

4 O Método de Partículas SPH

O método SPH foi apresentado tanto por Lucy (1977), quanto por Gingold e Monaghan (1977) para resolver, num primeiro momento, problemas astrofísicos em espaço tridimensional. O método SPH é um método numérico Lagrangeano onde o estado de um sistema é representado por um conjunto de partículas que possuem propriedades materiais individuais e se movem de acordo com as equações governantes de conservação.

Os fundamentos do método SPH estão na teoria da interpolação. Para se determinar o valor de uma grandeza num ponto qualquer do espaço, o método utiliza funções de suavização, também conhecidas como *kernels*, para interpolar os valores amostrados dentro da vizinhança do referido ponto. A seguir, está apresentada a formulação matemática do método, que está baseada na formulação apresentada por Liu e Liu (2003).

4.1. Aproximação por Partículas

No método SPH, o sistema é representado por um número finito de partículas que possuem massa e ocupam um volume no espaço. Desta forma, a aproximação da representação integral da função f (Equação 2.18) pode ser discretizada aplicando-se o somatório sobre todas as partículas pertencentes ao domínio de suporte. Este processo é denominado de aproximação por partículas.

Substituindo-se o volume infinitesimal $d\vec{r}'$ da representação integral da função f na posição da j -ésima partícula pelo volume ocupado pela partícula, ΔV_j , obtém-se:

$$\langle f(\vec{r}) \rangle = \sum_j f(\vec{r}_j) W(\vec{r} - \vec{r}_j, h) \Delta V_j \quad (4.1)$$

Substituindo-se ΔV_j por $\frac{m_j}{\rho_j}$, onde m_j e ρ_j são a massa e a densidade da partícula j , respectivamente, a Equação (4.1) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\langle f(\vec{r}) \rangle = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} f(\vec{r}_j) W(\vec{r} - \vec{r}_j, h) \quad (4.2)$$

Desta maneira, podemos aproximar o valor da função f na posição \vec{r} através dos valores amostrados na vizinhança de \vec{r} , ponderados pela função de suavização.

Aplicando-se o mesmo raciocínio nas equações do gradiente e do laplaciano de f (Equações 2.22 e 2.23), chega-se às Equações (4.3) e (4.4) que são as aproximações do gradiente e do laplaciano da função f , respectivamente.

$$\langle \nabla f(\vec{r}) \rangle = - \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} f(\vec{r}_j) \nabla W(\vec{r} - \vec{r}_j, h) \quad (4.3)$$

$$\langle \nabla^2 f(\vec{r}) \rangle = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} f(\vec{r}_j) \nabla^2 W(\vec{r} - \vec{r}_j, h) \quad (4.4)$$

É importante observar que o gradiente $\nabla W(\vec{r} - \vec{r}_j, h)$ é referente à partícula j . Como se deseja o valor da aproximação da derivada em relação à posição \vec{r} , a Equação (4.3) torna-se (Liu e Liu, 2003):

$$\langle \nabla f(\vec{r}) \rangle = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} f(\vec{r}_j) \nabla W(\vec{r} - \vec{r}_j, h) \quad (4.5)$$

Nas equações que modelam o movimento de um fluido, é comum aparecerem derivadas das grandezas envolvidas. Desta forma, de acordo com as Equações (4.5) e (4.4), pode-se obter os valores aproximados tanto do gradiente, quanto do laplaciano de f sem ter que derivar a função. Para isto, basta derivar a função de suavização que, na maioria dos casos, é muito mais simples que a função f .

Em resumo, de acordo com o método SPH, o valor aproximado de um campo escalar ou vetorial A , na posição \vec{r} , é dado pela seguinte equação:

$$A(\vec{r}) = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} A(\vec{r}_j) W(\vec{r} - \vec{r}_j, h) \quad (4.6)$$

O gradiente e o laplaciano do campo escalar ou vetorial estão apresentados nas Equações (4.7) e (4.8), respectivamente.

$$\nabla A(\vec{r}) = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} A(\vec{r}_j) \nabla W(\vec{r} - \vec{r}_j, h) \quad (4.7)$$

$$\nabla^2 A(\vec{r}) = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} A(\vec{r}_j) \nabla^2 W(\vec{r} - \vec{r}_j, h) \quad (4.8)$$

Em alguns casos, pode ser necessário obter a aproximação do divergente de um vetor \vec{u} qualquer. Desta forma, de acordo com o método SPH, o divergente de um vetor \vec{u} é representado pela seguinte equação:

$$\nabla \cdot \vec{u}(\vec{r}) = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \vec{u}(\vec{r}_j) \cdot \nabla W(\vec{r} - \vec{r}_j, h) \quad (4.9)$$

4.2. Funções de Suavização

No método SPH, as funções de suavização desempenham um importante papel nas aproximações realizadas pelo método, além de serem primordiais para eficiência computacional e precisão do método. A seguir, serão apresentadas as principais propriedades que uma função de suavização deve satisfazer, bem como as funções de suavização utilizadas no presente trabalho.

As principais propriedades que uma função de suavização deve satisfazer são as seguintes:

1. As funções de suavização devem ser normalizadas ao longo do seu domínio de suporte. Então:

$$\int_{\Omega} W(\vec{r} - \vec{r}', h) d\vec{r}' = 1 \quad (4.10)$$

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

$$W(\vec{r} - \vec{r}') = 0, \text{ se } |\vec{r} - \vec{r}'| > kh \quad (4.11)$$

onde kh define o domínio de suporte, sendo que k é um fator de escala e h é o raio de suavização.

3. $W(r - r') \geq 0$ para qualquer ponto \vec{r}' definido dentro do domínio de suporte da partícula no ponto \vec{r} (positividade).
4. Quanto maior for a distância entre duas partículas, menor será o valor da função de suavização.
5. As funções de suavização devem satisfazer à função delta de Dirac quando o raio de suavização tende a zero, ou seja:

$$\lim_{h \rightarrow 0} W(\vec{r} - \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (4.12)$$

6. As funções de suavização devem ser funções pares.
7. As funções de suavização devem ser suficientemente suaves.

A primeira propriedade garante que a integral da função de suavização dentro do domínio de suporte é unitária.

A segunda propriedade transforma a aproximação SPH de uma operação global em uma operação local. Isto resultará num conjunto de matrizes esparsas que diminuirá o esforço computacional.

A terceira propriedade mostra que a função de suavização deve ser não negativa dentro do domínio de suporte. Isto não é matematicamente necessário para a convergência ser obtida, mas é importante para garantir o significado físico na representação de alguns fenômenos.

A quarta propriedade é baseada na consideração física de que as partículas mais próximas de uma dada partícula na posição \vec{r} exercem uma maior influência do que as partículas mais afastadas de \vec{r} .

A quinta propriedade assegura que, quando o raio de suavização tende a zero, o valor da aproximação se aproxima ao valor da função, isto é, $\langle f(\vec{r}) \rangle = f(\vec{r})$.

A sexta propriedade determina que as partículas afastadas da mesma distância de \vec{r} contribuem da mesma forma, mesmo estando em coordenadas diferentes. Esta propriedade também é conhecida como propriedade de simetria.

A sétima propriedade busca a obtenção de uma melhor aproximação. Para a aproximação de uma função e de suas derivadas, a função de suavização necessita ser contínua para a obtenção de bons resultados.

Se a função de suavização satisfaz todas as sete propriedades, pode-se garantir que o erro de interpolação da função é de segunda ordem. Admitindo que $f(\bar{r})$ é diferenciável e usando a expansão em série de Taylor de $f(\bar{r}')$ em torno de \bar{r} , obtém-se:

$$\langle f(\bar{r}) \rangle = \int_{\Omega} \left[f(\bar{r}) + f'(\bar{r})(\bar{r}' - \bar{r}) + \text{Re}((\bar{r}' - \bar{r})^2) \right] W(\bar{r} - \bar{r}', h) d\bar{r}' \quad (4.13)$$

onde Re representa o resíduo da série de Taylor.

A Equação (4.13) pode ser escrita da seguinte forma:

$$\langle f(\bar{r}) \rangle = f(\bar{r}) \int_{\Omega} W(\bar{r} - \bar{r}') d\bar{r}' + f'(\bar{r}) \int_{\Omega} (\bar{r}' - \bar{r}) W(\bar{r} - \bar{r}', h) d\bar{r}' + \text{Re}(h^2) \quad (4.14)$$

Usando a Equação (4.10) e o fato da função de suavização ser uma função par (o termo de primeira ordem desaparece), tem-se (Liu e Liu, 2003):

$$\langle f(\bar{r}) \rangle = f(\bar{r}) + \text{Re}(h^2) \quad (4.15)$$

Desta forma, o erro de interpolação será de segunda ordem.

Qualquer função que possua as sete propriedades listadas anteriormente pode ser empregada como uma função de suavização no método SPH. Muitos pesquisadores têm testado diferentes tipos de função de suavização. A seguir, estão apresentadas as duas funções de suavização utilizadas no presente estudo: a função de suavização *spline* cúbica e a função de suavização *spline* de quinta ordem.

Monaghan e Lattanzio (1985) propuseram a seguinte função de suavização (Figura 13) baseada em funções *spline* cúbicas e conhecida como a função *B-spline*.

$$W(\bar{r} - \bar{r}', h) = W(R, h) = \alpha_d \times \begin{cases} \frac{2}{3} - R^2 + \frac{1}{2}R^3 & 0 \leq R < 1 \\ \frac{1}{6}(2 - R)^3 & 1 \leq R < 2 \\ 0 & R \geq 2 \end{cases} \quad (4.16)$$

Em uma, duas e três dimensões do espaço, $\alpha_d = 1/h$, $\alpha_d = 15/7\pi h^2$ e $\alpha_d = 3/2\pi h^3$, respectivamente. Na Equação (4.16), R é a distância relativa entre duas partículas nos pontos \vec{r} e \vec{r}' , ou seja, $R = \frac{|\vec{r} - \vec{r}'|}{h}$, onde $|\vec{r} - \vec{r}'|$ é a distância entre duas partículas. Segundo Liu e Liu (2003), a função *spline* cúbica tem sido muito utilizada como função de suavização na literatura existente do método SPH, pois ela se parece com a função Gaussiana com a vantagem de possuir um suporte mais compacto. Entretanto, a segunda derivada da função *spline* cúbica é uma função em partes linear e, desta maneira, as propriedades de estabilidade podem ser inferiores quando comparadas a outras funções de suavização. Adicionalmente, a função de suavização está em partes, o que pode dificultar o seu uso.

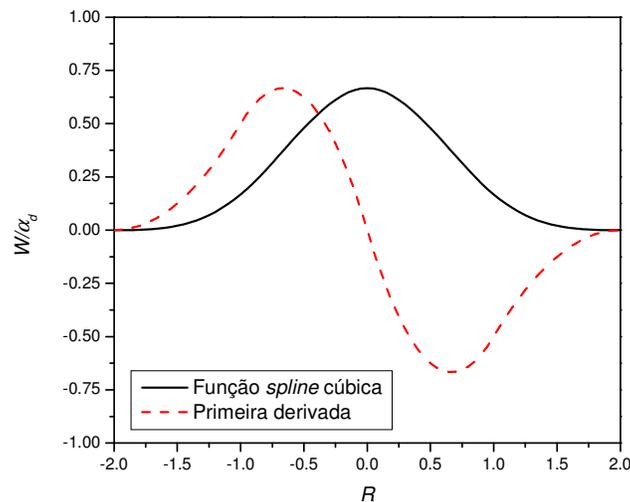


Figura 13 – Função de suavização *spline* cúbica e sua primeira derivada (função traçada com raio de suavização igual a um).

Morris *et al.* (1997) utilizaram uma *spline* de quinta ordem que se aproxima melhor da função Gaussiana e possui maior estabilidade em relação a outras funções de suavização. A função *spline* de quinta ordem é dada pela Equação (4.17) e o seu gráfico está apresentado na Figura 14.

$$W(R, h) = \alpha_d \times \begin{cases} (3-R)^5 - 6(2-R)^5 + 15(1-R)^5 & 0 \leq R < 1 \\ (3-R)^5 - 6(2-R)^5 & 1 \leq R < 2 \\ (3-R)^5 & 2 \leq R < 3 \\ 0 & R > 3 \end{cases} \quad (4.17)$$

Em uma, duas e três dimensões do espaço, $\alpha_d = 120/h$, $\alpha_d = 7/478\pi h^2$ e $\alpha_d = 3/359\pi h^3$, respectivamente.

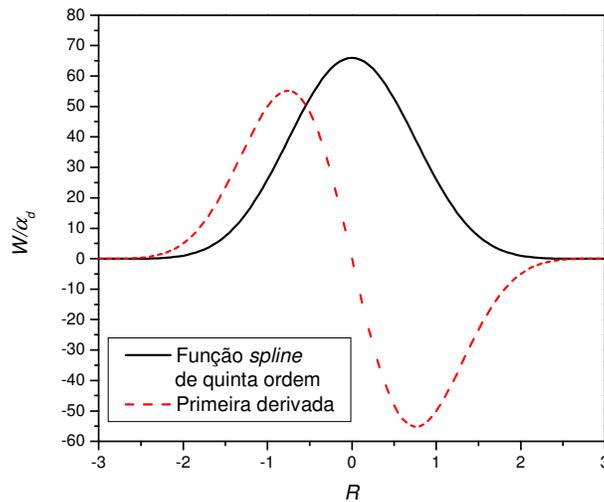


Figura 14 – Função de suavização *spline* de quinta ordem e sua primeira derivada (função traçada com raio de suavização igual a um).

4.3. Aplicação do Método SPH na Modelagem de Fluidos

No método SPH implementado neste estudo, três equações foram utilizadas para a modelagem de fluidos, são elas: a equação da continuidade, a equação da quantidade de movimento e a equação de energia. É importante salientar que a equação de energia foi utilizada apenas na simulação do problema do tubo de choque, que é um problema de fluido compressível não viscoso.

Nas seções seguintes, será apresentada a aplicação da metodologia SPH nas equações da continuidade, de quantidade de movimento e de energia.

4.3.1. Determinação da Densidade

Dentro do método SPH, é necessário o cálculo da densidade para cada partícula. Aplicando-se a aproximação SPH para o cálculo da densidade, obtém-se o seguinte resultado:

$$\rho(\vec{r}_i) = \sum_j m_j \frac{\rho_j}{\rho_j} W(R, h) \quad (4.18)$$

que pode ser reescrito como:

$$\rho(\vec{r}_i) = \sum_j m_j W(R, h) \quad (4.19)$$

Desta forma, a densidade de cada partícula i é determinada através do somatório das partículas pertencentes à vizinhança da partícula i , ponderadas pela função de suavização. A Equação (4.19) é comumente denominada de *summation density*.

A Equação (4.19) é uma das formas mais utilizadas para se determinar a densidade nas aplicações do método SPH. Com a finalidade de melhorar a acurácia dessa aproximação, Liu e Liu (2003) sugerem, no caso de escoamentos incompressíveis, o uso da seguinte equação:

$$\rho(\vec{r}_i) = \frac{\sum_j m_j W(R, h)}{\sum_j \frac{m_j}{\rho_j} W(R, h)} \quad (4.20)$$

Uma outra maneira de se calcular a densidade é aplicar o método SPH na equação da continuidade (Equação 2.2). Uma das formas mais populares para determinar a densidade através da equação da continuidade é utilizar a seguinte identidade (Liu e Liu, 2003):

$$-\rho \nabla \cdot \vec{v} = -(\nabla \cdot (\rho \vec{v}) - \vec{v} \cdot \nabla \rho) \quad (4.21)$$

Aplicando-se a aproximação SPH nos termos do lado direito da Equação (4.21), obtém-se:

$$\nabla \cdot \rho v(\vec{r}_i) = \sum_j m_j \vec{v}_j \cdot \nabla W(R, h) \quad (4.22)$$

$$\bar{v}(\vec{r}_i) \cdot \nabla \rho(\vec{r}_i) = \sum_j m_j \bar{v}_i \cdot \nabla W(R, h) \quad (4.23)$$

Utilizando-se a Equação (2.2) e as Equações (4.22) e (4.23), chega-se à seguinte equação para o cálculo da densidade das partículas:

$$\frac{D\rho(\vec{r}_i)}{Dt} = \sum_j m_j v_{ij}^b \cdot \nabla^b W(R, h) \quad (4.24)$$

onde $v_{ij}^b = v_i^b - v_j^b$ é a diferença de velocidade entre as partículas e o sobrescrito b indica a direção.

Segundo Liu e Liu (2003), a Equação (4.24) deve ser usada para simular eventos com forte descontinuidade. Neste estudo, essa equação foi utilizada na simulação do problema de quebra de barragem, pois forneceu simulações mais realistas.

4.3.2. Determinação do Gradiente de Pressão

O gradiente de pressão ($-\nabla p$), que representa a força de pressão e está presente na equação da quantidade de movimento para fluidos viscosos e para fluidos não viscosos (Equações 2.6 e 2.7), modela a variação do campo de pressão de um fluido. Aplicando-se a aproximação SPH ao gradiente de pressão, obtém-se:

$$\nabla p(\vec{r}_i) = \sum_j m_j \frac{p_j}{\rho_j} \nabla W(R, h) \quad (4.25)$$

Analisando-se Equação (4.25), percebe-se que a mesma não conserva a quantidade de movimento. Se interagirmos apenas duas partículas, i e j , a quantidade de movimento em i será determinada somente pela pressão da partícula j e vice versa. Visto que as pressões dessas partículas podem ser diferentes, não existirá a conservação da quantidade de movimento.

A falta de simetria é um problema inerente ao método SPH. Para contornar esse problema e garantir a conservação da quantidade de movimento, o presente trabalho utilizou a identidade (Equação 4.26) proposta por Monaghan (1988).

$$\frac{1}{\rho} \nabla p = \nabla \left(\frac{p}{\rho} \right) + \frac{p}{\rho^2} \nabla \rho \quad (4.26)$$

Aplicando-se a aproximação SPH na Equação (4.26), obtém-se:

$$\nabla \left(\frac{p(\vec{r}_i)}{\rho(\vec{r}_i)} \right) = \sum_j m_j \frac{p_j}{\rho_j^2} \nabla W(R, h) \quad (4.27)$$

e

$$\nabla \rho(\vec{r}_i) = \sum_j m_j \nabla W(R, h) \quad (4.28)$$

Desta forma, o termo envolvendo o gradiente de pressão pode ser escrito da seguinte maneira:

$$-\frac{1}{\rho(\vec{r}_i)} \nabla p(\vec{r}_i) = -\sum_j m_j \left(\frac{p_j}{\rho_j^2} + \frac{p_i}{\rho_i^2} \right) \nabla W(R, h) \quad (4.29)$$

Para se determinar o gradiente de pressão, torna-se necessário conhecer o valor da pressão de cada partícula. O método SPH faz uso de equações de estado para determinar a pressão das partículas.

Na simulação de escoamento de fluidos compressíveis e não viscosos, a equação de estado de gás ideal conhecida como *gamma law* foi utilizada. Esta equação modela um gás ideal utilizando a razão entre as capacidades caloríficas do gás a pressão e volume constantes e relaciona a pressão (p), a densidade (ρ) e a energia interna (e) do gás da seguinte maneira:

$$p = \left(\frac{c_p}{c_v} - 1 \right) \rho e \quad (4.30)$$

Para modelar escoamentos de fluidos incompressíveis com número de Reynolds pequeno, foi usada a Equação (4.31), conforme apresentado por Morris *et al.* (1997), onde c é a velocidade do som.

$$p = c^2 \rho \quad (4.31)$$

Na modelagem de escoamentos incompressíveis com superfície livre, foi utilizada a equação (4.32) como equação de estado (Batchelor, 1967). Essa equação foi aplicada por Monaghan (1994) como equação de estado da água para modelar escoamentos incompressíveis com superfície livre.

$$p = B \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right] \quad (4.32)$$

onde $\gamma = 7$, $B = \frac{c_0^2 \rho_0}{\gamma}$, sendo B um parâmetro dependente do problema,

$\rho_0 = 1000 \frac{kg}{m^3}$ é a densidade de referência e c_0 é a velocidade do som no fluido.

A Equação (4.32) é conhecida como equação de Tait (Becker e Teschner, 2007). Esta equação foi escolhida, pois, segundo Becker e Teschner (2007), ela garante uma baixa variação na densidade do fluido e é computacionalmente eficiente. A constante B governa a flutuação da densidade $\frac{|\Delta\rho|}{\rho_0} = \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0}$. Para determinar o valor da constante B , considera-se que o efeito da compressibilidade é proporcional a M^2 , onde M denota o número de Mach do escoamento. Assim, chega-se à seguinte relação:

$$\frac{|\Delta\rho|}{\rho_0} \sim \frac{v_f^2}{c_0^2} \quad (4.33)$$

onde v_f é a velocidade do escoamento.

Como se deseja uma pequena variação em torno da densidade do fluido, define-se $\frac{|\Delta\rho|}{\rho_0} \approx 0,01$, ou seja, assumindo-se que a velocidade do som é grande o

suficiente tal que $\frac{v_f^2}{c_0^2} < 0,01$, admite-se uma variação de 1% em torno da

densidade. Estimando-se que a velocidade máxima do escoamento é da ordem de $\sqrt{2gH}$, onde g é a constante gravitacional e H é a profundidade da coluna de fluido, tem-se:

$$c_0 \approx \sqrt{\frac{2gH}{0,01}} \quad (4.34)$$

4.3.3. Viscosidade

A determinação do termo de viscosidade presente na equação da quantidade de movimento para fluidos viscosos (Equação 2.7) segue o mesmo conceito aplicado ao gradiente de pressão. Desta forma, obtém-se:

$$\frac{1}{\rho(\vec{r}_i)} \nabla \cdot \vec{\tau}(\vec{r}_i) = \sum_j m_j \left(\frac{\vec{\tau}_j}{\rho_j^2} + \frac{\vec{\tau}_i}{\rho_i^2} \right) \cdot \nabla W(R, h) \quad (4.35)$$

Para determinar o termo viscoso da Equação (2.7), é necessária a aplicação da aproximação SPH no tensor das tensões viscosas. O tensor das tensões viscosas (Equação 2.8) pode ser reescrito da seguinte forma:

$$\tau^{ab} = \mu \varepsilon^{ab} \quad (4.36)$$

onde:

$$\varepsilon^{ab} = \frac{\partial v^b}{\partial r^a} + \frac{\partial v^a}{\partial r^b} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \delta^{ab} \quad (4.37)$$

Nas Equações (4.36) e (4.37), μ é viscosidade do fluido, ε^{ab} é o tensor taxa de deformação e δ^{ab} é a função delta de Dirac. Os sobrescritos a e b são usados para indicar a coordenada de direção.

O presente trabalho segue a metodologia aplicada por Liu e Liu (2003), que define a seguinte equação para a determinação do tensor das tensões viscosas:

$$\tau^{ab}(\vec{r}_i) = \mu_i \left(\sum_j \frac{m_j v_{ji}^b \nabla^a W(R, h)}{\rho_j} + \sum_j \frac{m_j v_{ji}^a \nabla^b W(R, h)}{\rho_j} - \left(\frac{2}{3} \sum_j \frac{m_j \vec{v}_{ji} \cdot \nabla W(R, h)}{\rho_j} \right) \delta^{ab} \right) \quad (4.38)$$

onde:

$$v_{ji}^k = v_j^k - v_i^k \quad (4.39)$$

É importante salientar que a Equação (4.38) utiliza a diferença entre os valores da velocidade das partículas j e i no lugar do valor da velocidade da partícula j para garantir a conservação da quantidade de movimento e o princípio de ação e reação (Nakamura, 2007).

4.3.4. Viscosidade Artificial

Com a finalidade de simular problemas de hidrodinâmica, métodos ou tratamentos especiais são necessários para permitir que o algoritmo SPH seja capaz de simular ondas de choque. A aplicação da conservação de massa, da conservação da quantidade de movimento e da conservação da energia em uma onda de choque requer a simulação da transformação da energia cinética em calor. Fisicamente, essa transformação de energia pode ser representada como uma forma de dissipação viscosa. Segundo Liu e Liu (2003), esta idéia levou ao desenvolvimento da viscosidade artificial de Von Neuman-Richtmyer (1950).

O presente trabalho usa a proposta de viscosidade artificial desenvolvida por Monaghan e Gingold (1983) e Lattanzio *et al.* (1986) que permite a simulação de ondas de choque e previne a sobreposição das partículas. Segundo Liu e Liu (2003), essa proposta de viscosidade artificial Π_{ij} é, desde então, a mais utilizada na literatura SPH. A formulação detalhada está apresentada a seguir.

$$\Pi_{ij} = \begin{cases} \frac{-\alpha_{\Pi} \bar{c}_{ij} \chi_{ij} + \beta_{\Pi} \chi_{ij}^2}{\bar{\rho}_{ij}} & \vec{v}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij} < 0 \\ 0 & \vec{v}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij} \geq 0 \end{cases} \quad (4.40)$$

onde:

$$\chi_{ij} = \frac{h_{ij} \vec{v}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij}}{|\vec{r}_{ij}| + \varphi^2} \quad (4.41)$$

$$\bar{c}_{ij} = \frac{1}{2}(c_i + c_j) \quad (4.42)$$

$$\bar{\rho}_{ij} = \frac{1}{2}(\rho_i + \rho_j) \quad (4.43)$$

$$h_{ij} = \frac{1}{2}(h_i + h_j) \quad (4.44)$$

$$\vec{v}_{ij} = \vec{v}_i - \vec{v}_j \quad (4.45)$$

$$\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j \quad (4.46)$$

Nas equações acima, α_{Π} e β_{Π} são constantes que usualmente possuem o valor 1,0 (Liu e Liu, 2003). O fator $\varphi = 0,1h_{ij}$ é necessário para prevenir divergências numéricas quando duas partículas se aproximam (Liu e Liu, 2003). Os símbolos c e v representam a velocidade do som e o vetor velocidade da partícula, respectivamente. Quando utilizada, a viscosidade artificial dada pela Equação (4.40) é adicionada no termo do gradiente de pressão presente na equação de conservação da quantidade de movimento (Liu e Liu, 2003). Desta forma:

$$-\frac{1}{\rho(\vec{r}_i)} \nabla p(\vec{r}_i) = -\sum_j m_j \left(\frac{p_j}{\rho_j^2} + \frac{p_i}{\rho_i^2} + \Pi_{ij} \right) \nabla W(R, h) \quad (4.47)$$

4.3.5. Forças Externas e de Corpo

Forças de corpo, como, por exemplo, a gravidade, são aplicadas diretamente sobre as partículas sem a necessidade do uso do método SPH. A colisão de partículas contra obstáculos foi tratada como força externa. Desta forma, a resposta à colisão foi aplicada diretamente às partículas.

4.3.6. Determinação da Energia Interna

O método SPH foi aplicado na Equação (2.14) para se determinar a energia interna específica. O presente trabalho utilizou a metodologia apresentada em Liu e Liu (2003) e utilizou a Equação 4.48, que considera a viscosidade artificial, para realizar a aproximação da equação de energia.

$$\frac{De(\vec{r}_i)}{Dt} = \frac{1}{2} \sum_j m_j \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} + \Pi_{ij} \right) v_{ij}^b \cdot \nabla^b W(R, h) \quad (4.48)$$

4.4. Implementação do Método SPH

Nesta seção, serão abordados os aspectos de maior relevância na implementação do método SPH.

4.4.1. Atributos Associados às Partículas

A Tabela 3 apresenta os principais atributos associados às partículas. Essas partículas são usadas, no método SPH, para a modelagem dos fluidos.

Massa (m)
Posição (\vec{r})
Velocidade (\vec{v})
Energia interna (e)
Densidade (ρ)
Viscosidade (μ)
Pressão (p)
Lista de partículas vizinhas

Tabela 3 – Principais atributos associados às partículas no método SPH.

4.4.2. Determinação do Domínio de Suporte kh

O raio de suavização h é muito importante no método SPH, pois influencia diretamente a eficiência computacional e a acurácia da solução. Se h é muito pequeno, podem não existir partículas suficientes no domínio de suporte para exercer forças sobre uma dada partícula, prejudicando a acurácia da solução. Se o raio de suavização é muito grande, o esforço computacional é maior e também pode ocorrer perda de acurácia, pois todos os detalhes e propriedades locais usadas pelo método podem ser muito suavizados.

Liu e Liu (2003) sugerem que o número de partículas vizinhas, incluindo a própria partícula, deve ser aproximadamente 5, 27 e 57 em uma, duas e três dimensões, respectivamente, no caso em que as partículas estão espaçadas de 1,2 vezes do raio de suavização inicial para um valor de $k = 2$.

No presente trabalho, foram usados diferentes valores para a constante k dependendo da função de suavização utilizada. A Tabela 4 apresenta os valores de k utilizados. Em relação ao raio de suavização h , maiores detalhes serão dados na apresentação dos resultados.

Função de suavização	Valor da constante k
<i>spline</i> cúbica	2
<i>spline</i> de quinta ordem	3

Tabela 4 – Valores da constante k para cada uma das funções de suavização.

4.4.3.

Determinação do Passo de Tempo

Para a determinação do passo de tempo, foi usada a mesma condição de Courant utilizada no método MPS. Esse critério deve ser seguido para evitar a sobreposição de partículas e garantir a convergência dos resultados.

4.4.4.

Tratamento de Fronteiras

Para partículas próximas às fronteiras como, por exemplo, uma parede, o presente trabalho utiliza o tipo de partícula virtual I apresentado em Liu e Liu (2003). Essas partículas virtuais são posicionadas na parede do sólido com a finalidade de produzir uma força repulsiva quando a partícula se aproxima da parede.

A força repulsiva exercida pela partícula virtual do tipo I é calculada usando-se uma aproximação similar à empregada por Lennard-Jones para calcular a força molecular (Liu e Liu, 2003). Se uma partícula virtual do tipo I é vizinha de uma partícula real que está se aproximando da fronteira, a força de repulsão é aplicada ao longo da linha central entre essas partículas.

$$PB_{ij} = \begin{cases} D \left[\left(\frac{r_0}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right)^{n_1} - \left(\frac{r_0}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right)^{n_2} \right] \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^2} & \frac{r_0}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \leq 1 \\ 0 & \frac{r_0}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} > 1 \end{cases} \quad (4.49)$$

Na Equação (4.49), $|\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ é a distância entre as partículas e os parâmetros n_1 e n_2 são iguais a 12 e 4, respectivamente (Liu e Liu, 2003). D é um parâmetro dependente do problema que, segundo Liu e Liu (2003), deve ser da ordem do quadrado da maior velocidade. O parâmetro r_0 é a distância de corte e possui grande importância na simulação. Se r_0 é muito grande, muitas partículas sofrem a força repulsiva das partículas virtuais na distribuição inicial, provocando um distúrbio inicial. Se r_0 é muito pequeno, as partículas reais podem penetrar na fronteira antes de sentirem a força de repulsão. Segundo Liu e Liu (2003), r_0 deve possuir um valor próximo ao do valor do espaçamento inicial entre as partículas.

Caso as partículas virtuais do tipo I não produzam força repulsiva suficiente para repelir as partículas reais, o presente trabalho utilizou a colisão contra a fronteira, baseado no trabalho de Macêdo (2007), para evitar a penetração das partículas na superfície sólida. Na resposta à colisão, a componente normal da velocidade é invertida e o seu valor pode ser escalonado por um coeficiente que varia entre 0 e 1. Para determinar se uma partícula estava em colisão contra um obstáculo, foi realizado o seguinte teste:

$$dist < f_c l_0 \quad (4.50)$$

Na Equação (4.50), $dist$ é a distância entre a fronteira sólida e a partícula, f_c é um fator de colisão e l_0 é o espaçamento inicial entre as partículas.

4.4.5. Evolução das Partículas

Segundo Liu e Liu (2003), na simulação de escoamentos de fluidos incompressíveis é interessante o uso da técnica “XSPH” proposta por Monaghan (1989; 1992). De acordo com esta técnica, as partículas se movimentam da seguinte maneira:

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i - \varepsilon \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (\vec{v}_i - \vec{v}_j) W(R, h) \quad (4.51)$$

Na Equação (4.51), ε é uma constante que varia entre 0 e 1. Na técnica XSPH, as partículas se movem com uma velocidade perto da velocidade média das partículas vizinhas. Quando aplicada em escoamento de fluido incompressível, esta técnica mantém as partículas mais ordenadas. Já quando aplicada a escoamento de fluido compressível, pode reduzir efetivamente a sobreposição entre as partículas. De acordo com Liu e Liu (2003), a escolha de $\varepsilon = 0,3$ é, na maioria dos casos, um bom valor para a simulação de escoamento de fluido incompressível.

4.4.6. O Algoritmo SPH

Uma forma geral do algoritmo SPH está apresentada na Figura 15. Num primeiro momento, determina-se o valor da densidade de cada partícula. Em seguida, a pressão de cada partícula é calculada através de uma equação de estado. Após a determinação das pressões das partículas, determina-se o termo do gradiente de pressão. Para a simulação do escoamento de fluido incompressível e viscoso, o termo de viscosidade é resolvido. Quando necessário, as forças de corpo são diretamente aplicadas sobre as partículas, sem a necessidade do uso da aproximação SPH. Para escoamento de fluido compressível, a equação de energia é resolvida. A partir da força resultante determinada através dos termos da equação de quantidade de movimento, as acelerações das partículas são obtidas e as novas posições calculadas. A evolução do sistema foi feita pelo método numérico *Leapfrog* (Hirsch, 1988). Finalmente, os testes de colisão contra os obstáculos são executados e as devidas correções são realizadas.

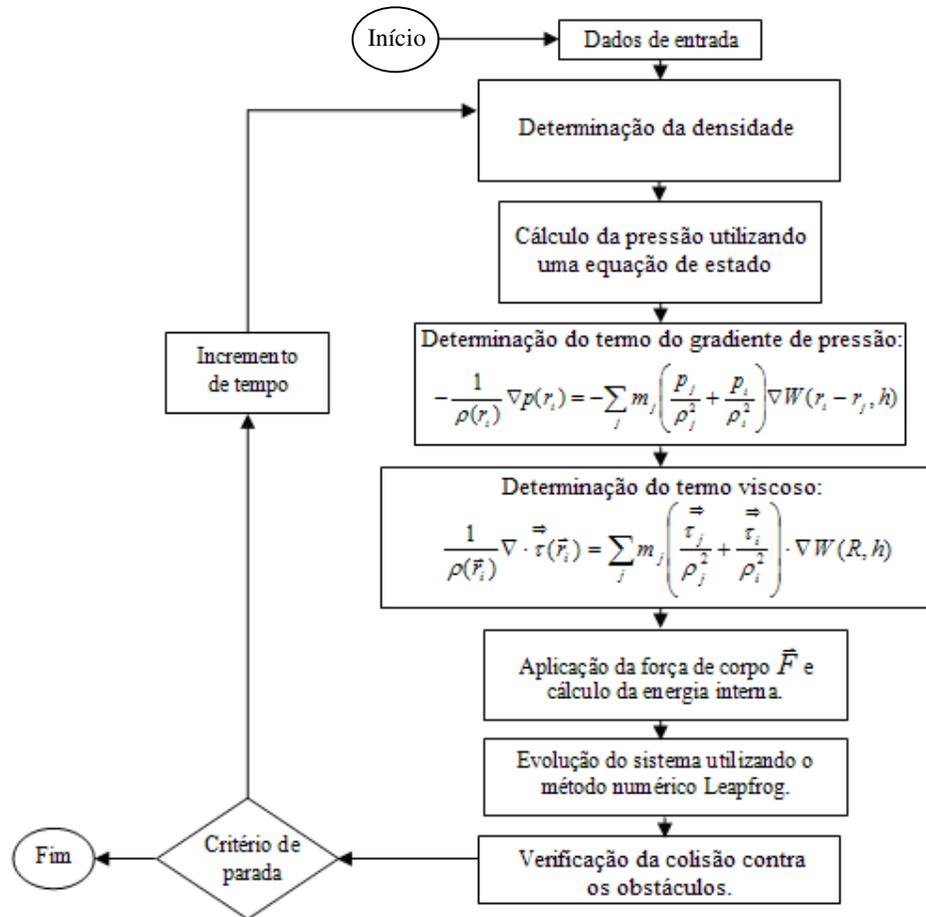


Figura 15 – Representação esquemática do algoritmo básico do método SPH.

4.5. Apresentação dos Resultados

Nesta seção, estão apresentados os resultados obtidos com o método de partículas SPH na simulação de fluidos. Três tipos de problemas foram simulados: o escoamento de fluido compressível não viscoso e o escoamento de fluido incompressível viscoso e não viscoso.

4.5.1. Escoamento de Fluido Compressível e Não Viscoso

Nesta seção, serão apresentados os resultados da simulação do problema de tubo de choque, que foi modelado como um escoamento de fluido compressível não viscoso.

4.5.1.1.

O Problema do Tubo de Choque

O tubo de choque consiste em um longo tubo fino preenchido com gás, no qual o gás é separado por uma fina membrana em duas partes de diferentes pressões e densidades. Segundo Liu e Liu (2003), este problema tem sido investigado por muitos pesquisadores do método SPH, além de ser um problema numérico de referência (*benchmark*).

O gás contido em cada uma das partes está inicialmente em um estado de equilíbrio e apresenta temperatura, densidade e pressão constantes. Ao retirar a membrana, o gás do lado pressurizado escoar para o lado de menor pressão em forma de uma onda de choque.

A simulação foi realizada em uma dimensão e as condições iniciais foram as mesmas utilizadas em Liu e Liu (2003) conforme ilustra a Tabela 5. A membrana está localizada na posição $x = 0$.

Posição em x	$x \leq 0$	$x > 0$
Densidade (ρ)	1 kg/m ³	0,25 kg/m ³
Velocidade (v)	0 m/s	0 m/s
Energia interna específica (e)	2,5 J/kg	1,795 J/kg
Pressão (p)	1 Pa	0,1795 Pa
Raio de suavização (h)	0,015 m	0,015 m
Espaçamento entre partículas (Δx)	0,001875 m	0,0075 m
Massa das partículas (m)	0,001875 kg	0,001875 kg

Tabela 5 – Condições iniciais do problema do tubo de choque.

Na simulação deste problema, foram utilizadas 400 partículas de fluido, sendo que 320 partículas foram posicionadas na região de alta pressão [-0,6 a 0,0] e 80 partículas na região de baixa pressão [0,0 a 0,6]. De acordo com Liu e Liu (2003), essa distribuição inicial das partículas é necessária para se obter o perfil descontínuo de densidade ao longo do tubo. O passo de tempo utilizado foi de 0,005 segundos e o tempo total de simulação foi de 0,15 segundos. Nesta simulação, foi utilizada a função de suavização *spline* cúbica, conforme sugerido por Liu e Liu (2003). Neste problema, a ação da gravidade foi desconsiderada.

O cálculo da densidade foi realizado pela equação conhecida como *summation density* (Equação 4.19). A pressão foi determinada pela equação de estado para gás ideal conhecida como *gamma law* (Equação 4.30). Além disso, a viscosidade artificial foi utilizada nessa simulação. Como o tempo de simulação foi muito pequeno, os efeitos das fronteiras sólidas podem ser negligenciados (Liu e Liu, 2003).

A Figura 16 apresenta a variação do perfil de densidade ao longo do tubo obtida pelo método SPH, para o instante de tempo $t = 0,15$ s. Nesta figura, também está apresentada a solução analítica (Sod, 1978). Analisando-se a Figura 16, percebe-se que o método SPH simulou com boa acurácia o problema do tubo de choque na região de $[-0,4$ a $0,4]$.

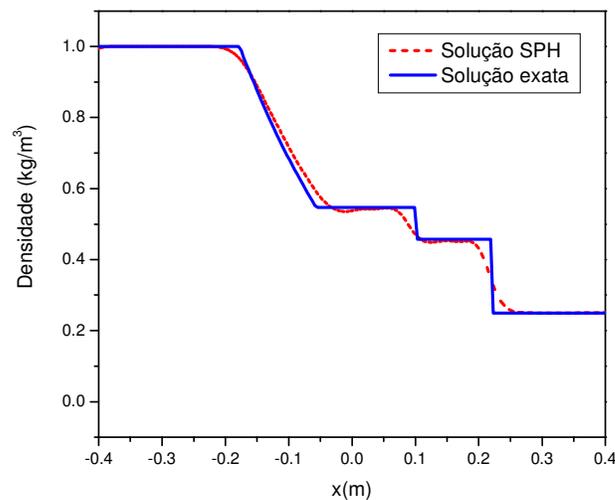


Figura 16 – Perfil de densidade no tubo de choque no instante $t = 0,15$ s. A onda de choque é observada próxima ao ponto $x = 0,2$ m.

A Figura 17 apresenta a variação do perfil de pressão ao longo do tubo de choque. Novamente, pode-se perceber que o método SPH foi capaz de simular o problema do tubo de choque com boa precisão, pois observa-se uma boa concordância entre a solução exata e a solução obtida pelo método SPH na região de $[-0,4$ a $0,4]$.

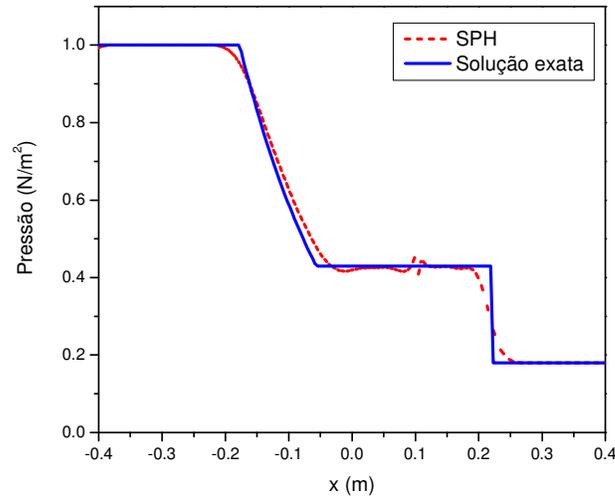


Figura 17 - Perfil de pressão no tubo de choque no instante $t = 0,15$ s. A onda de choque é observada próxima ao ponto $x = 0,2$ m.

4.5.2. Escoamento de Fluido Incompressível e Viscoso

Nesta seção, estão apresentados os resultados da simulação de um problema de fluido incompressível e viscoso.

4.5.2.1. Escoamento Laminar em uma Cavidade Quadrada

Um fluido contido dentro de uma cavidade quadrada escoar devido à imposição de velocidade na parede horizontal superior enquanto que as outras paredes permanecem fixas. A Figura 18 apresenta o modelo do problema.

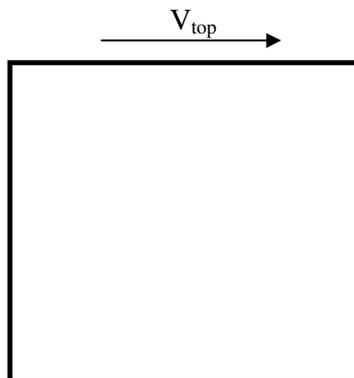


Figura 18 – Modelo do problema de escoamento laminar de um fluido contido no interior de uma cavidade quadrada.

A simulação deste problema foi realizada com o número de Reynolds igual a um. Foram usadas 1600 partículas (40 x 40) para modelar o fluido e o passo de tempo utilizado foi de 5×10^{-5} . O tempo final da simulação foi de 0,15 segundos, pois, segundo Liu e Liu (2003), neste momento o escoamento no interior da cavidade já se apresenta em regime permanente.

O cálculo da densidade foi realizado pela Equação (4.20). A pressão foi determinada pela Equação (4.31) e o efeito da gravidade foi desconsiderado. As fronteiras sólidas foram modeladas por 320 partículas virtuais do tipo I e o raio de suavização utilizado foi da ordem do espaçamento inicial entre as partículas. Como função de suavização, foi utilizada a função *spline* cúbica, conforme sugerido por Liu e Liu (2003).

O método dos Volumes Finitos foi utilizado como referência para verificar a acurácia do método SPH na simulação deste problema. A Figura 19 e a Figura 20 apresentam a configuração inicial das partículas para simulação pelo método SPH e a malha gerada pelo *software* Gambit[®], utilizada no Fluent[®], para a simulação pelo método dos Volumes Finitos, respectivamente.

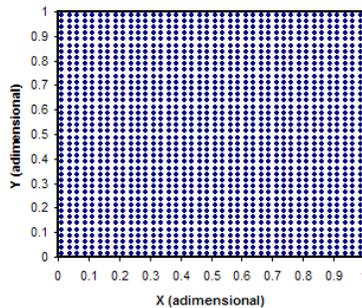


Figura 19 – Distribuição inicial das partículas no problema de escoamento laminar em uma cavidade quadrada. As partículas virtuais não estão apresentadas.

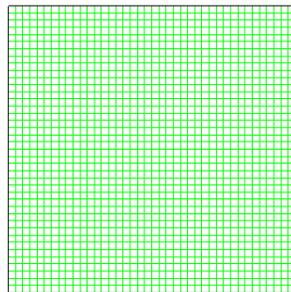


Figura 20 – Malha gerada pelo *software* Gambit[®] para o problema de escoamento laminar em uma cavidade quadrada.

A Figura 21 e a Figura 22 apresentam a variação da velocidade vertical adimensional ao longo de uma linha central horizontal e a variação da velocidade horizontal adimensional ao longo de uma linha central vertical, respectivamente. Analisando-se essas figuras, percebe-se que o método SPH simulou o referido problema com boa precisão, quando comparado com o método dos Volumes Finitos.

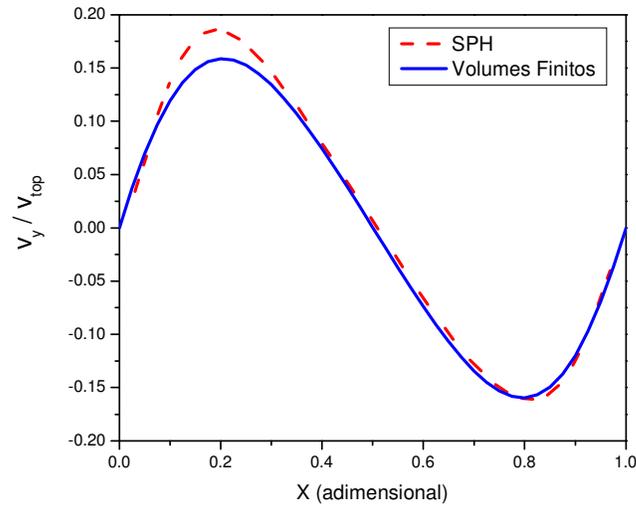


Figura 21 – Variação da velocidade adimensional vertical ao longo de uma linha central horizontal.

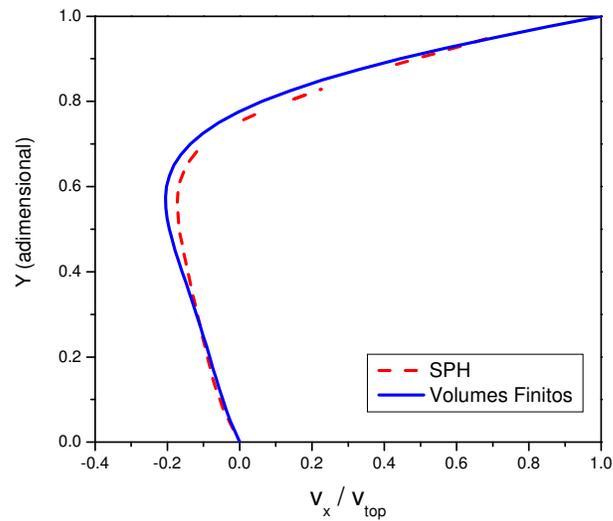


Figura 22 – Variação da velocidade adimensional horizontal ao longo de uma linha central vertical.

A Figura 23 e a Figura 24 apresentam as distribuições dos vetores de velocidade obtidas pelos métodos SPH e Volumes Finitos, respectivamente. Analisando-se as figuras, pode-se ver a formação de uma região de recirculação de fluido. Além disso, verifica-se uma boa concordância entre os métodos SPH e Volumes Finitos em relação à magnitude de velocidade.

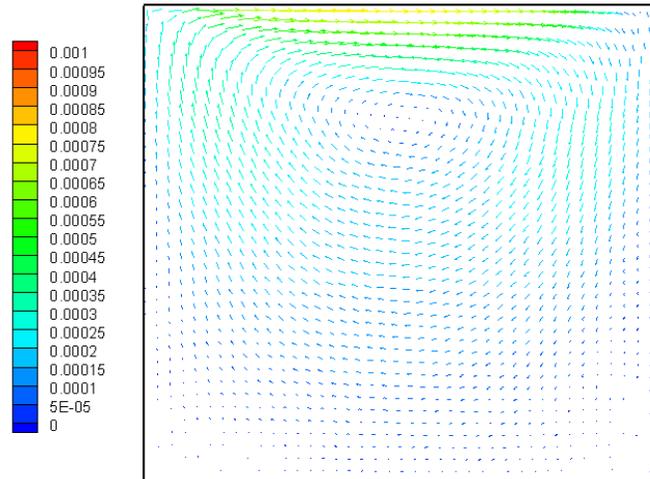


Figura 23 – Vetores de velocidade para o problema de escoamento laminar em uma cavidade quadrada na condição de regime permanente obtida pelo método SPH. A escala de cores e o tamanho dos vetores indicam a magnitude da velocidade em metros por segundo.

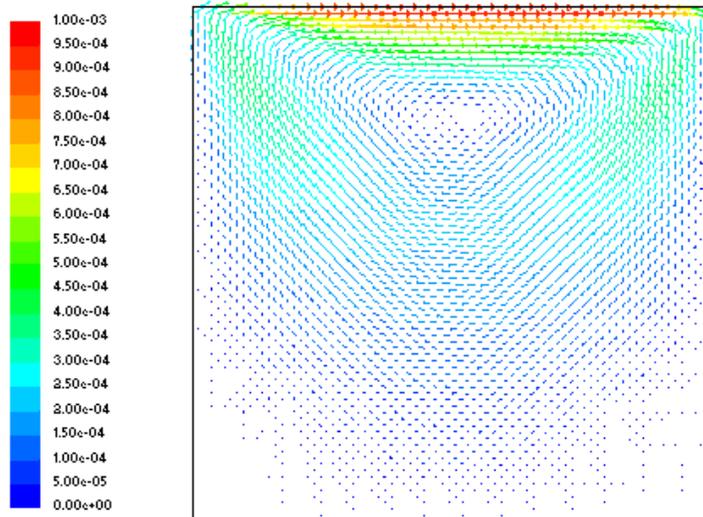


Figura 24 – Vetores de velocidade para o problema de escoamento laminar em uma cavidade quadrada na condição de regime permanente obtida pelo método dos Volumes Finitos. A escala de cores e o tamanho dos vetores indicam a magnitude da velocidade em metros por segundo.

4.5.3.

Escoamento de Fluido Incompressível e Não Viscoso

A seguir, estão apresentados dois problemas clássicos da literatura que foram simulados com o método SPH e modelados como escoamento de fluido incompressível e não viscoso.

4.5.3.1.

O Problema de Quebra de Barragem

O problema de quebra de barragem também foi resolvido utilizando o método SPH. A configuração do problema é a mesma utilizada na solução pelo método MPS (Figura 9).

Na simulação do problema de quebra de barragem, o espaçamento inicial entre as partículas (l_0) foi de 0,5 cm, o mesmo utilizado na simulação deste problema pelo método MPS, resultando num total de 1682 partículas de fluido. A colisão contra um obstáculo foi utilizada para o tratamento de fronteiras sólidas. A distância L usada na simulação foi de 14,6 cm e o passo de tempo usado foi de 10^{-4} segundos. O fluido simulado foi a água com densidade de referência (ρ_0) igual a 1000 kg/m^3 . A densidade (ρ) inicial de cada partícula, usada para calcular a distribuição inicial de pressão, foi determinada pela Equação (4.52), proposta por Monaghan (1994), onde H é a profundidade da coluna de fluido, y é a altura das partículas, g é a gravidade e B e γ são os mesmos parâmetros da equação de Tait (Equação 4.32).

$$\rho = \rho_0 \left(1 + \frac{\rho_0 g (H - y)}{B} \right)^{1/\gamma} \quad (4.52)$$

A colisão contra um obstáculo foi realizada da seguinte maneira. Primeiro, verificava-se a distância entre uma partícula de fluido e a fronteira sólida. Caso a distância fosse menor que um determinado valor, a posição da partícula era corrigida, assim como a sua velocidade.

O cálculo da densidade foi realizado aplicando-se o método SPH na equação da continuidade (Equação 4.24). A pressão foi determinada pela equação de Tait (Equação 4.32). O raio de suavização utilizado foi da ordem do espaçamento

inicial entre as partículas. Como função de suavização, foi utilizada a função *spline* de quinta ordem devido à sua estabilidade.

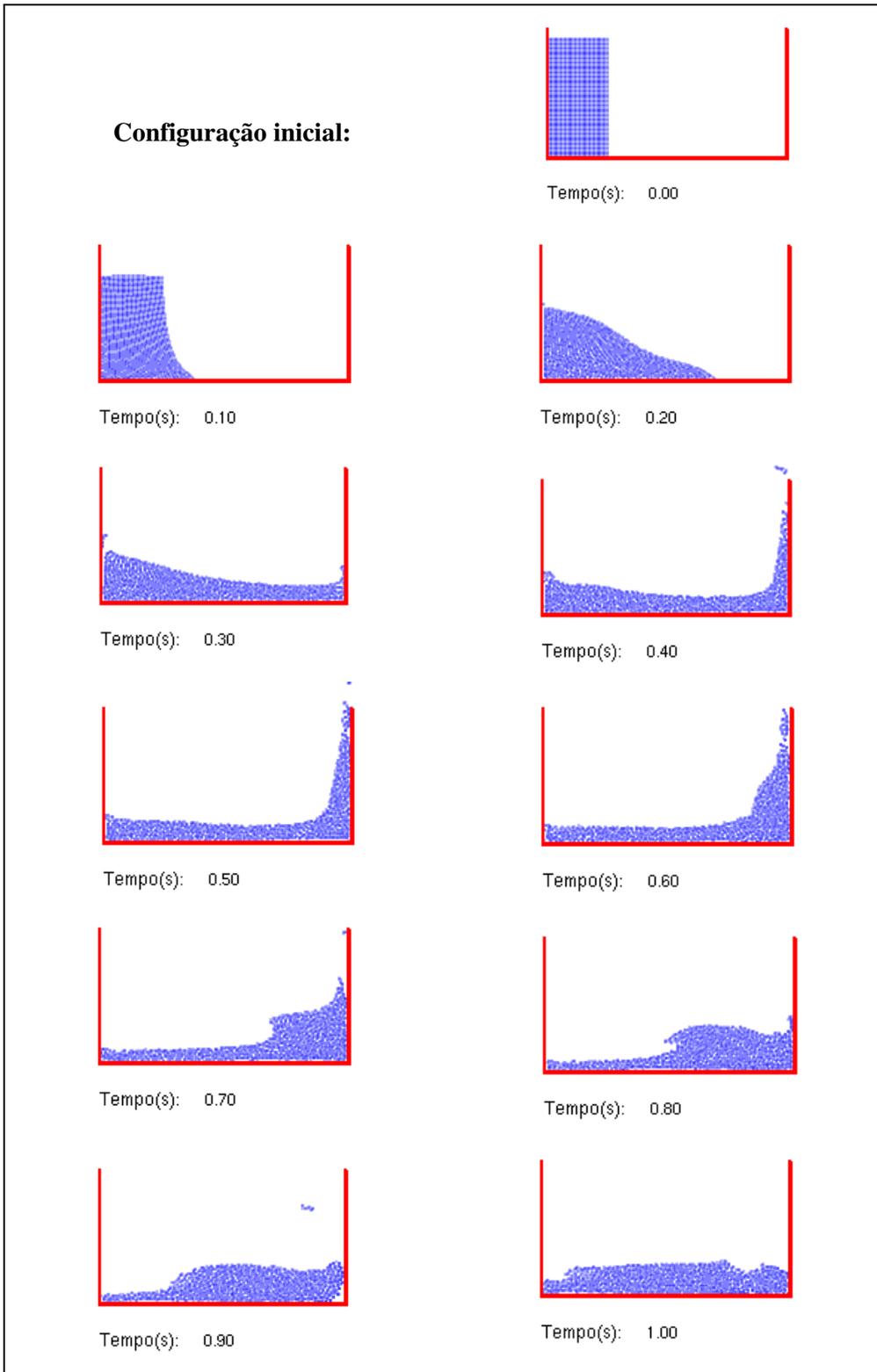


Figura 25 – Resultado da simulação do problema de quebra de barragem utilizando o método SPH.

A Figura 25 apresenta o resultado da simulação deste problema utilizando-se o método SPH. O resultado apresenta boa concordância com o resultado obtido pelo método MPS. Entretanto, não foi observada uma grande fragmentação de fluido quando o mesmo atinge a parede vertical da direita. No Capítulo 5, será realizada uma comparação entre os resultados obtidos pelo método SPH e os resultados obtidos pelos métodos MPS e VOF.

4.5.3.2. O Problema de Descarga de Água

O problema de descarga de água também foi resolvido utilizando o método SPH. A configuração do problema é a mesma utilizada na solução pelo método MPS (Figura 11).

Na simulação do problema de descarga de água, o espaçamento inicial entre as partículas (l_0) foi de 0,6 cm, o mesmo utilizado na simulação deste problema pelo método MPS, resultando num total de 1152 partículas de fluido. A distância L e o passo de tempo usados foram 14,6 cm e 10^{-4} segundos, respectivamente. A densidade de referência da água (ρ_0) na simulação foi igual a 1000 kg/m^3 e a densidade inicial, usada para calcular a distribuição inicial de pressão, foi determinada pela Equação (4.52). Para tratamento de fronteiras sólidas, foi utilizada a colisão contra obstáculo.

O cálculo da densidade foi realizado pela Equação (4.20). A pressão foi determinada pela equação de Tait (Equação 4.32). O raio de suavização utilizado foi da ordem do espaçamento inicial entre as partículas. Como função de suavização, foi utilizada a função *spline* de quinta ordem devido à sua estabilidade.

O resultado da simulação do problema de descarga de água utilizando o método SPH está apresentado na Figura 26. Analisando-se o resultado obtido, pode-se perceber que o método SPH também foi capaz de simular o efeito de alta pressão exercido sobre as partículas expelidas. No Capítulo 5, o resultado obtido pelo método SPH será comparado com os resultados obtidos pelos métodos MPS e VOF.

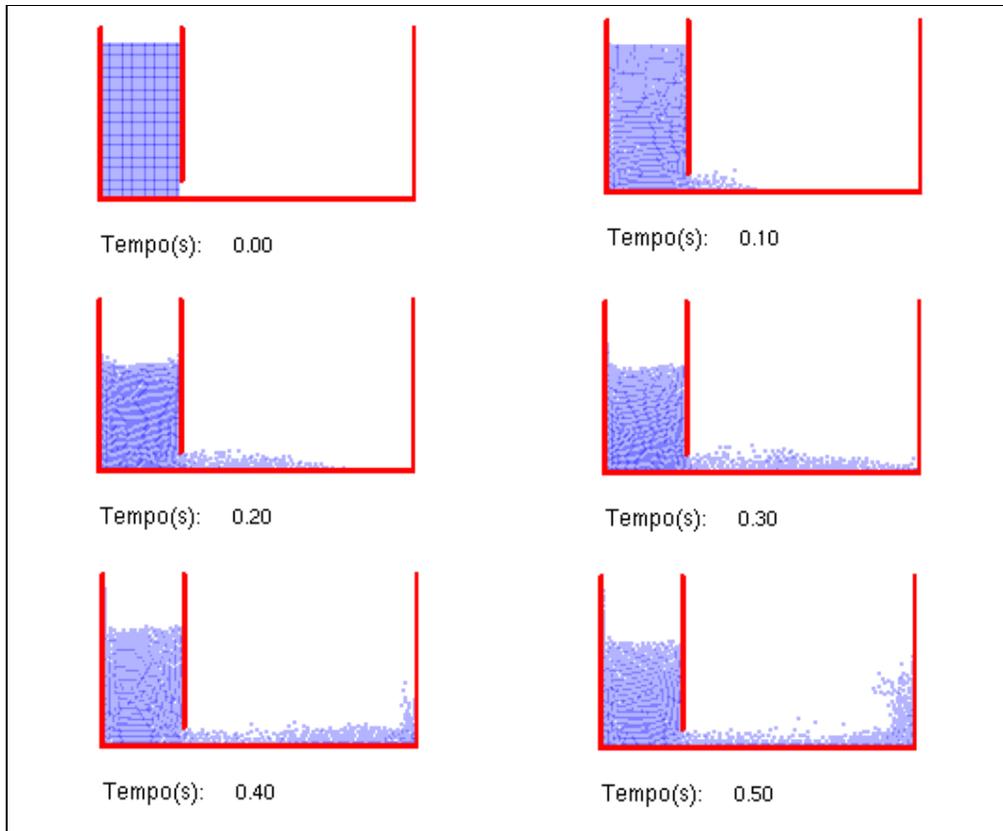


Figura 26 – Simulação do problema de descarga de água pelo método SPH.