

2 Equações Governantes e Formalismo Básico dos Métodos de Partículas

Neste capítulo, são apresentadas as equações governantes que modelam o movimento dos fluidos, bem como uma breve introdução aos conceitos essenciais para a formulação dos métodos de partículas.

2.1. Equações Governantes

As equações governantes que podem ser utilizadas como base pelos métodos MPS e SPH são a equação da continuidade, a equação da quantidade de movimento e a equação de energia.

2.1.1. Equação da Continuidade

A lei de conservação de massa expressa o fato que, em um sistema fluido, a massa não pode desaparecer nem pode ser criada. A Equação (2.1) é a forma diferencial da equação da continuidade, ou conservação de massa, onde ρ é a massa específica ou densidade, \vec{v} representa o vetor velocidade, t é o tempo e

$\nabla = \hat{i} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{j} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{k} \frac{\partial}{\partial z}$ é o operador vetorial gradiente.

$$\nabla \cdot \rho \vec{v} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (2.1)$$

Uma forma equivalente da equação (2.1) é obtida introduzindo-se a derivada material $\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla$, onde o primeiro termo representa a variação local temporal e o segundo a variação convectiva. Esta forma está apresentada na Equação (2.2).

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (2.2)$$

Dois casos de escoamento para os quais a equação diferencial da continuidade pode ser simplificada são dignos de nota. Um primeiro caso diz respeito a escoamentos incompressíveis, isto é, escoamentos onde a densidade não é função nem das coordenadas espaciais nem do tempo. Desta forma, a equação da continuidade é simplificada para:

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (2.3)$$

Um segundo caso refere-se ao escoamento permanente, onde todas as propriedades dos fluidos são, por definição, independentes do tempo. Desta forma, a equação da continuidade pode ser simplificada e apresenta a seguinte forma:

$$\nabla \cdot \rho \vec{v} = 0 \quad (2.4)$$

2.1.2. Equação da Quantidade de Movimento

A equação da quantidade de movimento, responsável por descrever o movimento de um fluido, é a representação da segunda lei de Newton, ou seja:

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = \sum \text{forças} \quad (2.5)$$

A seguir, será apresentada a equação da quantidade de movimento para os casos de escoamento de fluidos não viscosos e de fluidos viscosos.

2.1.2.1. Fluidos Não Viscosos

Todos os fluidos reais possuem viscosidade. Entretanto, em muitos casos de escoamento é razoável desprezar os efeitos da viscosidade. Desta forma, é útil investigar a dinâmica de um fluido ideal que tenha viscosidade nula.

A equação do movimento para o escoamento sem atrito, onde não há tensões de cisalhamento, está apresentada na Equação (2.6) e é conhecida como a equação de Euler (Fox e McDonald, 2001).

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\nabla p + \rho \vec{F} \quad (2.6)$$

Na Equação (2.6), p é a pressão e \vec{F} denota as forças de corpo por unidade de massa (por exemplo, a gravidade).

2.1.2.2. Fluidos Viscosos

Na simulação de fluidos reais, o efeito da viscosidade do fluido deve ser levado em consideração. Desta maneira, a equação da quantidade de movimento para fluidos viscosos é dada por (Fox e McDonald, 2001):

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\nabla p + \rho \vec{F} + \nabla \cdot \vec{\tau} \quad (2.7)$$

onde $\vec{\tau}$ representa o tensor das tensões viscosas.

Para um fluido Newtoniano, a tensão viscosa é proporcional à taxa de deformação, a qual pode ser expressa em função do gradiente de velocidade e das propriedades dos fluidos. A Equação (2.8) é utilizada para determinar o tensor das tensões viscosas (Fox e McDonald, 2001).

$$\vec{\tau} = \mu \left[\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T \right] - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \vec{v}) I \quad (2.8)$$

Na Equação (2.8), o parâmetro de proporcionalidade μ representa a viscosidade absoluta do fluido e I é a matriz identidade.

Introduzindo-se a equação do tensor das tensões viscosas (2.8) na equação de quantidade de movimento para fluidos viscosos (2.7), obtém-se:

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\nabla p + \rho \vec{F} + \nabla \cdot \left[\mu \left\{ \nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T \right\} - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \vec{v}) I \right] \quad (2.9)$$

A Equação (2.9) é chamada de equação de Navier-Stokes. Ela pode ser simplificada para o caso de escoamento incompressível e com viscosidade constante. Nesta situação, a equação de Navier-Stokes se reduz a:

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\nabla p + \rho \vec{F} + \mu \nabla^2 \vec{v} \quad (2.10)$$

onde $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ é o operador laplaciano.

No caso de escoamento de fluido incompressível e/ou não viscoso, a solução do escoamento pode ser obtida utilizando-se somente as equações de conservação de massa e de quantidade de movimento. Para escoamento de fluidos compressíveis, a densidade, de um modo geral, depende da pressão e da temperatura, sendo necessária uma equação de estado para relacionar as propriedades termodinâmicas. Além disso, a equação de energia deve ser satisfeita.

2.1.3. Equação de Energia

Em um fluido, a energia total (i) é considerada como sendo a soma da energia interna e da energia cinética por unidade de massa, conforme apresentado na Equação (2.11).

$$i = e + \frac{|\vec{v}|^2}{2} \quad (2.11)$$

A Equação de conservação de energia, ou primeira lei da termodinâmica, garante que as fontes para a variação da energia total são o trabalho das forças agindo sobre o sistema e o calor total transmitido para este sistema. Desta forma, a taxa de variação de energia interna (e) é dada pela seguinte equação (Batchelor, 1967):

$$\rho \frac{De}{Dt} = -p(\nabla \cdot \vec{v}) + \epsilon_v + \nabla \cdot (k\nabla T) + q_H \quad (2.12)$$

O primeiro termo do lado direito da Equação (2.12) é o trabalho reversível das forças de pressão, enquanto que ε_v é um termo de dissipação que age como uma fonte irreversível de calor. O termo $\nabla \cdot (k\nabla T)$ representa o fornecimento de calor por condução, onde k é a condutividade térmica e T é a temperatura absoluta. O termo q_H está relacionado com a geração de calor por outras fontes.

O termo dissipativo ε_v pode ser escrito da seguinte forma:

$$\varepsilon_v = \overset{\Rightarrow}{\tau} : \nabla \vec{v} \quad (2.13)$$

Para o escoamento de fluidos compressíveis não viscosos, o termo dissipativo é igual a zero. Adicionalmente, admitindo-se que não há geração de calor ($q_H = 0$) e que o termo de fornecimento de calor por condução é desprezível, a equação da variação da energia interna (e) é simplificada e apresenta a seguinte forma:

$$\rho \frac{De}{Dt} = -p(\nabla \cdot \vec{v}) \quad (2.14)$$

A Equação (2.14) foi usada neste estudo, no caso de escoamento compressível não viscoso, para modelar a variação de energia interna (e).

2.2. Formalismo Básico dos Métodos de Partículas

Dada uma função f definida sobre todo o domínio Ω , pode-se expressar f como:

$$f(\vec{r}) = \int_{\Omega} f(\vec{r}') \delta(\vec{r} - \vec{r}') d\vec{r}' \quad (2.15)$$

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

$$\delta(\vec{r} - \vec{r}') = \begin{cases} 1 & \text{se } \vec{r} = \vec{r}' \\ 0 & \text{se } \vec{r} \neq \vec{r}' \end{cases} \quad (2.16)$$

A Equação (2.15) indica que uma função pode ser representada em uma forma integral, conhecida como representação integral da função. Desde que a função delta de Dirac seja usada, a representação integral na Equação (2.15) é exata ou rigorosa, se f for definida e contínua em Ω .

Se a função delta de Dirac for substituída por uma função de suavização do tipo $W(\vec{r} - \vec{r}', h)$, a representação integral de f é dada por:

$$f(\vec{r}) \cong \int_{\Omega} f(\vec{r}')W(\vec{r} - \vec{r}', h)d\vec{r}' \quad (2.17)$$

onde h representa o comprimento (raio) de suavização (*smoothing length*).

É importante ressaltar que, como W não é a função delta de Dirac, a representação integral na Equação (2.17) é apenas uma aproximação. Isto é a origem do termo aproximação *kernel* (Liu e Liu, 2003), que é representada pelo operador $\langle \rangle$. Assim, a Equação (2.17) pode ser escrita na seguinte forma:

$$\langle f(\vec{r}) \rangle = \int_{\Omega} f(\vec{r}')W(\vec{r} - \vec{r}', h)d\vec{r}' \quad (2.18)$$

Em muitos casos, existe a necessidade de se aproximar a derivada da função f ao invés da própria função. Aplicando-se a representação integral à aproximação da derivada da função f , obtém-se:

$$\langle \nabla f(\vec{r}) \rangle = \int_{\Omega} \nabla[f(\vec{r}')W(\vec{r} - \vec{r}', h)]d\vec{r}' \quad (2.19)$$

Aplicando-se a integração por partes, chega-se a:

$$\langle \nabla f(\vec{r}) \rangle = \int_{\Omega} \nabla[f(\vec{r}')W(\vec{r} - \vec{r}', h)]d\vec{r}' - \int_{\Omega} f(\vec{r}')\nabla W(\vec{r} - \vec{r}', h)d\vec{r}' \quad (2.20)$$

A primeira integral presente no lado direito da Equação (2.20) pode ser convertida, usando-se o teorema da divergência (Teorema de Gauss), em uma integral sobre a superfície S do domínio de integração Ω :

$$\langle \nabla f(\vec{r}) \rangle = \int_S f(\vec{r}')W(\vec{r} - \vec{r}', h)\vec{n}dS - \int_{\Omega} f(\vec{r}')\nabla W(\vec{r} - \vec{r}', h)d\vec{r}' \quad (2.21)$$

Na Equação (2.21), \vec{n} é o vetor normal à superfície. Se o domínio do suporte estiver contido no domínio do problema (domínio no qual as equações

diferenciais parciais estão contidas), então a integral de superfície é zero e a Equação (2.21) pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$\langle \nabla f(\vec{r}) \rangle = - \int_{\Omega} f(\vec{r}') \nabla W(\vec{r} - \vec{r}', h) d\vec{r}' \quad (2.22)$$

Assim, a aproximação da derivada da função (f') é a aproximação integral da função f usando-se a derivada da função de suavização. De maneira análoga, tem-se a seguinte equação para representar a segunda derivada (Liu e Liu, 2003):

$$\langle \nabla^2 f(\vec{r}) \rangle = \int_{\Omega} f(\vec{r}') \nabla^2 W(\vec{r} - \vec{r}', h) d\vec{r}' \quad (2.23)$$

A seguir, nos Capítulos 3 e 4, será apresentada uma descrição detalhada da metodologia dos métodos Lagrangeanos de partículas MPS e SPH, respectivamente.