $\kappa$ . Així doncs, s'estudia un possible efecte de la presència del fibrinogen en la rigidesa de la paret cel·lular. L'evolució completa del tercer doblet es pot trobar al final de l'annex.

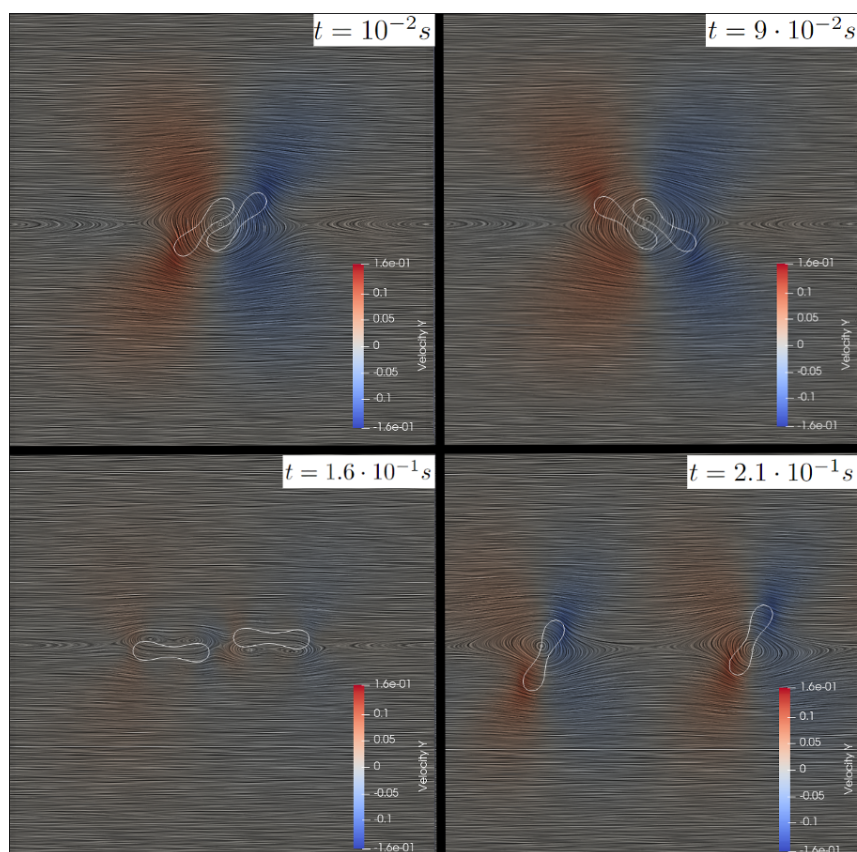


Figura 3.4: Evolució del doblet de vesícules amb les condicions del **cas 3**.

Es pot observar una gran resistència a la deformació (fenòmen que, per l'augment de rigidesa, era previsible) així com un moviment de rotació, similar al *tumbling* del **cas 2**, però sense deformació associada (mantenint així la hidrodinàmica de la forma de disc bicòncav). Una vegada separades, mantenen altra vegada aquest *tumbling*, ja que segueixen rotant de manera semi-caòtica (veure  $t = 2.1 \cdot 10^{-1} s$ ). El doblet es manté agrupat fins a  $t \approx 1.4 \cdot 10^{-1} s$ , suposant així un temps similar al del **cas 2** i, altra vegada, superior al del primer cas.

### 3.5 Conclusions i perspectives de futur

- De manera general, s'ha aconseguit reproduir comportaments reals (com són el *tank-treading* i el *tumbling*) a partir d'un codi construït en base a la teoria elastohidrodinàmica explicada a la part introductòria del treball. Així doncs, variant paràmetres físics de la simulació com són la densitat, la viscositat o la rigidesa es pot observar tot un ventall de fenòmens associables a diverses causes biològiques (com poden ser malalties associades a les concentracions de fibrinogen i a la rigidesa de la membrana dels glòbuls vermells), fet que indica que el programa pot arribar a ser útil en, per exemple, amb un objectiu de disseny d'experiments. Així doncs, es pot comprovar la capacitat dels eritròcits de mantenir la seva forma i el temps que passen agrupats en funció de les variables presentades a les simulacions mitjançant experiments *in vitro*, a on s'estudià el flux sanguini a nivell cel·lular, revisant així la presència de possibles problemes de coagulació i trombosi a diferents mostres de sang.
- Tot i que el *shear rate*  $\dot{\gamma}$  emprat és elevat (valors menors implicarien simulacions molt més llargues), s'ha pogut comprovar la gran influència de la relació de viscositats  $\lambda$  en el comportament de les vesícules. Així doncs, es podria afirmar que els canvis en la rigidesa  $\kappa$  tenen una gran influència sobre la forma de la vesícula, però que no s'han vist grans correlacions entre aquest paràmetre i el temps que els glòbuls vermells passen agrupats. Tot i així, com ja s'ha comentat a l'apartat anterior, aquesta darrera relació seria fàcil de comprovar a nivell experimental, ja que la rigidesa de la membrana dels glòbuls és un factor flexible a experiments amb vesícules artificials. D'altra banda, quan s'ha fet servir una viscositat pel plasma superior a la estàndard, el resultat ha estat contra-intuïtiu: els glòbuls vermells han passat agrupats menys temps que als altres dos casos (tot i que la hipòtesi era que modelar la presència de fibrinogen mitjançant la viscositat del plasma sanguini faria arribar a temps superiors), fet que ens pot indicar que el model no funciona bé per casos amb nombres de Reynolds inferiors, a on no es dona *tumbling*, moviment que pel seu caràcter rotatori afavoria l'agrupament. Cal tenir en compte que el programa fet servir no és més que un model, a on la paret no té gruix, es modelen els batecs com velocitats a les parets, les vesícules són molt grans, el fibrinogen no té un fregament associat, es pren sempre la mateixa configuració inicial i només es fan servir dues vesícules; llavors la seva validesa és limitada i s'haurien d'estudiar els rangs de treball realista de cada paràmetre físic present, i veure si fer servir relacions de viscositat  $\lambda$  menors que 5 realment té sentit.
- Finalment, es poden proposar diversos estudis i experiments per aprofundir més en aquest tema i en concret, aquesta simulació. Així doncs, es podria fer un estudi exhaustiu fent variar cada paràmetre poc a poc per veure'n la influència real (tot i que això implicaria moltes simulacions), es podria mirar d'incloure una paret amb un gruix finit, fer simulacions amb mides més realistes, construir un codi més eficient o més realista, i de cercar qualque mètode de frontera submergida alternatiu i mirar de reproduir-hi aquests comportaments, i si és possible, altres fenòmens propis de la elastohidrodinàmica i la hematologia, tot recolzant qualsevol potencial resultat amb experiments al laboratori que reproduïxin les mateixes situacions. Aquest tipus d'estudis són molt interessants des del punt de vista mèdic, a on un petit canvi en es paràmetres d'un flux tan senzill com el tractat pot suposar un greu risc de salut; i una simulació molt refinada podria arribar a ajudar a una comprensió més profunda (i, per tant, una major capacitat d'anticipació) d'aquestes malalties.

# Bibliografia

- [1] D. J. Acheson. *Elementary Fluid Dynamics*. 1990.
- [2] I. Cantat C. Misbah B. Kaoui, G. H. Ristow and W. Zimmermann. Lateral migration of a two-dimensional vesicle in unbounded poiseuille flow. 2008.
- [3] Jiannan Tan B. S. A study of solving Navier-Stokes equations with a finite volume method based on polygonal unstructured grids and the computational analysis of ground vehicle aerodynamics. 2010.
- [4] C. Christof. Immersed Boundary Methods: Simulation of Flows with Moving Elastic Boundaries and Application to Cardiac Fluid Dynamics. 2013.
- [5] B. Koobus F.Miralles. The immersed boundary approach. A review. 2021.
- [6] D. Toshniwal T.J. Hughes H. Gomez Y.J. Zhang H. Casquero, C. Bona-Casas. The divergence-conforming immersed boundary method: Application to vesicle and capsule dynamics. 2021.
- [7] W. Malalasekera H.K. Veersteg. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: the finite volume method*. 1995.
- [8] Scott J. Hollister. BME 456: Biosolid Mechanics: Modeling and Applications, 2010. [Online; accessed September 7, 2023].
- [9] LD Landau, EM Lifshitz, AM Kosevich, and LP Pitaevskii. *Theory of elasticity: volume 7*. 1986.
- [10] B. Lautrup. *Physics of Continuous Matter: Exotic and Everyday Phenomena in the macroscopic world*. 2011.
- [11] T. Rabczuk M. Ashoura, N. Valizadeha. Phase-field navier–stokes model for vesicle doublets hydrodynamics in incompressible fluid flow. 2023.
- [12] Arthur M.Jaffe. The Millennium Grand Challenge in Mathematics. *Notices of the American Mathematical Society*, 53, 2006.
- [13] Poszwa. Argon dimer potential and Lennard-Jones, 2005.
- [14] Timothy Rias. Components of the cauchy stress tensor in cartesian coordinates, 2011. [Online; accessed September 29, 2023].
- [15] Matthew Sands Richard P.Feynman, Robert B. Leighton. *The Feynman lectures on physics Vol. II*. 1964.
- [16] Alexander Rusch. Extending SU 2 to fluid-structure interaction via preCICE. 2016.

- [17] C. Saldanha. Fibrinogen interaction with the red blood cell membrane. 2012.
- [18] M. Sc. Galina Sieber. Numerical Simulation of Fluid-Structure Interaction Using Loose Coupling Methods. 2001.
- [19] Viquipèdia. Anàlisi numèrica — Viquipèdia, l'enciclopèdia lliure, 2022.
- [20] Jin Wang, Anita Layton, and Gene Hou. Numerical methods for fluid-structure interaction — a review. *Computer Physics Communications*, 12, 2 2012.
- [21] Wikipedia. Turbulence — Wikipedia, The free encyclopedia, 2021.
- [22] E. Krepl W.M. Lai, D. Rubin. *Introduction to Continuum Mechanics*. 1973.

# Capítol 4

## Annex

### 4.1 Sòlids

#### 4.1.1 La traça del tensor de deformacions

Es pren un tensor de deformacions  $u_{ik}$  prèviament diagonalitzat respecte tres direccions perpendiculars  $\vec{n}_1, \vec{n}_2$  i  $\vec{n}_3$ :

$$\begin{pmatrix} u_{11} & 0 & 0 \\ 0 & u_{22} & 0 \\ 0 & 0 & u_{33} \end{pmatrix} \quad (4.1.1)$$

Geomètricament, això significa que els elements de línia infinitesimals en les direccions  $n_i$  es mantenen perpendiculars després de la deformació. Aquestes direccions s'anomenen les direccions principals de la deformació, i els valors propis  $u_{11}$ ,  $u_{22}$  i  $u_{33}$  s'anomenen deformacions principals. Si es consideren les tres línies materials (en les direccions principals de deformació) que surten d'un punt qualsevol i formen un paral·lelepípede rectangular de costats:

$$dS_1, dS_2, dS_3$$

Que s'han expandit segons el tensor de deformacions fins:

$$dS_1(1 + u_{11}), dS_2(1 + u_{22}), dS_3(1 + u_{33})$$

Es pot calcular el canvi  $\Delta(dV)$  com:

$$\Delta(dV) = dS_1 dS_2 dS_3 (1 + u_{11})(1 + u_{22})(1 + u_{33}) - dS_1 dS_2 dS_3 = dV(u_{11} + u_{22} + u_{33}) + o(u_{ii}^2)$$

Per petites deformacions, es menyspreen els termes d'ordre superior [22]:

$$\frac{\Delta(dV)}{dV} = \frac{dV' - dV}{dV} = u_{11} + u_{22} + u_{33} \quad (4.1.2)$$

#### 4.1.2 El tensor de deformacions en coordenades cilíndriques i esfèriques

En coordenades cilíndriques  $(r, \theta, z)$ , el tensor de deformacions  $u_{ik}$  en funció del vector de desplaçaments  $\vec{u} = (u_r, u_\theta, u_z)$  s'escriu com [1]:

$$\begin{cases} u_{rr} = \frac{\partial u_r}{\partial r}, & u_{\theta\theta} = \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r}, & u_{zz} = \frac{\partial u_z}{\partial z} \\ 2u_{\theta z} = \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + \frac{\partial u_\theta}{\partial z}, & 2u_{zr} = \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} \\ 2u_{r\theta} = r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{u_\theta}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \end{cases} \quad (4.1.3)$$

En coordenades esfèriques  $(r, \theta, \phi)$ , el tensor de deformacions  $u_{ik}$  en funció del vector de desplaçaments  $\vec{u} = (u_r, u_\theta, u_\phi)$  s'escriu com [1]:

$$\left\{ \begin{array}{l} u_{rr} = \frac{\partial u_r}{\partial r}, \quad u_{\theta\theta} = \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r} \\ u_{\phi\phi} = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial u_\phi}{\partial \phi} + \frac{u_r}{r} + \frac{u_\theta \cot \theta}{r} \\ 2u_{\theta\phi} = \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{u_\phi}{\sin \theta} \right) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial u_\theta}{\partial \phi} \\ 2u_{\phi r} = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial u_r}{\partial \phi} + r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{u_\phi}{r} \right) \\ 2u_{r\theta} = r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{u_\theta}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \end{array} \right. \quad (4.1.4)$$

### 4.1.3 Interpretació del tensor d'esforços $\sigma_{ik}$

Prenem un tensor  $\sigma_{ik}$  en coordenades cartesianes:

- $\sigma_{xx}$  representa una força perpendicular per unitat d'àrea perpendicular a l'eix  $x$ , és a dir, la força és en l'eix  $x$
- $\sigma_{yx}$  i  $\sigma_{zx}$  representen les components tangencials, és a dir, forces tangencials per unitat d'àrea perpendicular a l'eix  $x$ , és a dir, forces en els eixos  $y$  i  $z$ .

El fet de traduir quantitats tensorials a casos coordinats no sempre és fàcil, i esquemes com el següent (a on, enlloc de  $x, y, z$ , s'empren els nombres 1, 2, 3) poden resultar útils per exemplificar els anterior significats de les components del tensor  $\sigma_{ik}$ :

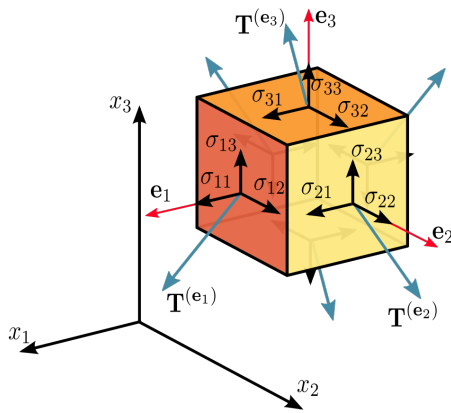


Figura 4.1: Components cartesianes d'un tensor d'esforços a les diferents cares d'un cub [14].

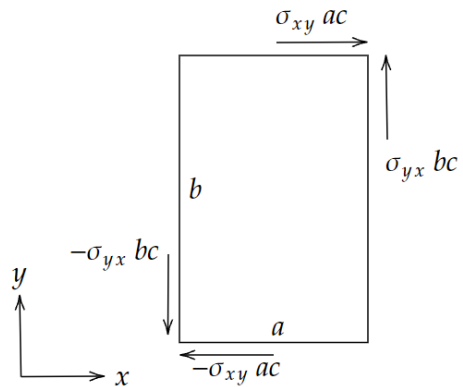


Figura 4.2: Esquema de la situació descrita per justificar la simetria del tensor d'esforços [9].

Ara, s'imposarà simetria sobre aquest darrer tensor, donant un argument simple però no del tot rigorós<sup>1</sup>. Es pren ara una capsa rectangular amb costats  $a, b$  i  $c$ . La força tangencial en la direcció  $y$  a una cara del pla  $x$  és  $\sigma_{yx}bc$ , mentre que la força en la direcció  $x$  a una cara del pla  $y$  és  $\sigma_{xy}ac$ . En un

<sup>1</sup>De fet, la pròpia definició del tensor d'esforços no requereix que aquest darrer sigui simètric. A l'argument oferit, s'anul·la el moment de les forces externes. En un cas general, l'equilibri anul·la el moment total, suma del de les forces internes i externes. Així doncs, l'argument del moment falla en general, i és inútil si el tensor d'esforços ja es simètric des d'un principi, però ofereix una bona idea intuïtiva de les forces i magnituds que representa.

equilibri mecànic i amb forces de signe oposat a cares oposades d'un cos, aquestes s'han de cancel·lar, i se'n pot calcular el moment de força a un punt qualsevol (escollim el cantó inferior esquerre):

$$M_z = a\sigma_{yx}bc - b\sigma_{xy}ac = abc(\sigma_{yx} - \sigma_{xy})$$

A on els moments dels elements diagonals es cancel·len automàticament. Per romandre en equilibri, aquest moment ha de ser nul, i les components  $\sigma_{xy}$  i  $\sigma_{yx}$  han de ser la mateixa. Així doncs, per aquest tensor simètric es tenen sis components independents, i es compleix:

#### 4.1.4 Demostració de les equacions termodinàmiques pels tensors $u_{ik}$ i $\sigma_{ik}$

Es considera una deformació d'un cert cos, determinada pel canvi del vector desplaçament  $\delta u_i$ . Si es calcula el treball per unitat de volum de les forces internes  $\delta W$  (integrant la força pel desplaçament, per tot el volum), es té:

$$\int \delta W dV = \int \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} \delta u_i dV$$

A continuació, es resol aquesta integral per parts i s'arregla el primer terme amb el Teorema de Stokes, on es torna a fer servir  $dS_k$  per representar les components del vector element de superfície:

$$\int \delta W dV = \oint \sigma_{ik} \delta u_i dS_k - \int \sigma_{ik} \frac{\partial \delta u_i}{\partial x_k} dV$$

Si es considera un medi infinit, es pot escollir una superfície tendint a infinita per la primera integral, el qual provoca que el tensor d'esforços s'anul·li en superfície. Així doncs, queda només el segon terme, el qual es pot reescriure fent servir les propietats de simetria del tensor  $\sigma_{ik}$ :

$$\int \delta W dV = \int \sigma_{ik} \frac{\partial \delta u_i}{\partial x_k} dV = -\frac{1}{2} \int \sigma_{ik} \left( \frac{\partial \delta u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \delta u_k}{\partial x_i} \right) dV = -\frac{1}{2} \int \sigma_{ik} \delta \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) dV = - \int \sigma_{ik} \delta u_{ik} dV$$

S'arriba a una expressió senzilla pel treball per unitat de volum realitzat per les forces internes en funció del canvi del tensor de deformacions:

$$\delta W = -\sigma_{ik} \delta u_{ik} \quad (4.1.5)$$

Les deformacions on el cos torna naturalment fins la seva forma original s'anomenen **elàstiques**. Per deformacions més potents, la cessió de la força pot no implicar una desaparició total de la deformació: aquestes són les deformacions plàstiques. A l'anàlisi termodinàmic següent, es consideraran deformacions elàstiques, i processos termodinàmicament reversibles (on es pot assumir equilibri termodinàmic a cada passa del procés). Així doncs, prenent magnituds relatives a l'unitat de volum del cos com l'entropia  $S$  o l'energia interna  $\mathcal{E}$ , prendrem el primer principi de la termodinàmica i farem servir el resultat anterior pel treball:

$$d\mathcal{E} = TdS + \sigma_{ik} du_{ik} \quad (4.1.6)$$

A continuació, introduint l'energia lliure del cos  $F = \mathcal{E} - TS$ , es té:

$$dF = -SdT + \sigma_{ik} du_{ik} \quad (4.1.7)$$

Ara, es defineix el potencial termodinàmic  $\Phi$  com:

$$\Phi = \mathcal{E} - TS - \sigma_{ik} u_{ik} = F - \sigma_{ik} u_{ik} \quad (4.1.8)$$

Substituint aquest darrer resultat a l'equació per l'energia lliure, obtenim:

$$d\Phi = -SdT - u_{ik} d\sigma_{ik} \quad (4.1.9)$$

Ara, fent servir aquests diferencials per expressar els tensors en termes de les derivades dels potencials termodinàmics, podem obtenir fórmules útils com són 1.2.9 [9].

### 4.1.5 Demostració de la Llei de Hooke generalitzada

De manera lògica, com  $u_{ik}$  implica  $\sigma_{ik}$ , i  $\sigma_{ik} = \partial F / \partial u_{ik}$ , no hi ha terme lineal a aquesta expansió. D'altra banda, com  $F$  és escalar, s'ha de construir termes escalars a partir del tensor de deformacions  $u_{ik}$ , com són el quadrat de la traça  $u_{ii}^2$  i la suma dels quadrats de totes les components  $u_{ik}^2$ :

$$F = F_0 + \frac{1}{2}\lambda u_{ii}^2 + \mu u_{ik}^2 \quad (4.1.10)$$

D'altra banda, es pot descomposar qualsevol tensor de deformacions en una contribució del que s'anomena cisalla pura (canvi de forma sense canvi de volum, amb traça nul·la) i el que s'anomena una compressió hidrostàtica (canvi de volum sense canvi de forma, amb  $u_{ik} = C\delta_{ik}$ ) i queden dos sumands, representants d'aquests dos fenòmens:

$$u_{ik} = \left(u_{ik} - \frac{1}{3}\delta_{ik}u_{ii}\right) + \frac{1}{3}\delta_{ik}u_{ii} \quad (4.1.11)$$

Combinant aquestes dues expressions, podem expressar l'energia lliure  $F$  fent servir aquest tipus descomposició (on prenem com a dos escalars independents les quantitats  $(u_{ik} - \frac{1}{3}\delta_{ik}u_{ii})^2$  i  $u_{ii}^2$ ):

$$F = \mu \left(u_{ik} - \frac{1}{3}\delta_{ik}u_{ii}\right)^2 + \frac{1}{2}K u_{ii}^2 \quad (4.1.12)$$

Allà on s'ha introduït el mòdul de compressió hidrostàtica  $K = \lambda + \frac{2}{3}\mu > 0$ . Ara, ja es pot escriure el diferencial total  $dF$ :

$$dF = K u_{ii} du_{ii} + 2\mu \left(u_{ik} - \frac{1}{3}u_{ii}\delta_{ik}\right) d\left(u_{ik} - \frac{1}{3}u_{ii}\delta_{ik}\right)$$

Ara, es fa servir l'expressió (16) i que  $du_{ii} = \delta_{ik} du_{ik}$ :

$$\sigma_{ik} = K u_{ii} \delta_{ik} + 2\mu \left(u_{ik} - \frac{1}{3}u_{ii}\delta_{ik}\right)$$

### 4.1.6 Relació entre el gradient de deformacions i el vector desplaçaments

Es pren la definició 1.2.1 escrita en components i es deriva cada una de les tres equacions respecte  $x'_1$ ,  $x'_2$  i  $x'_3$ :

$$\begin{aligned} x_1 &= x'_1 + u_1, & x_2 &= x'_2 + u_2, & x_3 &= x'_3 + u_3 \\ \frac{\partial x_1}{\partial x'_1} &= \frac{\partial x'_1}{\partial x'_1} + \frac{\partial u_1}{\partial x'_1}, & \frac{\partial x_1}{\partial x'_2} &= \frac{\partial x'_1}{\partial x'_2} + \frac{\partial u_1}{\partial x'_2}, & \frac{\partial x_1}{\partial x'_3} &= \frac{\partial x'_1}{\partial x'_3} + \frac{\partial u_1}{\partial x'_3} \\ \frac{\partial x_2}{\partial x'_1} &= \frac{\partial x'_2}{\partial x'_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x'_1}, & \frac{\partial x_2}{\partial x'_2} &= \frac{\partial x'_2}{\partial x'_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x'_2}, & \frac{\partial x_2}{\partial x'_3} &= \frac{\partial x'_2}{\partial x'_3} + \frac{\partial u_2}{\partial x'_3} \\ \frac{\partial x_3}{\partial x'_1} &= \frac{\partial x'_3}{\partial x'_1} + \frac{\partial u_3}{\partial x'_1}, & \frac{\partial x_3}{\partial x'_2} &= \frac{\partial x'_3}{\partial x'_2} + \frac{\partial u_3}{\partial x'_2}, & \frac{\partial x_3}{\partial x'_3} &= \frac{\partial x'_3}{\partial x'_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x'_3} \end{aligned}$$

De manera senzilla, podem veure que el primer sumand de totes aquestes equacions es pot agrupar en una matriu, la qual té uns per  $\frac{\partial x'_i}{\partial x'_i}$  i té zeros per  $\frac{\partial x'_i}{\partial x'_j}$ :

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial x'_1}{\partial x'_1} & \frac{\partial x'_1}{\partial x'_2} & \frac{\partial x'_1}{\partial x'_3} \\ \frac{\partial x'_2}{\partial x'_1} & \frac{\partial x'_2}{\partial x'_2} & \frac{\partial x'_2}{\partial x'_3} \\ \frac{\partial x'_3}{\partial x'_1} & \frac{\partial x'_3}{\partial x'_2} & \frac{\partial x'_3}{\partial x'_3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \delta_{ij}$$



D'altra banda, el segon sumand es pot contreure com:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x'_1} & \frac{\partial u_1}{\partial x'_2} & \frac{\partial u_1}{\partial x'_3} \\ \frac{\partial u_2}{\partial x'_1} & \frac{\partial u_2}{\partial x'_2} & \frac{\partial u_2}{\partial x'_3} \\ \frac{\partial u_3}{\partial x'_1} & \frac{\partial u_3}{\partial x'_2} & \frac{\partial u_3}{\partial x'_3} \end{pmatrix} = \frac{\partial u_i}{\partial x'_j}$$

Aquesta darrera equació ens permet veure que derivar respecte  $x'_1$ ,  $x'_2$  i  $x'_3$  atorga la definició del gradient de deformacions. Així doncs, s'arriba a la definició 1.2.16 pel tensor  $F_{ij}$ :

$$\begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & F_{13} \\ F_{21} & F_{22} & F_{23} \\ F_{31} & F_{32} & F_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x'_1} & \frac{\partial u_1}{\partial x'_2} & \frac{\partial u_1}{\partial x'_3} \\ \frac{\partial u_2}{\partial x'_1} & \frac{\partial u_2}{\partial x'_2} & \frac{\partial u_2}{\partial x'_3} \\ \frac{\partial u_3}{\partial x'_1} & \frac{\partial u_3}{\partial x'_2} & \frac{\partial u_3}{\partial x'_3} \end{pmatrix} \quad (4.1.13)$$

#### 4.1.7 Relació entre els tensors $E_{ij}$ i $F_{ij}$

Substituint les propietats 1.2.20 a l'equació 1.2.19, es té:

$$dx'_i F_{ki} F_{kj} dx'_j - dx'_i dx'_i = 2dx'_i E_{ij} dx'_j$$

Ara, s'aplica la delta de Kronecker com  $dx'_i = \delta_{ij} dx'_j$ , i s'arriba a:

$$dx'_i F_{ki} F_{kj} dx'_j - dx'_i \delta_{ij} dx'_j = 2dx'_i E_{ij} dx'_j$$

D'on es poden agrupar termes:

$$dx'_i (F_{ki} F_{kj} - \delta_{ij} - 2E_{ij}) dx'_j = 0$$

Com les coordenades  $dx'_i$  i  $dx'_j$  no són zero, s'obté que:

$$F_{ki} F_{kj} - \delta_{ij} - 2E_{ij} = 0 \rightarrow 2E_{ij} = F_{ki} F_{kj} - \delta_{ij}$$

D'on, finalment, ja es pot arribar a l'equació desitjada 1.2.21, que relaciona aquests dos tensors.

#### 4.1.8 Tractant amb el tensor $E_{ij}$

Si a l'equació 1.2.21 s'hi substitueixen totes les relacions esmentades anteriorment de tal manera que es fa aparèixer el vector desplaçaments  $\vec{u}$ , s'arriba a:

$$E_{ij} = \frac{1}{2} \left( \delta_{ki} \delta_{kj} + \delta_{ki} \frac{\partial u_k}{\partial x'_j} + \frac{\partial u_k}{\partial x'_i} \delta_{kj} + \frac{\partial u_k}{\partial x'_i} \frac{\partial u_k}{\partial x'_j} - \delta_{ij} \right)$$

Si ara s'hi aplica la relació  $\delta_{ki} \delta_{kj} = \delta_{ij}$ , s'arriba a la relació:

$$E_{ij} = \frac{1}{2} \left( \delta_{ki} \frac{\partial u_k}{\partial x'_j} + \frac{\partial u_k}{\partial x'_i} \delta_{kj} + \frac{\partial u_k}{\partial x'_i} \frac{\partial u_k}{\partial x'_j} \right)$$

Finalment, aplicant la relació  $\delta_{ki} \frac{\partial u_k}{\partial x'_j} = \frac{\partial u_i}{\partial x'_j}$ , s'arriba a la versió final 1.2.22

#### 4.1.9 Relació entre $dV$ i $dV'$

Es prenen els vectors de configuració en coordenades pre- i post-deformació:

$$\begin{aligned} dx_i'^1, dx_i'^2, dx_i'^3 \\ dx_i^1, dx_i^2, dx_i^3 \end{aligned}$$

A continuació, s'escriuen els diferencials de volum en termes d'aquests darrers vectors:

$$\begin{aligned} dV' &= (dx_r'^1 \times dx_r'^2) \cdot dx_r'^3 = dx_r'^1 dx_s'^2 \epsilon_{rst} dx_t'^3 \\ dV &= (dx_i^1 \times dx_i^2) \cdot dx_i^3 = dx_i^1 dx_j^2 \epsilon_{ijk} dx_k^3 \end{aligned}$$

A continuació, es fa aparèixer el tensor gradient de deformacions 1.2.15:

$$dV = dx_i^1 dx_j^2 \epsilon_{ijk} dx_k^3 = F_{ir} dx_r'^1 F_{js} dx_s'^2 \epsilon_{ijk} F_{kt} dx_t'^3 = \epsilon_{ijk} F_{ir} F_{js} F_{kt} dx_r'^1 dx_s'^2 dx_t'^3$$

Ara, es substitueix  $\epsilon_{ijk} F_{ir} F_{js} F_{kt}$  per  $\epsilon_{rst} \det(F_{mn})$ , arribant així a:

$$dV = (\det F_{mn} \epsilon_{rst} dx_r'^1 dx_s'^2 dx_t'^3) \equiv \det F dV'$$

Que justament és l'expressió a la qual es volia arribar 1.2.23.

#### 4.1.10 Relació entre $dA$ i $dA'$

Es seguirà un desenvolupament basat en l'expressió de l'àrea com el mòdul del producte vectorial de dos vectors que la formen. Així doncs, es prenen els vectors i se'n calcula el vector unitari normal a la superfície:

$$\begin{aligned} dx_i'^1, dx_i'^2 \\ dx_i^1, dx_i^2 \\ n_i' &= \frac{dx_i'^1 \times dx_i'^2}{|dx_i'^1 \times dx_i'^2|} \\ n_i &= \frac{dx_i^1 \times dx_i^2}{|dx_i^1 \times dx_i^2|} \end{aligned}$$

Es poden expressar les àrees  $dA$  i  $dA'$  com:

$$\begin{aligned} dA' &= |dx_i'^1 \times dx_i'^2| \\ dA &= |dx_i^1 \times dx_i^2| \end{aligned}$$

A continuació, es fa en producte  $n'dA$  per fer aparèixer el producte vectorial, i es reescriu aquest darrer en notació d'índexs:

$$\begin{aligned} n'dA' &= dx_i'^1 \times dx_i'^2 \iff n_i' dA' = \epsilon_{ijk} dx_j'^1 dx_k'^2 \\ n dA &= dx_i^1 \times dx_i^2 \iff n_i dA = \epsilon_{ijk} dx_j^1 dx_k^2 \end{aligned}$$

Ara, es fa aparèixer el tensor gradient de deformacions  $F_{ij}$  per relacionar coordenades deformades i no deformades, però fent servir la seva matriu inversa:

$$\epsilon_{ijk} dx_j'^1 dx_k'^2 = \epsilon_{ijk} (F_{jr})^{-1} dx_r^1 (F_{ks})^{-1} dx_s^2 = \epsilon_{ijk} (F_{jr})^{-1} (F_{ks})^{-1} dx_r^1 dx_s^2$$

Ara, ja es pot escriure:

$$n_i' dA' = \epsilon_{ijk} (F_{jr})^{-1} (F_{ks})^{-1} dx_r^1 dx_s^2$$

Ara, si es multiplica a ambdós costats de l'equació per la quantitat  $(F_{it})^{-1}$ :

$$(F_{it})^{-1}n'_i dA' = \epsilon_{ijk}(F_{it})^{-1}(F_{jr})^{-1}(F_{ks})^{-1}dx_r^1 dx_s^2$$

Es pot veure que la part dreta de l'equació anterior equival a la inversa del jacobià  $J$  multiplicada pel tensor de permutacions  $\epsilon$ , llavors:

$$(F_{it})^{-1}n'_i dA' = \epsilon_{trs} J^{-1} dx_r^1 dx_s^2$$

Finalment, multiplicant per  $J$  ambdós costats de l'equació s'arriba a l'expressió desitjada 1.2.24.

#### 4.1.11 El primer tensor d'esforços de Piola-Kirchhoff en funció de $\sigma_{ik}$

Es pren la definició d'ambdós tensors:

$$dP_i = (T_{ij}n'_j)dA' = (\sigma_{ij}n_j)dA$$

I es fa servir la fórmula de Nanson per relacionar els vectors normals  $n_j$  i  $n'_k$ :

$$n_j dA = J(F_{kj})^{-1}n'_k$$

Substituint-ho a la definició anterior i operant, s'arriba a:

$$(T_{ij}n'_j)dA' - \sigma_{ik}J(F_{jk})^{-1}n'_j dA' = 0 \rightarrow (T_{ij} - \sigma_{ik}J(F_{jk})^{-1})n'_j = 0$$

D'on ja s'arriba a les expressions que figuren al treball 1.2.26

#### 4.1.12 Equacions d'equilibri en termes dels tensor de Piola-Kirchhoff

Si es parteix d'un balanç integral entre forces de superfície, les forces de volum (fent servir un vector  $b'_i$  i les forces d'inèrcia:

$$\int_{A'} T_{ij}n'_j dA' + \int_{V'} \rho' b'_i dV' = \int_{V'} \rho' \frac{d^2 x'_i}{dt^2} dV'$$

Aplicant el Teorema de Stokes, s'arriba a:

$$\int_{V'} \frac{\partial T_{ij}}{\partial x'_j} dV' + \int_{V'} \rho' b'_i dV' = \int_{V'} \rho' \frac{d^2 x'_i}{dt^2} dV'$$

Ara, com tot són integrals de volum, s'agrupen en una i s'igualen tots els termes de la integral a zero, arribant així a la primera equació que es cercava 1.2.32

#### 4.1.13 Equacions d'equilibri per deformacions homogènies

A aquestes deformacions homogènies, el tensor de deformacions és constant a tot el volum del cos. Un exemple senzill és una compressió hidrostàtica pura. Emprant la llei de Hooke, queda clar que  $\sigma_{ik}$  també és constant.

Es considera ara una deformació d'una barra en l'eix  $z$ . Les forces constants s'apliquen uniformement a les cares externes de la barra, amb una força per unitat de superfície  $p$ . Com no hi ha forces als costats, es compleix  $\sigma_{ik}n_k = 0$  i  $n_z = 0$ , llavors totes les components del tensor  $\sigma_{ik}$  són zero llevat de  $\sigma_{zz} = p$ . Amb la llei de Hooke 1.2.11:

$$u_{xx} = u_{yy} = -\frac{1}{3} \left( \frac{1}{2\mu} - \frac{1}{3K} \right) p \equiv -\sigma u_{zz} \quad (4.1.14)$$

$$u_{zz} = \frac{1}{3} \left( \frac{1}{3K} + \frac{1}{\mu} \right) p \equiv \frac{p}{E} \quad (4.1.15)$$

On s'ha definit mòdul de Young  $E \equiv 9K\mu/(3K + \mu)$  i el coeficient de Poisson  $\nu \equiv \frac{3K-2\mu}{2(3K+\mu)}$ . Si es torna a la fórmula per l'energia lliure 1.2.13, es pot veure que directament:

$$F = \frac{1}{2} \sigma_{zz} u_{zz} = \frac{p^2}{3K} = \frac{p^2}{2E} \quad (4.1.16)$$

Ara, prenent l'expressió general 4.1.12 i escrivint els coeficients de Lamé en funció de  $E$  i  $\nu$ :

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{E}{2(1+\nu)} & K &= \frac{E}{3(1-2\nu)} \\ F &= \frac{E}{2(1+\nu)} \left( u_{ik}^2 + \frac{\nu}{1-2\nu} u_{ll}^2 \right) \end{aligned} \quad (4.1.17)$$

Ara, podem escriure fàcilment, fent servir 1.2.9 i 1.2.14:

$$\sigma_{ik} = \frac{E}{1+\nu} \left( u_{ik} + \frac{\nu}{1-2\nu} u_{ll} \delta_{ik} \right) \quad (4.1.18)$$

$$u_{ik} = \frac{(1+\nu)\sigma_{ik} - \nu\sigma_{ll}\delta_{ik}}{E} \quad (4.1.19)$$

Aquestes dues darreres fórmules són freqüents i es poden trobar escrites en components a l'annex 4.1.27. Ara, es cercarà partir de la primera llei de Newton per arribar a resultats que condicionin les quantitats estudiades, suposant així condicions de contorn pels problemes concrets que es poden plantejar on s'apliquen les lleis anteriors: Així doncs, si es pren una força externa gravitatòria  $\rho\mathbf{g}$  i es fa servir la definició 1.2.7 pel tensor d'esforços, es pot escriure la suma de forces igual a zero:

$$\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} + \rho g_i = 0 \quad (4.1.20)$$

Ara, substituint aquesta darrera igualtat a l'expressió 4.1.18 pel tensor d'esforços, es té la derivada:

$$\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \frac{\partial u_{ll}}{\partial x_i} + \frac{E}{1+\nu} \frac{\partial u_{ik}}{\partial x_k} \quad (4.1.21)$$

Finalment, fent servir la definició del tensor de deformacions 1.2.4:

$$\frac{E}{2(1+\nu)} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_k^2} + \frac{E}{2(1+\nu)(1-2\nu)} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_i \partial x_l} + \rho g_i = 0 \quad (4.1.22)$$

Aquesta darrera expressió representa el conjunt d'equacions d'equilibri desitjades. Per facilitar-ne l'enteniment, es poden escriure fàcilment en forma vectorial, identificant cada derivada present amb el seu operador <sup>2</sup>:

$$\Delta \vec{u} + \frac{1}{1-2\nu} \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) = -\rho \vec{g} \frac{2(1+\nu)}{E} \quad (4.1.23)$$

Un cas específic important és quan la deformació del cos no està causada per forces de volum, com és la gravetat, sinó per forces de contacte aplicades en superfície (que es veuran reflectides a la solució en forma de condicions de contorn):

$$(1-2\nu)\Delta \vec{u} + \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) = 0 \quad (4.1.24)$$

---

<sup>2</sup> $\partial^2 u_i / \partial x_k^2 \rightarrow \Delta \vec{u}$ ,  $\partial u_l / \partial x_l \rightarrow \vec{\nabla} \cdot \vec{u}$

Es pren la divergència d'aquesta darrera equació 4.1.24, i es fa servir la identitat  $\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}(\dots) \equiv \Delta(\dots)$  per veure que la divergència del camp  $\vec{u}$  és una funció harmònica, i arribar a l'equació:

$$\Delta(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) = 0 \quad (4.1.25)$$

D'altra banda, aplicant l'operador laplaciana sobre 4.1.24:

$$\Delta\Delta\vec{u} = 0 \quad (4.1.26)$$

Aquesta darrera equació s'anomena **biharmònica**, i es pot resoldre en coordenades polars mitjançant separació de variables. Aquestes dues darreres condicions sobre el camp de desplaçaments són vàlides també per un cas amb un camp gravitacional uniforme, ja que aquest atorga un zero quan se'n fa la derivada [9].

#### 4.1.14 Equacions d'equilibri en components cartesianes

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_{xx} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} [(1-\nu)u_{xx} + \nu(u_{yy} + u_{zz})] \\ \sigma_{yy} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} [(1-\nu)u_{yy} + \nu(u_{xx} + u_{zz})] \\ \sigma_{zz} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} [(1-\nu)u_{zz} + \nu(u_{xx} + u_{yy})] \\ \sigma_{xy} = \frac{E}{1+\nu}u_{xy}, \sigma_{xz} = \frac{E}{1+\nu}u_{xz}, \sigma_{yz} = \frac{E}{1+\nu}u_{yz} \end{array} \right. \quad (4.1.27)$$

## 4.2 Fluids

### 4.2.1 Conservació del moment: desenvolupament de les equacions

Per un ritme de creació nul, es pot fer servir el teorema de Stokes a l'equació 1.3.5 per escriure:

$$\int_V \frac{\partial(\rho\vec{v})}{\partial t} dV = - \oint_S \rho\vec{v}(\vec{v} \cdot \vec{n}) dS + \oint_S (\vec{\sigma} \cdot \vec{n}) dS + \int_V \vec{f}_v dV = \int_V \vec{\nabla}(\rho\vec{v} \cdot \vec{v}) dV + \int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{\sigma} + \int_V \vec{f}_v dV$$

A aquesta darrera expressió es poden veure reflectides les contribucions de les forces de contacte (representades pel tensor d'esforços  $\vec{\sigma}$ ) i les forces de volum (representades per la densitat de força de volum  $f_v$ ).

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho\vec{v})}{\partial t} + \vec{\nabla}(\rho\vec{v} \cdot \vec{v}) &= \vec{\nabla} \cdot \vec{\sigma} + \vec{f}_v \\ \rho \frac{\partial\vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{v} \vec{\nabla}(\rho\vec{v}) + \rho\vec{v} \cdot \vec{\nabla}\vec{v} &= \vec{\nabla} \cdot \vec{\sigma} + \vec{f}_v \end{aligned}$$

Aplicant-hi ara l'equació de continuïtat 1.3.3<sup>3</sup>, arribem fàcilment a l'equació de Navier-Stokes genèrica i a la equivalent segona llei de Newton:

$$\rho \frac{\partial\vec{v}}{\partial t} + \rho(\vec{v} \cdot \vec{\nabla}\vec{v}) = \vec{\nabla} \cdot \vec{\sigma} + \vec{f}_v \quad (4.2.1)$$

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} - \vec{f}_v = \vec{\nabla} \cdot \vec{\sigma} \quad (4.2.2)$$

<sup>3</sup>La qual implica  $\vec{v} \frac{\partial\vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}(\rho\vec{v}) = 0$

A continuació, es separa el tensor d'esforços en dues contribucions:

$$\vec{\sigma} = -p\mathbb{1} + \vec{\tau} \quad (4.2.3)$$

Allà on la primera part considera esforços de pressió, i la segona part considera esforços viscosos, introduint així el tensor  $\vec{\tau}$  d'esforços viscosos. Per un fluid newtonià incompressible, allà on la viscositat no depèn del ritme de cisalladura, es té la següent equació constitutiva <sup>4</sup>:

$$\vec{\tau} = \eta \left( \vec{\nabla} \vec{v} + (\vec{\nabla} \vec{v})^T \right) \quad (4.2.4)$$

Allà on s'ha fet servir la viscositat dinàmica  $\eta$ , d'aproximadament  $10^{-3} Pa \cdot s$  per l'aigua. Fent servir aquesta equació constitutiva i l'equació 4.2.1, es pot arribar a 1.3.6.

## 4.2.2 Conservació de l'energia

Al camp de la dinàmica de fluids, la conservació de l'energia sol venir representada per la famosa equació de Bernoulli (tot i que aquesta és un cas especial d'un concepte més general). Si es parteix de la definició d'energia cinètica i la dissipació d'aquesta:

$$E_c = \frac{1}{2} \rho \int_V v^2 dV \quad (4.2.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} \rho v^2 \right) = \rho \frac{\partial v}{\partial t} \quad (4.2.6)$$

Ara, s'escriu l'equació 1.3.6 per a un fluid newtonià incompressible (aquesta vegada sense explicitar encara el tensor d'esforços viscosos en funció del camp de velocitats):

$$\rho \frac{\partial v_i}{\partial t} = -v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ik}}{\partial x_k}$$

El gradient de pressions fa que el fluid es desplaci sense perdre energia cinètica, ja que es tracta d'un fluid no viscos. Així doncs, podem veure que la suma d'energies (cinètica, de flux, i potencial) és constant [10]. Es pot escriure la variació temporal d'energia cinètica com:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} \rho v^2 \right) &= -\rho \vec{v} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} - \vec{v} \cdot \vec{\nabla} p + \vec{v} \cdot (\vec{\nabla} \cdot \vec{\tau}) = \\ &= -\vec{\nabla} \cdot \left( \rho \vec{v} \left( \frac{1}{2} \vec{v}^2 + \frac{p}{\rho} \right) - \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \vec{\tau} \right) - \vec{\tau} \cdot \vec{\nabla} \vec{v} \end{aligned}$$

A continuació, s'integra aquesta darrera expressió sobre tot el volum i s'aplica el Teorema de Stokes al primer sumand:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \frac{1}{2} \rho v^2 dV = - \oint_S \left[ \rho \vec{v} \left( \frac{1}{2} \vec{v}^2 + \frac{p}{\rho} \right) - \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \vec{\tau} \right] dS - \int_V \vec{\tau} \cdot (\vec{\nabla} \vec{v}) dV$$

A aquesta darrera expressió s'hi reconeix les tres parts: a l'esquerra de la igualtat, es té la variació d'energia cinètica en el temps; el primer sumand representa la "pèrdua" de material a través de la superfície; i el darrer terme representa la fricció en cada punt del volum. Tal com s'ha fet abans, es pren una superfície d'integració amb la frontera a l'infinit per anul·lar la integral de superfície, quedant així l'equació:

<sup>4</sup>En mecànica de sòlids deformables i en enginyeria estructural, les equacions constitutives són igualtats que relacionen el camp de tensió mecànica amb la deformació.

$$\frac{\partial E_c}{\partial t} = - \int_V \vec{\tau} \cdot (\vec{\nabla} \vec{v}) dV \quad (4.2.7)$$

Fent servir l'expressió 4.2.3, i sabent que el tensor d'esforços és simètric 1.2.8, i també ho serà el d'esforços viscosos, simplifiquem encara més:

$$\frac{\partial E_c}{\partial t} = -\frac{1}{2}\eta \int_V (\vec{\nabla} \vec{v})^2 dV < 0 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\partial E_c}{\partial t} = -\frac{1}{2}\eta \int_V \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \right)^2 dV < 0 \quad (4.2.8)$$

Com podem veure d'aquest resultat, sempre es perd energia cinètica per mor de la viscositat del fluid. Per arribar a l'equació de Bernoulli, es pren un cas on les forces externes són gravitatòries  $\vec{f} = \vec{g} = -\vec{\nabla} X$  i el tensor d'esforços és  $\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} - \tau_{ij}$ , i es suposa un cas estacionari (on no es dissipa energia) i sense viscositat ( $\tau_{ij} = 0$ ), arribant així a:

$$\frac{\partial E_c}{\partial t} = -\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \left( \frac{1}{2} \rho v^2 p \right) + \rho \vec{v} \cdot \vec{\nabla} X = 0$$

Finalment, integrant aquesta darrera expressió per un fluid irrotacional:

$$\frac{\rho v^2}{2} + p + \rho X = cte \quad (4.2.9)$$

## 4.3 Part computacional

### 4.3.1 Navier-Stokes en 2D: el teorema de Gauss per polígons

Si es pren el Teorema de Gauss, és a dir, el cas concret del Teorema de Stokes per  $\mathbb{R}^3$ , es relaciona de manera senzilla la divergència d'un camp vectorial  $\vec{F}$  i el valor de les integrals de superfície del flux definit pel camp:

$$\oint_V (\vec{\nabla} \cdot \vec{F}) dV = \oint_S \vec{F} \cdot \vec{dS} = \oint_S (\vec{F} \cdot \hat{n}) dS \quad (4.3.1)$$

Aquest volum d'integració general  $V$  pot tenir una forma arbitrària, així que en teoria es poden prendre polígons, els quals permeten reescriure aquesta darrera equació integral 4.3.1 com una suma:

$$\oint_V (\vec{\nabla} \cdot \vec{F}) dV = \oint_S (\vec{F} \cdot \vec{n}) dS = \sum_i (\vec{F} \cdot \hat{n}_i) \cdot S_{i\Delta} \quad (4.3.2)$$

Allà a on  $\hat{n}$  i  $S_{i\Delta}$  representen el vector normal i la superfície de la cara  $i$ -èsima del volum escollit. Així doncs, una cel·la poligonal segueix la següent estructura:

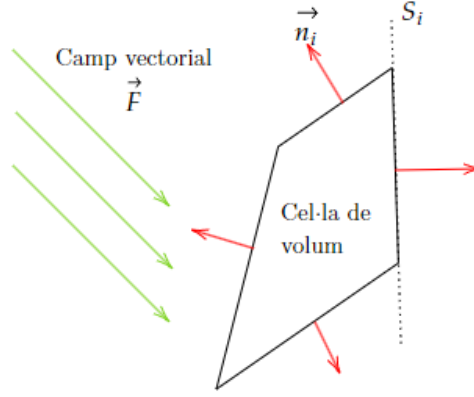


Figura 4.3: Esquema de la situació descrita, allà on s'hi troben vectors normals  $\hat{n}_i$ , una superfície  $S_i$  i el camp vectorial  $\vec{F}$

A continuació, es pren el conjunt d'equacions de Navier-Stokes en 2D en forma vectorial que es poden trobar a l'annex 4.3.2 i se'n fa una integració de volum, per després traduir aquesta darrera integral a una suma sobre les cares dels polígons emprats fent servir el Teorema de Gauss [3]:

$$\oint_V \vec{\nabla}(\rho \vec{v} \cdot \vec{v}) dV = \oint_V \left( -\frac{\partial p}{\partial x} \right) dV + \eta \oint_V \vec{\nabla}^2 u \cdot dV$$

$$\sum_i (\rho \vec{v} \cdot \hat{n}_i \cdot u \cdot S_i)_{cara} = \left( -\frac{\partial p}{\partial x} \cdot V_{\Delta} \right)_{cel} + \eta \sum_i (\vec{\nabla} u \cdot \hat{n}_i \cdot S_i)_{cara} \quad (4.3.3)$$

$$\oint_V \vec{\nabla}(\rho v \cdot \vec{v}) dV = \oint_V \left( -\frac{\partial p}{\partial y} \right) dV + \eta \oint_V \vec{\nabla}^2 v \cdot dV$$

$$\sum_i (\rho \vec{v} \cdot \hat{n}_i \cdot v \cdot S_i)_{cara} = \left( -\frac{\partial p}{\partial y} \cdot V_{\Delta} \right)_{cel} + \eta \sum_i (\vec{\nabla} v \cdot \hat{n}_i \cdot S_i)_{cara} \quad (4.3.4)$$

$$\oint \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) \cdot dV = 0$$

$$\sum_i (\rho \vec{v} \cdot \hat{n}_i \cdot S_i) = 0 \quad (4.3.5)$$

A continuació, es reconeix en el terme  $\rho \vec{v} \cdot \hat{n}_i \cdot S_i$  la massa de flux de fluid a través de la cara  $i$ -èsima de polígon (amb valors positius amb flux "cap a fora"). Ara, si representam aquest flux amb la lletra  $F_i$ :

$$\sum_i (F_i \cdot u)_{cara} = \left( -\frac{\partial p}{\partial x} \cdot V_{\Delta} \right)_{cel} + \eta \sum_i (\vec{\nabla} u \cdot \hat{n}_i S_i)_{cara} \quad (4.3.6)$$

$$\sum_i (F_i \cdot v)_{cara} = \left( -\frac{\partial p}{\partial y} \cdot V_{\Delta} \right)_{cel} + \eta \sum_i (\vec{\nabla} v \cdot \hat{n}_i S_i)_{cara} \quad (4.3.7)$$

$$\sum_i (F_i)_{cara} = 0 \quad (4.3.8)$$

Una vegada definides aquestes tres equacions, ja es té un conjunt de variables a calcular, les quals condicionen la construcció de la malla i la conseqüent estratègia de resolució:

- Flux de massa de fluid per una cara  $F_i$



- Velocitat del fluid  $\vec{u} = (u, v)$
- Àrea de la cara  $S_i$
- Vector normal a la cara  $\hat{n}_i$
- Gradients de la velocitat a la cara  $\vec{\nabla}u, \vec{\nabla}v$
- Volum de la cel·la  $V_\Delta$
- Gradients espaials promitjos de pressió a la cel·la en direccions  $x$  i  $y$

Així doncs, de manera general, l'objectiu és arribar a una expressió avaluable a cada cel·la de la malla computacional, i que després permeti passar al càlcul de les cel·les circumdants. Aquests polígons poden adoptar diverses formes, incrementant o reduint la complexitat de la malla [3].

### 4.3.2 Equacions de Navier-Stokes en 2D

Si es pren el conjunt d'equacions 1.3.7 per un fluid newtonià incompressible en dues dimensions  $(x, y)$ , a on el vector velocitat és  $\vec{u} = (u, v)$ , s'obté el següent sistema d'equacions [3]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0 \\ \vec{\nabla} \cdot (\rho u \vec{u}) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \eta \vec{\nabla}^2 u \\ \vec{\nabla} \cdot (\rho v \vec{u}) = -\frac{\partial P}{\partial y} + \eta \vec{\nabla}^2 v \end{array} \right. \quad (4.3.9)$$

### 4.3.3 Simulacions senceres pels tres casos del doblet de vesícules

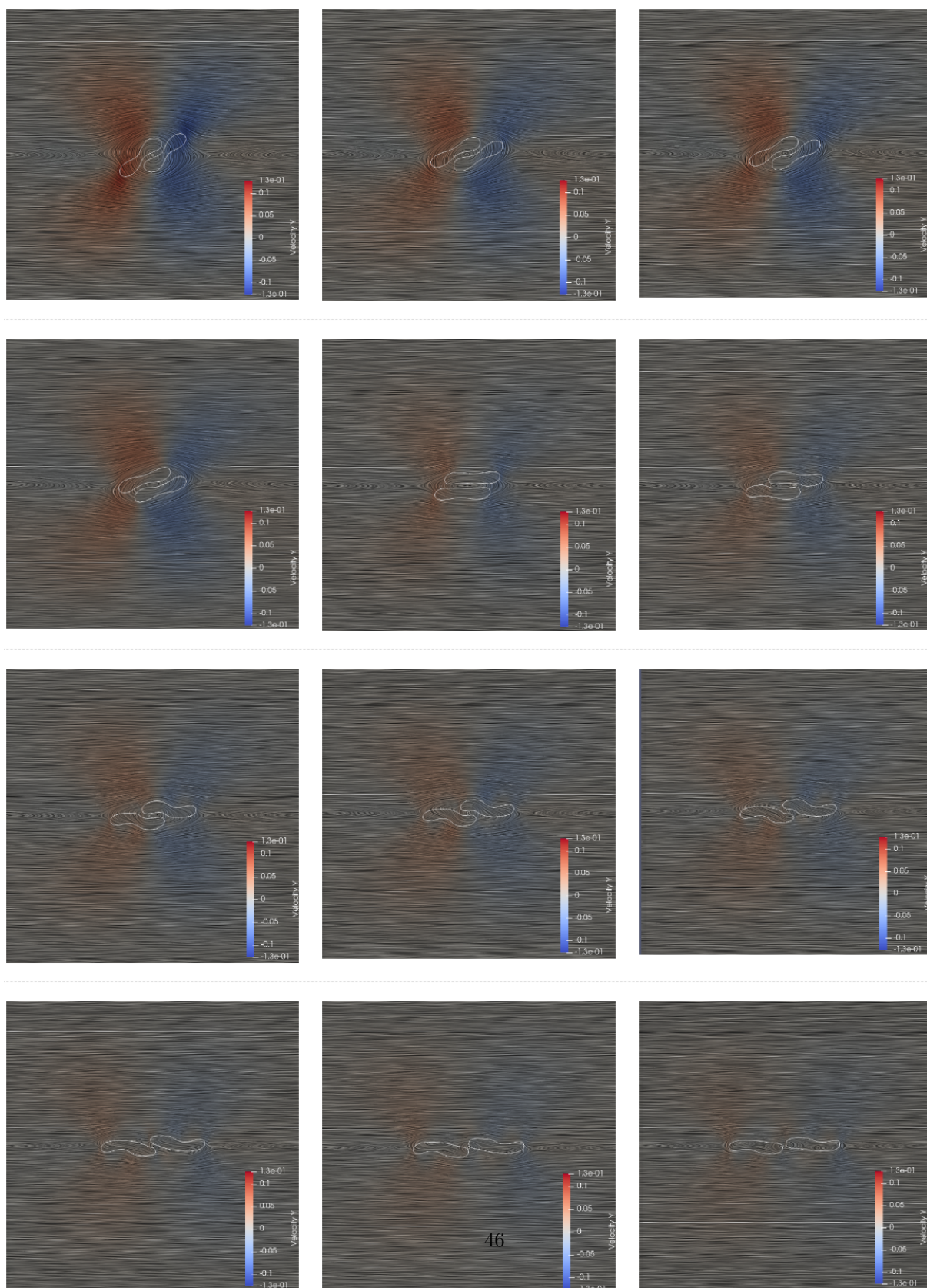


Figura 4.4: Evolució sencera del doblet de vesícules amb les condicions del cas 1.



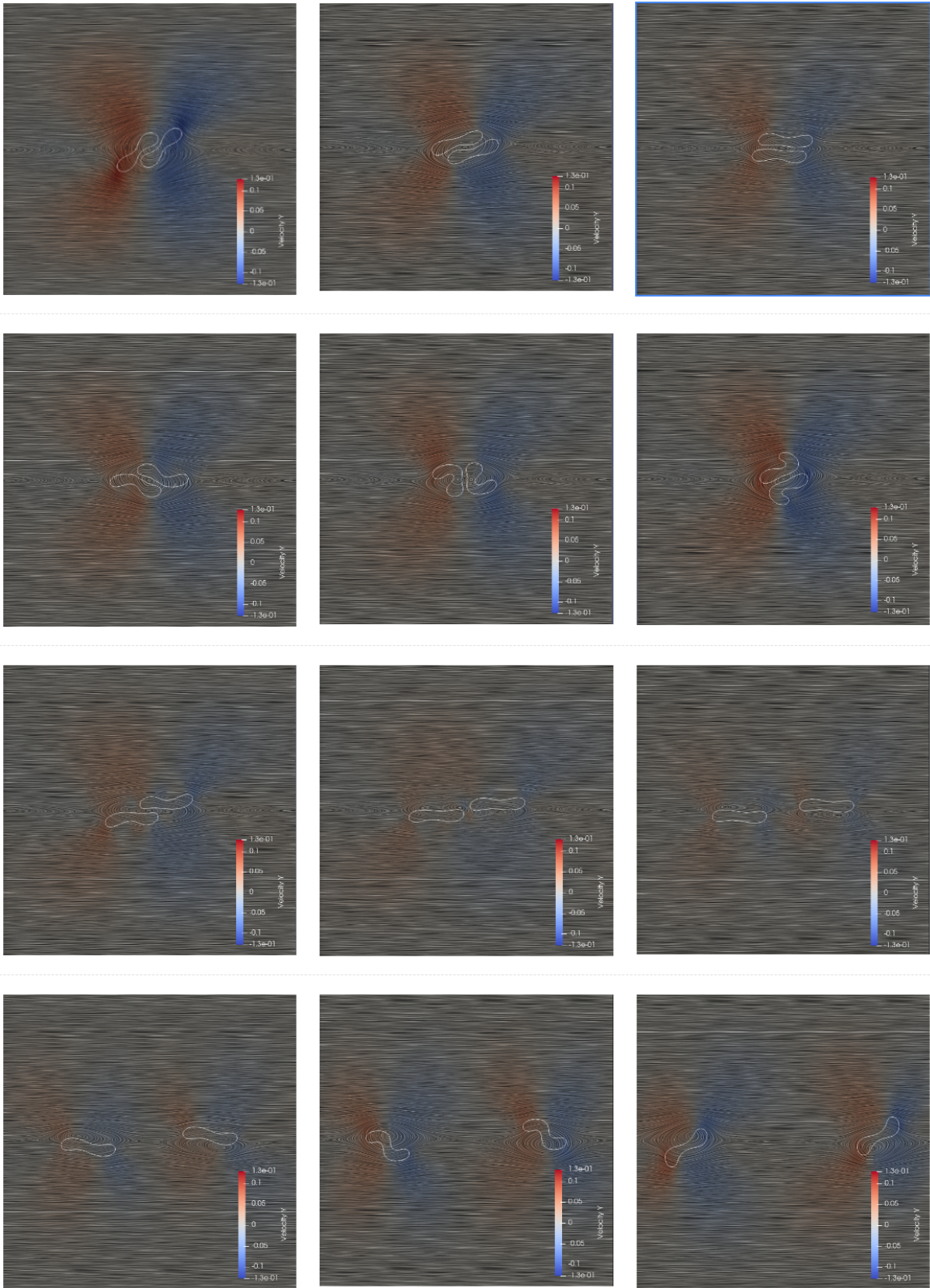


Figura 4.5: Evolució cada dues dècimes de segon <sup>47</sup> del doblet de vesícules amb les condicions del **cas 2**.



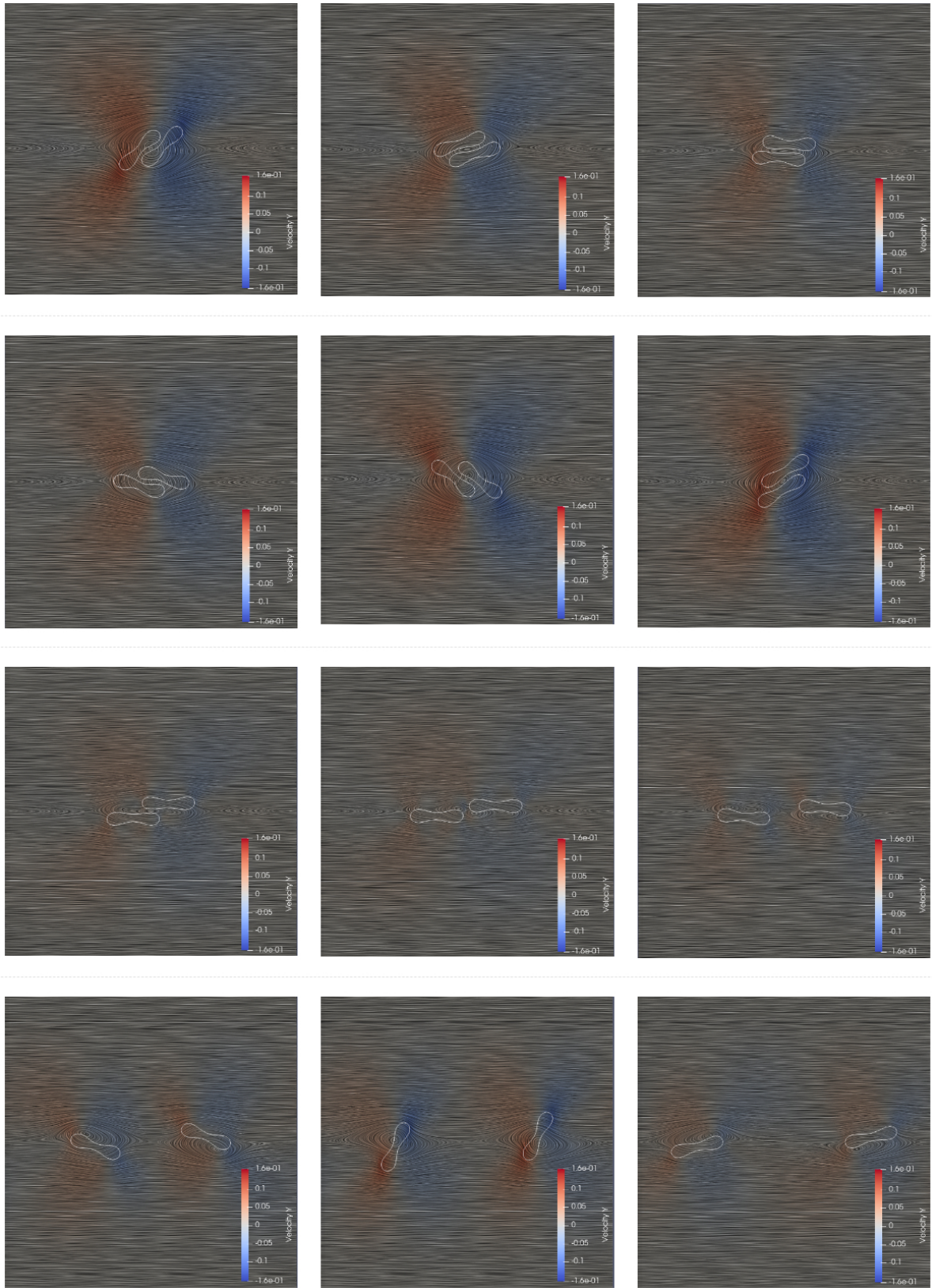


Figura 4.6: Evolució cada dues dècimes de segon del doblet de vesícules amb les condicions del cas 3.

#### 4.3.4 Nombres de Reynolds emprats (en sistema CGS)

Taula 4.1: Paràmetres i nombres de Reynolds  $R_E$  emprats als tres casos presentats

Cas	$\rho_{plasma}(kg/m^3)$	$\eta_{ext.}(P)$	$L(cm)$	$v = \dot{\gamma}L(cm/s)$	$R_E = \frac{\rho v L}{\eta}$
1	1.03	0.0133	0.020	3.20	4.81
2	1.03	0.010	0.020	3.20	6.40
3	1.03	0.010	0.020	3.20	6.40