

3

Método SPH

SPH (*Smoothed Particle Hydrodynamics*) é um método numérico Lagrangeano baseado em partículas. O método foi desenvolvido em 1977 por Gingold e Monaghan [12] e Lucy [20] para o tratamento de problemas astrofísicos. Por possuir uma formulação simples e por ser baseado em partículas, o método é eficiente o suficiente para permitir a simulação em tempo real de certos fenômenos físicos (dependendo do grau de realismo) sendo geral o suficiente para ser aplicado a vários tipos de problemas como por exemplo: dinâmica de fluidos, deformações de materiais, ondas de choque, fluxos de lava, etc.

Os fundamentos do método SPH estão na teoria da interpolação. O método utiliza funções de suavização chamados de *kernels*. Para se determinar o valor de uma grandeza qualquer num ponto $\vec{P}$ no espaço, o método, através das funções de suavização, interpola valores amostrados dentro da vizinhança do ponto $\vec{P}$. Nas seções seguintes, iremos apresentar uma formulação matemática do método. A formulação apresentada segue à exposta por Liu e Liu [17].

3.1.

Formalismo Básico

Qualquer função f definida em um domínio de interesse (domínio de suporte), representando uma propriedade física ou uma massa específica, pode ser aproximada através dos valores de um conjunto de amostras aleatórias ponderadas por uma função de suavização com raio finito.

Dada uma função f definida sobre todo o domínio Ω podemos expressar f como:

$$f(\vec{x}) = \int_{\Omega} f(\vec{x}') \delta(\vec{x} - \vec{x}') d\vec{x}' \quad (3.1)$$

onde Ω é o volume da integral que contém $\vec{x}$, e $\delta(\vec{x} - \vec{x}')$ é a função delta de Dirac definida por :

$$\delta(\vec{x} - \vec{x}') = \begin{cases} 1 & \text{se } \vec{x} = \vec{x}' \\ 0 & \text{se } \vec{x} \neq \vec{x}' \end{cases} \quad (3.2)$$

A Equação **3.1** implica que uma função f pode ser representada através de uma integral. Esta integral é chamada de *representação integral* da função f . Se f for definida e contínua em Ω , sua representação integral é garantidamente exata.

Se substituirmos a função delta de Dirac por uma função de suavização do tipo $W(\vec{x} - \vec{x}', h)$, a aproximação de f na forma integral será dada por:

$$\langle f(\vec{x}) \rangle = \int_{\Omega} f(\vec{x}') W(\vec{x} - \vec{x}', h) d\vec{x}' \quad (3.3)$$

Uma vez que a função de suavização W não é exatamente igual a função delta de Dirac, a Equação **3.3** representa uma aproximação da Equação **3.1**. Na função de suavização, o termo h representa o comprimento (raio) de suavização (*smoothing length*) que define a área (ou volume) de influência da função de suavização.

Em diversas situações, há a necessidade de se aproximar a derivada da função f ao invés da própria função f . Aplicando a representação integral à aproximação da derivada da função f obtemos:

$$\langle \vec{\nabla} f(\vec{x}) \rangle = \int_{\Omega} [\vec{\nabla} f(\vec{x}')] W(\vec{x} - \vec{x}', h) d\vec{x}' \quad (3.4)$$

Aplicando a integração por partes, temos:

$$\langle \vec{\nabla} f(\vec{x}) \rangle = \int_{\Omega} \vec{\nabla} [f(\vec{x}') W(\vec{x} - \vec{x}', h)] d\vec{x}' - \int_{\Omega} f(\vec{x}') \vec{\nabla} W(\vec{x} - \vec{x}', h) d\vec{x}' \quad (3.5)$$

Usando o teorema da divergência (Teorema de Gauss), podemos transformar a primeira integral do lado direito da Equação **3.5** em uma integral de superfície. Com isso obtemos:

$$\langle \vec{\nabla} f(\vec{x}) \rangle = \int_S f(\vec{x}') W(\vec{x} - \vec{x}', h) \vec{n} dS - \int_{\Omega} f(\vec{x}') \vec{\nabla} W(\vec{x} - \vec{x}', h) d\vec{x}' \quad (3.6)$$

onde $\vec{n}$ é o vetor normal à superfície. Se o domínio de suporte estiver contido dentro do domínio do problema (domínio onde as equações parciais diferenciais estão contidas), então a integral de superfície é zero e podemos reescrever a Equação 3.6 da seguinte forma:

$$\langle \vec{\nabla} f(\vec{x}) \rangle = - \int_{\Omega} f(\vec{x}') \vec{\nabla} W(\vec{x} - \vec{x}', h) d\vec{x}' \quad (3.7)$$

Ou seja, a aproximação da derivada da função f é a aproximação integral da função f usando-se o gradiente da função de suavização $\vec{\nabla} W(\vec{x} - \vec{x}', h)$, ao invés de simplesmente a função de suavização $W(\vec{x} - \vec{x}', h)$. Pode-se mostrar também que o mesmo processo é válido para a segunda derivada de f (Laplaciano de f):

$$\langle \nabla^2 f(\vec{x}) \rangle = \int_{\Omega} f(\vec{x}') \nabla^2 W(\vec{x} - \vec{x}', h) d\vec{x}' \quad (3.8)$$

3.2. Aproximação por Partículas

No método SPH, o sistema é representado por um número finito de partículas que possuem massa e ocupam um volume do espaço. A representação integral da função f (Equação 3.3) pode ser escrita de forma discreta, aplicando o somatório sobre todas as partículas dentro do domínio de suporte. Este processo chama-se aproximação por partículas.

Se o volume infinitesimal $d\vec{x}'$ da representação integral de f na posição da j -ésima partícula for substituído pelo volume ocupado pela partícula, ΔV_j , teremos:

$$\langle f(\vec{x}) \rangle = \sum_j f(\vec{x}_j) W(\vec{x} - \vec{x}_j, h) \Delta V_j \quad (3.9)$$

Se substituirmos ΔV_j por $\frac{m_j}{\rho_j}$, onde m_j e ρ_j são a massa e a massa específica da

partícula j , respectivamente, podemos reescrever a Equação 3.9 como:

$$\langle f(\vec{x}) \rangle = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} f(\vec{x}_j) W(\vec{x} - \vec{x}_j, h) \quad (3.10)$$

Ou seja, podemos aproximar o valor da função f na posição $\vec{x}$ através dos valores amostrados na vizinhança de $\vec{x}$, ponderados por uma função de suavização.

Da mesma forma que podemos aproximar a derivada da função f , através de sua representação integral, podemos aproximar a derivada de f através da aproximação por partículas. Se aplicarmos o mesmo raciocínio que aplicamos para determinar a Equação 3.7, obteremos a seguinte aproximação por partículas para a derivada de f .

$$\langle \vec{\nabla} f(\vec{x}) \rangle = - \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} f(\vec{x}_j) \vec{\nabla}_j W(\vec{x} - \vec{x}_j, h) \quad (3.11)$$

Note que o gradiente $\nabla W(\vec{x} - \vec{x}_j, h)$ é referente à partícula j . Como queremos o valor da aproximação da derivada em relação à posição $\vec{x}$, a Equação 3.11 passa a ser:

$$\langle \vec{\nabla} f(\vec{x}) \rangle = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} f(\vec{x}_j) \vec{\nabla} W(\vec{x} - \vec{x}_j, h) \quad (3.12)$$

O mesmo desenvolvimento pode ser aplicado à aproximação do Laplaciano da função f na posição $\vec{x}$, resultando em:

$$\langle \nabla^2 f(\vec{x}) \rangle = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} f(\vec{x}_j) \nabla^2 W(\vec{x} - \vec{x}_j, h) \quad (3.13)$$

As Equações 3.12 e 3.13 fazem com que o método SPH seja simples e ao mesmo tempo eficiente. Em inúmeras situações ocorre a necessidade de se calcular tanto o gradiente quanto o Laplaciano da função f . Com o método SPH, podemos obter os valores aproximados tanto do gradiente quanto do Laplaciano de f sem ter que derivar a função f . Para isto basta derivar a função de suavização que, na maioria dos casos, é muito mais simples que a função f .

Resumindo, podemos aproximar o valor de um campo escalar ou vetorial A , na posição $\vec{x}$, através da seguinte equação:

$$A(\vec{x}_i) = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} A(\vec{x}_j) W(\vec{x} - \vec{x}_j, h) \quad (3.14)$$

A derivada e o laplaciano do campo escalar ou vetorial será dado pelas Equações 3.15 e 3.16, respectivamente.

$$\vec{\nabla}A(\vec{x}_i) = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \vec{\nabla}A(\vec{x}_j)W(\vec{x} - \vec{x}_j, h) \quad (3.15)$$

$$\nabla^2 A(\vec{x}_i) = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \nabla^2 A(\vec{x}_j)W(\vec{x} - \vec{x}_j, h) \quad (3.16)$$

3.3. Propriedades da função de suavização

A escolha das funções de suavização no método SPH é primordial para estabilidade, velocidade e precisão do método. Diversas funções de suavização são propostas na literatura [17, 24]. Uma função para ser usada como função de suavização no método SPH deve satisfazer certas propriedades. Iremos destacar as principais propriedades presentes nas funções de suavização encontradas na literatura.

1. As funções de suavização devem ser normalizadas dentro do domínio de suporte, ou seja:

$$\int_{\Omega} W(\vec{x} - \vec{x}', h) d\vec{x}' = 1 \quad (3.17)$$

A integral da função de suavização dentro do domínio de suporte deve ser unitária para garantir que a interpolação seja correta.

2. As funções de suavização devem possuir um domínio de suporte compacto, ou seja:

$$W(\vec{x} - \vec{x}') = 0, \forall |\vec{x} - \vec{x}'| > kh \quad (3.18)$$

O domínio de suporte define a área (diferente de zero) efetiva de atuação da função de suavização onde k é uma constante.

3. Dependendo do tipo de problema a ser modelado, o valor da função de suavização $W(\vec{x} - \vec{x}')$ deve ser maior ou igual a zero para qualquer ponto $\vec{x}$ dentro do domínio de suporte. Esta propriedade não é necessária para garantir convergência da função de suavização. No

entanto, se o problema for a modelagem de um fenômeno físico, muitas vezes o valor de $W(\vec{x} - \vec{x}')$ sendo menor que zero não tem significado físico. Por exemplo, em problemas hidrodinâmicos, não há sentido ter valores de massa específica negativos.

4. O valor de $W(\vec{x} - \vec{x}')$ no ponto $\vec{x}'$ deve decrescer à medida que $\vec{x}'$ se afasta de $\vec{x}$. Ou seja, as partículas mais próximas de $\vec{x}$ devem ter maior influência do que aquelas mais afastadas de $\vec{x}$.
5. As funções de suavização devem satisfazer à função delta de Dirac quando o raio de influência h tender a zero, ou seja:

$$\lim_{h \rightarrow 0} W(\vec{x} - \vec{x}', h) = \delta(\vec{x} - \vec{x}') \quad (3.19)$$

A Equação 3.3 garante que o valor aproximado da função no ponto $\vec{x}$ se aproxima do valor real da função no ponto $\vec{x}$. Ou seja, $\langle f(\vec{x}) \rangle = f(\vec{x})$.

6. As funções de suavização devem ser funções pares. Esta propriedade também é conhecida como propriedade de simetria. Partículas afastadas da mesma distância de $\vec{x}$ devem contribuir da mesma forma, mesmo estando em diferentes posições.
7. As funções de suavização devem ser suficientemente suaves. Para garantir uma melhor aproximação as funções de suavização e suas derivadas devem ser contínuas.

Se as condições acima forem respeitadas, então pode-se garantir funções de suavização com erro de interpolação de segunda ordem. Se $f(\vec{x})$ for diferenciável, podemos usar a expansão de Taylor sobre $f(\vec{x}')$ em torno de $\vec{x}$, obtendo:

$$\langle f(\vec{x}) \rangle = \int_{\Omega} [f(\vec{x}) + f'(\vec{x})(\vec{x}' - \vec{x}) + r((\vec{x}' - \vec{x})^2)] W(\vec{x} - \vec{x}', h) d\vec{x}' \quad (3.20)$$

onde o termo r representa o resíduo da série de Taylor. Podemos reescrever a Equação 3.20 como:

$$\begin{aligned} \langle f(\vec{x}) \rangle &= f(\vec{x}) \int_{\Omega} W(\vec{x} - \vec{x}', h) d\vec{x}' \\ &\quad + f'(\vec{x}) \int_{\Omega} (\vec{x}' - \vec{x}) W(\vec{x} - \vec{x}', h) d\vec{x}' + r(h^2) \end{aligned} \quad (3.21)$$

Usando a Equação **3.17** e o fato da função de suavização ser uma função par (o termo de primeira ordem desaparece), teremos:

$$\langle f(\vec{x}) \rangle = f(\vec{x}) + r(h^2) \quad (3.22)$$

Isto é, o erro de interpolação será de segunda ordem.