

3 SPH

3.1 Introdução

Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) é um método puramente Lagrangiano desenvolvido por Lucy (1977) e Gingold (1977) em um estudo do campo da astrofísica voltado para colisão entre galáxias. Este método numérico tem se apresentado robusto e aplicável a uma grande variedade de outros campos de estudos tais como ondas de choque, deformações de materiais, fenômenos magnéticos, dinâmica de gases etc.

O método também é utilizado para obter soluções numéricas aproximadas de equações de dinâmica de fluidos, representando-as por um conjunto de partículas, diferentemente dos métodos Eulerianos que não utilizam partículas e sim uma grade regular, tal como o Método Diferença Finita. A principal vantagem vem diretamente da sua natureza lagrangeana, uma vez que essa aproximação lida melhor com dificuldades como falta de simetria, alto grau de deformação e o cálculo de superfície livre no fluido, que é mais eficiente que nos métodos eulerianos.

Os cálculos físicos são computados para cada partícula como uma interpolação dos valores das partículas vizinhas, através de um certo raio de influência (Figura 7), fazendo com que as partículas se movam de acordo com esses valores.

Dado que p_y é posição da partícula y e x é a posição de uma partícula e x' é a posição da partícula vizinha à esta. Denomina-se a distância r entre a partícula i e j como sendo

$$r_{ij} = p_i - p_j, \quad (3.1)$$

ou então:

$$r_{ij} = x - x' \quad (3.2)$$

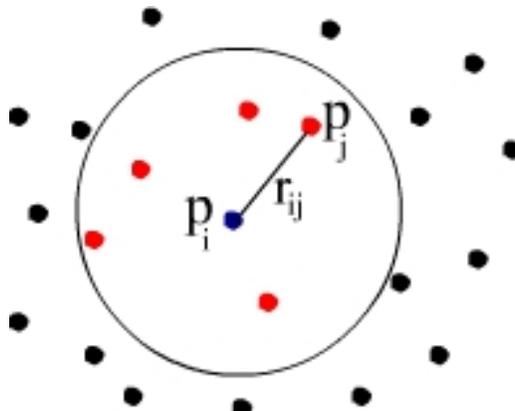


Figura 7 - Representação do raio de influência de uma partícula

As leis de conservação da dinâmica de fluidos, através de equações diferenciais parciais, são transformadas para cada partícula por equações que utilizam funções de interpolação chamadas de *kernels*. Essa interpolação é feita com a vizinhança de cada partícula amostrada pela simulação.

Na próxima seção são apresentadas as equações governantes do SPH.

3.2 Equações Governantes

Os principais recursos do SPH estão descritos em Monaghan (1982), Monaghan (1992) e Liu (2003). A formulação do SPH é frequentemente dividida em dois passos. O primeiro passo é a representação da integral. O segundo é aproximação por partículas.

Primeiramente aproximamos a função f através da integral:

$$f(x) = \int_{\Omega} f(x')W(x-x',h)dx' \quad (3.3)$$

em que h representa o tamanho da suavização.

O segundo passo é a discretização por partículas pode ser representada como:

$$f(x) = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{p_j} f(x_j)W(x_i - x_j, h) \quad (3.4)$$

em que i e j são partículas, m_j e p_j são a massa e a densidade, respectivamente e W a função de suavização.

3.3 Função de Suavização

A função de suavização, também chamada de *kernel*, tem um importante papel no método SPH, uma vez que ela é responsável pela estabilidade e precisão da simulação.

Em seu estudo, Nakamura (2007) cita as seguintes propriedades da função W :

- 1) Para garantir uma interpolação correta, a integral da função de suavização deve ser normalizada dentro do domínio de suporte, ou seja:

$$\int_{\Omega} W(x - x', h) dx' = 1 \quad (3.5)$$

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

$$W(x - x') = 0, \forall |x - x'| > \kappa h \quad (3.6)$$

dados que κ é uma constante e o domínio de suporte define a área (diferente de zero) efetiva de atuação da função.

- 3) Dependendo do tipo de problema a ser modelado, o valor da função de suavização deve ser maior ou igual a zero para qualquer ponto dentro do domínio de suporte. Isso ocorre porque não há significado físico caso a modelagem apresente o valor de $W(x - x') < 0$, como a massa de um objeto.
- 4) Partículas mais próximas de x devem influenciar mais que partículas mais afastadas. Logo, o valor de $W(x - x')$ no ponto x' deve decrescer à medida que x' se afasta de x .
- 5) As funções de suavização devem satisfazer à função delta de Dirac quando o raio de influência h tender a zero, ou seja:

$$\lim_{h \rightarrow 0} W(x - x', h) = \delta(x - x') \quad (3.7)$$

- 6) Partículas afastadas da mesma distância devem contribuir da mesma forma, logo as funções de suavização devem ser funções pares.
- 7) As derivadas dos kernels devem ser contínuas para garantir que as funções sejam suficientemente suaves.

Como o *kernel* é uma função diferenciável, podemos calcular a derivada da função f a partir dos valores das partículas, que são os pontos de interpolação. O cálculo pode ser feito com diferenciação ordinária. Logo, não há

necessidade de utilizar diferenças finitas. Temos então o cálculo da derivada, ou gradiente:

$$\nabla f(x_i) = \sum_j \frac{m_j}{p_j} \nabla f(x_j) W(x - x_j, h) \quad (3.8)$$

e do laplaciano:

$$\nabla^2 f(x_i) = \sum_j \frac{m_j}{p_j} \nabla^2 f(x_j) W(x - x_j, h) \quad (3.9)$$

A função de suavização foi calculada originalmente por Gingold e Monaghan (1977). Utilizaram uma Gaussiana, que em uma dimensão, é definida como:

$$W(x, h) = \frac{1}{h\sqrt{\pi}} e^{-(x^2/h^2)} \quad (3.10)$$

Segundo estudos de Monaghan (1992), uma função de suavização baseada em *splines* normalmente é mais eficiente computacionalmente. Porém, para se obter uma melhor interpretação física nas equações do SPH, uma função baseada numa Gaussiana apresenta melhores resultados.

3.4 Modelagem das Equações

No método SPH, o fluido é simulado respeitando 3 leis físicas: conservação de massa, de energia e de momento. Como soluções analíticas são dificilmente encontradas, lançamos mão de métodos numéricos para resolver as equações de conservação como mostrado no trabalho de Müller *et al* (2003).

Como a simulação é feita através de partículas, o número de partículas é constante assim como o valor da massa para cada partícula. Logo a conservação da massa é garantida e não precisa ser calculada. Pelo fato de tratarmos de fluidos isotérmicos, não há uma troca de energia com o meio externo, garantindo assim a conservação de energia.

O modelo matemático que descreve o comportamento de um fluido é dado por um conjunto de equações diferenciais conhecido como equação de Navier-Stokes. Simplificada para fluidos Newtonianos e incompressíveis, a conservação de momento é calculada por esta equação, devido à aplicação direta da segunda Lei de Newton. Tal equação é apresentada como:

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \vec{v} \right) = -\vec{\nabla} P + \mu \vec{\nabla}^2 \vec{v} + \rho \vec{g} \quad (3.11)$$

em que ρ é a massa específica, t é o tempo, \vec{v} é o vetor velocidade, P a pressão, \vec{g} a força da gravidade e μ a viscosidade do fluido. A explicação da escolha das funções de suavização pode ser vista no apêndice desta dissertação.

O termo não-linear $\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \vec{v}$ (chamado de aceleração convectiva) pode ser desprezado em sistemas de partículas, porque as partículas se movem com o fluido e, portanto, a convecção é diretamente incluída. Desta maneira, podemos reescrever a equação de Navier-Stokes como sendo:

$$\vec{a} = \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \frac{1}{\rho} (-\vec{\nabla} P + \mu \vec{\nabla}^2 \vec{v} + \rho \vec{g}) \quad (3.12)$$

O cálculo da massa específica de cada partícula x_i é dada através da soma das massas das partículas vizinhas x_j ponderadas pela função de suavização. Logo:

$$\rho(\vec{x}_i) = \sum_j m_j W(\vec{x}_i - \vec{x}_j, h) \quad (3.13)$$

A função de suavização utilizada por Nakamura (2007) para este cálculo foi:

$$W_{poly6}(\vec{x} - \vec{x}', h) = \frac{315}{64\pi h^9} \begin{cases} (h^2 - r^2)^3, & 0 \leq r \leq h \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (3.14)$$

A variação do momento do fluido é determinada somando as 3 forças expressas no lado direito da equação de Navier-Stokes. As forças são o campo de pressão ($-\vec{\nabla} P$), força de viscosidade ($\mu \vec{\nabla}^2 \vec{v}$) e gravidade ($\rho \vec{g}$).

3.4.1 Força de Pressão

A primeira força, que é a variação do campo de pressão de um fluido, pode ser calculada aplicando o método SPH através da equação:

$$-\vec{\nabla} P(\vec{x}_i) = - \sum_j m_j \frac{P_j + P_i}{2\rho_j} \vec{\nabla} W(\vec{x}_i - \vec{x}_j, h) \quad (3.15)$$

Foi utilizada a média das forças de pressão entre as partículas i e j para contornar o problema de falta de simetria inerente ao método SPH. Com este recurso é garantida a conservação de momento.

Para este cálculo é utilizada a seguinte função de suavização:

$$W_{spike}(r) = \frac{15}{\pi h^6} \begin{cases} (h - r)^3, & 0 \leq r \leq h \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (3.16)$$

3.4.2 Força de Viscosidade

Para o cálculo da força de viscosidade, devemos usar a equação 3.11 do método SPH, ou seja:

$$\mu \nabla^2 \vec{v}(\vec{x}_i) = \mu \sum_j m_j \frac{\vec{v}_j - \vec{v}_i}{\rho_j} \nabla^2 W(\vec{x}_i - \vec{x}_j, h) \quad (3.17)$$

A força de viscosidade também não apresenta uma simetria. Logo, Müller *et al* (2003) propuseram utilizar a diferença entre as velocidades: $\vec{v}_j - \vec{v}_i$.

O kernel utilizado na Equação 3.17 foi proposto no trabalho de Müller *et al* (2003):

$$W_{viscosity}(r) = \frac{15}{2\pi h^3} \begin{cases} \frac{-r^3}{2h^3} + \frac{r^2}{h^2} + \frac{h}{2r} - 1, & 0 \leq r \leq h \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (3.18)$$

3.4.3 Força da Gravidade

O cálculo da gravidade é usado diretamente nas partículas como força externa. Logo, não há a necessidade de utilizar o método SPH.

3.4.4 Força de Tensão Superficial

Apesar da equação de Navier-Stokes não modelar forças de tensão superficial, Nakamura (2007) implementou-as seguindo o trabalho de Müller *et al* (2003). Esta força surge devido ao desbalanceamento de forças entre as partículas. Dentro do fluido essas forças se anulam, já que há partículas por todos os lados. Na superfície não há partículas na parte externa, gerando uma força resultante chamada tensão superficial (Figura 8).

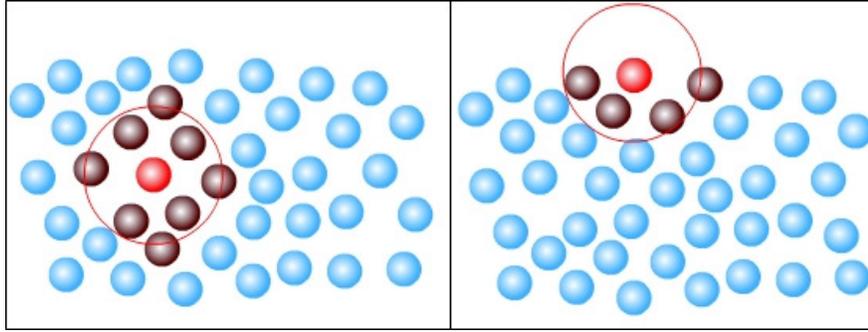


Figura 8 - Esquerda: Partícula no interior do fluido sofre forças por todos os lados. Direita: Partícula da superfície não recebe forças em todos os lados, gerando a força de tensão superficial

A força gerada para balancear as partículas da superfície atua na direção inversa à normal à superfície, ou seja, apontando para dentro do fluido.

Para a implementação da tensão superficial foi descrita uma grandeza da partícula denominada C_s , ou campo de cor. Seu valor é 1 dentro da partícula e 0 em qualquer outro lugar do domínio. O cálculo do campo de cor no fluido pode ser feito utilizando o método SPH na equação 3.4:

$$C_s(\vec{x}_i) = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} 1 \cdot W(\vec{x}_i - \vec{x}_j, h) \quad (3.19)$$

A normal da superfície do fluido é dada pelo gradiente do campo de cor, através da equação 3.8:

$$\vec{n} = \vec{\nabla} C_s(\vec{x}_i) = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} 1 \cdot \vec{\nabla} W(\vec{x}_i - \vec{x}_j, h) \quad (3.20)$$

A função de suavização, neste caso, foi a mesma para a determinação da massa específica. A normal está orientada para dentro do fluido, logo a curvatura, κ , possui um valor negativo. Ela pode ser calculada pelo Laplaciano do campo de cor:

$$\kappa = - \frac{\nabla^2 C_s}{|\vec{n}|} \quad (3.21)$$

Segundo Müller *et al* (2003), com o valor da curvatura, a força gerada pela tensão superficial que atua sobre a superfície do fluido é calculada multiplicando um valor constante σ , intensidade da tensão, pelo valor da curvatura na direção da normal, ou seja:

$$\vec{f}^{surface} = \sigma \kappa \vec{n} = - \sigma \nabla^2 C_s \frac{\vec{n}}{|\vec{n}|} \quad (3.22)$$