

Simulação de Fluidos sem Malha: Uma introdução ao método SPH

Publicações Matemáticas

Simulação de Fluidos sem Malha: Uma introdução ao método SPH

Afonso Paiva
UFU

Fabiano Petronetto
UFES e PUC-Rio

Geovan Tavares
PUC-Rio

Thomas Lewiner
PUC-Rio



27^o Colóquio Brasileiro de Matemática

Copyright © 2009 by Afonso Paiva et al
Direitos reservados, 2009 pela Associação Instituto
Nacional de Matemática Pura e Aplicada - IMPA
Estrada Dona Castorina, 110
22460-320 Rio de Janeiro, RJ
Impresso no Brasil / Printed in Brazil
Capa: Noni Geiger / Sérgio R. Vaz

27^a Colóquio Brasileiro de Matemática

- A Mathematical Introduction to Population Dynamics - Howard Weiss
- Algebraic Stacks and Moduli of Vector Bundles - Frank Neumann
- An Invitation to Web Geometry - Jorge Vitório Pereira e Luc Piro
- Bolhas Especulativas em Equilíbrio Geral - Rodrigo Novinski e Mário Rui Páscoa
- C^* -algebras and Dynamical Systems - Jean Renault
- Compressive Sensing - Adriana Schulz, Eduardo A. B. da Silva e Luiz Velho
- Differential Equations of Classical Geometry, a Qualitative Theory - Ronaldo Garcia e Jorge Sotomayor
- Dynamics of Partial Actions - Alexander Arbieto e Carlos Morales
- Introduction to Evolution Equations in Geometry - Bianca Santoro
- Introduction to Intersection Homology and Perverse Sheaves - Jean-Paul Brasselet
- Introdução à Análise Harmônica e Aplicações - Adán J. Corcho Fernandez e Marcos Petrucio de A. Cavalcante
- Introdução aos Métodos de Decomposição de Domínio - Juan Galvis
- Problema de Cauchy para Operadores Diferenciais Parciais - Marcelo Rempel Ebert e José Ruidival dos Santos Filho
- **Simulação de Fluidos sem Malha: Uma Introdução ao Método SPH - Afonso Paiva, Fabiano Petronetto, Geovan Tavares e Thomas Lewiner**
- Teoria Ergódica para Autômatos Celulares Algébricos - Marcelo Sobottka
- Uma Iniciação aos Sistemas Dinâmicos Estocásticos - Paulo Ruffino
- Uma Introdução à Geometria de Contato e Aplicações à Dinâmica Hamiltoniana - Umberto L. Hryniewicz e Pedro A. S. Salomão
- Viscosity Solutions of Hamilton-Jacobi Equations - Diogo Gomes

ISBN: 978-85-244-0302-6

Distribuição: IMPA
Estrada Dona Castorina, 110
22460-320 Rio de Janeiro, RJ
E-mail: ddic@impa.br
<http://www.impa.br>

À Dora e Waltrudes.

À Cintia.

À Giodana e Adriano.

À Debora.

Prefácio

Esse livro faz parte de um grande esforço do grupo Matmídia do Departamento de Matemática da PUC-Rio para o entendimento de estruturas discretas e suas relações com o contínuo no contexto de computação gráfica. Enquanto que as estruturas discretas fazem parte de uma matemática que podemos chamar de knuthiana (estrutura computacional de algoritmos) e é típica do século XX, a matemática contínua é euclideana (estrutura das transformações) e milenar; a relação entre essas duas estruturas está longe de ser entendida. Este esforço de entendimento da relação do discreto com o contínuo é interdisciplinar, como é também uma parte considerável de computação gráfica, e envolve várias partes de matemática: dinâmica, geometria, topologia, análise numérica e teoria dos grafos, combinadas com outras de computação: teoria de algoritmos e programação.

A partir de 2003 começamos no laboratório Matmídia da PUC-Rio um esforço para simular a dinâmica dos fluidos, via a equação de Navier-Stokes, usando o método Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) que era natural dentro do contexto que estávamos explorando em outras áreas, em particular estruturas de dados, reconstrução de superfícies e de campos de vetores discretos e representação computacional de isosuperfícies.

Em meados de 2004 começamos a desenvolver para a Petrobras um software (que é de sua exclusiva propriedade) para simular o processo de formação dos lobos turbidíticos, principal formação dos reservatórios petrolíferos brasileiros, usando a técnica SPH. Este trabalho de construção do software continua sendo desenvolvido pelo grupo Matmídia em conjunto com geólogos da Petrobras.

O Sibgrapi (Simpósio Brasileiro de Computação Gráfica e Proces-



samento de Imagens), em 2006, reconheceu o nosso esforço nos premiando como melhor artigo e melhor vídeo (júris técnico e popular) e motivou ainda mais para que continuássemos a nossa pesquisa. Isso nos expôs a comunidade de computação gráfica do Brasil, matemática e computacional, em uma área de pesquisa até então praticamente aqui inexistente.

Queremos agradecer especialmente a Cristiano Sombra, que coordenou a primeira fase do projeto com a Petrobras, e a Paulo Paraizo, que coordena agora a segunda fase, ambos do Centro de Pesquisas da Petrobras, que acreditaram no projeto e nos mantiveram dentro dos limites que proporcionam simulações de significado geológico.

Agradecemos à PUC, CNPq, Capes e Faperj, que nos financiam academicamente sempre aceitando propostas inovadoras que levam a formação de pessoal de alto nível.

Agradecemos ao 27º Colóquio Brasileiro de Matemática que, aceitando a nossa proposta, nos possibilita apresentar o assunto para um público privilegiado constituído em grande parte por matemáticos.

Agradecemos ao Departamento de Matemática da PUC-Rio por acreditar, ao longo dos últimos 25 anos, que é possível criar um grupo de pesquisas em computação gráfica que tenha uma forte componente matemática. Agradecemos aos funcionários do Departamento de Matemática, Katia, Creuza, Orlando e Otávio, pela ajuda constante, e aos colegas do laboratório Matmidia pelo companheirismo de sempre, em particular a Marcos Lage, Marcos Citeli e Hélio Lopes pelo apoio ao longo deste trabalho.

Conteúdo

1	Introdução	11
1.1	Física básica dos escoamentos	12
1.2	Desafios matemáticos	18
1.3	Abordagem com estruturas	19
1.4	Abordagem com convolução	19
1.5	Aplicações de SPH	21
1.5.1	Fenômenos naturais	22
1.5.2	Interação fluido-estrutura: fluido multifásico . .	23
1.5.3	Fenômenos multi-escalas	26
1.5.4	Interatividade	27
1.5.5	Rendering	29
1.5.6	Indústria do entretenimento	30
1.6	Estrutura do livro	31
2	Smoothed Particle Hydrodynamics	33
2.1	Contexto do método SPH	34
2.2	Formulação de SPH	35
2.2.1	Representação integral	36
2.2.2	Aproximação por partículas	40
2.3	Operadores SPH	44
2.3.1	Operadores de primeira ordem	44
2.3.2	Operador laplaciano SPH	46
2.4	Núcleos SPH	50
2.4.1	Consistência do núcleo	55
2.4.2	Consistência da aproximação por partículas . .	59



3	Dinâmica dos fluidos usando SPH	63
3.1	Navier-Stokes na forma lagrangeana	63
3.1.1	Volume de controle finito	64
3.1.2	Elemento de fluido infinitesimal	65
3.1.3	O divergente da velocidade entra em cena . . .	65
3.1.4	Equação da continuidade	67
3.1.5	Equação do momento	68
3.2	Incompressibilidade	73
3.3	Equações de governo: um resumo	75
3.4	Aproximação SPH das equações de Navier-Stokes . . .	76
3.4.1	Aproximações SPH da densidade	76
3.4.2	Aproximação SPH da equação do momento . .	77
4	Aspectos numéricos do método SPH	81
4.1	Integração temporal	82
4.1.1	Método de Euler	83
4.1.2	Integrador Leap-Frog	84
4.1.3	Estimativa de passo de tempo	86
4.2	Tratamento da fronteira	87
4.2.1	Operadores SPH na fronteira	87
4.2.2	Interação com a fronteira	90
4.2.3	Condições de contorno	92
4.3	Busca de partículas vizinhas	94
4.3.1	Força bruta	94
4.3.2	Busca em grades	95
4.3.3	Busca em estruturas adaptativas	97
4.4	Visualização da superfície livre	98
4.4.1	União de bolas	99
4.4.2	Formulação implícita	100
4.4.3	Advecção da superfície	102
4.5	Exemplo completo	103
4.5.1	Inicialização	105
4.5.2	Estimativa dos parâmetros físicos	106
4.5.3	Suavização da velocidade: XSPH	107
4.5.4	Correção numérica: viscosidade artificial	107

5	Incompressibilidade SPH	109
5.1	Pressão em fluidos incompressíveis	110
5.2	Método da projeção	111
5.3	Solução SPH da equação de Poisson	113
5.3.1	Equação de Poisson	114
5.3.2	Discretização SPH	115
5.3.3	Exemplo	117
5.3.4	Resolução do sistema	119
5.4	Método da projeção SPH	125
5.4.1	Campo de velocidade intermediário	125
5.4.2	Projeção no espaço de divergência livre	127
5.4.3	Exemplo: vortex spin-down	129
6	Aplicações	135
6.1	Fluidos viscoplásticos	135
6.1.1	Plasticidade	136
6.1.2	Fluido newtoniano generalizado	137
6.1.3	Aproximação SPH do tensor extra-tensão	139
6.1.4	Transição de fase	140
6.1.5	Exemplos	142
6.2	Decomposição de campos vetoriais	147
6.2.1	Decomposição de Helmholtz-Hodge	147
6.2.2	Algoritmo SPH de decomposição	152
6.2.3	Detecção automática de feições	157
6.3	Fluidos bifásicos	160
6.3.1	Algoritmo SPH	160
6.3.2	Resultados	164
A	Noções elementares de cálculo diferencial vetorial	171
A.1	Campos vetoriais e operadores diferenciais	172
A.2	Interpretação geométrica e teoremas integrais	177



Capítulo 1

Introdução

Em anos recentes o acoplamento de computadores poderosos e instrumentos de sensoriamento tem causado um enorme impacto na matemática aplicada, na física e nas engenharias. Essa associação faz com que temas que estavam há longo tempo sem avanços significativos, agora possam ser validados experimentalmente com um enorme grau de precisão. Assim, a física experimental troca pouco a pouco as equações diferenciais pelos modelos numéricos. Em particular em dinâmica dos fluidos, os softwares decorrentes podem ser validados seja por comparação com simulações feitas com diferentes técnicas numéricas, seja por experiências de laboratório que lhe dêem respaldo.

Na matemática aplicada tradicional, os métodos numéricos de equações diferenciais, ordinárias e parciais, se concentraram por um longo tempo em estabelecer as condições de validade para os métodos desenvolvidos ao longo de todo o século passado, ou seja, garantir que o modelo discreto solucione, no limite, a equação diferencial. Assim os métodos numéricos se tornaram de grande precisão mas foram perdendo a conexão com os fenômenos físicos que lhe originaram. Em dinâmica dos fluidos a virada do século XIX para o século XX sintetizou os grandes desenvolvimentos nos séculos anteriores em dois aspectos fundamentais: desenvolvimentos teóricos por um lado e experimentos em laboratório por outro. Nomes como Euler, Cauchy, Lagrange, Laplace, Poisson, Reynolds, Navier, Stokes, Prandtl, en-



tre muitos outros foram nomes significativos desse período. Esse é o período da hidrodinâmica física, onde se procurava combinar os aspectos de modelagem e experimentais e que hoje é parte integral do universo de dinâmica dos fluidos. O livro *Worlds of Flow* [34] é um excelente texto sobre a história desse período.

As equações que modelam a dinâmica dos fluidos, porém, mostraram os limites do cálculo diferencial para prever esses fenômenos complexos, deixando a hidrodinâmica prejudicada por décadas. Mas a partir da década de 1940, com o advento dos computadores, a simulação numérica dá grande impulso à dinâmica dos fluidos e hoje em dia é uma área de enorme importância.

Hoje, uma das principais características de dinâmica dos fluidos é a sua interdisciplinaridade [62]. Isso possibilita que pesquisadores formados nessa área possam trabalhar tanto na indústria quanto na universidade. A formação acadêmica exige que aquele interessado nessa área tenha, eventualmente, que dominar técnicas de topologia, geometria e análise acopladas a uma formação em computação científica e ciência da computação. É tal a sua importância que pesquisadores em dinâmica dos fluidos trabalham atualmente em institutos e departamentos de matemática, física, e engenharias em todo o mundo.

1.1 Física básica dos escoamentos

Os fluidos são meios contínuos para a mecânica newtoniana, com a característica de se deformar continuamente quando submetido a uma tensão de cisalhamento, não importando o quão pequena possa ser essa tensão. Os fluidos incluem os líquidos, os gases, os plasmas e, de certa maneira, os sólidos plásticos. Por não resistir a deformação, os fluidos apresentam a capacidade de escoar, também descrita como a habilidade de tomar a forma de seus recipientes. Na literatura, o menor “corpo” de fluido a ser estudado em mecânica dos fluidos é chamado de *elemento de fluido*.

O principal objetivo da mecânica dos fluidos é a procura do entendimento de como os elementos de fluido, se deslocam com seus vizinhos e influenciam tanto o comportamento local, quanto global do fluido. Com isto queremos dizer que o movimento em uma região

do fluido influencia e é influenciado por aquele das regiões vizinhas em escalas locais e globais. A resistência ao escoamento determina em boa parte o comportamento do fluido .

Para simular o escoamento de um fluido, precisamos ter uma representação físico matemática do estado dos elementos de um fluido num certo instante de tempo, que chamaremos de *partícula*. A quantidade física mais importante a ser representada é a velocidade do fluido, pois a velocidade determina não só como o próprio fluido se move, mas também como outras quantidades físicas do fluido, tais como densidade, pressão, temperatura, variam com o tempo. O modelo matemático tradicional para descrever o comportamento de um fluido é dado por um conjunto de equações diferenciais parciais (EDP's) que são deduzidas a partir das seguintes leis físicas:

- conservação do momento (segunda lei de Newton): a taxa de variação temporal do momento de um elemento de fluido é igual à resultante das forças que atuam sobre o elemento.
- conservação da massa: a massa de um elemento de fluido é invariante com o tempo.
- conservação da energia (primeira lei da termodinâmica): a taxa de variação temporal da energia em um elemento de fluido é igual a soma do fluxo de calor para dentro do elemento com o trabalho realizando por forças que agem sobre o elemento.

As energias, porém, podem provir de diversos fenômenos físicos e serem tratadas separadamente das duas primeiras leis acima na forma de um acoplamento [94].

Os três ingredientes principais na conceituação do escoamento dos fluidos são devido às forças de convecção, à pressão e à viscosidade. Os três determinam como o fluido deve se comportar em tempos futuros uma vez dada uma condição inicial e se o fluido está ou não confinado.

As forças convectivas são devidas tanto a difusão quanto a advecção. A difusão vem de forças randômicas em consequência do movimento das moléculas do fluido e, portanto é a soma de forças que se dão em escalas muito pequenas. A advecção, por outro lado, é



devida às forças que acontecem nas grandes escalas como, por exemplo, um fluido em turbulência ou submetido a uma fonte de calor.

A força que provem da pressão é expressa como gradiente da pressão usual, ou seja, a variação espacial de forças transversais ao fluido por unidade de área. Essas forças são bastante influenciadas pela densidade do fluido, assim fluidos incompressíveis tendem a ter pouca variação de pressão.

Por último, a viscosidade é um dos ingredientes que mais desafiam aqueles que fazem simulação numérica ou experimentos em laboratórios. Duas características da viscosidade que tem uma importância preponderante são a difusão e o número de Reynolds. A difusão é definida como a variação espacial do gradiente da velocidade, o chamado laplaciano da velocidade, enquanto que o número de Reynolds expressa, na média, a relação entre as forças convectivas e as de difusão.

Abordagem lagrangeana

As quantidades físicas associadas com os elementos de fluido variam com o tempo. Essas variações podem ser descritas de uma das duas formas seguintes:

1. *Descrição lagrangeana*: o fluido é representado por uma coleção de elementos de fluido onde cada elemento de fluido se move com o escoamento (figura 1.1(a)). Nessa descrição o referencial desloca-se simultaneamente com o elemento.
2. *Descrição euleriana*: ao invés de acompanharmos o movimento ao longo dos elementos de fluido, fixamos pontos \mathbf{x} no espaço e em seguida calculamos as variações das quantidades físicas do fluido nesses pontos (figura 1.1(b)). Os pontos \mathbf{x} são chamados de *coordenadas espaciais*.

Para relacionar essas descrições, precisamos primeiramente entender o movimento de um elemento de fluido que ocupa um volume finito no espaço $\Delta V \subset \mathbb{R}^3$ no instante $t = 0$. Dado um ponto $\mathbf{A} \in \Delta V$, o movimento desse elemento é descrito através das equações:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{A}, t), \quad \text{com} \quad \mathbf{A} = \mathbf{x}(\mathbf{A}, 0);$$

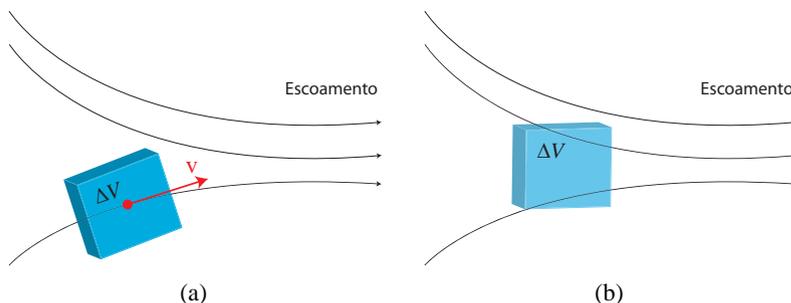


Figura 1.1: Escoamento de um fluido através de um elemento de fluido com volume ΔV : (a) Elemento de fluido se movendo ao longo de uma linha de corrente com velocidade \mathbf{v} tangente a trajetória. (b) Elemento de fluido fixo no espaço com o escoamento passando através dele.

essas equações descrevem a trajetória do elemento que, no instante $t = 0$, ocupa a posição inicial \mathbf{A} . Assim, um elemento de fluido se move ao longo da curva $t \mapsto \mathbf{x}(\mathbf{A}, t)$ com uma velocidade:

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x}(\mathbf{A}, t), t) = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t}(\mathbf{A}, t).$$

O ponto \mathbf{A} é chamado de *coordenada material* e a trajetória descrita pelo elemento de fluido é chamada de *linha de corrente*.

Se admitirmos que $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{A}, t)$ possui uma única inversa, podemos trabalhar tanto com a coordenada espacial \mathbf{x} , quanto com a coordenada material \mathbf{A} .

Dada uma quantidade física genérica do fluido q , a função $q(\mathbf{x}, t)$ nos conta o valor de q em um elemento de fluido que ocupa uma posição \mathbf{x} no instante t , lembrando que o ponto \mathbf{x} é uma coordenada espacial. Então como calcular a variação temporal dessa quantidade em um determinado elemento de fluido que se desloca com o escoamento entre os pontos 1 e 2 (figura 1.2) em um intervalo de tempo Δt ? Mais ainda, como a variação temporal de um atributo físico em um elemento de fluido em movimento se relaciona com a variação de um atributo em um ponto fixo no espaço, isto é, como a forma lagrangeana se relaciona com a forma euleriana? Para responder a



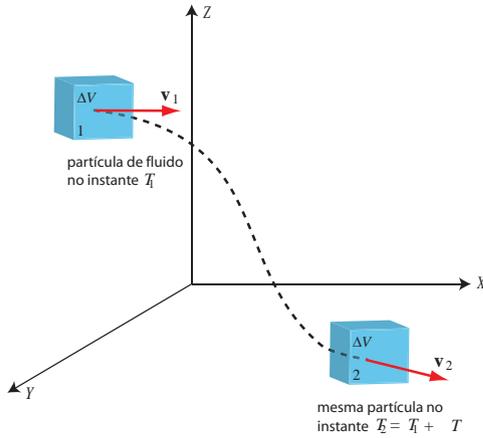


Figura 1.2: Elemento de fluido se deslocando com o escoamento.

essas perguntas vamos calcular o que definimos como derivada da função $q(\mathbf{x}, t)$ em relação ao tempo.

Usando a regra da cadeia para $q(\mathbf{x}(t), t)$ temos:

$$\begin{aligned} \frac{dq}{dt} &= \frac{\partial q}{\partial t} + \nabla q \cdot \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} \\ &= \frac{\partial q}{\partial t} + \nabla q \cdot \mathbf{v}. \end{aligned}$$

Assim, definimos a *derivada material*, *substantiva*, ou *total* de q através da fórmula:

$$\frac{Dq}{Dt} := \frac{\partial q}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla q. \quad (1.1)$$

O termo $\frac{\partial(\)}{\partial t}$ é chamado de *derivada local*. Esse termo é responsável pela variação da quantidade física em relação ao tempo num ponto fixo no espaço; o termo $\mathbf{v} \cdot \nabla(\)$ é chamado de *derivada convectiva* e ele mede a variação da quantidade física de um elemento de fluido que se move de um ponto no espaço para outro. A soma desses termos $\frac{D(\)}{Dt}$ descreve a advecção, isto é, o mecanismo de transporte

descrição euleriana	descrição lagrangeana
$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} - \frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{f}$	$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{f}$
$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\mathbf{v} \cdot \nabla \rho$	$\frac{D\rho}{Dt} = 0$

Tabela 1.1: Equações do momento (topo) e da continuidade (base) nas descrições euleriana e lagrangeana.

de uma substância ou uma propriedade conservada com um fluido em movimento.

Podemos ilustrar as descrições euleriana e lagrangeana através de um termômetro. O primeiro ponto de vista seria como se estivéssemos interessados na variação de temperatura medida por um termômetro fixo em uma parede enquanto uma brisa de ar quente passa por ele. Enquanto pelo ponto de vista lagrangeano, estaríamos interessados na medição da temperatura através de um termômetro preso em um balão meteorológico carregado pelo vento.

As descrições euleriana e lagrangeana das equações de evolução da velocidade e da densidade de um fluido com certas propriedades mostradas na tabela 1.1 são bem diferentes. A equação na primeira linha é conhecida como *equação do momento*, enquanto na segunda linha a equação é chamada de *equação da continuidade*. Em ambas descrições, euleriana e lagrangeana, \mathbf{v} é a velocidade do escoamento, ρ é a densidade do fluido, \mathbf{f} é uma força externa que age sobre os elementos de fluido (por exemplo, força gravitacional), μ é a viscosidade do fluido, ou seja a variação da capacidade de fricção entre os elementos de fluido (essa variável é determinada experimentalmente e depende do material) e a razão $\frac{\rho}{\mu}$ é o número de Reynolds, usualmente denotado por Re . As equações mostradas na tabela 1.1, em ambas as formas, euleriana e lagrangeana, são conhecidas como as equações de Navier-Stokes. No capítulo 3 mostraremos com detalhes a dedução das equações de Navier-Stokes.



1.2 Desafios matemáticos

As equações de Navier-Stokes apresentam desafios em todas as áreas em que ela é investigada: teórica, numérica, computacional, e experimental. Essa última não é abordada nesse livro.

Do ponto de vista teórico essas equações têm sido exploradas desde a primeira metade do século passado, seja sob restrições matemáticas ou físicas, seja mergulhando as equações de Navier-Stokes em um espaço mais amplo que permita encontrar soluções para todo tempo, além das condições iniciais dadas. Em geral se procuram condições que garantam diferenciabilidade, unicidade, propriedades intrinsecamente dinâmicas (existência de atratores, por exemplo) e propriedades estatísticas das soluções (importantes no estudo de turbulência). O instituto de matemática Clay estabeleceu com um de seus prêmios do milênio “provar a existência de soluções únicas diferenciáveis para todo o tempo para as equações de Navier-Stokes definidas em um domínio do espaço” [49, 52, 147].

O arsenal de técnicas de análise numérica para aproximações de equações diferenciais ordinárias e parciais foi estabelecido no século passado. Entretanto quando as equações provêm da descrição de fenômenos físicos dinâmicos suas aproximações não podem violar as leis da física, ou seja os incrementos no espaço e no tempo não estão dissociados. A condição de Courant-Friedrichs-Lewy [70] é o exemplo típico disso, para o caso de aproximações por diferenças finitas.

Do ponto de vista computacional as máquinas atuais impõem limitações de memória e precisão que fazem com que as aproximações obtidas através dos métodos numéricos funcionem limitadamente. Isto é um grande problema de otimização combinatório para evitar que o tempo de computação possa ser excessivamente longo para se obter resultados satisfatórios. A tendência mais moderna é de associar métodos de álgebra linear computacional, estruturas de dados e técnicas de visualização àquelas mais tradicionais de análise numérica para melhor compreender soluções de equações diferenciais ordinárias e parciais.

1.3 Abordagem com estruturas

A discretização das equações de Navier-Stokes na descrição euleriana é geralmente feita através de métodos numéricos que usam uma grade fixa discretizando todo o espaço da simulação (figura 1.3(a)), enquanto a descrição lagrangeana corresponde ao uso de uma malha móvel (figura 1.3(b)) ou de um sistema de partículas para discretizar somente o fluido (figura 1.3(c)).

Tradicionalmente os métodos com malha mais usados na solução de equações diferenciais parciais têm sido os de diferenças finitas e os de elementos finitos. De um modo geral se pré-estabelece uma topologia especificando que a avaliação em um ponto depende de uma maneira estruturada de avaliações em seus vizinhos. Nos métodos de diferenças finitas se define uma grade retangular fixa no espaço e a partir dela se calcula os valores em cada ponto. No método de elementos finitos interpreta-se as equações como um problema variacional num espaço de Hilbert, e aproximam-se as soluções por aquelas em espaços vetoriais de dimensão finita.

Em ambos os métodos, diferenças finitas e elementos finitos, o controle da malha é essencial em questões como adaptatividade, remalhamento, entre outros, o que faz com que o pré-processamento de dados seja uma etapa importante, mas cara, do processo. Essas questões se tornam críticas no caso de grandes deformações como acontece em dinâmica dos fluidos. Algumas referências nessas áreas são [70] para diferenças finitas, [171] em elementos finitos e [163] para uma introdução à álgebra linear computacional.

1.4 Abordagem com convolução

Os métodos sem malha começaram com Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) proposto por Gingold e Monaghan [58] e Lucy [105], originalmente inventado para modelar fenômenos astrofísicos. Desde então, e principalmente a partir de sua aplicação em simulação de fraturas, esse método induziu várias áreas de pesquisas no que hoje se chama genericamente de métodos sem malha em equações diferenciais parciais.



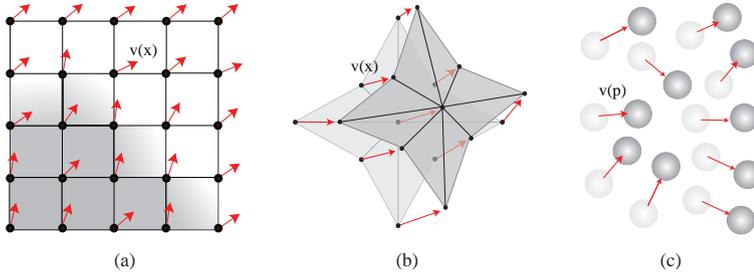


Figura 1.3: Discretização euleriana (a) com campo de velocidade $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ nos vértices \mathbf{x} da grade. A região cinza representa o fluido. Representações lagrangeanas: (b) discretização utilizando uma malha com campo de velocidade $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ nos vértices \mathbf{x} da malha; (c) discretização através de um sistema de partículas com campo de velocidade $\mathbf{v}(\mathbf{p})$ nas partículas \mathbf{p} do sistema.

A principal ideia nessa classe de métodos é obter soluções precisas e numericamente estáveis para EDP através de um conjunto de partículas sem o uso de qualquer malha que forneça a conectividade entre essas partículas. Cada partícula, pode representar diretamente um objeto físico ou uma parte de todo o sistema contínuo.

Após a discretização espacial, a discretização numérica é obtida usando as informações em todas as partículas através de médias locais, ou seja, convoluções. Nesse intuito, a principal ferramenta utilizada é um teorema de integração, que garante com condições simples sobre o núcleo de convolução W , que:

$$\frac{1}{h^n} f * W \left(\frac{x}{h} \right) \rightarrow f(x)$$

podendo assim aproximar

$$f(x_i) \approx \sum_{j, \|x_i - x_j\| \leq r_i} W(x_i - y_j) f(x_j) \Delta V_j$$

ou seja a avaliação de f em um ponto é uma média de pontos vizinhos ponderadas pela função W e pela porção de volume que representa ΔV .

A interface com outros métodos numéricos tem proporcionado aos métodos sem malhas expansões em várias direções. Só para citar alguns temos:

- Reproducing kernel particle method (RKPM) [103];
- Meshless local Petrov Galerkin (MLPG) [6, 5];
- hp-clouds [42];
- Particle-in-cell (PIC) [31];
- Moving particle semi-implicit (MPS) [82].

O site http://en.wikipedia.org/wiki/Meshfree_methods lista vários métodos relacionados com o SPH.

As principais referências em métodos sem malha são [13, 92, 94]. Em particular, um excelente tutorial de SPH foi escrito por Monaghan [115] e uma visão geral desse método e suas aplicações em astrofísica, geologia, engenharia e outras pode ser encontrado no excelente site do grupo SPHERIC: <http://wiki.manchester.ac.uk/spheric/>. Existem ainda algumas implementações em software livre de SPH, <http://www.rchoetzlein.com/eng/graphics/fluids.htm> e <http://www.itm.uni-stuttgart.de/research/pasimodo/>.

1.5 Aplicações de SPH

Os métodos sem malha utilizados para modelar fluidos contribuem ao grande esforço para o entendimento do que chamamos modelagem de objetos pontuais – aqueles gerados a partir de medições. Esse tipo de modelagem se evidencia a partir meio da década de 1970 com simulações em astrofísica e se intensifica na década de 1990 com aplicações em engenharia mecânica e civil. Neste período começaram a aparecer comercialmente *scanners* de alta definição, difundindo sensores de pontos 3D e câmeras fotográficas de alta definição, que podem gerar modelos pontuais precisos em poucos instantes. Assim, nos últimos anos o uso dos métodos sem malha em computação gráfica representa uma linha de pesquisa promissora e seu uso em filmes comerciais tem lhe dado destaque.



As aplicações do método SPH precisam integrar áreas de matemática e computação que são significativas por si mesmas, em particular:

- equações diferenciais numéricas,
- dinâmica dos fluidos,
- estrutura de dados,
- método de busca,
- aproximação geométrica,
- representação de superfícies implícitas discretas,
- rendering.

Além disso, uma grande vantagem do método SPH é a facilidade de acoplar fenômenos, sendo assim apropriado para tratar de fluidos multi-fásicos, interface fluido-sólido, fluidos muito viscosos e grandes deformações de sólidos. A modelagem de fenômenos naturais, ou seja, aqueles que ocorrem na natureza tem sido, desde o início do uso de método SPH em computação gráfica, frequente. Um grande potencial do método, entretanto, é integrar escalas diferentes, como, por exemplo, a mesoescala (aquela em que vivemos) e a microescala (a escala atômica), o que abre a possibilidade de uma maior integração dos métodos sem malha e aqueles com malha. Finalmente, a facilidade de modelagem oferecida pelo método SPH atraiu muitas aplicações fora da simulação física precisa, em particular nas indústrias de jogos e de cinema.

1.5.1 Fenômenos naturais

A modelagem de fenômenos naturais tais como fogo, fumaça, lava, cabelo, materiais granulares, bolhas, sangue, e outros têm no método SPH um ambiente de simulação. Assim começou o uso do método SPH em computação gráfica, na década 1990, com os trabalhos, apresentados no Siggraph de 1995, em simulação de lava, e em geral de objetos deformáveis, feita por Desbrun e Cani [36] e a modelagem de fogo, fumaça e fenômenos gasosos em geral, por Stam e



Figura 1.4: Exemplos de materiais viscoplásticos: derretimento de uma vela de cera e o escoamento de lava no *Pão de Açúcar*.

Fiume [152]. Com isso chama-se atenção da comunidade de computação gráfica sobre a possibilidade de se usar um método sem malha para modelar fenômenos que podem ser de execução mais difícil quando feita com métodos com malha. Em 2001, Hadap e Magnenat-Thalmann modelaram a dinâmica do cabelo humano [63]. Em [125] a simulação de lava, de fato uma lâmpada de lava, comum nas lojas de decoração, é revisitada e simulada usando SPH produzindo um agradável efeito visual. Em 2009, Paiva, Petronetto, Tavares e Lewiner [133, 130, 135] utilizaram uma abordagem SPH no contexto de fluidos não-newtonianos para simular, além de lava, objetos que derretem sobre o efeito da temperatura e que sofrem grande deformações (figura 1.4). Essa abordagem é discutida com detalhes no capítulo 6 do presente livro.

1.5.2 Interação fluido-estrutura: fluido multifásico

O entendimento da interação fluido-estrutura, seja essa estrutura fluida, líquida ou gasosa, é um grande desafio em dinâmica dos fluidos. A importância dessa interação vem não somente de seus aspectos teóricos, mas também da vasta gama de aplicações que ela proporciona. Em aplicações desempenham papel de destaque as indústrias aeronáutica, turbo-mecânica, naval, metalúrgica e na indústria do petróleo. Na indústria aeronáutica o comportamento do ar em torno dos aerofólios quando são sujeitos à grandes mudanças de temperatura e pressão; na indústria naval o impacto de ondas marítimas em cascos de navios; na indústria de turbo-máquinas, o *design* de peças



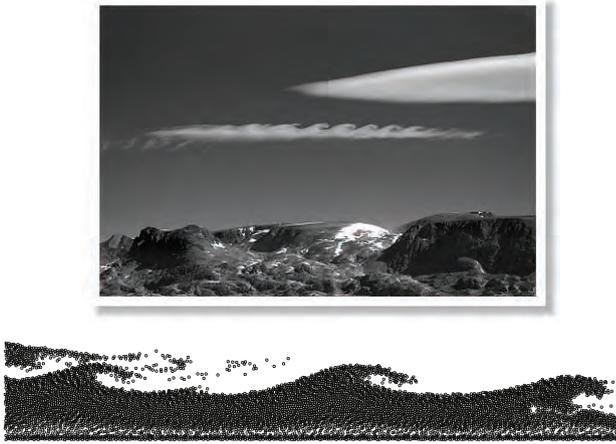


Figura 1.5: A instabilidade de Kelvin Helmholtz em fluidos bifásicos é reproduzida pelo método da projeção SPH descrito no final do livro.

devem levar em conta vários aspectos tais como altas temperaturas e turbulência; na indústria do petróleo a existência de falhas e fraturas em ambientes geológicos tem na escala macroscópica a mesma importância que fluidos em meios porosos na escala microscópica. Recentemente, a área de meio-ambiente vem apresentando vários desafios principalmente devido a emissão de gases, com suas consequências na poluição de cidades e rios, e a formação de tsunamis, erupção de vulcões, colapso de represas e queda de barreiras e com sua interferência na estrutura costeira dos continentes e na vida nas cidades [129, 126, 108].

Fluidos multifásicos são de difícil modelagem, a começar porque não se tem uma definição precisa do seu significado nem equações físicas claras descrevendo a interação das fases. Por exemplo, distingui-los de mistura ou determinar quando um fluido multifásico transforma-se, por reações químicas, em um único fluido é uma tarefa complicada. É aqui onde se encontram os maiores desafios e as maiores oportunidades de usar esse tipo de técnica de modo convincente. Podemos usar fluidos multifásicos como estruturas físicas que interagem umas com as outras em um dado ambiente mantendo as

suas próprias características.

Simulação com SPH tem como um de seus principais trunfos poder lidar facilmente com fluidos multifásicos, aqui entendido como o estudo da evolução temporal da interação fluido-estrutura. Em SPH, é simples representar diferentes fases, por exemplo, associando a cada partícula uma única fase e as propriedades físicas relativas. Com isso é possível saber em um dado momento como está se comportando cada uma das partículas dos fluidos envolvidos numa simulação.

Os problemas centrais e inter-relacionados, em fluidos multifásicos, são como definir apropriadamente as noções de:

- densidade das partículas,
- forças de pressão,
- forças de tensão superficial.

A principal característica da densidade para fluidos multifásicos é que ela é uma função descontínua. Esse fato apresenta um dos grandes obstáculos para métodos sem malha, onde remalhamento e/ou adaptatividade são necessários para capturar a fronteira de regiões pertencentes a diferentes fluidos. Hu e Adams [72] criaram um método SPH para simular escoamentos de fluidos multifásicos, onde se leva em conta essa descontinuidade durante interação entre os fluidos em escala tanto microscópica quanto mesoscópica. Posteriormente, esse método foi estendido por Solenthaler e Pajarola [148] para animar fluidos imiscíveis.

Para a interação fluido-sólido é preciso se levar em consideração que sólidos se movimentam no espaço de forma mais restrita: por movimentos rígidos. Portanto, para esse tipo de interação temos que levar em conta duas estruturas para acomodar os sólidos que tem viscosidade infinita. Um esquema híbrido euleriano-lagrangeano foi proposto por Carlson *et al.* em [20], o qual inspirou Solenthaler e Pajarola [150] a desenvolverem um método de animação envolvendo interações entre corpos rígidos e fluidos no contexto SPH. Nesse trabalho, eles criaram um método unificado de interação fluido-sólido, e onde acomodou em um único modelo a elasticidade e viscoplasticidade de materiais, admitindo distinção e fusão de materiais.



No método SPH, usualmente a pressão é obtida através de uma equação de estado [10], que é uma fórmula explícita para se calcular a pressão. Essa fórmula é, entretanto típica de fluidos compressíveis, como os gases. Nesse livro empregamos as equações de estado para simular escoamentos de fluidos quase-incompressíveis. Porém, obter a pressão através de uma equação explícita em simulações de escoamentos de fluidos multifásicos não é possível devido a descontinuidade da densidade na interface entre os fluidos. Para contornar esse problema, podemos utilizar o método da projeção em escoamentos de fluidos incompressíveis [26], então a pressão em cada passo de tempo é obtida implicitamente satisfazendo uma equação de Poisson, de tal forma que a descontinuidade da densidade não comprometa a simulação [137]. O cálculo da pressão é fundamental na simulação de instabilidades, em particular aquelas que ocorrem sejam por diferenças de velocidades ou de densidades entre os fluidos (figura 1.5). Recentemente, Solenthaler e Pajarola [149] introduziram um esquema preditor-corretor para calcular a densidade, consequentemente a pressão, com uma ordem de precisão maior.

A simulação da tensão superficial tem sido um dos pontos mais delicados de simular em dinâmica dos fluidos. Morris em [122], introduziu na literatura de SPH um método para calcular a tensão superficial entre fluidos, o qual foi refinado mais tarde por Hu e Adams em [73]. Um dos problemas no estudo da tensão superficial é o cálculo da curvatura que aparentemente é multiescala.

1.5.3 Fenômenos multi-escalas

Um caso importante de multi-escala são os escoamentos em meios porosos, particularmente na extração de petróleo. Um meio poroso finito é caracterizado pela relação entre o volume do espaço vazio, os poros, e todo o volume do espaço preenchido. Em um trabalho recente [89], usou a lei de Darcy como elemento essencial em uma escala macroscópica para a simulação de materiais como esponja ou tecidos que absorvem água. Podemos citar também o trabalho de Tong *et al.* [90], onde é feito uma mistura de fluidos e materiais granulares como areia.

Outro fenômeno físico explorado recentemente com o método descrito nesse livro é o de erosão geológica, de fato, erosão hidráulica.

Quando um rio corre sobre uma formação rochosa a erode e assim há uma modificação desse ambiente pela troca de sedimento entre o fluido e essa formação. Em [83] um modelo híbrido combinando SPH com uma grade euleriana é explorado para simular o fenômeno de erosão hidráulica.

A simulação multiescala com SPH, embora já apontada pelos engenheiros no contexto de limites numéricos do método dos elementos finitos, já começa a ser explorada pela comunidade de computação gráfica para simulação de bolhas como um ambiente misto de euleriano e SPH [71], onde as pequenas bolhas são simuladas com SPH, em um ambiente de simulação euleriano com uma malha mais grossa.

1.5.4 Interatividade

Os métodos SPH ganharam muito espaço em áreas que precisam de simulações visualmente corretas para um baixo custo computacional, tipicamente em jogos ou em filmes de animação. Isto implica diversos desafios, distintos da simulação física exata, em particular:

- usar o menor número de partículas possível,
- otimizar o contexto numérico, com o objetivo de dar o mínimo possível de passos no tempo,
- manter a estrutura de busca local com custo baixo,
- usar algoritmos de colisão eficientes na fronteira de simulação,
- aproveitar hardwares disponíveis, como placas gráficas.

Usar um número mínimo de partículas representa um sério desafio a modelagem de fluidos com SPH. O problema principal é como manter a simulação fisicamente aceitável enquanto se controla o número de partículas de modo que a simulação se dê a taxas próximas da interatividade. Um dos métodos pioneiros nessa área é proposto por Müller *et al.* [123], onde usa-se uma variação do método SPH para conseguir taxas interativas.

Nesse livro e em [135], incluímos um algoritmo geométrico para colisões que consegue melhorar a realidade física e ao mesmo tempo





Figura 1.6: O modelo Stanford Bunny sofre uma grande deformação após colidir contra a face de David. Imagem retirada de Paiva *et al.* [135].

diminuir o custo computacional. Este tipo de algoritmo acelera consideravelmente simulações em domínios com topologia complexa (figura 1.6). Aqui também usamos uma estrutura de dados mais eficiente do que a tradicional octree e com isso mantemos o uso de memória constante. A programação em placas gráficas (GPUs) do método SPH é uma área de pesquisas inovadora. Embora no início tenha-se programado os algoritmos de busca em CPU, mais recentemente se faz todo o processo em GPU [65]. Mais recentemente adaptividade e rendering foram acrescentados a todo o processo para dar grande realismo a programação do método em placa gráfica [167, 168].



Figura 1.7: Ilustrações dos modelos complexos: skull (esquerda), gargoyle (meio) e uma superfície mínima de Scherk, geradas utilizando o método baseado no modelo físico de escoamento de fluidos com SPH. Imagem retirada de Paiva *et al.* [131].

1.5.5 Rendering

Em computação gráfica, cada vez mais as técnicas de rendering para geração de imagens de alta qualidade e com aparência de ilustrações feitas à mão tem ganhado espaço principalmente em aplicações que envolvem a utilização de efeitos artísticos na geração de ilustrações médicas ou na criação de maquetes eletrônicas.

Existem diversas técnicas de se criar um render não foto-realista, uma delas é baseada em ilustrações com hachuras, técnica conhecida como *hatching*. Usualmente, o *hatching* é feito através do cálculo de campos vetoriais sobre a malha triangular da superfície do modelo de entrada utilizando quantidades diferenciais da geometria diferencial clássica [68, 142], tais como, caminhos geodésicos, campos de curvaturas principais e normal. Entretanto, o cálculo dessas quantidades requer que a malha de entrada tenha uma triangulação da superfície cuidadosamente gerada.

Um dos primeiros trabalhos a combinar rendering e SPH foi proposto por Paiva *et al.* em [131]. Eles criaram um novo método puramente físico de *hatching* de superfícies com geometria complexa e topologia arbitrária inspirado em simulação de escoamento de fluidos utilizando SPH (figura 1.7). Ao contrário dos métodos tradicionais, a geometria diferencial foi substituída por uma abordagem física, em



outras palavras, o campo vetorial é calculado utilizando quantidades diferenciais de um escoamento de fluido (por exemplo, velocidade). A vantagem dessa abordagem é a de permitir processar objetos sem estrutura, como sopa de triângulos.

1.5.6 Indústria do entretenimento

Nas últimas décadas, a demanda por animações visualmente realistas tem encorajado a indústria do entretenimento (*games* e cinema) a pesquisar e desenvolver métodos computacionais para simular fenômenos físicos complexos. Muitos desses trabalhos se concentram na simulação de escoamento de fluidos. Durante o lançamento do filme *Shrek*, quando perguntado qual foi a cena mais difícil de ser filmada durante a produção de *Shrek*, o presidente e produtor do estúdio *DreamWorks*, Jeffrey Katzenberg, respondeu: “despejar leite em um copo”.

Recentemente, simulações de escoamento de fluidos usando SPH se tornaram bastantes populares na indústria cinematográfica de efeitos especiais graças ao programa *RealFlow*TM, desenvolvido pela empresa *Next Limit* (<http://www.nextlimit.com>). O *RealFlow*TM foi utilizado em simulações de escoamentos de fluidos nos filmes: *Senhor do Anéis: O Retorno do Rei*, *Poseidon*, *A Era do Gelo 2* e *X-MEN 3*. Em 2008, a famosa academia de cinema responsável pelo Oscar (AMPAS), concedeu um prêmio técnico pela contribuição científica na indústria do cinema aos fundadores da *Next Limit* pela criação do *RealFlow*TM.

1.6 Estrutura do livro

Os métodos SPH permitem ligar equações diferenciais da física com uma solução aproximada no computador. Este livro tenta seguir este laço, começando pelos fundamentos matemáticos até as aplicações em simulação físicas.

No capítulo 2, a teoria da aproximação SPH está brevemente exposta, onde são apresentados alguns operadores de cálculo diferencial no mundo SPH, suas variações e as escolhas de modelagem matemática decorrentes.

Com esta ferramenta diferencial, é possível re-escrever as equações fundamentais da física dos fluidos: as equações de Navier-Stokes. No caso SPH, isto é adequado na sua formulação lagrangeana, como descrito no capítulo 3.

A formulação obtida substitui o cálculo diferencial usado pela física clássica pelo cálculo discreto. Apesar disto ser mais adaptado para simulação numérica, não deixa de carregar desafios matemáticos para adequar as equações discretas, o seu significado físico, a convergência para o modelo diferencial e a realidade computacional (capítulo 4).

Um caso fundamental desta adequação é o cálculo da pressão, em particular para fluidos incompressíveis. A propriedade de incompressibilidade tem um significado tanto físico (conservação da massa), quanto matemático (campo de velocidade solenoidal), além de ser um desafio computacional de assegurar essa propriedade contínua. No capítulo 5 é apresentado o método da projeção SPH para resolver a pressão, ilustrando esta pluridisciplinaridade de problemáticas dentro do contexto SPH.

Finalmente, no capítulo 6, exemplificamos os conceitos e técnicas apresentados com aplicações em simulação de fluidos, desde ferramentas de compreensão de escoamentos através da decomposição de Helmholtz-Hodge em SPH até a simulação de fenômenos físicos complexos como, por exemplo, viscoplasticidade e fluidos bifásicos.

O texto comporta alguns exercícios para verificar o acompanhamento do leitor, além de um pequeno apêndice de cálculo diferencial vetorial contendo as principais fórmulas de cálculo usadas no livro. Indicamos ainda que as figuras coloridas estão disponíveis eletronicamente, no endereço <http://www.matmidia.mat.puc-rio.br>



na seção “Educação”. Os autores deste livro estão a disposição do leitor para qualquer esclarecimento, dúvida, sugestão, e podem ser encontrados fisicamente ou eletronicamente nas seguintes instituições: Afonso Paiva (Universidade Federal de Uberlândia), Fabiano Petronetto (Universidade Federal do Espírito Santo), Geovan Tavares e Thomas Lewiner (Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro).

Finalmente, o leitor pode usar este livro como *flick book*, virando as páginas para ver uma simulação de quebra de represa no canto inferior das páginas, reproduzidas em maior tamanho na figura 1.8.

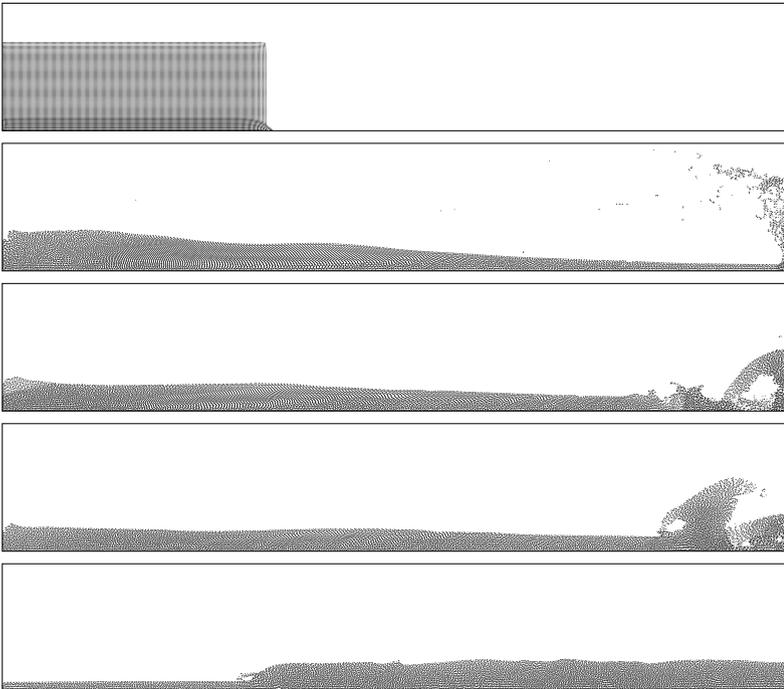


Figura 1.8: Simulação SPH de quebra de represa d’água com 20.700 partículas, usando colisão geométrica e equação de estado para o cálculo da pressão.

Capítulo 2

Smoothed Particle Hydrodynamics

Soluções numéricas de equações diferenciais parciais (EDP's) são hoje de suma importância em áreas aplicadas, tais como engenharia, meteorologia, oceanografia e geologia, por auxiliarem na compreensão de uma ampla gama de fenômenos naturais modelados matematicamente por um conjunto de EDP's.

Dada a importância e abrangência dessas equações, existe um grande interesse na comunidade científica por estudos teóricos e experimentais que possam auxiliar em solucioná-las. A maior parte desses estudos teóricos considera hipóteses idealizadas, onde os fenômenos físicos relacionados às equações são tratados de forma isolada e simplificada [50, 74].

Como alternativa, os estudos experimentais são utilizados para a compreensão de aspectos globais dos fenômenos. Devido à complexidade desses fenômenos, porém, torna-se inviável a reprodução de vários fenômenos naturais. Além disso, alguma variável importante do problema físico pode não ser diretamente observada ou medida na baixa escala do modelo experimental.

Uma terceira opção na busca da compreensão desses fenômenos é a modelagem numérica das equações que descrevem os mesmos. Recentemente tem havido um grande interesse nessa abordagem, princi-



palmente pelo aumento da capacidade de processamento dos computadores e pelo desenvolvimento de códigos computacionais eficientes em obter soluções numéricas para essas equações.

A modelagem numérica aproxima operações diferenciais, presentes nas EDP's que modelam o problema, em representações discretas. Com isso, o conjunto de EDP's é aproximado por um conjunto de equações algébricas ou de equações diferenciais ordinárias (EDO's), os quais podem ser resolvidos usando conhecidas rotinas numéricas.

O propósito desse capítulo é a formalização do método numérico, utilizado para a modelagem numérica das equações diferenciais parciais, conhecido como SPH, “hidrodinâmica de partículas suavizadas”, do acrônimo inglês *Smoothed Particles Hydrodynamics*.

2.1 Contexto do método SPH

Desde sua introdução para resolver problemas astrofísicos em 1977 nos trabalhos de Lucy [105] e Gingold e Monaghan [58], o método SPH tem sido estudado e estendido para modelar uma maior variedade de problemas, incluindo, além de problemas astrofísicos [16, 88, 136], problemas em hidrodinâmica [1, 113, 120, 158, 169] e mecânica dos sólidos [85, 140].

A discretização no método SPH é dada por um conjunto de partículas, definidas como pontos no espaço, aos quais também associamos outras propriedades individuais relacionadas a física do fenômeno simulado, tais como temperatura, densidade, etc. Em um dado ponto do domínio, cada função ou uma de suas derivadas parciais envolvidas nas EDP's é aproximada por uma média ponderada de contribuições dadas por partículas que estão próximas ao ponto.

Assim, no método SPH, o estado de um sistema é totalmente representado por um conjunto de partículas, isto é, além de representar o objeto da simulação (fluido, sólido ou gasoso) amostrando as propriedades físicas, as partículas também são utilizadas como a estrutura computacional para calcular as aproximações necessárias para obter uma solução numérica para o problema. Além disso, em SPH a massa do sistema é trivialmente conservada, ou seja, o problema de difusão numérica presente nos métodos eulerianos não ocorre em SPH.

Mais ainda, como não é necessária nenhuma conectividade pré-definida entre as partículas da discretização, o método SPH é bastante atrativo para vários problemas onde outros métodos tradicionais encontram grandes dificuldades. Podemos citar como exemplos dessas dificuldades, no método de elementos finitos (MEF) [170] em simulações de fenômenos hidrodinâmicos, tais como explosão e impacto em alta velocidade, que possuem características especiais (grandes deformações do objeto, fronteiras deformáveis,...) que levam a grandes deformações na malha utilizada; e no método de diferenças finitas (MDF) [2] em simulações cujo domínio tem uma geometria complexa ou, simplesmente, irregular. Algumas aplicações do método SPH aos problemas citados são: impacto em alta velocidade [66, 76], explosão [93, 98, 154, 155] e simulações com geometrias complexas [84, 158].

Por último, outra característica atraente de SPH é a combinação da formulação lagrangeana com as partículas em simulações de escoamentos de fluidos. Ao contrário de outros métodos que não usam malhas [47, 56, 161], nos quais os elementos da discretização (nós ou partículas) são somente usados como pontos de interpolação, as partículas no método SPH também carregam propriedades físicas, movendo-se em função das interações entre si e de forças externas, e guardando toda a dinâmica do escoamento. Em particular, em simulações de escoamentos de fluidos, o método SPH captura facilmente a superfície livre ou a interface entre dois fluidos, tarefa esta bastante difícil ao utilizar métodos com malhas.

O método SPH, sendo um método de discretização por partículas, sem uso de malha e de formulação lagrangeana, tem sido usado em diferentes áreas para várias aplicações práticas. A formulação mais detalhada do método SPH será descrita nas próximas seções. Uma revisão de métodos sem malhas e/ou métodos de partículas é encontrado no trabalho de Li e Liu [92]. Em particular, vários outros trabalhos revisam o método SPH, destacando-se entre eles os de Benz [14] e de Monaghan [112].

2.2 Formulação de SPH

Nesta seção descrevemos a formulação básica do método SPH em duas etapas: a *representação integral* e a *aproximação por partículas*.



Na primeira etapa, a convolução entre uma função arbitrária e uma função núcleo suave define uma *representação integral* de uma função. A representação integral de uma função é então aproximada por uma soma em um conjunto de partículas, a qual é geralmente chamada na literatura por *aproximação por partículas*.

2.2.1 Representação integral

Representação integral de uma função

Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ o domínio do problema e f uma função qualquer definida em Ω

$$f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^m .$$

A representação integral da função f é definida como a convolução da função f por uma função suave $W^h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$

$$f^h(\mathbf{u}) \doteq \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} . \quad (2.1)$$

A função W^h é conhecida na literatura por *núcleo*. O índice h visto na definição acima não é apenas uma notação. Veremos mais adiante que os núcleos utilizados em SPH possuem h como um parâmetro de extrema importância.

A definição (2.1) é muitas vezes motivada pelo delta de Dirac. O delta de Dirac pode ser vista como uma distribuição $\delta(x)$ com

$$\delta(x) = 0, \text{ se } x \neq 0$$

e satisfazendo

$$\int_{\mathbb{R}} \delta(x) dx = 1 .$$

Essa definição, embora heurística, não deve ser tomada com rigor, principalmente porque nenhuma função pode ter as propriedades acima. De acordo com a teoria de integração de Lebesgue, se duas funções mensuráveis $f(x)$ e $g(x)$ são tais que $f(x) = g(x)$, exceto em um conjunto de medida nula ($\{0\}$), então $f(x)$ é integrável se, e somente se, $g(x)$ é integrável, e as integrais são iguais. Por isso, basta

observar que $f(x) = \delta(x)$ e $g(x) = 0$ são iguais, exceto em $x = 0$, e diferem nos valores de sua integração. Uma definição rigorosa do delta de Dirac requer conceitos de teoria da medida [9, 75].

O núcleo W^h , além de suave, deve satisfazer outras condições, que serão descritas no decorrer dessa seção. A princípio, de maneira mais rigorosa, deve-se existir $W^1 : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ tal que

$$W^h(\mathbf{x}) = \frac{1}{h^n} W^1\left(\frac{1}{h}\|\mathbf{x}\|\right), \quad (2.2)$$

onde n é a dimensão do problema, h é um número positivo e W^1 é uma função diferenciável, com suporte compacto e integral unitária. Uma família $\{W^h\}$ de funções diferenciáveis, com suporte compacto e integral unitária, é dita uma *aproximação da identidade*. Nesse caso:

$$\lim_{h \rightarrow 0} \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = f(\mathbf{u}). \quad (2.3)$$

O núcleo W^h na representação integral (equação 2.1) é escolhido no método SPH satisfazendo (2.2) e, portanto, tendo as seguintes propriedades:

1. compacidade

$$W^h(\mathbf{x}) = 0 \text{ quando } \|\mathbf{x}\| > \kappa h \quad (2.4)$$

2. normalização

$$\int_{\mathbb{R}^n} W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = 1 \quad (2.5)$$

Na condição de compacidade (equação (2.4)), o domínio efetivo (não-nulo) do núcleo W^h no ponto $\mathbf{u} \in \Omega$ é definida por

$$V(\mathbf{u}) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n ; \|\mathbf{x} - \mathbf{u}\| \leq \kappa h\} \quad (2.6)$$

e chamada de *suporte compacto* do núcleo no ponto \mathbf{u} , ou simplesmente de *suporte compacto* de \mathbf{u} , e é definida pelo *comprimento suave* h e pelo fator de escala κ associado ao núcleo.



Representação integral da derivada de uma função

Dada uma função $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^m$, definida em um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, para obtermos a representação integral de um operador diferencial da função f , utilizaremos o conceito de representação integral visto na seção anterior (equação 2.1), a condição de compacidade do núcleo W (equação 2.4) e o teorema de Gauss (ver Apêndice A).

Ao utilizar o conceito de representação integral (equação 2.1) para o operador diferencial $\nabla \cdot$ aplicado a função f obtemos

$$(\nabla \cdot f)^h(\mathbf{u}) \doteq \int_{\Omega} \nabla \cdot f(\mathbf{x}) W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} \quad (2.7)$$

Daí, usando a regra de derivação do produto

$$\nabla \cdot [f(\mathbf{x}) W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x})] = W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) \nabla \cdot f(\mathbf{x}) + f(\mathbf{x}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x})$$

reescrevemos a equação (2.7) da seguinte forma

$$\begin{aligned} (\nabla \cdot f)^h(\mathbf{u}) &= \int_{\Omega} \nabla \cdot [f(\mathbf{x}) W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x})] d^n \mathbf{x} \\ &- \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x}. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Pelo teorema de Gauss (apêndice A.2) o fluxo de um campo vetorial f através de uma superfície fechada S é igual ao divergente de f sobre a região R limitada por S . Portanto, usando-o na primeira integral na equação (2.8), temos

$$\begin{aligned} (\nabla \cdot f)^h(\mathbf{u}) &= \int_{\partial\Omega} [f(\mathbf{x}) W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x})] \cdot \mathbf{n} dS \\ &- \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

onde \mathbf{n} é o vetor normal (unitário e exterior) à superfície fechada $\partial\Omega$.

Como o núcleo W^h é definido tendo suporte compacto, a integral de superfície na equação (2.9) é nula, exceto nos pontos cujo o suporte compacto contém pontos da superfície $\partial\Omega$. Portanto, para os pontos cujo suporte compacto está totalmente contido no domínio do problema, a equação (2.9) é simplificada da seguinte forma

$$(\nabla \cdot f)^h(\mathbf{u}) = - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x}. \quad (2.10)$$

Se o suporte intersecta a fronteira S do domínio, a integral de superfície na equação (2.9) pode ser não-nula. Sobre tais circunstâncias, isto é, se assumimos a equação (2.10) válida também nesses pontos, modificações devem ser feitas para avaliar os efeitos na superfície do domínio de integração. Veremos no capítulo 4 algumas alternativas para compensar a deficiência na aproximação em pontos próximos a superfície.

Seguindo o mesmo raciocínio, podemos obter a representação integral para o gradiente de uma função escalar, dada por

$$(\nabla f)^h(\mathbf{u}) = - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x}. \quad (2.11)$$

Nas equações (2.10) e (2.11), notamos que a operação diferencial na função f é substituída por uma operação diferencial no núcleo W^h , onde o índice \mathbf{x} no operador diferencial ∇ representa a variável na qual é realizada a diferenciação. Em outras palavras, a representação integral da derivada de uma função segue os valores da função e da derivada espacial do núcleo, ao invés da derivada da própria função.



2.2.2 Aproximação por partículas

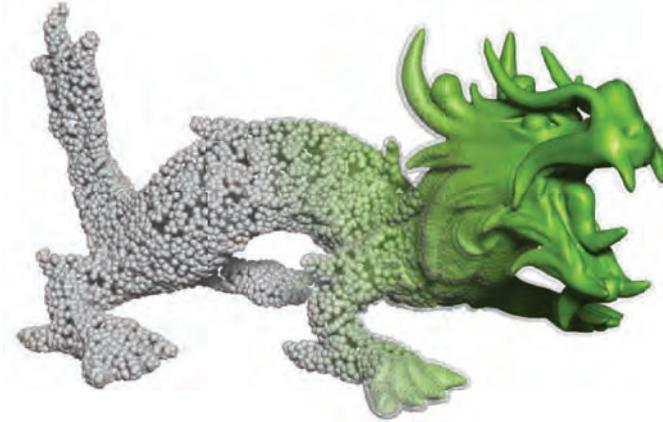


Figura 2.1: Representação do objeto por partículas.

No método SPH, todo o sistema é representado por um número finito de partículas, distribuídas aleatoriamente no domínio do problema (figura 2.1).

As representações integrais obtidas para uma função f e suas derivadas em um ponto $\mathbf{u} \in \Omega$ (equações (2.1) e (2.10)) podem ser discretizadas substituindo a integral no domínio Ω pelo somatório sobre todas as partículas que representam esse domínio. Usando, porém, a condição de compacidade (equação 2.4), a integração sobre o domínio do problema Ω se reduz à integração sobre o suporte compacto do núcleo e , portanto, o somatório também pode ser calculado localmente; operando-se apenas nas partículas que pertencem ao suporte compacto.

O volume infinitesimal $d^m \mathbf{x}$ é substituído pelo volume finito ΔV relacionado à porção do sistema representada por uma partícula vizinha. O volume ΔV , por sua vez, pode ser relacionado à massa m da partícula pela expressão

$$m = \Delta V \cdot \rho,$$

onde ρ é a densidade da partícula.

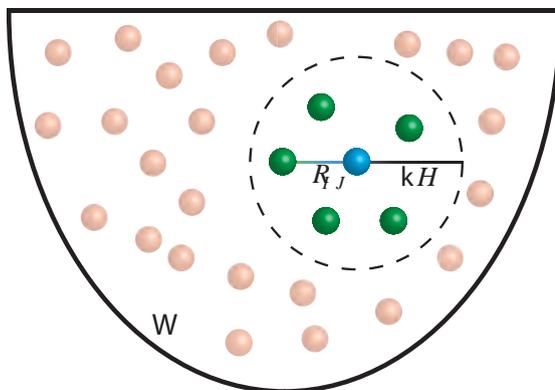


Figura 2.2: Somente partículas que pertencem ao suporte compacto da partícula i são usadas na aproximação por partículas.

Relacionar o elemento de volume com os atributos físicos ρ e m é conveniente em SPH para aplicações em dinâmica dos fluidos, nos quais a densidade é uma variável importante. Dessa forma, podemos dizer que as aproximações são obtidas em uma quantidade de massa constante, o que se adapta melhor à física em aplicações de SPH.

A representação integral para uma função f , em uma partícula indexada por i , pode então ser discretizada da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 f^h(\mathbf{x}_i) &= \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) W^h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} \\
 &= \int_{V_i} f(\mathbf{x}) W^h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} \\
 &\approx \sum_{j \in V_i} f(\mathbf{x}_j) W^h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \Delta V_j \\
 &\approx \sum_{j \in V_i} f(\mathbf{x}_j) W^h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \frac{1}{\rho_j} m_j
 \end{aligned} \tag{2.12}$$

onde o somatório percorre todas as partículas que pertencem ao suporte do núcleo W^h no ponto \mathbf{x}_i (figura 2.2), definido por

$$V_i = V(\mathbf{x}_i) = \{\mathbf{x}_j, \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\| \leq \kappa h\} .$$



Operadores básicos

Portanto, o valor de uma função (resp. da derivada de uma função) em uma dada partícula i é aproximado usando uma média dos valores da função em todas as partículas j pertencentes a seu suporte, ponderados pelo núcleo (resp. pelo gradiente do núcleo) e por propriedades físicas das partículas vizinhas.

Resumindo, as aproximações para uma partícula i são dadas por

$$\begin{aligned}
 \left(\begin{array}{l} \text{função} \\ \text{escalar ou vetorial} \end{array} \right) \quad f_i &= \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} f_j W_{ij} \\
 \left(\begin{array}{l} \text{divergente de uma} \\ \text{função vetorial} \end{array} \right) \quad \nabla \cdot \mathbf{f}_i &= \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} \mathbf{f}_j \cdot \nabla_i W_{ij} \\
 \left(\begin{array}{l} \text{gradiente de uma} \\ \text{função escalar} \end{array} \right) \quad \nabla f_i &= \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} f_j \nabla_i W_{ij}
 \end{aligned} \quad (2.13)$$

onde

$$\begin{aligned}
 W_{ij} &= W^h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) = \frac{1}{h^n} W^1\left(\frac{r_{ij}}{h}\right) \\
 \nabla_i W_{ij} &= \frac{\mathbf{x}_{ij}}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}}
 \end{aligned}$$

com

$$f_i = f(\mathbf{x}_i), \quad \mathbf{x}_{ij} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j \quad \text{e} \quad r_{ij} = \|\mathbf{x}_{ij}\|.$$

Deve-se notar que o gradiente do núcleo é tomado com respeito a partícula i e portanto o sinal negativo nas equações (2.10) e (2.11) são removidos nas aproximações por partículas equações (2.13).

As aproximações por partículas (equações 2.13) discretizam as representações integrais contínuas de uma função e sua derivada, baseadas em um conjunto arbitrário de partículas. O uso dessa soma em partículas arbitrariamente distribuídas para aproximar a integral faz de SPH um método sem malha para integração numérica muito atraente para vários problemas, como por exemplo, simulações de fluidos que sofrem grandes deformações.

Comprimento suave

O comprimento suave h é muito importante em SPH, uma vez que está diretamente ligado à precisão numérica do método e à eficiência da simulação.

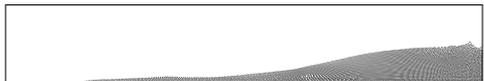
A precisão numérica da aproximação por partículas em SPH depende de que haja um número necessário e suficiente de partículas dentro do suporte compacto de cada partícula do sistema. Pois, se h é muito pequeno, não existem partículas suficientes no suporte compacto de dimensão κh e, por outro lado, se h é muito grande, propriedades locais serão suavizadas globalmente.

Computacionalmente, a eficiência do método também depende do número de partículas vizinhas, assim como da maneira como é determinada a vizinhança (conjunto de partículas vizinhas) de todas as partículas da simulação. No método SPH, o processo de encontrar a vizinhança de uma partícula é normalmente conhecido por *busca por partículas vizinhas*, ou simplesmente *busca por vizinhança*. Tal tarefa é de extrema importância ao método e será revisada na seção 4.3.

Segundo Liu e Liu [94] o número de partículas dentro do suporte compacto, em uma, duas e três dimensões, deve ser em torno de 5, 21 e 27, respectivamente. Essa análise considera as partículas distribuídas sobre uma grade com o comprimento suave $h = 1,3\Delta x$, onde Δx é o espaço entre as partículas, e $k = 2$.

Vale citar, embora nas aplicações contidas neste livro o comprimento suave é mantido constante durante toda a simulação, em algumas aplicações do método SPH torna-se necessário determinar para cada partícula um comprimento suave, como por exemplo, em gases onde o fluido pode expandir ou contrair localmente [112, 153].

Exercício (fácil). Dada uma função $w : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $w(\mathbf{x}) = (\|\mathbf{x}\|)$. Mostre que $\nabla_{\mathbf{x}} w(\mathbf{x} - \mathbf{u}) = -\nabla_{\mathbf{u}} w(\mathbf{x} - \mathbf{u})$.



2.3 Operadores SPH

As aproximações listadas na seção anterior (equações 2.13) para os operadores diferenciais são raramente usadas nos trabalhos que utilizam o método SPH. Outras aproximações resultantes de propriedades implícitas do próprio método, ou de identidades para os operadores diferenciais, se mostraram mais adaptadas à física do problema ou à definição matemática [121, 157].

2.3.1 Operadores de primeira ordem

Os operadores discretos obtidos na seção anterior são imprecisos e frequentemente não obedecem às propriedades de conservação associadas às equações no modelo contínuo quando aplicados à simulação de fluidos [92]. Entretanto, quando essa aproximação é combinada com um termo que contém a expressão nula

$$\nabla W(\mathbf{x}) = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \nabla_{\mathbf{x}} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) = 0,$$

desde que $\{W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j)\}_j$ seja uma partição da unidade, pode-se encontrar melhores aproximações. Por exemplo, podemos definir os seguintes operadores SPH.

gradiente SPH I

$$\nabla f_i = \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} (f_j - f_i) \nabla_i W_{ij} \quad (2.14)$$

divergente SPH I

$$\nabla \cdot \mathbf{f}_i = \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} (\mathbf{f}_j - \mathbf{f}_i) \cdot \nabla_i W_{ij}. \quad (2.15)$$

Outras aproximações são encontradas na literatura. Para obter aproximações mais precisas para os operadores diferenciais em SPH, Monaghan [112] sugere escrever o gradiente de um campo escalar usando a regra da derivada do produto

$$\nabla f = \frac{1}{\rho} [\nabla(\rho f) - f \nabla \rho] \quad (2.16)$$

e similarmente o divergente de um campo vetorial como

$$\nabla \cdot \mathbf{f} = \frac{1}{\rho} [\nabla \cdot (\rho \mathbf{f}) - \mathbf{f} \cdot \nabla \rho] . \quad (2.17)$$

Daí, usando as equações (2.13), obtemos os operadores SPH descritos a seguir.

gradiente SPH II

$$\nabla f_i = \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j \in V_i} m_j (f_j - f_i) \nabla_i W_{ij} \right] \quad (2.18)$$

divergente SPH II

$$\nabla \cdot \mathbf{f}_i = \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j \in V_i} m_j (\mathbf{f}_j - \mathbf{f}_i) \cdot \nabla_i W_{ij} \right] \quad (2.19)$$

Note que cada expressão fora dos operadores diferenciais nas igualdades (2.16) e (2.17) são avaliadas na própria partícula. Observa-se também que essas aproximações são bastante semelhantes às aproximações obtidas anteriormente (equações 2.15 e 2.14). A diferença entre os conjuntos de operadores **I** e **II** é o uso do volume $\frac{m_j}{\rho_j}$ nas equações (2.14) e (2.15) ao invés de $\frac{m_j}{\rho_i}$ (observe a mudança de índice) utilizado nas equações (2.18) e (2.19). Segundo Colagrossi e Landrini [29], o primeiro conjunto de operadores fornece resultados mais precisos na simulação de escoamento bi-fásico com uma pequena variação de densidade entre os fluidos.

Por último, para obter operadores SPH simétricos, isto é, a interação entre duas partículas i e j é simétrica, considere a seguinte identidade

$$\frac{\nabla f}{\rho} = \frac{1}{\rho^{2-\sigma}} \nabla \left(\frac{f}{\rho^{\sigma-1}} \right) + \frac{f}{\rho^\sigma} \nabla \left(\frac{1}{\rho^{1-\sigma}} \right) . \quad (2.20)$$

Podemos definir novos operadores SPH variando o valor de σ na igualdade acima. Os operadores listados abaixo foram obtidos com $\sigma = 2$.



gradiente SPH III

$$\nabla f_i = \rho_i \left[\sum_{j \in V_i} m_j \left(\frac{f_j}{\rho_j^2} + \frac{f_i}{\rho_i^2} \right) \nabla_i W_{ij} \right] \quad (2.21)$$

divergente SPH III

$$\nabla \cdot \mathbf{f}_i = \rho_i \left[\sum_{j \in V_i} m_j \left(\frac{\mathbf{f}_j}{\rho_j^2} + \frac{\mathbf{f}_i}{\rho_i^2} \right) \cdot \nabla_i W_{ij} \right] \quad (2.22)$$

Uma característica dos operadores obtidos nessa seção é que a iteração entre partículas aparecem explicitamente no operador SPH. Note que nos conjuntos de operadores **I** e **II**, o termo $-f_j$ assegura que a aproximação dos operadores diferenciais para funções constantes seja exata. Mais ainda, em funções que diferem por uma constante, qualquer uma dessas aproximações, obtêm o mesmo resultado para ambas as funções [137].

2.3.2 Operador laplaciano SPH

Vistas as aproximações para os operadores gradiente e divergente no método SPH, chega-se ao final dessa seção apresentando algumas aproximações para o operador laplaciano encontradas na literatura.

De imediato, poderíamos obter a aproximação básica para o laplaciano de uma função escalar usando as representações integrais dos operadores gradiente e divergente (equações 2.10 e 2.11) para obtermos a representação integral do laplaciano

$$(\nabla^2 f)^h(\mathbf{u}) = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}}^2 W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x}.$$

Conseqüentemente, obtêm-se o seguinte operador laplaciano

$$\nabla^2 f_i = \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} f_j \nabla_i^2 W_{ij} \quad (2.23)$$

Porém, a equação (2.23) possui algumas desvantagens. Dentre elas, essa aproximação é muito sensível à desordem de partículas [28].

Outro operador laplaciano SPH é baseado nos operadores gradiente e divergente SPH. Visto que o laplaciano no espaço euclidiano é o divergente do gradiente

$$\nabla^2 f = \nabla \cdot (\nabla f) , \tag{2.24}$$

pode-se obter uma aproximação para o laplaciano da seguinte forma: dada uma propriedade escalar p na partícula, define-se uma nova propriedade $g = \nabla p$ dada pelo gradiente da propriedade p . Para isso utiliza-se um dos operadores gradiente SPH visto anteriormente. Daí, usando um dos operadores divergente SPH, obtém-se uma aproximação para $\nabla \cdot g$. O resultado obtido após essas duas aproximações é uma aproximação para o laplaciano

$$\nabla \cdot g = \nabla \cdot \nabla p = \nabla^2 p .$$

Como exemplo, pode-se usar os operadores gradiente e divergente SPH definidos nas equações (2.18) e (2.19) para obter a seguinte aproximação resultante da composição desses dois operadores.

laplaciano SPH I

$$\nabla^2 f_i = \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j \in V_i} m_j \left((\nabla f)_j^h - (\nabla f)_i^h \right) \cdot \nabla_i W_{ij} \right] \tag{2.25}$$

onde

$$(\nabla f)_k^h = \frac{1}{\rho_k} \left[\sum_{l \in V_k} m_l (f_l - f_k) \nabla_k W_{kl} \right]$$

é a aproximação SPH para o gradiente da função f .

Outra aproximação encontrada na literatura de SPH [30] é dada pela seguinte identidade

$$\nabla^2 (\rho f) = \rho \nabla^2 f + 2 (\nabla \rho \cdot \nabla f) + f \nabla^2 \rho .$$



Reescrevendo-a da seguinte forma

$$\rho \nabla^2 f = \nabla^2 (\rho f) - f \nabla^2 \rho - 2 (\nabla f \cdot \nabla \rho)$$

e aplicando diretamente os operadores laplaciano SPH básico e gradiente SPH II (equações 2.23 e 2.18) nos respectivos operadores encontrados na identidade acima, obtém-se uma nova aproximação descrita a seguir.

laplaciano SPH II

$$\nabla^2 f_i = \sum_{j \in V_i} m_j (f_j - f_i) \left(\nabla_i^2 W_{ij} - \frac{2}{\rho_i^2} \nabla_i W_{ij} \cdot \nabla \rho_i \right), \quad (2.26)$$

onde

$$\nabla_i^2 W_{ij} = \nabla_i^2 W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$$

e

$$\nabla_i W_{ij} = \nabla_i W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j).$$

No operador laplaciano SPH II (equação 2.26), o termo $\nabla \rho_i$ é pré-calculado usando um dos operadores gradiente SPH.

A desvantagem em usar os operadores laplacianos SPH definidos nas equações (2.25) e (2.26) está na necessidade de realizar, para cada partícula, dois somatórios para obter a aproximação SPH para o laplaciano de uma função, o que é computacionalmente muito caro. A próxima, e última, aproximação evita esse problema.

A última aproximação é baseada na expansão em série de Taylor. Para uma função $f(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} = (x, y)$, a série de Taylor, até os termos de segunda ordem, sobre um ponto $\mathbf{u} = (a, b)$, é dada por

$$\begin{aligned} f(x, y) &= f(a, b) + (x - a) \frac{\partial f}{\partial x}(a, b) + (y - b) \frac{\partial f}{\partial y}(a, b) \\ &+ \frac{1}{2} \left((x - a)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(a, b) + (y - b)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(a, b) \right) \\ &+ (x - a)(y - b) \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(a, b) \\ &+ O(\|(x, y) - (a, b)\|^3). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Assumindo a igualdade dada pela expressão (2.27) sem os termos de ordem superior a dois, obtém-se a aproximação para a função f dada por

$$\begin{aligned}
 f(x, y) = & f(a, b) + (x - a) \frac{\partial f}{\partial x}(a, b) + (y - b) \frac{\partial f}{\partial y}(a, b) \\
 & + \frac{1}{2} \left((x - a)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(a, b) + (y - b)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(a, b) \right) \\
 & + (x - a)(y - b) \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(a, b)
 \end{aligned} \tag{2.28}$$

Cleary e Monaghan [28] utilizam as propriedades de simetria e normalização do núcleo W listadas na seção 2.4, para mostrar os seguintes resultados

$$\int (\mathbf{u} - \mathbf{x}) \frac{\mathbf{u} - \mathbf{x}}{\|\mathbf{u} - \mathbf{x}\|^2} \nabla_u W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n x = 0$$

e

$$\int (\mathbf{u} - \mathbf{x})_i (\mathbf{u} - \mathbf{x})_j \frac{\mathbf{u} - \mathbf{x}}{\|\mathbf{u} - \mathbf{x}\|^2} \nabla_u W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n x = \delta_{ij},$$

onde o símbolo de Kronecher δ_{ij} é definido por

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & , \text{ se } i = j \\ 0 & , \text{ se } i \neq j \end{cases} .$$

Deixamos as demonstrações dos resultados para o leitor.

Portanto, multiplicando a expressão (2.28) por

$$\frac{\mathbf{u} - \mathbf{x}}{\|\mathbf{u} - \mathbf{x}\|^2} \nabla_u W(\mathbf{u} - \mathbf{x})$$

e integrando-a, obtém-se a representação integral para o operador laplaciano de uma função escalar

$$\nabla^2 f(\mathbf{u}) = 2 \int \frac{f(\mathbf{u}) - f(\mathbf{x})}{\|\mathbf{u} - \mathbf{x}\|^2} (\mathbf{u} - \mathbf{x}) \nabla_u W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n x . \tag{2.29}$$



A aproximação (2.29) pode agora ser facilmente discretizada usando a aproximação por partículas, na qual usa-se apenas derivada de primeira ordem do núcleo.

laplaciano SPH III

$$\nabla^2 f_i = 2 \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} \frac{f_i - f_j}{r_{ij}} \mathbf{x}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij}. \quad (2.30)$$

O laplaciano definido pela equação (2.30) é obtido diretamente, isto é, sem a necessidade de calcular outras aproximações SPH.

Na tese de Petronetto [137] é apresentada uma comparação entre os principais operadores diferenciais definidos na literatura de SPH. As versões apresentadas para cada operador diferencial (gradiente, divergente e laplaciano) são analisadas estatisticamente. Em vários cenários, variando a densidade de partículas da representação de um domínio, funções analíticas definem propriedades nas partículas e, portanto são também conhecidos os valores dos operadores diferenciais para essa propriedade em cada partícula. A partir daí, as versões para um mesmo operador diferencial são utilizadas para obter as aproximações desejadas e os resultados encontrados são analisados e comparados.

2.4 Núcleos SPH

O método SPH utiliza as representações integrais (2.1) e (2.10), para aproximar uma função e sua derivada, usando uma função suave W^h como núcleo. O núcleo é de extrema importância, pois não somente determina o padrão da aproximação, como também define a dimensão do suporte das partículas, e determina a consistência e, conseqüentemente, a precisão de ambas as aproximações: integral e por partículas.

Diferentes núcleos são usados no método SPH. Várias propriedades são discutidas na literatura, para que uma função possa ser usada como um núcleo. Algumas dessas propriedades são listadas abaixo.

1. o núcleo deve ser **suficientemente suave**

$$W^h \in C^k, k > 1$$

2. o núcleo deve ser **normalizado**

$$\int_{\mathbb{R}^n} W^h(\mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = 1$$

3. o núcleo deve ter **suporte compacto**

$$W^h(\mathbf{x}) = 0 \text{ quando } \|\mathbf{x}\| > \kappa h$$

4. o núcleo deve ser **positivo**

$$W^h(\mathbf{x}) \geq 0$$

5. o núcleo deve ser **decrecente**

$$W^h(\mathbf{x}) < W^h(\mathbf{u}) \text{ se } \|\mathbf{x}\| > \|\mathbf{u}\|$$

6. o núcleo deve ser **simétrico**

$$W^h(\mathbf{x}) = w(\|\mathbf{x}\|)$$

Pelas propriedades 1, 2 e 3 podemos dizer que a representação integral (2.1) está bem definida e, além disso, temos como consequência a *aproximação da identidade* para uma função e suas derivadas

$$\lim_{h \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = f(\mathbf{u}) .$$

Em particular, a terceira propriedade faz da aproximação SPH uma operação local.

A quarta propriedade significa que o núcleo deve ser não-negativo no suporte. Essa propriedade não é necessária para a convergência, mas é importante para assegurar aproximações coerentes para propriedades físicas envolvidas em um dado problema. Por exemplo, valores negativos para o núcleo podem resultar em densidades negativas.



Alguns trabalhos, porém, utilizam núcleos que em algumas regiões têm valores negativos; podemos citar o núcleo usado no trabalho de Monaghan e Lattanzio [116].

A quinta e sexta propriedades são importantes para determinar a influência (em relação ao núcleo) das interações entre partículas de acordo com a distância entre elas. Partículas mais próximas devem influenciar mais do que partículas mais distantes, enquanto que partículas à mesma distância, mas em diferentes posições, tenham a mesma influência. Essas propriedades não são fundamentais e, as vezes, são transgredidas [103].

Qualquer função, com as propriedades anteriores, pode ser empregada como um núcleo em SPH. Diferentes funções são encontradas em diversos trabalhos que utilizam o método SPH [37, 123]. Lucy [105] utilizou a seguinte função como núcleo:

$$W^h(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = W^h(R) = \alpha_d \begin{cases} (1 + 3R)(1 - R)^3, & 0 \leq R < 1 \\ 0, & R \geq 1 \end{cases} \quad (2.31)$$

onde α_d é uma constante de normalização, obtida pela condição de normalização (propriedade 2), e R é a distância relativa entre duas partículas

$$R = \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|}{h}.$$

Monaghan [112] afirma que é sempre melhor utilizar como núcleo uma função gaussiana. A seguinte função gaussiana foi utilizada em seu trabalho original [58] em astrofísica:

$$W^h(R) = \alpha_d e^{-R^2}. \quad (2.32)$$

A função gaussiana não tem suporte compacto, condição esperada de um núcleo em SPH (propriedade 3), mas aproxima-se rapidamente de zero quando a distância entre duas partículas aumenta. Contudo, mesmo tomando um suporte finito, o mesmo provavelmente será muito grande para que a função gaussiana possa ser considerada nula, tornando-a computacionalmente inviável devido à inclusão de muitas partículas no suporte de cada partícula.

Outra classe de núcleos muito importante são os núcleos dados por funções splines. Essa classe de funções splines tem sido utilizada com maior frequência como núcleos em SPH.

Inicialmente, Monaghan e Lattanzio [116] utilizaram um núcleo spline cúbico

$$W^h(R) = \alpha_d \begin{cases} \frac{2}{3} - R^2 + \frac{1}{2}R^3, & 0 \leq R < 1 \\ \frac{1}{6} (2 - R)^3, & 1 \leq R < 2 \\ 0, & R \geq 2 \end{cases} \quad (2.33)$$

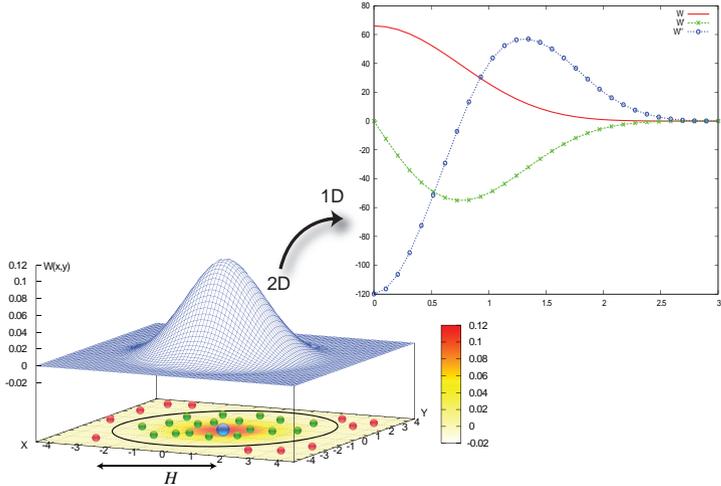


Figura 2.3: Função núcleo: partículas que distam mais do que κh não são utilizadas nas aproximações. Em destaque os gráficos do núcleo 1d e de suas derivadas de primeira e segunda ordem.

Posteriormente, Morris [118, 119] introduziu splines de graus mais alto que aproximam melhor a função gaussiana e são mais estáveis. A figura 2.3 ilustra o núcleo spline quártico definido por

$$W^h(R) = \alpha_d \begin{cases} (3-R)^5 - 6(2-R)^5 - 15(1-R)^5, & 0 \leq R < 1 \\ (3-R)^5 - 6(2-R)^5, & 1 \leq R < 2 \\ (3-R)^5, & 2 \leq R < 3 \\ 0, & R \geq 3 \end{cases} \quad (2.34)$$



Núcleos definidos por funções splines têm sido um dos mais utilizados na literatura de SPH, pois aproximam o núcleo gaussiano e têm suporte compacto. Porém, por serem definidas por partes, as splines são ligeiramente mais difíceis de usar do que funções definidas diretamente, isto é, sem usar definições por partes.

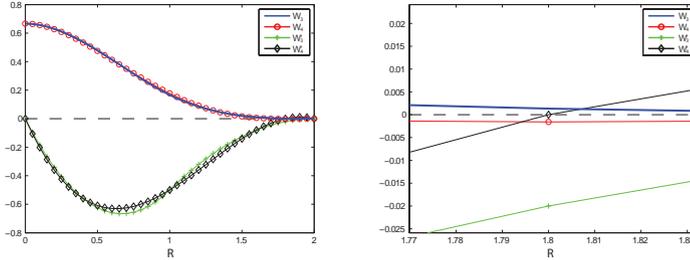


Figura 2.4: Núcleos 1D spline cúbico W_3 e quártico W_4 com suas respectivas derivadas ($\kappa = 2$ e $h = 1$).

Liu e Liu [100] propõem uma pequena alteração no núcleo proposto por Lucy (equação 2.31), assegurando resultados mais precisos e estáveis (figura 2.4). O novo núcleo de quarta ordem é dado pela seguinte expressão:

$$W^h(R) = \alpha_d \begin{cases} \frac{2}{3} - \frac{9}{8}R^2 + \frac{19}{24}R^3 - \frac{5}{32}R^4, & 0 \leq R < 2 \\ 0, & R \geq 2 \end{cases} \quad (2.35)$$

onde, dada a dimensão d do problema, temos

$$\alpha_d = \begin{cases} \frac{1}{h}, & \text{se } d = 1 \\ \frac{15}{7\pi h^2}, & \text{se } d = 2 \\ \frac{315}{208\pi h^3}, & \text{se } d = 3 \end{cases}$$

O núcleo dado pela equação (2.35) satisfaz a condição de normalização; tem, assim como sua derivada, suporte compacto e aproxima

o núcleo spline cúbico (equação (2.33)) e, conseqüentemente, o núcleo gaussiano. Além dessas propriedades, tem a segunda derivada suave, e essa propriedade está diretamente ligada à questão da estabilidade do método SPH [118, 156]. Por outro lado, esse núcleo não possui as propriedades de positividade e decrescimento. A figura 2.4 ilustra esse núcleo de quarta ordem (equação (2.35)) juntamente com o núcleo spline cúbico (equação (2.33)).

Observa-se que em todos os exemplos as funções tomadas como núcleos são funções que têm a seguinte forma:

$$W^h(\mathbf{x}) = W^h(R),$$

onde $R = \|\mathbf{x}\|/h$. Essa é uma escolha natural para funções núcleos em SPH, embora alguns trabalhos utilizem núcleos que não repetem este padrão [99, 103, 146]. Uma análise do comportamento de vários núcleos em uma dimensão pode ser encontrada no trabalho de Fulk e Quinn [55].

2.4.1 Consistência do núcleo

No tradicional método de diferenças finitas (MDF), o conceito de *consistência* define o quanto um sistema de equações discretas se aproxima das EDP's que modelam o problema físico [2]. O teorema de equivalência de Lax-Richtmyer [87] diz que, dado um problema bem posto, isto é, um problema que depende continuamente das condições iniciais, em um esquema de interpolação numérica (em MDF) consistente a existência de estabilidade é uma condição necessária e suficiente para a convergência do sistema linear de equações obtidas pelo esquema.

De maneira semelhante, usando expansão em série de Taylor, uma análise das aproximações SPH pode ser considerada. Primeiramente, essa análise é considerada sobre as aproximações contínuas do método SPH, obtidas pelas representações integrais de uma função e suas derivadas (seção 2.2.1). No que se segue, veremos que condições devem ser satisfeitas para que uma função defina um núcleo no método SPH de tal forma que as aproximações tenham certa ordem de precisão. Além disso, essas condições podem ser usadas para definir núcleos no método SPH de forma sistemática [100].



No método SPH, dada uma função f , a convolução dessa função por um núcleo W define a representação integral da função f .

$$f(\mathbf{u}) \doteq \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x}$$

Supondo f suficientemente diferenciável, podemos expandir $f(\mathbf{x})$ em série de Taylor em torno do ponto \mathbf{u}

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k f^{(k)}(\mathbf{u})}{k!} (\mathbf{u} - \mathbf{x})^k + r_n(\mathbf{u} - \mathbf{x}) \quad (2.36)$$

de onde, substituindo essa série na representação integral, obtemos

$$f(\mathbf{u}) = \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k f^{(k)}(\mathbf{u})}{k!} \int_{\Omega} (\mathbf{u} - \mathbf{x})^k W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} + r_n(\mathbf{u} - \mathbf{x})$$

Comparando os dois lados na igualdade acima, podemos dizer que a representação integral da função f é uma aproximação de ordem n se as seguintes condições, a respeito do núcleo, são satisfeitas

$$\begin{aligned} M_0 &= \int_{\Omega} W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = 1 \\ M_1 &= \int_{\Omega} (\mathbf{u} - \mathbf{x}) W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = 0 \\ M_2 &= \int_{\Omega} (\mathbf{u} - \mathbf{x})^2 W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = 0 \\ &\vdots \\ M_n &= \int_{\Omega} (\mathbf{u} - \mathbf{x})^n W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = 0 \end{aligned}$$

Os termos M_k são chamados de *momentos do núcleo*. Note que o primeiro momento M_0 é a condição de normalização do núcleo. Por outro lado, o segundo momento M_1 é uma propriedade de núcleos simétricos.

De maneira análoga, podemos fazer uma análise para a representação integral da derivada de uma função. Denotando a fronteira do domínio Ω por $S = \partial\Omega$ temos que

$$f'(\mathbf{u}) \doteq \int_S f(\mathbf{x}) W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} dS - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) W'(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x}$$

onde \mathbf{n} é o vetor unitário exterior a superfície S .

Da mesma forma que determinamos os momentos M_k , ao substituir a expansão em série de Taylor (equação 2.36) na segunda integral da igualdade acima, podemos dizer que, se as seguintes equações são satisfeitas, então $f'(\mathbf{u})$ é uma aproximação de ordem n .

$$\begin{aligned} M'_0 &= \int_{\Omega} W'(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = 0 \\ M'_1 &= \int_{\Omega} (\mathbf{u} - \mathbf{x}) W'(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = 1 \\ M'_2 &= \int_{\Omega} (\mathbf{u} - \mathbf{x})^2 W'(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = 0 \\ &\vdots \\ M'_n &= \int_{\Omega} (\mathbf{u} - \mathbf{x})^n W'(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = 0 \end{aligned}$$

e

$$W(\mathbf{u} - \mathbf{x})|_S = 0$$

A restrição do núcleo $W|_S$, à fronteira S do domínio do problema, sendo uma função nula implica na integral de superfície nula para qualquer função arbitrária.

$$\int_S f(\mathbf{x}) W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} dS = 0$$

Essa igualdade foi usada na definição da representação integral da derivada de uma função (seção 2.2.1). Além disso, o momento M'_0



pode ser facilmente obtido dado a restrição nula do núcleo a superfície S . Mais ainda, se essa restrição é satisfeita, os momentos M'_k (exceto $k = 0$) podem ser obtidos a partir dos momentos M_k pela a seguinte relação.

$$M'_k = k M_{k-1}, \quad k = 1, \dots, n$$

Podemos estender essa análise para derivadas de ordem superior. Basta observar que a derivada de ordem $n+1$ é a derivada da derivada de ordem n .

Veremos nas aplicações adiante que a derivada de maior ordem nas EDP's que modelam os problemas é de segunda ordem. Em resumo, as representações integrais

$$\left\{ \begin{array}{l} f(\mathbf{u}) \doteq \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} \\ f'(\mathbf{u}) \doteq - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) W'(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} \\ f''(\mathbf{u}) \doteq \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) W''(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} \end{array} \right. \quad (2.37)$$

são aproximações de ordem n se o núcleo satisfaz

$$\left\{ \begin{array}{l} M_0 = \int_{\Omega} W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = 1 \\ M_1 = \int_{\Omega} (\mathbf{u} - \mathbf{x}) W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = 0 \\ M_2 = \int_{\Omega} (\mathbf{u} - \mathbf{x})^2 W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = 0 \\ \vdots \\ M_n = \int_{\Omega} (\mathbf{u} - \mathbf{x})^n W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = 0 \end{array} \right. \quad (2.38)$$

e

$$\left\{ \begin{array}{l} W(\mathbf{u} - \mathbf{x})|_S = 0 \\ W'(\mathbf{u} - \mathbf{x})|_S = 0. \end{array} \right. \quad (2.39)$$

A análise baseada em expansão em series de Taylor está diretamente relacionada ao conceito de consistência para MDF. Similarmente, o conceito de consistência em métodos de elementos finitos (MEF) também pode ser aplicado ao método SPH. Em MEF a consistência é caracterizada pela maior ordem polinomial que pode ser exatamente reproduzida usando uma função base [95]. Pode-se mostrar que, no método SPH, a representação integral reproduz exatamente polinômios de grau menor que ou igual a n desde que as condições (2.38) sejam satisfeitas pelo núcleo. Por exemplo, para que um campo constante (ordem polinomial zero) $f(\mathbf{x}) = c$ possa ser exatamente reproduzido pela representação integral de uma função (equação (2.1)), devemos ter

$$f^h(\mathbf{u}) \doteq \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = \int_{\Omega} c W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = c.$$

É fácil verificar que a condição de normalização, primeira equação nas condições (2.38), é a condição necessária para a representação integral aproximar exatamente um polinômio de ordem zero.

Exercício (fácil). *Dada uma função f , mostre que a representação integral de f utilizando um núcleo simétrico possui precisão de segunda ordem.*

Exercício (médio). *Mostre que a representação integral de uma função reproduz exatamente um polinômio de grau n se todos os momentos M_k (equações (2.38)), $k = 0, 1, \dots, n$ forem satisfeitos pelo núcleo.*

2.4.2 Consistência da aproximação por partículas

Na seção anterior o conceito de consistência foi apresentado para a formulação contínua da aproximação por núcleos, ou simplesmente, para as representações integrais. Porém, essa consistência não pode ser assumida pelo método SPH devido ao segundo passo de sua formulação: a aproximação por partículas.

O problema no qual as aproximações por partículas dos momentos M_k 's (equações (2.38)) não são satisfeitas em métodos de partículas



é conhecido como *inconsistência de partículas* [12, 118]. A versão discreta da consistência é dada por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{j=1}^N W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = 1 \\ \sum_{j=1}^N (\mathbf{u} - \mathbf{x})^k W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = 0, \quad k = 1, \dots, n \end{array} \right. \quad (2.40)$$

onde N é o número de partículas que pertencem ao suporte compacto da partícula localizada em \mathbf{x} . Mas, essa consistência discreta não é sempre satisfeita. Podemos citar dois exemplos onde as equações (2.40) não são satisfeitas. O simples caso de partículas que estão próximas a fronteira do domínio de tal forma que o suporte compacto intersecciona a fronteira ou, mesmo com o suporte contido no domínio, quando as partículas estão irregularmente distribuídas. A figura 2.5 ilustra esses casos.

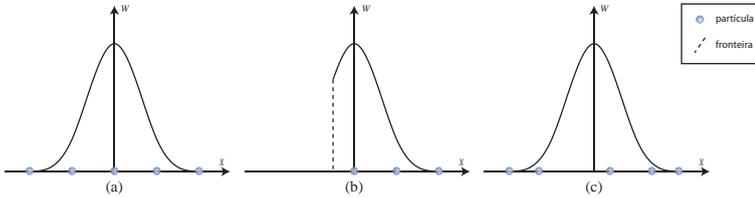


Figura 2.5: Aproximações por partículas. Da esquerda para a direita: (a) amostragem densa de partículas no suporte compacto; (b) o suporte compacto intersecciona a fronteira do domínio e (c) uma distribuição irregular de partículas no suporte compacto.

Existem diferentes maneiras para tentar obter as condições de consistência na forma discreta [39, 40, 101, 102, 103]. Liu, Liu e Lam [100] descrevem um algoritmo para construção de um núcleo polinomial de grau n

$$W^h(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) = \sum_{I=1}^n b_I(\mathbf{x}, h) \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_j}{h} \right)^I, \quad (2.41)$$

tal que as condições de consistência discretas para uma aproximação de ordem n (equações (2.40)) sejam satisfeitas.

Os coeficientes $b_I(\mathbf{x}, h)$ são determinados pelo algoritmo resolvendo o seguinte sistema, obtido ao substituir o núcleo polinomial (equação 2.41) em todos os momentos discretos (equações 2.40).

$$\begin{bmatrix} m_0(\mathbf{x}, h) & m_1(\mathbf{x}, h) & \cdots & m_k(\mathbf{x}, h) \\ m_1(\mathbf{x}, h) & m_2(\mathbf{x}, h) & \cdots & m_{1+k}(\mathbf{x}, h) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_k(\mathbf{x}, h) & m_{k+1}(\mathbf{x}, h) & \cdots & m_{k+k}(\mathbf{x}, h) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0(\mathbf{x}, h) \\ b_1(\mathbf{x}, h) \\ \vdots \\ b_n(\mathbf{x}, h) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

onde

$$m_k(\mathbf{x}, h) = \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_j}{h} \right)^k \Delta \mathbf{x}_j$$

Após determinar os coeficientes $b_I(\mathbf{x}, h)$, o núcleo polinomial da equação (2.41) determina uma aproximação por partículas com consistência de ordem n (seção 2.2.2). Porém o elevado custo desse método deve ser levado em consideração, o qual concentra-se em construir essa matriz de momento e resolver o sistema determinado por ela para cada partícula. Mais ainda, para resolver o problema, a matriz deve ser não-singular e, portanto, a distribuição das partículas deve satisfazer certas condições. Por último, vale ressaltar, que o núcleo obtido pode não ter algumas propriedades desejáveis, como por exemplo: positividade e simetria.



Capítulo 3

Dinâmica dos fluidos usando SPH

As equações de governo dos escoamentos de fluidos newtonianos são representadas matematicamente por um conjunto de EDP's conhecido como as equações de Navier-Stokes. No capítulo anterior, apresentamos os conceitos básicos do método SPH assim como a aproximação por partículas utilizada na discretização espacial dos operadores diferenciais presentes nas EDP's.

Esse capítulo descreve detalhadamente a aproximação SPH das equações de governo dos escoamentos de fluidos. A idéia principal da aproximação SPH consiste na discretização espacial das equações de Navier-Stokes através de um sistema de partículas. Por sua vez, esse sistema de partículas fornece um conjunto de EDO's em relação ao tempo, o qual é resolvido via integração temporal.

3.1 Navier-Stokes na forma lagrangeana

As equações de Navier-Stokes são derivadas dos princípios físicos da conservação da massa e do momento. No capítulo 1, apresentamos duas abordagens para as equações de Navier-Stokes: a descrição euleriana e a descrição lagrangeana. O ponto de vista euleriano das equações de Navier-Stokes se refere a sua descrição espacial, enquanto



que o ponto de vista lagrangeano se refere a descrição material dessas equações. A diferença fundamental entre as duas descrições reside na derivada total de uma quantidade física em relação ao tempo. Pois, na descrição lagrangeana a derivada total em relação ao tempo consiste na combinação da derivada local com a derivada convectiva.

Nessa seção, devido a natureza lagrangeana do método SPH, vamos estudar as equações de Navier-Stokes na forma lagrangeana e em seguida a aproximação SPH de cada uma dessas equações.

3.1.1 Volume de controle finito

Consideremos um volume fechado arbitrário em um espaço de dimensão finita através do qual o fluido escoa. Na mecânica dos fluidos, esse volume define um *volume de controle finito* V associado com uma superfície de controle S que delimita esse volume.

Na descrição lagrangeana conforme é ilustrado na figura 3.1(a), o volume de controle se desloca juntamente com o escoamento mantendo sempre o fluido em seu interior. Entretanto, o escoamento pode induzir uma variação na forma desse volume de controle, ou seja, o volume de controle lagrangeano pode sofrer expansões, compressões ou deformações. Apesar da variação da forma do volume de controle lagrangeano, a massa do fluido contido nesse volume permanece invariante.

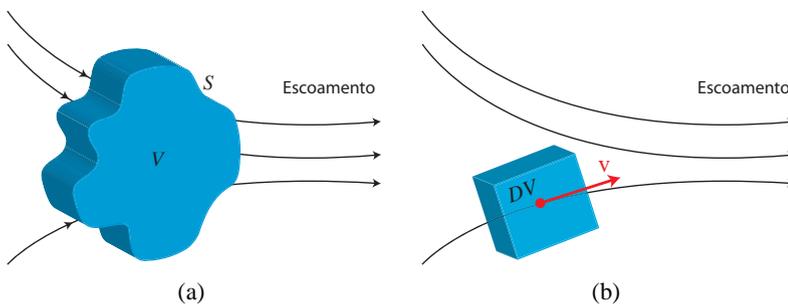


Figura 3.1: Descrição lagrangeana: (a) volume de controle finito V com uma superfície de controle S e (b) elemento de fluido infinitesimal de volume dV se deslocando com velocidade \mathbf{v} .

Através do modelo de volume de controle lagrangeano, podemos aplicar os princípios físicos de conservação no fluido que reside em seu interior. Assim, ao invés de olharmos o escoamento como um todo, o volume de controle finito limita nossa atenção apenas para o fluido que está na região finita determinada pelo próprio volume de controle. Portanto, aplicando as leis físicas da conservação da massa e do momento no volume de controle finito, obtemos as equações de governo dos escoamentos de fluidos na forma integral. Podemos manipular essas equações na forma integral para obter de forma “indireta” as equações de Navier-Stokes.

3.1.2 Elemento de fluido infinitesimal

Uma maneira alternativa de obter as equações de Navier-Stokes é utilizando o conceito de *elemento de fluido infinitesimal*. O elemento de fluido é infinitesimal no mesmo sentido do cálculo diferencial; porém, o elemento é grande o suficiente para ser visto como um meio contínuo.

Agora, consideremos um elemento de fluido infinitesimal que possui um volume de controle diferencial dV associado com uma superfície de controle diferencial dS . Na descrição lagrangeana, o elemento de fluido infinitesimal se move com velocidade \mathbf{v} junto com o escoamento e ocupa uma posição \mathbf{x} em um certo instante de tempo t , como mostra a figura 3.1(b). Novamente, ao invés de olharmos o fluido como um todo, podemos aplicar as leis físicas da conservação da massa e do momento diretamente no elemento de fluido infinitesimal e com isso deduzir as equações de governo na forma diferencial. Logo, as equações de Navier-Stokes são deduzidas de forma direta.

3.1.3 O divergente da velocidade entra em cena

No capítulo 1, apresentamos a definição da derivada material e a sua interpretação física, devido ao seu uso frequente nas equações de governo dos escoamentos de fluidos. Nessa seção vamos discutir o significado físico do divergente da velocidade, $\nabla \cdot \mathbf{v}$, termo que também é bastante empregado nas equações de governo.



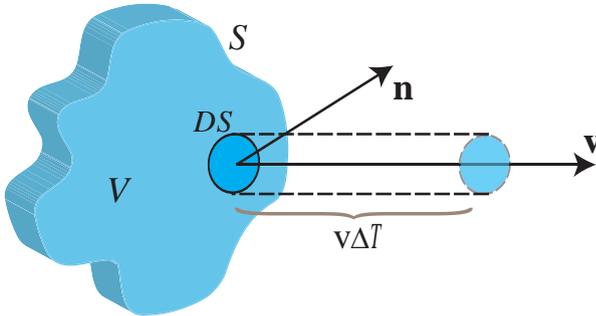


Figura 3.2: Variação do volume de controle lagrangeano.

Para um volume de controle lagrangeano V , o movimento do fluido em seu interior induz uma variação em sua superfície de controle S . Consequentemente, a variação da superfície de controle resulta também na variação do volume de controle, principalmente em regiões onde a densidade do fluido ρ assume valores distintos. A figura 3.2 mostra que a variação do volume de controle ΔV , devido ao movimento de uma superfície infinitesimal dS sobre um incremento de tempo Δt , é igual ao volume do cilindro cuja área da base é dS e a altura é $(\Delta t \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n}$, ou seja,

$$\Delta V = (\Delta t \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} dS, \quad (3.1)$$

onde \mathbf{n} é um vetor normal unitário e exterior à superfície dS .

A variação total do volume em todo volume de controle é igual a soma da equação (3.1) em toda superfície S . No limite $dS \rightarrow 0$, essa soma se torna a integral de superfície:

$$\Delta V = \int_S (\Delta t \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} dS. \quad (3.2)$$

Dividindo ambos os lados da equação (3.2) por Δt , obtemos a variação temporal do volume de controle:

$$\frac{DV}{Dt} = \frac{1}{\Delta t} \int_S (\Delta t \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} dS = \int_S \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS. \quad (3.3)$$

Aplicando o teorema de Gauss na equação (3.3), temos:

$$\frac{DV}{Dt} = \int_V \nabla \cdot \mathbf{v} dV. \quad (3.4)$$

Suponhamos que o volume de controle lagrangeano é encolhido a um volume δV tão pequeno de modo que passe a ser considerado um elemento de fluido infinitesimal. Logo, a equação (3.4) pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{D(\delta V)}{Dt} = \int_{\delta V} \nabla \cdot \mathbf{v} dV. \quad (3.5)$$

Tomando o limite $\delta V \rightarrow 0$, segue da equação (3.5) que:

$$\frac{D(\delta V)}{Dt} = (\nabla \cdot \mathbf{v}) \delta V$$

ou

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{1}{\delta V} \frac{D(\delta V)}{Dt}. \quad (3.6)$$

Portanto, a equação (3.6) mostra que o divergente da velocidade pode ser interpretado fisicamente como a variação temporal do volume do elemento de fluido por unidade de volume.

3.1.4 Equação da continuidade

A equação da continuidade obedece a lei de conservação da massa. Para um elemento de fluido infinitesimal lagrangeano de volume δV , a massa contida nesse volume é:

$$\delta m = \rho \delta V, \quad (3.7)$$

onde m é a massa e ρ é a densidade do fluido.

Desde que a massa é conservada no elemento de fluido lagrangeano, logo a variação temporal da massa é nula, então:

$$\frac{D(\delta m)}{Dt} = \frac{D(\rho \delta V)}{Dt} = \delta V \frac{D\rho}{Dt} + \rho \frac{D(\delta V)}{Dt} = 0$$

ou

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \frac{1}{\delta V} \frac{D(\delta V)}{Dt}. \quad (3.8)$$



Finalmente, utilizando a equação (3.6), e substituindo o lado direito da equação (3.8) pelo divergente da velocidade; a equação da continuidade na forma lagrangeana é dada por:

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho\nabla \cdot \mathbf{v}. \quad (3.9)$$

Uma maneira mais elegante de demonstrar a equação da continuidade pode ser feita através do *teorema do transporte* [110].

Exercício (difícil). *Dado um volume de controle finito V arbitrário. Seja S a superfície de controle associada ao volume V . Supondo que o volume controle V está fixo no espaço, o balanço de massa dentro desse volume é dado por:*

$$\int_S \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS = - \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV,$$

onde \mathbf{n} é o vetor normal unitário e exterior a superfície S . Deduzir a equação da continuidade (equação (3.9)) a partir da equação acima.

3.1.5 Equação do momento

A equação do momento é uma aplicação direta da segunda lei de Newton e diz respeito à conservação do momento, isto é, a taxa de variação temporal do momento do fluido é igual à resultante de forças \mathbf{F} que atuam sobre o fluido. Logo, um fluido pode ser representado por uma coleção de elementos de fluido infinitesimais, onde cada elemento de fluido possui massa constante m , densidade ρ , tem velocidade \mathbf{v} , aceleração \mathbf{a} e ocupa um volume infinitesimal cuja forma pode variar ao longo do escoamento. Assim, para cada elemento de fluido podemos escrever a segunda lei de Newton através da famosa equação:

$$\mathbf{F} = m \mathbf{a}. \quad (3.10)$$

A aceleração de um elemento de fluido é dada pela derivada material:

$$\mathbf{a} = \frac{D\mathbf{v}}{Dt}. \quad (3.11)$$

Usando a equação (3.11) podemos reescrever a equação (3.10) como:

$$\mathbf{F} = m \frac{D\mathbf{v}}{Dt}. \quad (3.12)$$

Agora nos resta determinar as forças que atuam sobre o fluido. Essas forças são classificadas em:

1. *Forças de campo*: são aquelas que atuam à distância, isto é, agem na massa do elemento como um todo sem a necessidade do contato entre os elementos. Exemplos dessas forças são: a força gravitacional, eletromagnética e centrífuga.
2. *Forças de superfície*: são aquelas que atuam diretamente na superfície do elemento de fluido. Essas forças são em decorrência da pressão exercida sobre o fluido por um elemento exterior e das *tensões viscosas normais e de cisalhamento* devido a fricção com elementos vizinhos em movimento.

As tensões normais agem perpendicularmente à superfície do elemento de fluido, alterando o seu volume (figura 3.3(a)), sendo, portanto, proporcionais à variação temporal do volume do elemento de fluido. Enquanto que as tensões de cisalhamento agem tangencialmente à superfície do elemento por meio da fricção com elementos adjacentes causando-lhe uma deformação cisalhante (figura 3.3(b)). A pressão p do fluido aparece como uma das tensões normais, pois em regiões de alta pressão, o elemento de fluido é comprimido. Enquanto em regiões de baixa pressão, o elemento tende a se esticar.

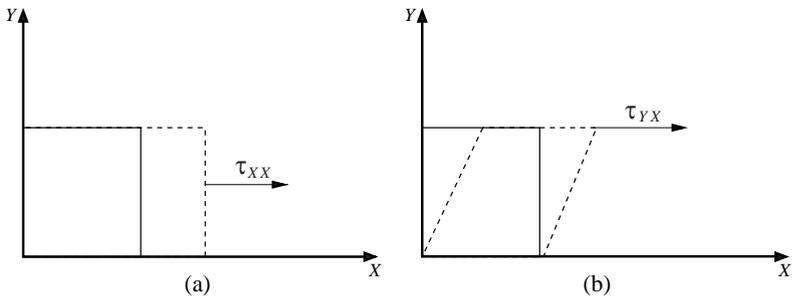


Figura 3.3: Tensões exercidas sobre um elemento de fluido.
 (a) Tensão normal tende a esticar ou a comprimir o elemento.
 (b) Tensão de cisalhamento tende a deformar o elemento.



Denotaremos as tensões viscosas através do símbolo τ_{ij} , cujos índices i e j indicam que a tensão age na direção j sobre a superfície normal à direção i . Particularmente, a tensão τ_{yx} ilustrada na figura 3.3(b) age na direção x sobre um plano perpendicular ao eixo y .

Consideremos um elemento de fluido infinitesimal no espaço euclidiano na posição $\mathbf{x} = (x, y, z)$, com velocidade $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$ e que possui a forma de um paralelepípedo, conforme é ilustrado na figura 3.4. Desde que os campos p e τ variam suavemente, podemos expandi-los em séries de Taylor a partir dos respectivos valores nas extremidades do elemento de fluido. Logo, o cálculo da força resultante exercida sobre um elemento de fluido infinitesimal, cujo volume é $dx dy dz$, na direção do eixo x é dado por:

$$\begin{aligned}
 F_x &= - \left[\left(p + \frac{\partial p}{\partial x} dx \right) - p \right] dy dz \\
 &+ \left[\left(\tau_{xx} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} dx \right) - \tau_{xx} \right] dy dz \\
 &+ \left[\left(\tau_{yx} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} dy \right) - \tau_{yx} \right] dx dz \\
 &+ \left[\left(\tau_{zx} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} dz \right) - \tau_{zx} \right] dx dy \\
 &= \left(-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) dx dy dz,
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

Se a aceleração do elemento de fluido é $\mathbf{a} = \left(\frac{Dv_x}{Dt}, \frac{Dv_y}{Dt}, \frac{Dv_z}{Dt} \right)$ e a força de campo exercida sobre o elemento de fluido por unidade de massa, ou seja, uma aceleração, é $\mathbf{f} = (f_x, f_y, f_z)$; então através da

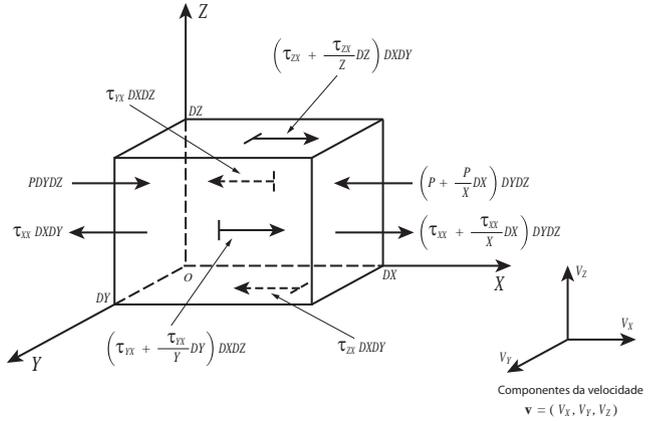


Figura 3.4: Forças exercidas sobre um elemento de fluido infinitesimal na direção do eixo x .

segunda lei de Newton (3.12) e pelo fato de $m = \rho dx dy dz$ segue que:

$$\begin{aligned} \rho dx dy dz \frac{Dv_x}{Dt} &= - \frac{\partial p}{\partial x} dx dy dz + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} dx dy dz \\ &+ \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} dx dy dz + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} dx dy dz \\ &+ f_x (\rho dx dy dz) \end{aligned} \quad (3.14)$$

Portanto, a equação do momento na direção x é:

$$\frac{Dv_x}{Dt} = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + f_x. \quad (3.15)$$

Analogamente, as equações do momento nas direções y e z são:

$$\frac{Dv_y}{Dt} = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + f_y, \quad (3.16)$$

$$\frac{Dv_z}{Dt} = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} + f_z. \quad (3.17)$$



Podemos agrupar as equações (3.15), (3.16) e (3.17) na forma vetorial para obter a equação do momento na forma lagrangeana:

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \frac{1}{\rho}\nabla \cdot \mathbb{T} + \mathbf{f}, \quad (3.18)$$

onde \mathbb{T} é um tensor simétrico 3×3 :

$$\mathbb{T} = \begin{pmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{pmatrix}. \quad (3.19)$$

Esse tensor é chamado de *tensor extra-tensão* ou *tensor de tensões*; e o seu divergente é calculado da seguinte forma:

$$\nabla \cdot \mathbb{T} = (\nabla \cdot (\mathbb{T} \mathbf{e}_1))^T, \nabla \cdot (\mathbb{T} \mathbf{e}_2))^T, \nabla \cdot (\mathbb{T} \mathbf{e}_3))^T),$$

com $\mathbf{e}_1 = (1, 0, 0)^T$, $\mathbf{e}_2 = (0, 1, 0)^T$ e $\mathbf{e}_3 = (0, 0, 1)^T$.

A distribuição das tensões viscosas no tensor extra-tensão \mathbb{T} se dá da seguinte forma: os coeficientes da diagonal de \mathbb{T} (τ_{xx} , τ_{yy} , τ_{zz}) são as tensões normais e os demais coeficientes (τ_{xy} , τ_{xz} , τ_{yx} , τ_{yz} , τ_{zx} , τ_{zy}) são as tensões de cisalhamento.

Tensões viscosas em fluidos newtonianos

Um *fluido newtoniano* (por exemplo, água) é um fluido no qual a tensão τ exercida sobre o fluido é proporcional aos gradientes de velocidade, isto é, ao *tensor taxa de deformação* \mathbb{D} :

$$\tau_{ij} = 2\mu \left[\mathbb{D}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \text{traço}(\mathbb{D}) \right] \quad (3.20)$$

com

$$\mathbb{D}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right), \quad (3.21)$$

lembrando que δ_{ij} é o delta de Kronecker e a constante de proporcionalidade μ é denominada de *coeficiente de viscosidade dinâmica do fluido*. Em particular, quando o coeficiente de viscosidade μ é nulo, o fluido é dito *invíscido*.

Finalmente, utilizando as equações (3.20) e (3.21), podemos re-presentar o tensor \mathbb{T} (equação (3.19)) como:

$$\mathbb{T} = 2\mu \left[\mathbb{D} - \frac{1}{3} \text{traço}(\mathbb{D})\mathbb{I} \right], \quad \text{com } \mathbb{D} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T). \quad (3.22)$$

Denotamos $\nabla \mathbf{v}^T$ como sendo a matriz transposta da matriz jacobiana $\nabla \mathbf{v}$ e \mathbb{I} representando a matriz identidade, sendo que cada matriz possui dimensão 3×3 . Observamos que $\text{traço}(\mathbb{D}) = \nabla \cdot \mathbf{v}$.

No capítulo 6, abordaremos fluidos que possuem um comportamento mais complexo, onde a tensão τ possui uma dependência não-linear com o tensor \mathbb{D} .

3.2 Incompressibilidade

Um fluido é dito *incompressível* quando a densidade de um elemento de fluido não é afetada pela variação da pressão, ou seja, durante o movimento o volume de qualquer elemento de fluido é preservado mesmo sobre influência da pressão; pode-se aumentar ou diminuir a pressão que a densidade permanecerá constante. A densidade de um elemento de fluido pode variar em virtude da condução térmica; porém, as variações de temperatura serão consideradas “pequenas” o suficiente para que as alterações na densidade sejam consideradas desprezíveis. Logo, podemos considerar a densidade em cada elemento de fluido como constante. Assim, em um escoamento de fluido incompressível, a variação temporal da densidade ρ é nula, isto é,

$$\frac{D\rho}{Dt} = 0.$$

Dessa maneira a equação da continuidade (3.9) toma a forma simples:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (3.23)$$

Matematicamente, um escoamento é incompressível quando o campo de velocidade possui divergência nula. A restrição (3.23) é dita *condição de incompressibilidade*.

Uma outra forma de classificar um escoamento é através da velocidade do som no fluido. Fisicamente, a velocidade do som é a



velocidade com a qual uma perturbação de pressão de pequena amplitude se desloca através de um fluido. A razão entre a magnitude da velocidade do escoamento e a velocidade do som no fluido é conhecida como o *número de Mach*, e é usualmente denotado como Ma . Para números de Mach pequenos, $Ma < 0.3$, o escoamento é incompressível, caso contrário é dito *compressível*. Uma rica classe de fluidos incompressíveis é a classe dos líquidos. Entretanto, no mundo real nenhum fluido é realmente incompressível, até mesmo um líquido pode ter a sua densidade aumentada aplicando-se uma pressão suficiente.

Simplificação das equações de Navier-Stokes

Através da classificação do escoamento, podemos fazer simplificações nas equações de Navier-Stokes. Suponhamos que o escoamento é incompressível, através da condição de incompressibilidade, podemos simplificar o tensor extra-tensão \mathbb{T} dado na equação (3.22) da seguinte forma:

$$\mathbb{T} = \mu (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T). \quad (3.24)$$

Utilizando a equação anterior, temos que:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbb{T} &= \mu [\nabla \cdot \nabla \mathbf{v} + \nabla \cdot (\nabla \mathbf{v}^T)] \\ &= \mu [\nabla (\nabla \cdot \mathbf{v}) + \nabla^2 \mathbf{v}] \\ &= \mu \nabla^2 \mathbf{v}, \end{aligned} \quad (3.25)$$

onde $\nabla^2 \mathbf{v} = (\nabla^2 v_1, \nabla^2 v_2, \nabla^2 v_3)$ é chamado de *vetor laplaciano*.

Portanto, supondo que a única força de campo exercida sobre os elementos de fluido por unidade de massa é a gravidade \mathbf{g} e utilizando a equação (3.25), podemos simplificar a equação do momento (3.18):

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{g}. \quad (3.26)$$

Intuitivamente a viscosidade de um fluido descreve o quanto um fluido em movimento resiste à deformação, isto é, a maneira como a velocidade do fluido se dissipa. Logo, nada mais natural do que o surgimento do vetor laplaciano $\nabla^2 \mathbf{v}$ no termo das tensões viscosas na

equação acima. Pois o operador diferencial relacionado à dissipação física é o operador laplaciano ∇^2 , para isso basta lembrar da equação do calor.

Portanto, para simular escoamentos de fluidos incompressíveis, utilizamos as equações (3.23) e (3.26). Essas equações são conhecidas como as *equações de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis na forma lagrangeana*.

Exercício (fácil). *Dê um exemplo de um campo vetorial não-nulo definido no plano euclidiano que satisfaz a condição de incompressibilidade.*

3.3 Equações de governo: um resumo

Nas seções anteriores, vimos que as equações de governo dos escoamentos de fluidos newtonianos podem ser descritas através da descrição lagrangeana das equações de Navier-Stokes. A forma lagrangeana das equações de Navier-Stokes descreve o comportamento de um fluido no ponto de vista de um elemento de fluido que se move com velocidade \mathbf{v} junto com o escoamento e ocupa uma posição \mathbf{x} em um certo instante de tempo t . Esse comportamento no espaço euclidiano é descrito através do conjunto de equações diferenciais parciais deduzidas a partir dos princípios físicos de conservação da massa (equação da continuidade) e da conservação do momento (equação do momento):

Equação da continuidade

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v}$$

Equação do momento

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbb{T} + \mathbf{f}$$

Nas equações acima, ρ é a densidade do fluido, p é pressão do fluido, \mathbf{f} é uma força de campo externa. O tensor extra-tensão \mathbb{T} é



calculado da seguinte forma:

$$\mathbb{T} = 2\mu \left[\mathbb{D} - \frac{1}{3} \text{traço}(\mathbb{D}) \mathbb{I} \right], \quad \text{com} \quad \mathbb{D} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T),$$

onde μ é a viscosidade do fluido e \mathbb{I} é a matriz identidade.

Nos escoamentos de fluidos incompressíveis, as equações de Navier-Stokes podem ser simplificadas da seguinte forma:

Equação da continuidade em escoamentos incompressíveis

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

Equação do momento em escoamentos incompressíveis

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{f}.$$

3.4 Aproximação SPH das equações de Navier-Stokes

Nessa seção mostraremos como é feita a aproximação SPH para simular escoamentos de fluidos incompressíveis. Para isso vamos representar o fluido como um sistema de partículas onde cada uma delas, além de ser um centro de interpolação SPH, possui quantidades físicas do fluido como, por exemplo: massa, velocidade, densidade, viscosidade, pressão, etc.

3.4.1 Aproximações SPH da densidade

Nos métodos SPH tradicionais, a aproximação da densidade em uma partícula i é feita diretamente através da aproximação SPH (2.12):

$$\rho_i = \sum_{j \in V_i} \rho_j W_{ij} \frac{m_j}{\rho_j} = \sum_{j \in V_i} m_j W_{ij}. \quad (3.27)$$

Entretanto, a aproximação (3.27) requer um ciclo extra de computação, pois a densidade é calculada antes dos outros parâmetros,

tornando assim a simulação mais lenta no ponto de vista computacional. Outra opção para o cálculo da densidade é através da equação da continuidade (3.9), simplesmente aplicando a aproximação SPH do divergente (2.15) na equação (3.9). Assim, a versão SPH da equação da continuidade é da forma:

$$\frac{D\rho_i}{Dt} = -\rho_i \sum_{j \in V_i} (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) \cdot \nabla_i W_{ij} \frac{m_j}{\rho_j}. \quad (3.28)$$

A densidade da partícula i é obtida integrando a equação (3.28) em relação ao tempo.

3.4.2 Aproximação SPH da equação do momento

A aceleração em cada partícula i é calculada através da equação do momento (3.26):

$$\frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} = -\frac{1}{\rho_i} \nabla p_i + \frac{\mu}{\rho_i} \nabla^2 \mathbf{v}_i + \mathbf{g}. \quad (3.29)$$

A idéia aqui é aplicar as regras de aproximação SPH, discutidas no capítulo 2, nos dois primeiros termos, pressão e viscosidade, do lado direito da equação (3.29). Primeiro vamos aproximar termo proveniente das forças exercidas pela pressão na partícula e em seguida vamos aproximar o termo viscoso $\frac{\mu}{\rho_i} \nabla^2 \mathbf{v}_i$.

Equações de estado

Tradicionalmente no método SPH a pressão, ao contrário dos métodos com malha onde ela é a solução implícita de uma equação de Poisson [151], é uma função explícita da densidade local do fluido semelhante as equações de estado da termodinâmica [53].

Apesar do método SPH ter sido criado para simular fluidos compressíveis, podemos aproximar um fluido incompressível por um fluido *quase-incompressível* utilizando uma equação de estado [113]. Assim a pressão p_i pode ser calculada por uma equação de estado sugerida por Batchelor [10] e tem a forma:

$$p_i = B \left[\left(\frac{\rho_i}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right], \quad (3.30)$$



com $\gamma = 7$ e ρ_0 é a densidade (ou massa específica) de referência. O parâmetro B é o termo relacionado às flutuações de densidade do fluido e é estimado por

$$B = \frac{c^2 \rho_0}{\gamma},$$

onde c é a velocidade do som. A velocidade do som representa a velocidade pontual mais rápida de propagação de onda naquele meio, nas simulações SPH ela é escolhida como sendo aproximadamente dez vezes a maior velocidade esperada no escoamento do fluido, isto é, um número de Mach em torno de 0.1. A equação (3.30) é conhecida como *equação de Tait*. Posteriormente, Morris *et al.* [120] simularam fluidos quase-incompressíveis de alta viscosidade através da seguinte equação de estado:

$$p_i = c^2 (\rho_i - \rho_0). \quad (3.31)$$

O cálculo da pressão ainda continua sendo um ponto delicado nas simulações de fluidos incompressíveis usando SPH, pois há uma dificuldade de manter a incompressibilidade do fluido devido à falta de um controle explícito da densidade global. No capítulo 5 vamos mostrar uma variante do método SPH para simular escoamentos de fluidos incompressíveis, isto é, escoamentos que satisfazem a condição de incompressibilidade (3.23).

Gradiente da pressão

Após atualizar a pressão em todas as partículas usando uma das equações de estado acima, podemos avaliar em cada partícula o gradiente da pressão na equação do momento (3.29). Uma maneira de calcular o gradiente da pressão é dada pela aproximação SPH do gradiente (2.21):

$$-\frac{1}{\rho_i} \nabla p_i = - \sum_{j \in V_i} m_j \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} \right) \nabla_i W_{ij}. \quad (3.32)$$

Essa aproximação do gradiente da pressão é frequentemente vista na literatura SPH. Pois, conforme comentamos no capítulo 2, essa aproximação dada de forma simétrica reduz as instabilidades numéricas causadas pelo problema de inconsistência de partículas.

Termo viscoso

O cálculo do termo viscoso $\frac{\mu}{\rho_i} \nabla^2 \mathbf{v}_i$ da equação do momento (3.29) pode ser aproximado numericamente através da aproximação SPH do laplaciano (2.30) aplicada em cada coeficiente do vetor laplaciano $\nabla^2 \mathbf{v}_i$:

$$\frac{\mu}{\rho_i} \nabla^2 \mathbf{v}_i = \frac{2\mu}{\rho_i} \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} \mathbf{v}_{ij} \frac{\mathbf{x}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij}}{r_{ij}^2}, \quad (3.33)$$

onde $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$, $\mathbf{x}_{ij} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$ e $r_{ij} = \|\mathbf{x}_{ij}\|$. A vantagem dessa aproximação é a garantia numérica que o significado físico do vetor laplaciano será respeitado, isto é, a velocidade do fluido será dissipada devido à viscosidade do fluido.

Finalmente, através das equações (3.32) e (3.33), para cada partícula i a versão SPH da equação do momento (3.29) é dada por:

$$\begin{aligned} \frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} = & - \sum_{j \in V_i} m_j \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} \right) \nabla_i W_{ij} \\ & + \frac{2\mu}{\rho_i} \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} \mathbf{v}_{ij} \frac{\mathbf{x}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij}}{r_{ij}^2} + \mathbf{g}. \end{aligned} \quad (3.34)$$

No próximo capítulo, vamos discutir os aspectos numéricos e computacionais para a implementação de um sistema baseado no método SPH para simular escoamentos de fluidos newtonianos.



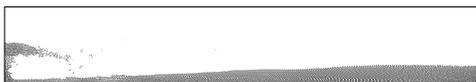
Capítulo 4

Aspectos numéricos do método SPH

Se a física usa do cálculo infinitesimal para modelar a natureza, o computador infelizmente é limitado às operações algébricas com uma quantidade finita de números. Uma opção é tentar modelar a natureza diretamente com as ferramentas computacionais. Outro caminho, mais acessível por enquanto, é aproximar, no sentido matemático, o modelo físico. Isso torna os aspectos computacionais não apenas um problema de tradução em linguagem de programação, mas um processo matemático delicado, submetido às limitações das máquinas, e que deve respeitar o fenômeno físico.

Nesse contexto, os métodos SPH ganharam espaço em aplicações de diversos horizontes: desde a simulação precisa de fenômenos físicos até efeitos para jogos. Essa variedade de contexto corresponde a uma variação significativa de estratégias para implementá-lo: os jogos procuram resultados apenas visualmente coerentes mas requerem códigos extremamente eficientes, enquanto a simulação física exige a maior precisão possível independente do custo computacional.

Além disso, os tipos de simulação influenciam na escolha das estruturas de dados a serem usadas. Por exemplo, escoamentos turbulentos de um líquido confinado acontecem em um volume limitado e o método SPH manipula informações densas durante um longo tempo,



enquanto a simulação de explosões de gases atualiza informações esparsas em um grande volume durante poucos instantes. As diferentes aplicações mudam a combinatória do problema de simulação, como descrito nas seções 4.1 e 4.3.

Finalmente, as interações de fluido com outros meios são delicadas de modelar fisicamente, apesar de ter um efeito decisivo em particular no caso de fluidos incompressíveis. Essas interações, pelas suas complexidades, são geralmente tratadas localmente durante o algoritmo como detalhado nas seções 4.2 e 4.4.

Os exercícios desse capítulo, colocados ao longo do texto e no final de cada seção, são de três tipos: análise de uma formulação para calcular as equações físicas, análise de um algoritmo e implementação de um método. Uma visão geral do método, onde encaixam as seções desse capítulo, é ilustrada na figura 4.1, e detalhada na última seção

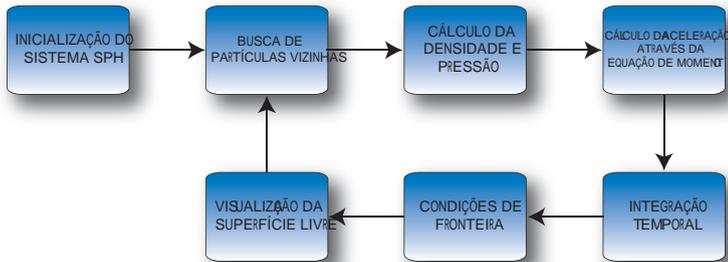


Figura 4.1: Visão geral do ciclo de simulação de um sistema SPH.

4.1 Integração temporal

O método SPH permite, entre outras coisas, calcular no computador aproximações de derivadas espaciais (ver capítulo 2). Esse problema é chamado de *discretização* espacial. Em particular, o método SPH permite calcular as derivadas a partir de partículas (amostras) distribuídas aleatoriamente no espaço, obtendo, no caso de simulação de fluidos, densidade, pressão, viscosidade... Porém, a equação de conservação do momento envolve derivadas espaciais e temporais, e

essa seção detalha alguns métodos para aproximar essas derivadas a partir de amostras de tempo distribuídos uniformemente, do tipo:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt}(t) \approx F(\dots \mathbf{v}(t-2\Delta t), \mathbf{v}(t-\Delta t), \mathbf{v}(t), \mathbf{v}(t+\Delta t), \mathbf{v}(t+2\Delta t) \dots) .$$

Portanto, a integração temporal se aparenta com a discretização de derivadas em reticulados (*grades*), onde os métodos de diferenças finitas são os mais usados [44]. Porém, no contexto temporal, tentamos calcular um ponto do reticulado em função apenas dos pontos inferiores (instantes anteriores). Quando o cálculo é direto, ou seja, quando temos apenas uma incógnita a resolver (o instante atual), o método é chamado de *explícito*. Ao contrário, tipicamente quando colocamos os instantes futuros como incógnita e isolamos o instante atual, o método é chamado de *implícito*. Essa última classe de métodos é delicado no contexto lagrangeano, e não será abordado neste livro. Nos métodos explícitos, tem um meio termo entre a qualidade de aproximação a priori de uma discretização e o seu custo computacional. Nessa seção, revemos rapidamente dois métodos, Euler e leap-frog, e mencionaremos técnicas usuais para estimar o passo de tempo.

4.1.1 Método de Euler

O método explícito mais simples é conhecido como método de Euler. Ele corresponde a primeira aproximação da derivada, conhecida como diferença para frente, que no caso da velocidade pode ser escrita como:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt}(t) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\mathbf{v}(t+h) - \mathbf{v}(t)}{h} \approx \frac{\mathbf{v}(t+\Delta t) - \mathbf{v}(t)}{\Delta t} .$$

Essa estimativa de derivada envolve apenas dois pontos de tempo: t e $t+\Delta t$, o que permite calcular o instante a seguir diretamente a partir do instante atual, tornando o integrador eficiente, pois basta calcular e armazenar apenas um instante para calcular o seguinte.

Na prática, a aceleração \mathbf{a}_i de uma partícula i é calculada a partir da soma das forças na equação do momento de Navier-Stokes, e assim a velocidade \mathbf{v}_i e a posição \mathbf{x}_i são atualizadas a partir da aproximação anterior:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_i(t+\Delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \Delta t \mathbf{a}_i(t) \\ \mathbf{x}_i(t+\Delta t) &= \mathbf{x}_i(t) + \Delta t \mathbf{v}_i(t+\Delta t) \end{aligned} .$$



É possível estimar a precisão a priori do método: a velocidade de uma partícula pode ser vista como uma função vetorial do tempo. Se essa função é bem aproximada por seu polinômio de Taylor, temos:

$$\mathbf{v}(t+\Delta t) = \mathbf{v}(t) + \Delta t \cdot \frac{d\mathbf{v}}{dt}(t) + O\left((\Delta t)^2\right) .$$

A aproximação do método de Euler pode ser escrita como:

$$\left(\frac{d\mathbf{v}}{dt}(t)\right)_{Euler} = \frac{d\mathbf{v}}{dt}(t) + O(\Delta t) .$$

Por causa dessa análise, o método de Euler é qualificado de método de *primeira ordem*. Observe que a análise supõe que a velocidade seja uma função suficientemente suave, o que é comum em matemática, mas que certamente não é o caso para um fluido perto de um vórtice ou de uma turbulência, que são os casos mais interessantes.

Essa análise permite ter uma comparação de integradores temporais, e a baixa ordem do integrador pode tornar uma simulação bastante instável em certas circunstâncias – uma propriedade indesejável para qualquer integrador. Essa instabilidade pode ser remediada tomando um passo de tempo Δt muito pequeno, idealmente para ter o termo $o(\Delta t)$ inferior a precisão desejada.

Exercício (*difícil*). Use o método de Euler para resolver, na mão ou no computador, um sistema massa-mola unidimensional: $\mathbf{a} = -k \cdot \mathbf{x}$. Observe que ele aumenta a energia total do sistema (por exemplo, a velocidade nos pontos extremos da mola cresce).

4.1.2 Integrador Leap-Frog

Um integrador mais atraente e tão simples quanto o método de Euler, mas com uma precisão de segunda ordem, é o integrador leap-frog [44]. Ele é baseado na estimativa de derivada como diferença centrada:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt}(t) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\mathbf{v}(t+\frac{1}{2}h) - \mathbf{v}(t-\frac{1}{2}h)}{h} \approx \frac{\mathbf{v}(t+\frac{1}{2}\Delta t) - \mathbf{v}(t-\frac{1}{2}\Delta t)}{\Delta t} .$$

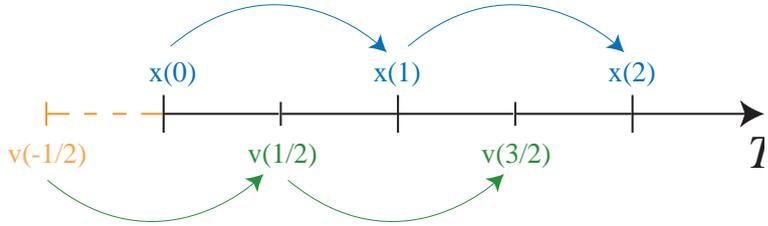


Figura 4.2: Esquema de integração leap-frog: posição \mathbf{x}_i e velocidade \mathbf{v}_i em uma partícula i são avaliadas de maneira intercalada em relação ao tempo t .

A estimativa de derivada envolve de novo apenas dois pontos de tempo: $t - \frac{1}{2}\Delta t$ e $t + \frac{1}{2}\Delta t$, o que torna esse integrador tão eficiente como o de Euler. Porém, para calcular o instante a seguir diretamente a partir do instante atual, usa instantes intermediários, o que não cria problema do ponto de vista da aproximação.

Na prática, a velocidade de cada partícula é calculada nos pontos médio dos intervalos de tempo (figura 4.2) e a posição nos pontos inteiros. Assim, posição e velocidade são avaliadas intercaladamente da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_i\left(t + \frac{1}{2}\Delta t\right) &= \mathbf{v}_i\left(t - \frac{1}{2}\Delta t\right) + \Delta t \mathbf{a}_i(t) \\ \mathbf{x}_i\left(t + \Delta t\right) &= \mathbf{x}_i(t) + \Delta t \mathbf{v}_i\left(t + \frac{1}{2}\Delta t\right). \end{aligned} \quad (4.1)$$

Quando é preciso calcular a velocidade em um passo de tempo inteiro, ela pode ser interpolada a partir dos passos intermediários. O mais simples é calculá-la através da média entre as velocidades anterior e posterior:

$$\mathbf{v}_i(t) = \frac{1}{2} \left[\mathbf{v}_i\left(t + \frac{1}{2}\Delta t\right) + \mathbf{v}_i\left(t - \frac{1}{2}\Delta t\right) \right]. \quad (4.2)$$

Além disso, a inicialização do método requer uma etapa adicional no cálculo da velocidade $\mathbf{v}_i\left(-\frac{1}{2}\right)$ através do método de Euler

$$\mathbf{v}_i\left(-\frac{1}{2}\right) = \mathbf{v}_i(0) - \frac{1}{2}\Delta t \mathbf{a}_i(0). \quad (4.3)$$



Ao contrário da diferença para frente usada no integrador de Euler, o integrador leap-frog é reversível no tempo devido à forma simétrica na qual ele é definido. A reversibilidade no tempo é uma propriedade importante, pois ela garante conservação de energia do sistema.

Exercício (fácil). Baseado na análise do método de Euler, mostre que o integrador leap-frog é um integrador de ordem 2:

$$\left(\frac{d\mathbf{v}}{dt}(t) \right)_{\text{leap-frog}} = \frac{d\mathbf{v}}{dt}(t) + O((\Delta t)^2) .$$

4.1.3 Estimativa de passo de tempo

Nos métodos anteriores, vimos que idealmente a derivada temporal discreta converge para a derivada caso o passo de tempo Δt tende a zero. Na prática, porém, é impossível usar o passo de tempo muito pequeno, pois é preciso ter uma resposta da simulação em um tempo razoável. Assim, existe um meio-termo entre a precisão do método e o tempo de resposta. Observe ainda que os computadores tem dificuldades em manipular diferenças muito pequenas de números, gerando erros numéricos quando o passo de tempo é pequeno demais, o que pode tornar certas simulações impossíveis com métodos existentes, mesmo com tempo infinito!

Para estimar a priori o passo de tempo de uma simulação, podemos usar dois tipos de avaliações: físicas e numéricas. A avaliação física é relacionada às propriedades do material simulado, geralmente caracterizado pela velocidade do som c no material. Essa velocidade caracteriza a velocidade máxima com a qual uma modificação se propaga mecanicamente. Por exemplo, no método SPH, uma partícula influencia as suas vizinhas dentro de um raio κh . Essa influência ocorre com velocidade $\frac{\kappa h}{\Delta t}$, que não pode exceder a velocidade c , obtendo assim $\Delta t < \frac{\kappa h}{c}$. Considerações similares podem gerar outros valores máximos de passo de tempo, como por exemplo, em relação às propriedades perto de turbulências.

Outra estimativa do passo de tempo é dada pela condição de estabilidade de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL), obtida em 1928, pelos professores Richard Courant, Kurt Friedrichs e Hans Lewy. Ela se

aplica a priori para soluções através do método de diferenças finitas para fenômenos regidos por EDP's hiperbólicas. Ela pode ser extrapolada ao método SPH, em um passo de tempo adaptativo determinado pela expressão [120]:

$$\Delta t = 0.1 \min_i \left\{ \frac{h}{\|\mathbf{v}_i\| + c}, \frac{h^2 \rho_i}{8 \mu_i} \right\}. \quad (4.4)$$

Exercício (médio). No caso de um passo de tempo Δt adaptativo, respeitando a condição CFL, quais modificações devem ser feitas nos coeficientes de derivação e interpolação do método leap-frog?

4.2 Tratamento da fronteira

A simulação de fluidos a partir das equações de Navier-Stokes pode ser vista como um grande problema de equações diferenciais parciais. A solução desse tipo de equações depende fortemente das condições iniciais e de fronteira. O comportamento dos fluidos perto da fronteira, porém, tem uma física muito particular, onde podem se misturar tensão superficial (no caso de fronteira livre), colisão e fricção (gás em fronteira rígida), molhamento (líquido perto de um meio permeável), capilaridade... Além do significado físico da própria condição de fronteira das equações, em termo de velocidade e pressão. Esses fenômenos complexos intervêm em várias escalas, e são ainda mal modelados pela física.

Portanto, a incorporação de condições de fronteira nas simulações é um problema complexo, onde ainda não se tem uma solução corretamente fundamentada. Essa seção menciona apenas três aspectos mais usuais: a avaliação dos operadores SPH perto da fronteira, a modelagem da interação com a fronteira e as condições limites com o tratamento das descontinuidades decorrentes.

4.2.1 Operadores SPH na fronteira

A definição de continuidade, derivação e outras operações básicas de análise funcionam em uma vizinhança de um ponto do domínio. Portanto, trata-se essencialmente de conjuntos abertos. A fronteira de um fluido é o bordo do domínio, e portanto fechado. A definição de



derivadas nesses casos é delicada. A solução matemática usual seria o uso dos teoremas de Stokes (recapitulados no apêndice), relacionando médias de derivadas em um domínio com médias no bordo desse domínio. Essa solução não cabe na prática, pois nem sempre podemos estimar essas médias no bordo. Outras soluções rigorosas poderiam ser propostas, porém precisar-se-ia entender melhor as próprias equações de Navier-Stokes, o que é um problema em aberto. Sobram então heurísticas. Mencionaremos duas heurísticas que exemplificam duas estratégias comuns: definir operadores truncados na fronteira e estender o domínio para a fronteira se tornar uma interface.

A primeira estratégia consiste em definir corretamente uma aproximação SPH perto da fronteira. Tipicamente, podemos imaginar as partículas no semi-plano $x > 0$ e tentar estimar a densidade (operador direto) ou o termo viscoso (operador derivado) em um ponto perto de $x = 0$. Se usarmos diretamente os operadores introduzidos no capítulo 2, perderíamos o requisito de normalização do núcleo: se a integral do núcleo no plano inteiro é 1, será menor no semi-plano. Uma opção simples seria de forçar a normalização na fronteira, dividindo a aproximação pelo valor médio do núcleo:

$$f_i = \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} f_j W_{ij} / \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} W_{ij} .$$

Essa correção foi proposta por Chen-Beraun [23], porém, não podemos estendê-las para operadores de derivada, pois o valor médio dos núcleos derivados tem que ser 0. Por outro lado, a derivada na direção ortogonal à fronteira não é bem definida, portanto usa-se geralmente a normalização do núcleo não derivado.

A segunda estratégia consiste em estender o domínio, acrescentando partículas fora da fronteira, chamadas de partículas fantasmas (*ghost particles*) [113]. Nesse caso, a avaliação SPH continua geralmente igual à avaliação do interior do domínio, porém, as partículas fantasmas não podem ser transportadas (mudar de posição) normalmente para elas não entrem no interior do domínio. Agora é preciso definir a posição dessas partículas, e as quantidades físicas que elas carreguem para a aproximação SPH.

A posição dela é geralmente definida como sendo a reflexão de partículas reais situadas perto da fronteira. Isso permite atribuir facilmente às quantidades físicas das partículas fantasmas como iguais ou simétricas (mudança de sinal) das partículas reais. Observe que, no primeiro caso (quantidade iguais), os gradientes serão ortogonais à fronteira. O problema dessa opção é que, se houver deficiência de partículas (poucas partículas em um dado volume), o que é comum perto da fronteira, as partículas fantasmas não compensariam muito essa deficiência.

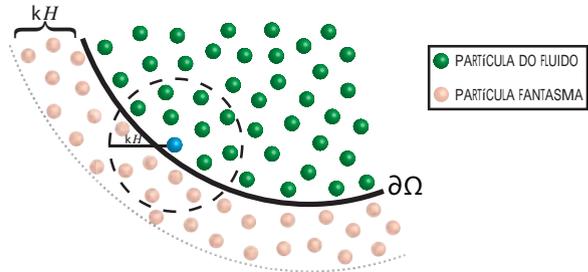


Figura 4.3: As partículas fantasmas são utilizadas para estender o domínio da simulação.

Outra opção para evitar essa deficiência é colocar partículas fantasmas regularmente em uma faixa fora da fronteira (ver figura 4.3). Isso tem a vantagem de garantir a concentração de partículas, porém torna mais trabalhoso a definição das propriedades físicas nestas partículas fantasmas. Imitando o caso anterior, podemos avaliar essas quantidades por simetria, usando a interpolação SPH dentro do domínio perto da posição simétrica à partícula fantasma.

Exercício (fácil). No caso bidimensional, com fronteira vertical em $x = 0$ e uma distribuição regular (em uma grade) de partículas, calcule a aproximação SPH da função $f(x) = x^2 + y^2$ no ponto $(0; \frac{1}{2})$ usando as estratégias mencionadas acima.



4.2.2 Interação com a fronteira

A interação com a fronteira tem geralmente dois aspectos: confinar as partículas no domínio da simulação, isso é, evitar que as partículas escapem, e aproximar as forças físicas ocorrendo na fronteira. Detalharemos aqui duas técnicas para modelar fronteiras sólidas: potenciais repulsivos [113] e colisão [135].

O tratamento de fronteiras sólidas no SPH proposto por Monaghan em [113], aproveita a estratégia das partículas fantasmas descrita na seção anterior. No modelo dele, as partículas fantasmas geram forças altamente repulsivas e assim previnem a interpenetração de partículas do fluido nas fronteiras sólidas do problema. Essa força de repulsão é calculada usando uma expressão matemática semelhante à do potencial de Lennard-Jones utilizado em dinâmica molecular [7]. Portanto, a força de repulsão sobre uma partícula de fluido i que colide com uma partícula fantasma g é

$$\Gamma_{ig} = \begin{cases} C \left[\left(\frac{r_0}{r_{ig}} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r_{ig}} \right)^4 \right] \frac{\mathbf{x}_{ig}}{r_{ig}^2}, & \frac{r_0}{r_{ig}} \leq 1 \\ 0, & \frac{r_0}{r_{ig}} > 1 \end{cases}, \quad (4.5)$$

com $\mathbf{x}_{ig} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_g$, $r_{ig} = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_g\|$. A constante C depende do problema e deve ser da mesma ordem de grandeza do quadrado da maior velocidade esperada no escoamento. O raio de interação r_0 é importante na simulação. Pois se for escolhido um valor muito alto para r_0 , a força de repulsão pode causar uma grande perturbação no estado inicial das partículas e conseqüentemente arruinar toda a simulação. Se for escolhido um valor pequeno, a força de repulsão não será suficiente para evitar a interpenetração de partículas na fronteira. Na maioria dos casos, é recomendado r_0 ser um valor próximo da distância inicial das partículas do sistema.

Uma das maiores dificuldades da abordagem acima é a de modelar fronteiras que possuem geometria complexa através de partículas fantasmas. Além disso, o potencial artificial incrementa a energia total do sistema físico, enquanto o comportamento da fronteira é geralmente de absorver energia. Finalmente, o potencial de Lennard-Jones não pode garantir que as partículas sejam corretamente confinadas no domínio. Por outro lado, se as partículas fantasmas são obtidas sem maiores dificuldades, então essa é uma estratégia fácil de implementar e, portanto, tornou-se popular na literatura.

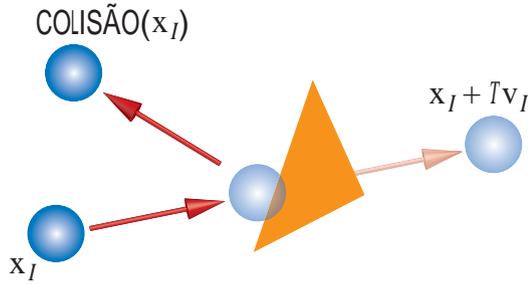


Figura 4.4: Resposta da colisão partícula \times triângulo.

Para evitar esses problemas, pode-se usar uma abordagem puramente geométrica, calculando explicitamente a resposta da colisão com a fronteira (ver figura 4.4). A colisão geométrica é muito adequada quando a fronteira é descrita usando uma malha triangular, o caso mais comum na computação. A colisão atualiza a posição e a velocidade da partícula, na qual a trajetória intersecta a fronteira. A dificuldade do método é detectar de forma eficiente o teste de interseção. Uma maneira eficiente é usar a estrutura de busca de partículas vizinhas, descrita no final desse capítulo [130].

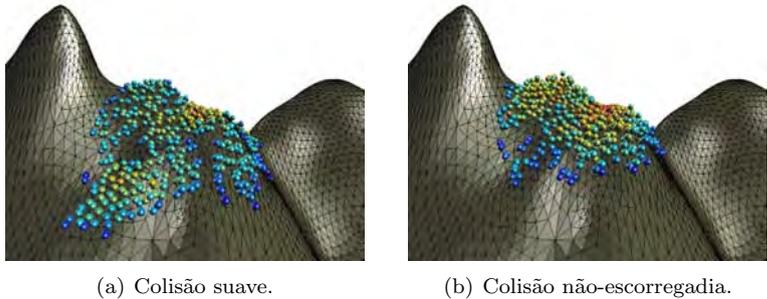


Figura 4.5: Simulação de um escoamento de lava após 1910 iterações com colisão suave (esquerda) e com colisão não-escorregadia (direita), com os mesmos parâmetros: 545 partículas e 9566 triângulos na fronteira. O mapa de cores representa a densidade de cada partícula. A colisão suave faz a lava deslizar mais rapidamente.



As novas posição e velocidade da partícula podem seguir simplesmente a lei de Snell-Descartes (ver figura 4.4). Em uma colisão perfeitamente elástica é invertida apenas a componente normal da velocidade. Para colisões suaves, a componente tangencial e normal podem ser escaladas por coeficientes constantes entre 0 e 1, o coeficiente que dissipa a velocidade tangencial é chamado de *coeficiente de fricção* enquanto o que dissipa a velocidade normal é conhecido como *coeficiente de restituição*. Nos casos em que ambos os coeficientes são 0 a colisão é dita *não-eskorregadia* (ver figura 4.5). Essa dissipação simples na velocidade de resposta permite simular a absorção de energia gerada pela colisão com o bordo.

Exercício (médio). *Em 2D, considere uma fronteira descrita com partículas fantasmas colocadas nas posições inteiras do eixo y . Calcule a trajetória de uma partícula com velocidade $\mathbf{v} = (-1, -1)$ perto da fronteira, submissa apenas ao potencial de Lennard-Jones. Calcule a energia cinética da partícula ao longo do tempo.*

4.2.3 Condições de contorno

A modelagem física usual utiliza equações diferenciais para prever o comportamento de um sistema a partir das condições limites. Dadas as equações de Navier-Stokes e as propriedades físicas, essas condições determinam inteiramente o comportamento do sistema. São geralmente as propriedades iniciais do fluido, o domínio e as propriedades do fluido forçadas pela interação com a fronteira. Tipicamente, a temperatura de um gás confinado é constante na fronteira, pois o exterior atua como regulador. Na prática, isso significa que qualquer partícula perto da fronteira (nenhuma está exatamente *na* fronteira) manterá a sua temperatura constante durante a simulação, independente das interações térmicas com as vizinhas.

Esses tipos de condições de contorno são as mais simples e as mais usadas nas simulações numéricas. As mais clássicas são: a velocidade perpendicular à fronteira (condição *no slip*), o gradiente da pressão perpendicular ao bordo (interpretação da equação da continuidade), temperatura constante. . .

Infelizmente, essas condições introduzem descontinuidades no sistema. Na abstração diferencial, a condição afeta o bordo que é fora do domínio, mas na simulação, assim como o tratamento da fronteira da seção anterior, ela afeta uma camada perto do bordo. As quantidades físicas aproximadas perto da transição entre a camada perto do bordo e o interior podem não ser diferenciáveis. Por um lado, a aproximação SPH suaviza essas quantidades (SPH começa por *smoothed*), e por outro lado é um problema de aproximação discreta onde uma amostragem pode aproximar várias funções, inclusive C^∞ . As descontinuidades, porém, mudam o modelo físico, além de geralmente causar instabilidades numéricas.

Um paliativo heurístico a esse problema é impor as condições de contorno explicitamente em uma camada limite perto da fronteira, em vez de impô-las integralmente para as partículas perto do bordo. Por exemplo, a condição de temperatura fixa pode, em vez de fixar a temperatura das partículas que tocam bordo e deixá-las logo depois livre, pode-se definir que a temperatura deve variar linearmente dentro de uma camada um pouco maior perto do bordo. Se a temperatura do bordo for 0, isso pode ser simplesmente calculado multiplicando as temperaturas por um fator proporcional a distância da partícula ao bordo. No fundo, troca uma condição de fronteira descontínua (sim ou não) por uma interpolação mais suave (linear, quadrática...), permitindo uma melhor aproximação das derivadas.

Exercício (*difícil*). *No caso unidimensional, calcule a dissipação de calor ($\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla^2 T$) de uma barra identificada com o semi-eixo $x > 0$ e mantida à temperatura T_0 na fronteira $x = 0$, usando a solução diferencial, a solução SPH com partículas fixas nos pontos inteiros do eixo $x > 0$, com e sem camada limite.*



4.3 Busca de partículas vizinhas

Todos os cálculos dos operadores SPH são realizados através de somas sobre partículas vizinhas. Esse aspecto é parecido com a maioria dos métodos de simulação, porém no SPH as partículas mudam de posição ao longo do tempo. Portanto, as partículas vizinhas nem sempre são as mesmas, e precisa-se então buscar as partículas vizinhas de cada partícula com frequência. Se o algoritmo de busca não for bem desenhado, essa tarefa pode tomar quase todo o tempo do processador, tornando-a inviável. Essa seção mostrará os algoritmos e as estruturas de dados usuais para calcular os vizinhos de forma eficiente.

A dificuldade é que não se tem uma solução universal: uma partícula de um gás não confinado, ocupando uma fração pequena do domínio, terá um número variável de vizinhos dependendo se está em uma região densa ou esparsa, enquanto em um líquido o número de vizinhos é mais estável. Também, se tiver um número muito grande de partículas, armazenar todos os vizinhos pode ser proibitivo para a memória da máquina. Dá ainda para aproveitar certas propriedades, por exemplo, se o passo de tempo da simulação é muito pequeno, os vizinhos mudam pouco. . . Esses aspectos são as restrições de um grande problema de **otimização combinatória** para conseguir o melhor desempenho da simulação.

4.3.1 Força bruta

O algoritmo mais simples é considerar cada par de partículas, e testar se elas estão em uma distância inferior à κh . Esse algoritmo é chamado de força bruta, pois precisa de muito esforço computacional e pouco trabalho de raciocínio. É importante entender porque o algoritmo pode ser desastroso, e como podemos torná-lo ótimo em certas configurações.

Considere que o sistema tem n partículas, e que elas têm na média k vizinhos. Para se ter uma ordem de grandeza, n é da ordem de milhares a centenas de milhares, e k é de algumas dezenas. O tempo de busca será o número de pares distintos ordenados de partículas $\frac{n(n-1)}{4}$ vezes o tempo de achar os pares e efetuar os testes para ver se são duas partículas vizinhas, e ainda o tempo de retornar as kn vizinhas.

Se n é muito grande, o tempo cresce como $O(n^2)$, que pode significar séculos de computação! Em compensação, esse sistema não usa nenhuma estrutura de dados e, portanto, não tem nenhum requisito de memória adicional.

Esse método pode ser melhorado significativamente com duas observações. No caso que as partículas se movem pouco a cada passo, ou porque o passo de tempo é pequeno ou porque o fluido é muito viscoso, os vizinhos de uma partícula raramente mudam. Assim, basta calcular os vizinhos apenas quando mudam; esse processo é chamado de *atualização preguiçosa*. Na verdade, podemos testar explicitamente se uma partícula vai mudar de vizinho: se ela percorreu mais de $\frac{1}{2}\kappa h$. Nesse caso, temos que re-calcular os vizinhos dela e atualizar os vizinhos antigos. Isso ocorre a cada $\bar{t} = \frac{\kappa h}{2\bar{c}\Delta t}$ passos de tempo em média, onde \bar{c} é a velocidade média de uma partícula. O custo da busca é amortecido de um fator \bar{t} ao longo da simulação. Se \bar{t} for comparável com n , a busca força bruta com a atualização preguiçosa pode ser muito eficiente.

Outra melhoria eficiente vem da seguinte observação: se uma partícula se afasta dos seus vizinhos, ela geralmente não vai muito longe. Assim, não precisa buscar os vizinhos em uma posição qualquer, mas apenas nos vizinhos dos vizinhos. Isso requer que o deslocamento das partículas a cada passo seja pequeno, mas em compensação restringe o número de pares a considerar de $\frac{n(n-1)}{4}$ para $\frac{nk^2}{2}$.

Exercício (fácil). Calcule o custo em tempo de execução da busca se for combinar a força bruta com a atualização preguiçosa e o cálculo pelos vizinhos.

4.3.2 Busca em grades

É possível obter os vizinhos de uma partícula com um tempo que não cresce com o número de partículas (chamado de $O(1)$). Mais ainda, podemos acelerar a busca condicionados a gastar um pouco mais de memória. Esse caso é particularmente interessante se o raio h de cada partícula é constante ou tenha apenas pequenas variações, aplicação típica em simulações de líquido ou, mais geralmente, fluidos incompressíveis. Nesse caso, podemos construir uma grade regular em cima do domínio de simulação, de intervalo κh_{max} em cada dimensão, onde



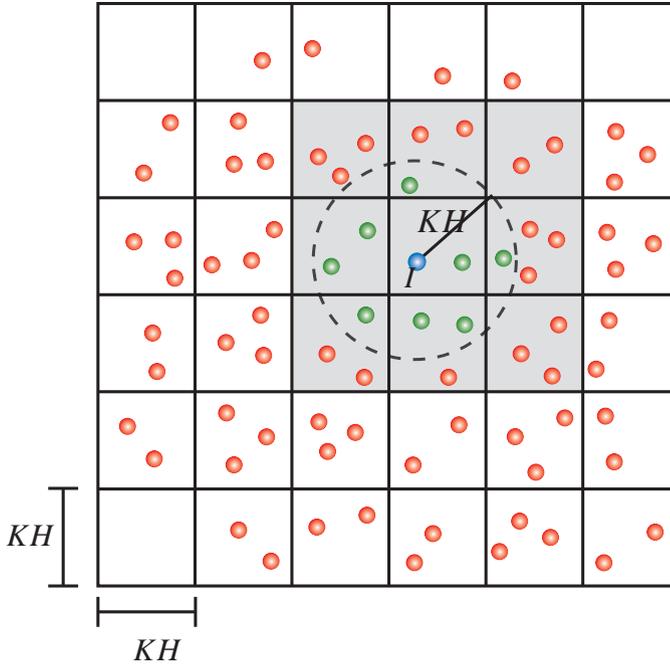


Figura 4.6: Busca das partículas vizinhas utilizando uma grade uniforme bi-dimensional com o espaçamento sendo o raio de influência κh . A região cinza representa as células da grade onde será realizada a busca.

h_{max} é o maior raio de uma partícula ao longo da simulação. Essa grade particiona as partículas de acordo com a posição delas. Pela escolha do intervalo, as partículas vizinhas da partícula i só podem estar na mesma célula ocupada pela partícula i ou em suas células diretamente adjacentes (figura 4.6). Assim, a busca por partículas que possuem uma distância menor do que κh a partir da partícula i é restrita a 3^n células, onde n é a dimensão do espaço.

Esse algoritmo é extremamente eficiente para domínios densos e compactos. Alguns cuidados podem ainda melhorá-lo: primeiro, para evitar desperdício de memória, deve-se orientar a grade, retangular,

para cobrir o domínio com o mínimo de área fora do domínio. Isso é feito usualmente calculando as direções da grade por uma decomposição em valores singulares (SVD) da matriz de covariância dos pontos da fronteira. Segundo, em vez de apagar a grade a cada passo de tempo e preencher ela com as novas posições, pode-se apenas atualizá-la quando uma partícula sai de uma célula. Isso não muda a complexidade assintótica do algoritmo, mas geralmente melhora o seu desempenho. Finalmente, para evitar o carregamento de pedaços de memória em ordem não linear, acessando todas as células vizinhas, pode-se armazenar cada partícula na sua célula e nas suas vizinhas. Esse alto consumo de memória permite procurar apenas em uma célula os seus vizinhos.

Exercício (médio). Calcule o custo em tempo de execução da busca se for combinar a grade com a atualização preguiçosa.

4.3.3 Busca em estruturas adaptativas

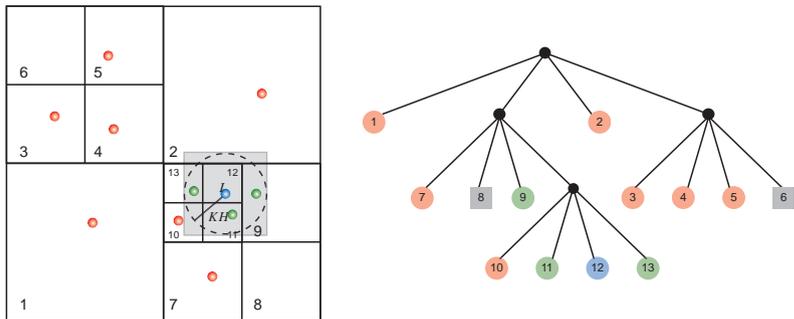
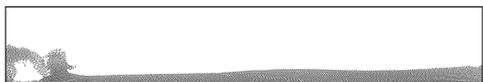


Figura 4.7: Estrutura de árvore utilizada no algoritmo de busca e a subdivisão hierárquica do espaço bi-dimensional. A busca é realizada através de um teste de intersecção do cubo envolvente da partícula i (região em cinza) com as células representadas pelos nós da árvore.

No caso que o raio de cada partícula varia (gases), ou que o domínio é em grande parte vazio (fluidos não confinados), o uso de grades regulares pode requerer quantidades importantes de memória,



pois particionam o espaço da mesma forma caso tenham fluido ou não. Uma alternativa às grades nestes casos é de usar partição adaptada do espaço, com células grandes nas regiões mais vazias e menores nas regiões densas. Assim, o número de partículas por célula estará mais homogêneo.

Existem várias estruturas adaptativas. A mais geral é a partição binária do espaço (BSP), que consiste em dividir recursivamente cada célula por um plano, gerando duas novas células chamadas de células filhas. Essa estrutura começa do domínio inteiro, e associando cada célula a suas filhas, obtém-se uma estrutura de árvore binária. A busca de partícula vizinha se resume então a percorrer a árvore, selecionando as células filhas que ainda contém uma determinada posição.

A estrutura de BSP pode ser particularizada se usar apenas planos perpendiculares aos eixos (kd-tree), e ainda se dividir cada célula no meio (octree, ver figura 4.7). Nesse último caso, a estrutura tem certa regularidade que permite representar ela de forma otimizada, e ainda melhorar o tempo de busca [21].

Finalmente, no caso extremo de gases esparsos, por exemplo, em simulação de astrofísica, as partículas podem estar tão dispersas que gerar uma estrutura a partir da geometria do domínio requiera memória demais. Nesse caso, é possível codificar a posição de cada partícula de tal modo que seja fácil agrupar os códigos vizinhos. O agrupamento dos códigos pode ser construído por estruturas comuns em computação, chamadas de tabela de dispersão (*hash table*).

Exercício (difícil). *Considerando que a BSP é construída para ter apenas uma partícula por célula na última divisão, calcule o número de divisões efetuadas para n partículas. Deduza o custo da busca baseada na BSP.*

4.4 Visualização da superfície livre

O objetivo de simular fluidos é extrair informações de um modelo físico, por exemplo, medir a sustentabilidade de um avião, avaliar a resistência de pilas de plataformas de extração de petróleo, validar modelos de astrofísica. . . As informações estão contidas nas propriedades físicas das partículas ao longo da simulação, porém apresentar uma lista de partículas com as suas respectivas propriedades não é

muito cômodo! Existem inúmeros métodos para apresentar essas informações, agrupadas na linha de pesquisa de visualização científica, como por exemplo, a representação do campo vetorial de velocidade ou do fluxo, extração de trajetórias relevantes de matéria ou detecção dos vórtices... Descrever esses métodos fugiria do foco deste texto, porém um aspecto em particular é relevante para a simulação: a representação da superfície livre do fluido.

Primeiro, a geometria da superfície livre intervém na física do fluido, através da tensão superficial e da interface com outros meios. Por exemplo, um fluido tende a evitar altas curvaturas na sua superfície, ou ainda a interação da água com o vento tem um papel forte no estudo das ondas. Segundo, a superfície livre é a maneira mais elementar de visualizar o comportamento do fluido. É necessária tanto na parte de simulação física, e ainda mais nas aplicações mais gráficas onde é o objetivo final. Veremos que a geração da superfície livre é um problema muito ilustrativo dos problemas de discretização. Em particular, veremos que não é simples definir nem a topologia dessa superfície, e que a geometria dela depende às vezes mais da maneira de gerá-la do que das propriedades físicas.

4.4.1 União de bolas

A modelagem SPH representa o fluido por partículas, associadas a um domínio de raio κh . A representação natural de cada partícula seria então por uma bola, centrada na posição da partícula. Qual seria o seu raio? Escolhemos κh e a posição inicial das partículas para ter um número suficiente de partículas vizinhas, portanto esse raio deve ser grande demais. Por outro lado, se colocarmos um raio pequeno demais, temos o risco de desconectar as partículas, gerando uma topologia indesejável. Além disso, a superfície fronteira da união de bolas tem curvatura ou localmente constante (perto de uma bola só) ou infinita (na interseção das bolas), dificultando estimativas de tensão superficial.

O problema topológico dependendo do raio é um problema clássico de geometria computacional, baseado nos diagramas de Voronoi [15]. É possível calcular de forma não tão lenta uma estrutura discreta, chamada de α -shapes [45, 109], que retorna rapidamente a topologia da união de bola para diferentes raios, mesmo se esses raios variam



proporcionalmente de partícula em partícula. Assim, pode-se escolher o menor raio possível para ter um fluido conexo. Note-se que, visto o custo de calcular essa estrutura, é recomendável construí-la apenas para alguns tempos de simulação, similarmente à avaliação preguiçosa da seção anterior.

Essa estrutura serve também para resolver parte do problema geométrico, inspirando-se nos modelos de superfície molecular. Nesse caso, também baseado em união de bolas, pode-se calcular a superfície acessível ao solvente, ou seja, a superfície obtida rolando uma esfera de raio fixo r sobre a união de bolas. Essa superfície é mais suave, tendo curvatura limitada por $\frac{1}{r}$. Cada elemento do α -shape parametriza uma parte desta superfície. A dificuldade é calcular o α -shape para cada passo de tempo eficientemente.

Exercício (fácil). *Desenhe a união de bola e a superfície acessível ao solvente para diversos raios, em um modelo de fluido em um domínio em forma de retângulo. Observe a diferença das superfícies obtidas ao se usar partículas colocadas de forma regular em uma grade e ao se usar partículas dispostas irregularmente.*

4.4.2 Formulação implícita

A formulação acima, apesar de geometricamente simples, não respeita muito o modelo SPH. De fato, o operador SPH escalar para a função constante igual a 1 permite calcular diretamente a função densidade SPH $\chi(\mathbf{x})$ do fluido em qualquer ponto \mathbf{x} do espaço \mathbb{R}^3 [122]:

$$\chi(\mathbf{x}) = \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} W_{ij} .$$

Daí, é possível definir a superfície externa S do fluido de forma implícita por $S = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \chi(\mathbf{x}) = \chi_0\}$, onde escolhermos uma densidade mínima χ_0 . Observe que não devemos escolher $\chi_0 = 0$, pois sendo o núcleo do operador SPH estritamente positivo em um raio κh , obteríamos apenas a união de bolas de raio κh descrita anteriormente. O parâmetro χ_0 deve ser escolhido no intervalo $]0, 1[$, em geral perto de 1 (ver figura 4.8).

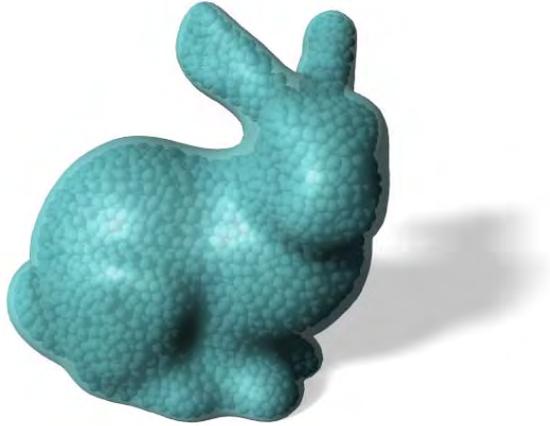
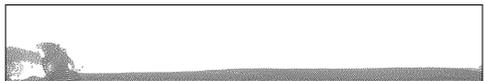


Figura 4.8: Visualização da superfície implícita extraída do modelo Stanford Bunny constituído de partículas.

Apesar dessa formulação ser mais compatível com o modelo físico, em particular com o termo de tensão superficial na versão SPH das equações de Navier-Stokes, estamos novamente com um problema de escolha de parâmetro χ_0 . Esse parâmetro, além de influenciar a geometria, influencia também a topologia. So que, nesse caso, ele representa a topologia considerada pelo modelo SPH, e é importante respeitá-la. Dentre os algoritmos para geração de superfície (malha triangular) a partir de uma equação implícita, como por exemplo, o método Marching Cubes [104], devemos então escolher um que trata corretamente a topologia [91, 132] (ver figura 4.9). Esses métodos requerem calcular a função densidade em uma grade (não necessariamente regular), e a curvatura máxima da superfície depende do χ_0 e da precisão da grade.

Exercício (médio). *Desenhe a superfície s para $\chi_0 = 1$ no caso de partículas dispostas em um semi-círculo de raio 1, uma a cada ângulo $\frac{\pi}{10}$, com $\kappa h = 0.1$.*



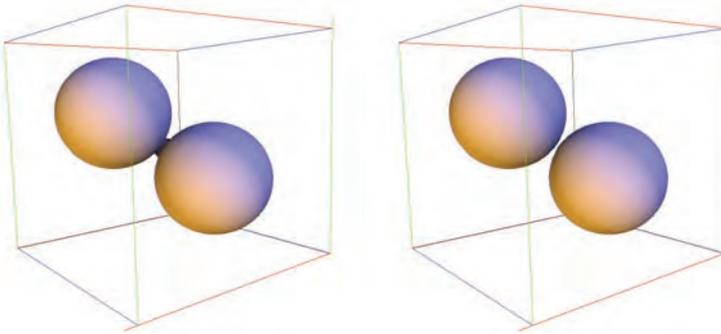


Figura 4.9: Superfície implícita de duas esferas próximas uma da outra. À esquerda a superfície é gerada através do algoritmo de MC original. À direita a superfície é gerada utilizando o algoritmo de MC com garantias topológicas.

4.4.3 Advecção da superfície

Para evitar o custo de recalculando a superfície livre a cada passo, é possível calcular a evolução da superfície a partir da velocidade das partículas em volta. Essa estratégia pode ser aplicada a vários níveis da geração de superfície. Por exemplo, pode-se transportar diretamente os vértices da malha triangular que representa a superfície. Isso permite gerar a malha apenas uma vez, mas requer muitos cuidados para evitar que apareçam triângulos degenerados, além de problemas mais sérios para conservar o volume ou para manter a coerência quando houver mudança topológica. Finalmente, é possível gerar e transportar uma superfície diretamente a partir das partículas perto da superfície livre [59], apesar de não ser tão simples identificá-las. Esses métodos, porém, permitem conservar o volume e outras propriedades físicas do fluido.

Exercício (médio). *Começando de uma malha qualquer com vértices em um parabolóide de eixo z , transporte os vértices da malha com um campo de velocidade $\mathbf{v} = (x^2 + y^2, x^2 + y^2, 1 - x)$. Observe a deterioração da aproximação da superfície livre.*

4.5 Exemplo completo

Vimos na seção anterior que cada passo tem, já na sua formulação matemática, muitas variações para representar corretamente a física ou então produzir um algoritmo que execute em um tempo aceitável. Essas seções se encaixam segundo a figura 4.1, que pode ser traduzida no seguinte algoritmo:

- 1: Inicialize o sistema
- 2: **repeat**
- 3: Faça a busca das partículas vizinhas. (seção 4.3)
- 4: **for** cada partícula i **do**
- 5: Atualize a pressão p_i . (seção 3.4.2)
- 6: **end for**
- 7: **for** cada partícula i **do**
- 8: Calcule a derivada da densidade. (equação (3.28))
- 9: Calcule a aceleração. (equação do momento (3.34))
- 10: **end for**
- 11: **for** cada partícula i **do**
- 12: Atualize \mathbf{v}_i e ρ_i com o integrador temporal. (seção 4.1)
- 13: Aplique a condição de fronteira (seção 4.2) e faça as correções numéricas. (essa seção)
- 14: **end for**
- 15: Atualize Δt usando a condição CFL.
- 16: $tempo = tempo + \Delta t$
- 17: **until** $tempo < tempo_{total}$

Esse processo, em particular os passos ainda não descritos (inicialização, correções numéricas), será visto no exemplo clássico da aplicação do método SPH em superfície livre: a simulação da quebra de uma barragem [113] (*dam break*), ilustrado na figura 4.10 e no rodapé deste livro. O problema consiste em um volume de água confinado em uma região cúbica de um canal onde é instantaneamente retirada a barragem da represa. O método SPH é utilizado para simular o comportamento da queda da coluna de água.



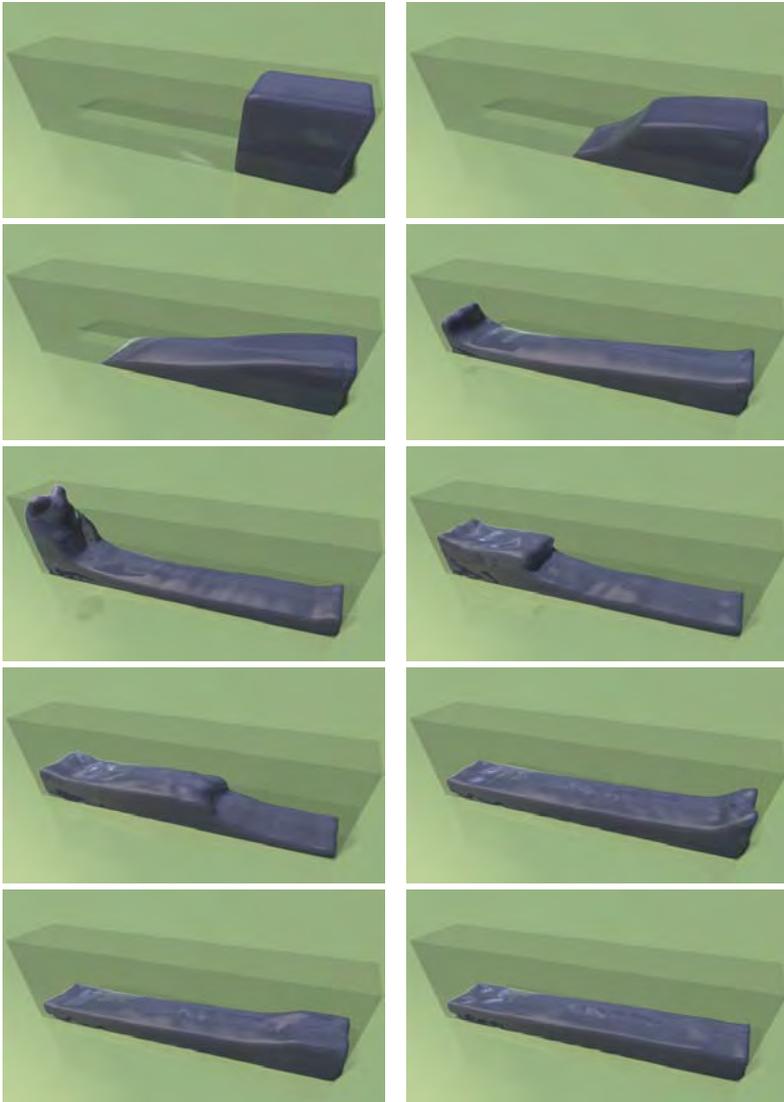


Figura 4.10: Simulação SPH da quebra de uma barragem utilizando 10^4 partículas.

4.5.1 Inicialização

O domínio é definido e discretizado. Nesse caso simples, o domínio é um paralelepípedo, e cada face dele é representada por dois triângulos retângulos. O fluido é inicialmente colocado em um paralelepípedo menor (ver figura 4.11). Dado o volume total do fluido V , a massa de

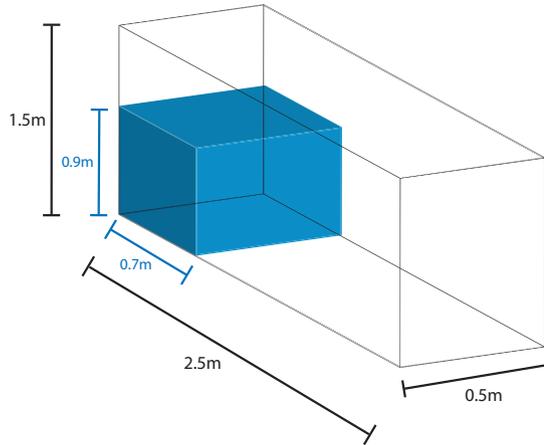


Figura 4.11: Configuração inicial do problema.

uma partícula i é determinada por $m_i = \rho_0 \frac{V}{n}$, sendo n o número total de partículas do sistema. Cada partícula do sistema é representada por uma esfera, logo o raio de uma partícula i é

$$r_i = \sqrt[3]{\frac{3}{4} \frac{m_i}{\rho_0 \pi}} .$$

Já que o fluido que queremos simular é incompressível, manteremos o raio r_i fixo durante a simulação.

Na simulação do problema utilizamos 10^4 partículas (figura 4.10), portanto a massa de cada partícula vale $m_i = 3.15 \times 10^{-2}$ kg. As partículas são inicialmente geradas em uma grade uniforme onde o raio de influência κh é tomado como sendo 1.2 vezes o tamanho do espaçamento da grade, recomenda-se que em simulações SPH que o número de partículas vizinhas seja no mínimo 20 em simulações 2D e 56 em simulações 3D [94].



4.5.2 Estimativa dos parâmetros físicos

O sistema é iniciado com densidade inicial da água sendo $\rho_0 = 1000\text{kg/m}^3$, a viscosidade $\mu = 10^{-3}\text{Ns/m}^2$ e a gravidade $\mathbf{g} = 9.8\text{m/s}^2$. A velocidade característica do escoamento \mathbf{v}_e é estimada a partir da conservação de energia mecânica do sistema (transformação de energia potencial em cinética), segue que

$$\frac{m\mathbf{v}_e^2}{2} = mgH, \quad (4.6)$$

como a coluna de água possui altura $H = 0.9\text{m}$, logo $\mathbf{v}_e = \sqrt{2\mathbf{g}H} = 4.2\text{m/s}$. Assim, podemos estimar a velocidade do som $c \approx 42\text{m/s}$ e obter a constante $B = 252\text{kPa}$ da equação de estado.

A velocidade do som não corresponde necessariamente à velocidade do som física. Isso é infelizmente uma necessidade da discretização, e cada modelo numérico terá uma correção particular. Observe que foi o mesmo caso quando foram estabelecidas as velocidades do som para os modelos diferenciais da física.

Além disso, cada partícula carrega os seguintes atributos físicos:

Atributo	Descrição
\mathbf{x}	posição
\mathbf{v}	velocidade
$\mathbf{v}_{1/2}$	velocidade para o integrador
\mathbf{a}	aceleração
\mathbf{D}	tensor de deformação
ρ	densidade
η	viscosidade
T	outros atributos: temperatura. . .

4.5.3 Suavização da velocidade: XSPH

Com o objetivo de prevenir a interpenetração de partículas, a qual pode gerar aglomerados instáveis de partículas, Monaghan [117] introduziu a técnica XSPH que consiste em calcular uma média das velocidades das partículas vizinhas. A técnica permite que as partículas se movimentem de uma forma mais suave em um escoamento incompressível, reduzindo o problema de desordem de partícula nas simulações SPH (figura 4.12).

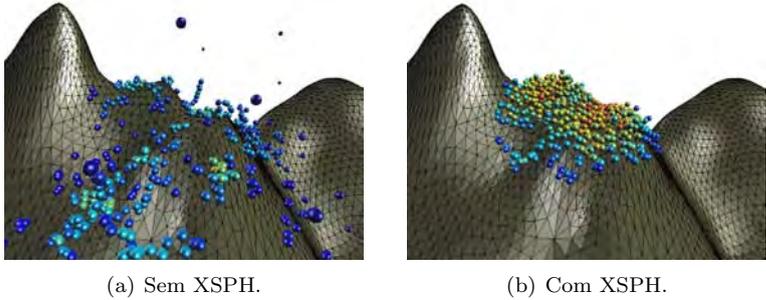


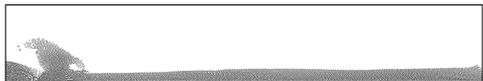
Figura 4.12: Simulação de um escoamento de lava após 1910 iterações, sem XSPH (esquerda) e com a correção XSPH (direita), com a mesma configuração da figura 4.5. A simulação explode sem XSPH, devido à distância arbitrariamente pequena entre as partículas.

Na técnica XSPH, a velocidade de cada partícula i é corrigida através da média das velocidades de suas partículas vizinhas ponderada por um parâmetro global constante $\varepsilon \in [0, 1]$ da seguinte forma:

$$\mathbf{v}_i \leftarrow \mathbf{v}_i + \varepsilon \sum_{j \in V_i} \frac{2m_j}{\rho_i + \rho_j} (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) W_{ij} .$$

4.5.4 Correção numérica: viscosidade artificial

Para evitar instabilidades numéricas devidas às oscilações nos campos vetoriais da velocidade e pressão, no caso da pressão ser calculada por uma equação de estado, existe uma técnica muito comum em elementos finitos e diferenças finitas que consiste em adicionar um termo de



viscosidade artificial na equação de momento a fim de dissipar essas oscilações indesejadas. Isso é feito da seguinte forma:

$$\frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} \leftarrow \frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} + \sum_{j \in V_i} m_j \Pi_{ij} \nabla_i W_{ij}.$$

O efeito da viscosidade artificial em sistemas SPH se deve ao seguinte termo:

$$\Pi_{ij} = \begin{cases} \frac{2\lambda\alpha_{ij}c}{\rho_i + \rho_j}, & \mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{x}_{ij} < 0 \\ 0, & \mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{x}_{ij} \geq 0 \end{cases} \quad \text{com} \quad \alpha_{ij} = \frac{h(\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{x}_{ij})}{r_{ij}^2 + 0.01h^2},$$

com $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$. A constante λ corresponde à viscosidade volumétrica. Geralmente, o valor de λ é tomado próximo de 1.

É ainda possível calcular a pressão exatamente para garantir a incompressibilidade a partir de uma versão SPH da equação de Poisson [137], como será exposto no próximo capítulo.

Capítulo 5

Incompressibilidade SPH

Nesse capítulo apresentaremos uma variação do método SPH para a simulação de escoamentos incompressíveis, onde a condição de incompressibilidade do escoamento é obtida através do cálculo da pressão por uma equação de Poisson.

Na seção 5.3, a solução numérica para uma equação de Poisson é obtida nas partículas que representam o domínio da simulação como solução de um sistema linear resultante da discretização da equação de Poisson através dos operadores SPH. O cálculo da pressão usa essa solução SPH para a equação de Poisson no contexto do método da projeção (seção 5.2). Esse método projeta a velocidade obtida pela equação do momento (omitindo o gradiente da pressão) em um espaço de divergência nula, garantindo a conservação de massa do sistema (equação da continuidade). A projeção pode ser interpretada como a subtração de um campo gradiente (componente irrotacional) do campo de velocidade.

A solução da equação de Poisson no contexto SPH permitirá simulações de fluidos incompressíveis inteiramente lagrangeana usando o método apresentado no final desse capítulo (seção 5.4).



5.1 Pressão em fluidos incompressíveis

O processo de solução das equações de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis

- equação do momento

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \frac{\mu}{\rho}\nabla^2\mathbf{v} + \mathbf{f}, \quad (5.1)$$

- equação da continuidade

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (5.2)$$

requer que cada variável tenha uma equação evolutiva no tempo. Nessas equações, porém, não existe nenhum termo que determine a variação temporal da pressão p .

Vimos no capítulo 3 que no método SPH, tradicionalmente, um fluido incompressível é representado através de um fluido quase-incompressível, isto é, as equações de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis são resolvidas por meio de técnicas numéricas utilizadas em escoamentos compressíveis. Tal técnica é conhecida como *incompressibilidade artificial* [51]. Em particular, em aplicações do método SPH a pressão é calculada através de uma equação de estado:

$$p = p(\rho).$$

Em escoamentos incompressíveis, porém, a pressão p não pode ser obtida em função da densidade, pois a densidade deveria ser constante, e assim ∇p representaria mais o erro de aproximação do que uma quantidade física. Além disso, fisicamente, a pressão não é uma grandeza termodinâmica nesse tipo de escoamento. Resultados utilizando essa abordagem são aceitáveis em algumas aplicações, como por exemplo, para simulações de superfície livre com baixos números de Reynolds [120]. Em escoamentos confinados ou com altos números de Reynolds, porém, essa abordagem requer um passo de tempo de integração muito pequeno [32]. Vale enfatizar que, nessa abordagem, a condição de incompressibilidade do escoamento (equação (5.2)) pode não ser satisfeita pelo campo de velocidade obtido.

Em simulações de escoamentos incompressíveis queremos que, durante toda a simulação, o campo de velocidade obtido em cada instante de tempo tenha divergência nula, o que é de extrema importância devido ao seu significado físico: conservação de massa. Na literatura, existe uma classe de métodos para simular escoamentos incompressíveis, na qual o papel desempenhado pela pressão é fazer com que o campo de velocidade, obtido a partir da equação do momento, satisfaça a condição de incompressibilidade. Essa classe de métodos é conhecida como *método da projeção*.

5.2 Método da projeção

O método da projeção foi introduzido na década de 60 por Chorin [24] para simular escoamentos incompressíveis eficientemente. Rigorosamente falando, o método da projeção é baseado na seguinte filosofia: em escoamentos incompressíveis, a pressão não exerce nenhum significado termodinâmico, comportando-se apenas como um meio (de forma mais precisa: como um multiplicador de Lagrange) para obter a incompressibilidade do escoamento.

O método da projeção pode ser separado em duas etapas. No primeiro passo, um campo de velocidade é calculado utilizando a equação do momento (5.1) omitindo o gradiente da pressão e, portanto, sem que a condição de incompressibilidade (equação (5.2)) seja satisfeita. No segundo passo, o campo de velocidade é *projetado* no sub-espaço de divergência nula, obtendo assim um novo campo de velocidade, dessa vez satisfazendo a condição de incompressibilidade.

A formulação do método da projeção será apresentada adicionando certas hipóteses às variáveis do escoamento (p , ρ e \mathbf{v}). Nesse intuito, a seguinte decomposição ortogonal de campos vetoriais será útil:

Decomposição de Helmholtz-Hodge: Seja Ω uma região no espaço (ou no plano) com fronteira suave $\partial\Omega$. Um campo vetorial \mathbf{w} definido em Ω pode ser unicamente decomposto na forma

$$\mathbf{w} = \mathbf{u} + \nabla\phi,$$

onde a componente \mathbf{u} tem divergente nulo e é paralelo à fronteira do domínio, isto é, $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$ em $\partial\Omega$, onde \mathbf{n} é o vetor normal a fronteira.



Pela decomposição de Helmholtz-Hodge é natural introduzir o operador de projeção ortogonal \mathcal{P} , o qual mapeia qualquer vetor \mathbf{w} em Ω em sua componente de divergência nula \mathbf{u} . O operador de projeção \mathcal{P} , portanto, é bem definido, linear e pode-se escrever $\mathbf{w} \in \Omega$ como:

$$\mathbf{w} = \mathcal{P}(\mathbf{w}) + \nabla\phi.$$

Além disso, vale notar que

$$\mathcal{P}(\mathbf{u}) = \mathbf{u},$$

desde que $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ e $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$ e

$$\mathcal{P}(\nabla\phi) = 0.$$

Em um escoamento com densidade constante ($\rho = \rho_0$), a equação do momento (5.1) pode ser reescrita da seguinte maneira

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla p' + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{f},$$

onde $p' = \frac{p}{\rho_0}$ e $\nu = \frac{\mu}{\rho_0}$. Ao aplicar o operador de projeção \mathcal{P} na equação acima, tem-se

$$\mathcal{P} \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = \mathcal{P} (-\nabla p' + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{f}).$$

Assumindo que o campo de velocidade \mathbf{v} tem divergente nulo e é nulo na fronteira, o mesmo acontece para $\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}$ (supondo \mathbf{v} suficientemente suave). Além disso, o resultado da projeção do campo gradiente é o vetor nulo: $\mathcal{P}(\nabla p) = \mathbf{0}$. Portanto, pelas propriedades do operador de projeção, tem-se

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \mathcal{P} (-\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{f}).$$

Essa forma das equações de Navier-Stokes elimina o termo que envolve a pressão e expressa $\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}$ em função da própria velocidade \mathbf{v} e das forças externas \mathbf{f} . A pressão, por sua vez, pode ser obtida como a componente irrotacional de

$$-\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{f}.$$

Essa nova formulação das equações de Navier-Stokes não é somente de interesse teórico, esclarecendo o papel da pressão, mas também é de interesse prático no desenvolvimento de algoritmos numéricos eficientes na simulação de fluidos incompressíveis.

Várias versões numéricas do método da projeção podem ser encontradas, onde diferentes hipóteses a cerca das variáveis da simulação são utilizadas. Podemos citar, os trabalhos pioneiros de Chorin [25] e Temam [160], onde condições de contorno periódica foram utilizadas. Posteriormente, para condição de fronteira não escorregadia (velocidade nula na fronteira), Shen [144, 145] mostrou a convergência e algumas estimativas de erros para vários métodos da projeção. Um estudo sobre várias versões numéricas do método da projeção foi realizado por Weina [166].

Essa classe de métodos tem se tornado dominante na simulação de escoamentos incompressíveis [11, 32, 61, 127, 166]. Além disso, outros nomes para variações desse método podem ser encontrados na literatura, como método de passo fracionado [3, 97, 78] ou método de desacoplamento pressão-velocidade [35, 80].

Baseado no método da projeção, uma formulação puramente lagrangeana para obter a incompressibilidade em SPH será apresentada no final desse capítulo, onde a condição incompressibilidade (equação (5.2)) é obtida, dentro dos limites dos erros de discretização, resolvendo uma equação de Poisson para a pressão.

5.3 Solução SPH da equação de Poisson

Vimos como a incompressibilidade do escoamento pode ser obtida através do cálculo da pressão por uma equação de Poisson. Vários outros problemas são descritos por uma equação de Poisson, ou têm como parte essencial de sua solução essa equação.

Essa seção propõe um método para resolver a equação de Poisson utilizando o método lagrangeano SPH. Ao contrário de outros métodos (híbridos), onde a equação de Poisson é resolvida em uma malha [46, 48, 130, 151], na discretização da equação de Poisson apresentada nessa seção, utilizam-se as partículas da discretização como estrutura, isto é, a equação de Poisson é resolvida diretamente nas partículas, ao invés da pressão ser calculada em uma malha ou grade.



5.3.1 Equação de Poisson

Matematicamente, a equação de Poisson é uma equação de derivadas parciais com uma ampla utilidade em várias áreas, dentre elas: física e engenharia. Em eletrostática, por exemplo, pode-se escrever o campo elétrico $E = -\nabla\phi$ em termos de um potencial elétrico ϕ dado pela solução da equação de Poisson

$$\nabla^2\phi(\mathbf{r}) = -\frac{\rho(\mathbf{r})}{\epsilon},$$

onde $\rho(\mathbf{r})$ é a densidade de carga em \mathbf{r} e ϵ é uma constante elétrica.

De uma maneira geral, no espaço bi-dimensional, a equação de Poisson defini-se como:

$$\nabla^2u(x, y) = f(x, y), \quad (5.3)$$

onde Ω é uma região em \mathbb{R}^2 limitada por uma superfície fechada $S = \partial\Omega$ e f é uma função dada. A solução $u(x, y)$ é chamada de potencial.

A solução completa da equação de Poisson depende dos valores do potencial na fronteira do domínio Ω . Os dois tipos mais comuns de condições de fronteira para a equação de Poisson são as condições de Dirichlet e Neumann. Quando o potencial u é explicitamente definido em todo ponto $(x, y) \in S$ tem-se a condição de fronteira de *Dirichlet*

$$u(x, y) = \phi(x, y), \quad \forall(x, y) \in S. \quad (5.4)$$

Por outro lado, na condição de fronteira de *Neumann*, a variação do potencial na direção perpendicular à fronteira é conhecida

$$\nabla u(x, y) \cdot \mathbf{n}(x, y) = \varphi(x, y), \quad \forall(x, y) \in S, \quad (5.5)$$

onde vetor $\mathbf{n}(x, y)$ é o vetor normal à fronteira S no ponto (x, y) apontando para fora da superfície.

Encontrar uma solução analítica para uma equação de Poisson num domínio qualquer é em geral uma tarefa difícil e recorre-se então a métodos numéricos para encontrar soluções em um conjunto discreto de pontos no domínio Ω . Pode-se citar nesse contexto, a utilização dos métodos das diferenças finitas [57, 77] e dos elementos finitos [19].

A próxima seção propõe um método para resolver a equação de Poisson utilizando o método lagrangeano SPH. O operador laplaciano na equação de Poisson (equação (5.3)) será substituído por uma de suas versões discretas deduzidas no capítulo 2. A aproximação em cada partícula que representa o domínio de interesse conduz à obtenção de um sistema linear de grande dimensão, caracterizado por um alto grau de esparsidade. A solução desse sistema, por algum método numérico, encontra o potencial associado à equação de Poisson em cada partícula do sistema.

5.3.2 Discretização SPH

Nos métodos SPH, o domínio é discretizado por um conjunto finito de partículas. Dada uma função escalar ϕ , o operador laplaciano SPH na partícula i pode ser aproximado por (ver capítulo 2)

$$(\nabla^2 \phi)^h(\mathbf{x}_i) = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \frac{2(\phi(\mathbf{x}_i) - \phi(\mathbf{x}_j))}{r_{ij}} \mathbf{x}_{ij} \cdot \nabla_i W(\mathbf{x}_{ij}), \quad (5.6)$$

onde $\mathbf{x}_{ij} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$ e $r_{ij} = \|\mathbf{x}_{ij}\|$.

Os núcleos utilizados nesse livro têm a propriedade de simetria (seção 2.4) e podem ser reescrito como

$$W(\mathbf{x}_{ij}, h) = W_1\left(\frac{r_{ij}}{h}\right) = W_1(R_{ij}).$$

Consequentemente,

$$\nabla_i W_{ij} = \frac{\mathbf{x}_{ij}}{hr_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial R}.$$

A equação (5.6) pode então ser reescrita como

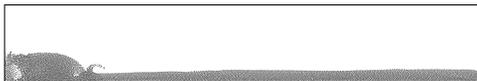
$$(\nabla^2 \phi)^h(\mathbf{x}_i) = \sum_j 2 \frac{m_j}{\rho_j} \left(\phi(\mathbf{x}_i) - \phi(\mathbf{x}_j) \right) \frac{1}{hr_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial R},$$

ou, de uma maneira mais simplificada, dada por

$$(\nabla^2 \phi)^h(\mathbf{x}_i) = \sum_j 2 \frac{m_j}{\rho_j} \left(\phi(\mathbf{x}_i) - \phi(\mathbf{x}_j) \right) F(\mathbf{x}_{ij}), \quad (5.7)$$

onde

$$F(\mathbf{x}_{ij}) = \frac{1}{hr_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial R}.$$



A i -ésima linha da matriz A , representada pelos coeficientes

$$a_{ij}, j \in \{1, 2, \dots, n\},$$

é obtida pela equação (5.8) aplicada na partícula i com

$$\begin{cases} a_{ij} = -2 \frac{m_j}{\rho_j} F(\mathbf{x}_{ij}), & j \neq i \\ a_{ii} = -\sum_{k \neq i} a_{ik} \end{cases} \quad (5.11)$$

5.3.3 Exemplo

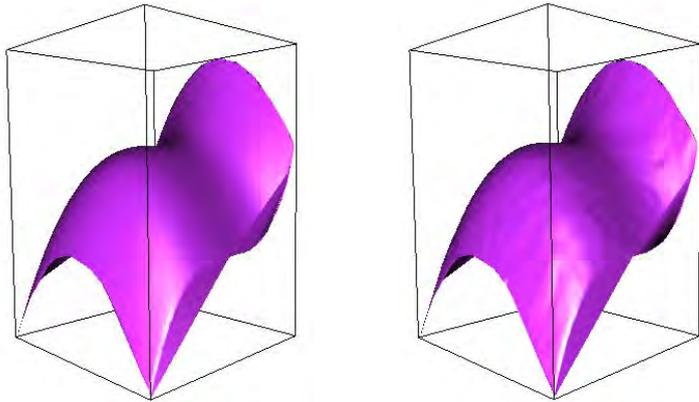


Figura 5.1: Solução da equação de Poisson usando o método SPH. O termo fonte é dado por $f(x, y) = 6x - 2$ e a solução é conhecida na fronteira do domínio ($u(x, y) = x^3 - y^2 + 10$) (condição de fronteira de Dirichlet). A superfície da esquerda é dada pela solução exata $(x, y, u(x, y))$, enquanto à direita a superfície ilustra a solução encontrada pelo método SPH.

O método SPH descrito nessa seção é usado para obter a a solução para a seguinte equação de Poisson

$$\begin{cases} \nabla^2 u(x, y) = 6x - 2 & \text{em } \Omega = [-1, 1] \times [-1, 1] \subset \mathbb{R}^2 \\ u(x, y) = x^3 - y^2 + 10 & \text{se } (x, y) \in \partial\Omega \end{cases} \quad (5.12)$$



O domínio Ω é representado por um conjunto finito de partículas amostradas de acordo com uma distribuição disco de Poisson. Essa distribuição assegura uma amostragem uniforme na qual quaisquer dois pontos dessa amostragem distam mais do que uma distância mínima r , ou seja, dado um disco de raio r sobre um elemento qualquer da amostragem, não existe nenhum outro elemento pertencente a amostragem dentro desse disco. Uma implementação do algoritmo descrito por Dunbar e Humphreys [43] é responsável pela posição inicial das partículas.

Definimos o volume para cada partícula como sendo o volume de Ω dividido pelo número de partículas da discretização do mesmo $\frac{m}{\rho} = \frac{Vol(\Omega)}{\#\text{partículas}}$. Além disso, partículas que estão próximas a fronteira de Ω tem o potencial definido pela condição de fronteira de Dirichlet $u_i = u(x_i, y_i) = x_i^3 - y_i^2 + 10$.

Na figura 5.1, a superfície da esquerda $(x, y, u(x, y))$ ilustra a solução exata da equação de Poisson (equação (5.12)). Da mesma forma, a solução encontrada pelo método SPH é ilustrada pela superfície da direita $(x, y, u_{SPH}(x, y))$.

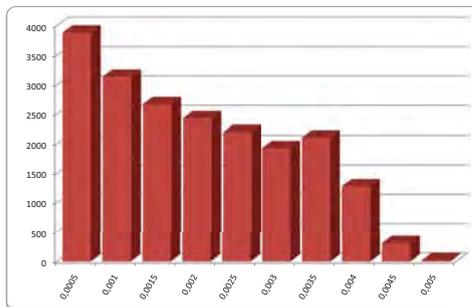


Figura 5.2: Erro relativo obtido pelo resultado encontrado com o método SPH para a solução da equação de Poisson (equação (5.12)).

O erro relativo obtido com a solução encontrada com o método descrito acima para o exemplo dado pela equação (5.12) é ilustrado na figura 5.2. As partículas originais cujo potencial foram definidos pela condição de fronteira de Dirichlet (equação (5.12)) não são levadas em consideração nessa análise estatística do erro.

5.3.4 Resolução do sistema

Pela construção da matriz A (sistema (5.11)) podemos observar que na i -ésima linha da mesma o coeficiente a_{ij} na coluna j é não-nulo se, e somente se, a partícula j é vizinha da partícula i . A figura 5.3 ilustra um simples exemplo.

Portanto, a matriz A é uma matriz com um elevado grau de esparsidade, já que em SPH o número de partículas vizinhas utilizadas no somatório da equação (5.7) pode ser consideravelmente menor do que o número de partículas usadas na discretização do domínio.

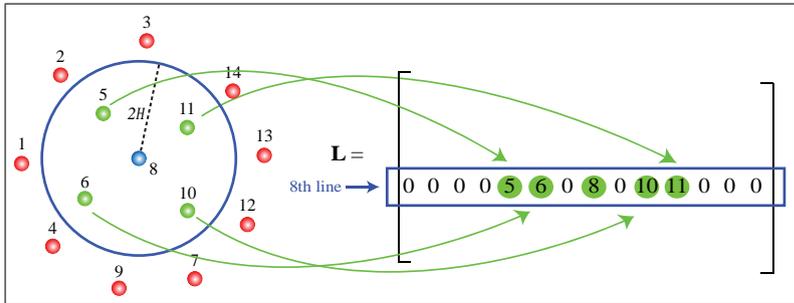
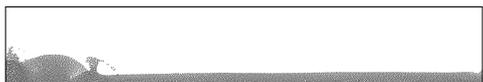


Figura 5.3: Construção da matriz A . A linha 8 da matriz tem como coeficientes não-nulos apenas as colunas, cujas partículas de mesmos índices pertencem à vizinhança $V_8 = \{5, 6, 8, 10, 11\}$ da partícula 8.

Para assegurar a eficiência numérica, torna-se imprescindível a utilização de algoritmos especialmente desenvolvidos para permitir um tratamento eficaz de matrizes esparsas. Para explorar ao máximo as características dessas matrizes e, ao mesmo tempo, garantir um bom desempenho na solução do sistema, esses algoritmos devem respeitar as seguintes regras básicas:

1. somente os coeficientes não-nulos presentes nas matrizes devem ser armazenados;
2. efetuar somente as operações envolvendo coeficientes não-nulos, evitando cálculos redundantes envolvendo elementos nulos.

Os algoritmos que permitem trabalhar diretamente com matrizes esparsas são mais complexos do que os algoritmos utilizados no



tratamento de matrizes cheias. Essa complexidade resulta não só da necessidade de se evitar sequências de operações redundantes, mas também do tipo de armazenamento utilizado. Foram utilizadas as bibliotecas `SparseLib++` [141] e `IML++` [41] para o armazenamento e manuseio de matrizes esparsas e para encontrar a solução do sistema linear.

Matrizes Esparsas

Nas formulações antigas de elementos finitos, as matrizes esparsas são geralmente armazenadas em semi-banda ou em perfil. No método SPH proposto, a utilização de tais estruturas de armazenamento é inadequada. A distribuição irregular das partículas faria com que qualquer uma dessas estruturas tivessem um elevado número de coeficientes nulos armazenados.

Existem outros tipos diferentes de armazenamento de matrizes esparsas utilizados. Dentre eles, encontra-se uma forma bem simples e direta de armazenamento de matrizes esparsas, onde se utilizam três vetores com dimensão igual ao número de elementos não-nulos da matriz, denotado por nz . No primeiro vetor, \mathbf{V} , armazenam-se os valores dos coeficientes não-nulos existentes. Os índices correspondentes às linhas e colunas de cada um dos coeficientes não-nulos são armazenados em outros dois vetores, \mathbf{I} e \mathbf{J} , respectivamente. Assim, para cada $k \in \{1, 2, \dots, nz\}$ o valor não-nulo $\mathbf{VAL}(k)$ ocorre na posição $(\mathbf{I}(k), \mathbf{J}(k))$ da matriz esparsa.

A matriz de tamanho 5×5

$$B = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 5 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 3 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 2 & 4 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \quad (5.13)$$

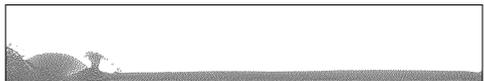
pode ser armazenada da seguinte forma

$$\begin{aligned} \mathbf{V} &= [5 & 4 & 3 & 3 & 2 & 2 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1] \\ \mathbf{I} &= [2 & 4 & 1 & 3 & 3 & 4 & 5 & 2 & 3 & 1 & 4 & 5] \\ \mathbf{J} &= [2 & 4 & 1 & 3 & 4 & 3 & 5 & 3 & 2 & 4 & 1 & 1] \end{aligned} \quad (5.14)$$

A estrutura de dados \mathbf{V} , \mathbf{I} e \mathbf{J} é muitas vezes denominada de *esquema coordenado de armazenamento*. Esse tipo de armazenamento não leva em conta que os vetores tenham algum tipo de ordem, e embora seja muito simples, apresenta uma grande limitação: torna bastante pesado e moroso o processo de obtenção de todos os coeficientes situados numa mesma linha ou coluna.

Uma das estruturas de armazenamento mais utilizadas consiste em definir uma lista de vetores correspondente a cada uma das linhas, armazenados sequencialmente. Dessa forma, a representação de matrizes esparsa é feita graças ao uso de três vetores. O primeiro vetor \mathbf{VL} é definido de maneira semelhante ao vetor \mathbf{V} , exceto que todos os elementos da linha i estejam antes de qualquer elemento de qualquer linha $i + k$, $k > 0$. O segundo vetor \mathbf{JL} representa a coluna associada a cada item listado no vetor \mathbf{VL} . Por último, o vetor \mathbf{IL} permite identificar onde iniciam e terminam, em \mathbf{VL} e \mathbf{JL} , os valores referentes a cada uma das linhas da matriz esparsa.

As dimensões dos vetores \mathbf{VL} e \mathbf{JL} são iguais ao número nz de coeficientes não-nulos da matriz esparsa, porém, a dimensão do vetor \mathbf{IL} é igual ao número de linhas da matriz esparsa, geralmente menor do que nz , mais uma entrada adicional para identificar o final dos vetores \mathbf{VL} e \mathbf{JL} . Por exemplo, a matriz B pode então ser armazenada pelos vetores



$$\begin{aligned}
 \mathbf{VL} &= [3 \quad -1 \quad 5 \quad 1 \quad 1 \quad 3 \quad 2 \quad -1 \quad 2 \quad 4 \quad 1 \quad 2] \\
 \mathbf{JL} &= [1 \quad 4 \quad 2 \quad 3 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 1 \quad 3 \quad 4 \quad 1 \quad 5] \\
 & \hspace{15em} (5.15) \\
 \mathbf{IL} &= [1 \quad 3 \quad 5 \quad 8 \quad 11 \quad 13]
 \end{aligned}$$

O armazenamento usando a tripla de vetores \mathbf{IL} , \mathbf{VL} e \mathbf{JL} é conhecido como *armazenamento compacto de linhas*. Nesse processo as linhas têm de ser armazenadas por ordem, porém, dentro de uma mesma linha não é necessário nenhuma ordenação. De acordo com a definição dos apontadores indicados pelo vetor \mathbf{IL} , a linha i de uma matriz esparsa é descrita pelas posições $\mathbf{IL}(i)$ até $\mathbf{IL}(i+1) - 1$ dos vetores \mathbf{VL} e \mathbf{JL} . Por exemplo, a terceira linha da matriz B é armazenada entre as posições

$$\mathbf{IL}(3) = 5$$

e

$$\mathbf{IL}(3+1) - 1 = 8 - 1 = 7$$

dos vetores \mathbf{VL} e \mathbf{JL} , isto é,

$$\begin{aligned}
 \mathbf{VL} &= [3 \quad -1 \quad 5 \quad 1 \quad \mathbf{1} \quad \mathbf{3} \quad \mathbf{2} \quad -1 \quad 2 \quad 4 \quad 1 \quad 2] \\
 \mathbf{JL} &= [1 \quad 4 \quad 2 \quad 3 \quad \mathbf{2} \quad \mathbf{3} \quad \mathbf{4} \quad 1 \quad 3 \quad 4 \quad 1 \quad 5]
 \end{aligned}$$

Quando $\mathbf{IL}(l) = \mathbf{IL}(l+1) - 1$ a l -ésima linha da matriz esparsa não contém nenhum termo não-nulo.

O armazenamento em lista de vetores foi utilizado para guardar a matriz esparsa resultante da discretização da equação de Poisson em todas as partículas que representam o domínio do problema. A biblioteca `SparseLib++` [141] foi utilizada para tal propósito. A biblioteca `SparseLib++`, além de representar uma matriz esparsa em vários formatos de armazenamento, dentre eles o armazenamento compacto de linhas, também armazena vetores e fornece as operações básicas entre matrizes esparsas ou matrizes esparsas e vetores de maneira eficiente, como por exemplo multiplicação entre uma matriz esparsa e um vetor.

Métodos iterativos

A necessidade de resolver sistemas de equações lineares aparece numa grande quantidade de problemas científicos. Vários pesquisadores têm publicado artigos que exaltam as virtudes dos métodos iterativos, em comparação aos métodos diretos para a solução de grandes sistemas de equações lineares. Muitos métodos demonstram potencialidades para solucionar tais problemas. A questão crucial é achar aquele que melhor se adapta ao problema que se tem em mãos, pois não há garantias de que um método que funciona bem para um tipo de problema irá funcionar bem para outro tipo. Vários métodos iterativos para solução de sistemas lineares e outros tópicos importantes são apresentados por Saad [143].

Os métodos iterativos trabalham pelo melhoramento contínuo da solução aproximada até que esta esteja precisa o suficiente. Esse amplo grupo de técnicas utiliza aproximações sucessivas para chegar a soluções mais precisas a cada passo, para um dado sistema linear.

A eficiência dos métodos iterativos tem sido estudada para a solução de sistemas densos, não-simétricos. Pesquisadores de renome como Freund e Nachtigal [54], Golub e Van Loan [60], Hageman e Young [64] entre outros contribuíram enormemente para o estudo e desenvolvimento das técnicas iterativas.

Quando a dimensão e a esparsidade dos sistemas lineares aumentam, os métodos iterativos começam a ser competitivos. Embora a convergência do processo envolva um número indeterminado de operações, e seja necessário discutir qual o critério de parada mais adequado, a sua utilização começa a ser atrativa pela enorme economia que podem proporcionar em termos de memória envolvida no armazenamento dos coeficientes. Tipicamente, a aplicação de um método iterativo implica apenas o armazenamento da matriz dos coeficientes na sua forma inicial e de um pequeno número de vetores de dimensão igual à dimensão do sistema.

Não é só a redução da necessidade de armazenamento que torna a utilização de algoritmos iterativos atraente. Também se consegue assegurar em muitas circunstâncias melhores tempos de execução. Deve-se chamar, no entanto, a atenção para o fato de a aplicação dos algoritmos iterativos na sua forma pura não ser em geral muito eficiente. Para que tais métodos sejam competitivos, é necessário utilizar formas para acelerar a convergência.



A razão pela qual um método iterativo converge depende das propriedades do espectro da matriz dos coeficientes. Por esse motivo deve-se procurar transformar o sistema linear em outro equivalente, no sentido de possuir a mesma solução, mas com propriedades do espectro mais favoráveis. Portanto, os métodos iterativos usualmente envolvem uma segunda matriz, que transforma a matriz dos coeficientes em outra com melhores propriedades. Essa matriz de transformação é denominada *pré-condicionador*.

Uma apresentação mais formal dos métodos iterativos pode ser encontrada em Barrett et al. [8] e inclui os seguintes métodos iterativos.

- Gradiente Conjugado
- Resíduo Mínimo Generalizado
- Gradiente Biconjugado
- Resíduo Quase-Mínimo
- Gradiente Conjugado Quadrado
- Gradiente Biconjugado Estabilizado

O método Gradiente Conjugado, CG (Conjugate Gradient), é o método iterativo mais popular para resolver grandes sistemas de equações lineares. Só pode ser aplicado, porém, quando a matriz relacionada ao sistema é simétrica e definida positiva.

As matrizes relacionadas à discretização da equação de Poisson no método SPH, além do alto grau de esparsidade, podem ser assimétricas. Um método iterativo aplicável a matrizes assimétricas é o de Resíduo Quase-Mínimo, QMR (Quasi-Minimal Residual). A principal idéia por trás do método QMR é a solução do sistema tri-diagonal, reduzido no sentido dos mínimos quadrados. Freund e Nachtigal [54] fornecem uma apresentação do método QMR com mais detalhes.

A biblioteca IML++ [41] foi utilizada para resolver o sistema de equações lineares obtido com a equação de Poisson discreta. Vários métodos iterativos são encontrados nessa biblioteca. Além desses, alguns pré-condicionadores também são implementados, dentre eles: Diagonal de Jacobi, Cholesky e LU.

5.4 Método da projeção SPH

Essa seção descreve um método da projeção no contexto lagrangeano para simulações de fluidos incompressíveis usando o método SPH. O método apresentado, faz uso da solução para a equação de Poisson usando SPH (seção 5.3) para determinar um campo de pressão durante a simulação, de tal forma que o campo de velocidade obtido durante toda a simulação obedeça a condição de incompressibilidade.

A importância da equação de Poisson, no contexto de fluidos incompressíveis, é que ela faz a ligação entre as equações do momento e da continuidade. Essa equação fornece valores de p que permite a velocidade, obtidas a partir da equação do momento, satisfazer a equação da continuidade, dentro dos limites dos erros de discretização dessas equações.

O método, usa um passo intermediário para obter um campo de velocidade sem garantir a incompressibilidade do escoamento. A partir daí, o campo de velocidade intermediário é projetado em um espaço de divergência livre resolvendo uma equação de Poisson para a pressão. O novo campo é obtido subtraindo o gradiente da pressão encontrada. As duas etapas do método da projeção SPH serão descritas no que segue.

5.4.1 Campo de velocidade intermediário

No primeiro passo, um campo de velocidade intermediário \mathbf{v}^* é obtido pela equação do momento (equação (5.1)), sem o termo da pressão.

Nesse intuito, o termo viscoso $\nu \nabla^2 \mathbf{v}$, onde ν é a viscosidade cinemática do fluido, precisa ser discretizado utilizando algum operador SPH. Em algumas implementações do método SPH [4, 32, 37, 106] a viscosidade artificial, introduzida para modelar frente de choques [115], é utilizada para modelar a força viscosa real, dada pelo termo $\nu \nabla^2 \mathbf{v}$. Morris, Fox e Zhu [120] afirmam que a viscosidade real modelada pela viscosidade artificial gera perfis de velocidades indesejados na simulação. Outras expressões têm sido utilizadas para calcular a força viscosa real, algumas utilizando somas de somas [165] (e, portanto, dobrando o esforço computacional), e outras utilizam a derivada segunda do núcleo para aproximar a viscosidade [123, 157], tornando o método suscetível a erros numéricos.



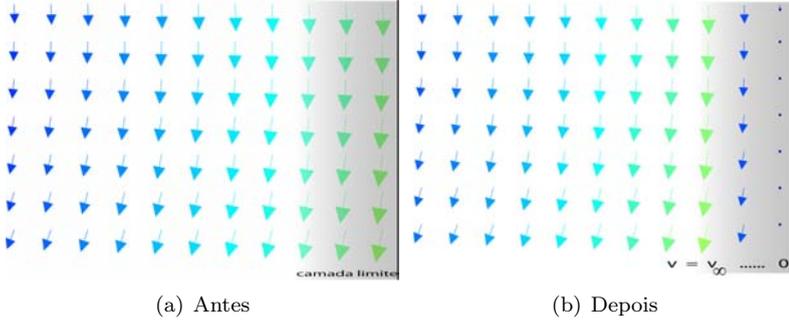


Figura 5.4: O conceito de camada limite é aplicada em um campo de velocidade.

A aproximação para o termo viscoso adotado por Morris et al [120] é utilizada no método da projeção proposto nessa seção

$$\left(\frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{v} \right)_i = \sum_j \frac{m_j (\mu_i + \mu_j) \mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{x}_{ij} \nabla_i W_{ij}}{\rho_i \rho_j r_{ij}^2},$$

onde as diferenças entre as posições e as velocidades das partículas i e j são denotadas por $\mathbf{x}_{ij} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$ e $r_{ij} = \|\mathbf{x}_{ij}\|$, respectivamente. Essa expressão é similar àquela utilizada por Monaghan [114] para modelar condução do calor.

A integração numérica é calculada utilizando o método explícito de Euler (capítulo 4). Portanto, o campo \mathbf{v}^* em uma partícula i é obtido pela seguinte expressão

$$\mathbf{v}^*_i = \mathbf{v}_i^t + \Delta t \left[\sum_j \frac{m_j (\mu_i + \mu_j) \mathbf{v}_{ij}^t \cdot \mathbf{x}_{ij}^t \nabla_i W_{ij}}{\rho_i \rho_j r_{ij}^2} + \mathbf{f}_i \right], \quad (5.16)$$

onde Δt é o passo de tempo da discretização temporal e \mathbf{f}_i é a força externa na partícula i .

A restrição $\mathbf{v}^* = 0$ em $\delta\Omega$ é aplicada ao campo obtido em 5.16 utilizando o conceito de camada limite (capítulo 4). Na camada-limite, a magnitude da velocidade é alterada, indo de zero, na superfície do domínio, até a velocidade \mathbf{v}_∞ , na fronteira da camada limite, onde \mathbf{v}_∞ é a velocidade do escoamento livre em relação à fronteira do domínio. A figura 5.4 ilustra o efeito causado pela camada limite em um campo de velocidade.

5.4.2 Projecção no espaço de divergência livre

O segundo passo no método é a projecção no sub-espaço de divergência nula do campo de velocidade intermediária obtido anteriormente. A projecção no sub-espaço de divergência nula é obtida através da solução de uma equação de Poisson para a pressão:

$$\begin{cases} -\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right) = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{v}^* \\ \frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} = 0 \text{ em } \partial\Omega \end{cases} \quad (5.17)$$

A solução da equação de Poisson é obtida diretamente nas partículas da discretização do fluido (seção 5.3). A discretização dessa equação de Poisson pode ser obtida usando os operadores SPH definidos no capítulo 2. Para o divergente do campo intermediário usamos

$$(\nabla \cdot \mathbf{v}^*)_i = \frac{1}{\rho_i} \sum_j m_j (\mathbf{v}^*_j - \mathbf{v}^*_i) \nabla_i W_{ij}$$

Para o laplaciano da pressão, a identidade de operadores

$$\nabla \cdot (k \nabla p) = \frac{1}{2} (\nabla^2 (kp) - p \nabla^2 k + k \nabla^2 p) ,$$

com $k = \rho^{-1}$ é utilizada para defini-lo. Podemos aproximar cada item nessa identidade com um dos operadores definidos no capítulo 2, por exemplo,

$$\begin{aligned} \nabla^2 (kp) &= 2 \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \frac{(k_i p_i - k_j p_j)}{r_{ij}^2} \mathbf{x}_{ij} \nabla_i W_{ij} \\ p \nabla^2 k &= 2 \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \frac{(k_i p_i - k_j p_i)}{r_{ij}^2} \mathbf{x}_{ij} \nabla_i W_{ij} \\ k \nabla^2 p &= 2 \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \frac{(k_i p_i - k_i p_j)}{r_{ij}^2} \mathbf{x}_{ij} \nabla_i W_{ij} \end{aligned} \quad (5.18)$$

A partir daí, a aproximação para o lado esquerdo da equação de Poisson (equação (5.17)) é obtida como:

$$(\nabla \cdot (k \nabla p))_i = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \frac{(k_i + k_j) (p_i - p_j)}{r_{ij}^2} \mathbf{x}_{ij} \nabla_i W_{ij} .$$



A condição de Neumann, dada pela componente do gradiente da pressão na direção normal a fronteira $S = \delta\Omega$, é imposta usando partículas fantasmas (capítulo 4), cujas posições são dinamicamente definidas de acordo com as partículas da discretização.

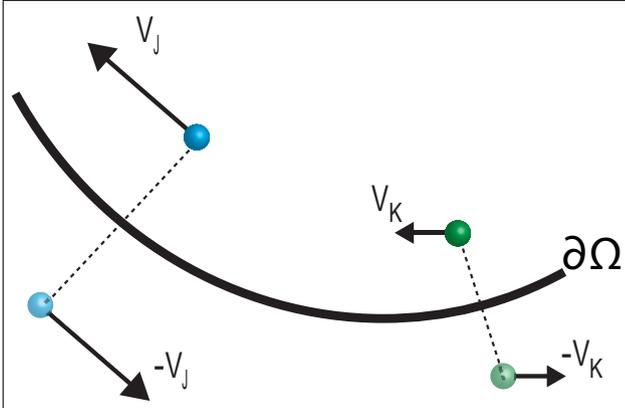


Figura 5.5: Partículas fantasmas criadas para impor a condição de Neumann na equação de Poisson (equação (5.17)).

O efeito dessas partículas é implicitamente incluído nas aproximações SPH da seguinte maneira: dada uma partícula i próxima à fronteira S , cada iteração com uma partícula vizinha j próxima a fronteira, pode gerar uma nova iteração com uma partícula-fantasma (figura 5.5), sendo que a partícula fantasma terá as seguintes propriedades:

- *posição*: a posição da partícula fantasma j_{ghost} é encontrada pela reflexão da partícula j através da superfície S ;
- *velocidade*: a velocidade da partícula fantasma j_{ghost} é estabelecida por simétrica em relação a partícula j . Portanto, uma partícula-fantasma criada pela reflexão de uma partícula indecada por j tem velocidade $\mathbf{v}_{j_{ghost}} = -\mathbf{v}_j$;
- *pressão*: a pressão da partícula fantasma j_{ghost} é definida igual à pressão da partícula j .

A partir do cálculo da pressão pela equação de Poisson, um novo campo de velocidade é obtido fazendo

$$\mathbf{v}_i^{t+1} = \mathbf{v}_i^* - \Delta t \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right)_i, \quad (5.19)$$

onde o gradiente da pressão é dado pelo operador SPH

$$\left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right)_i = \frac{1}{\rho_i^2} \sum_j m_j (p_j - p_i) \nabla_i W_{ij}.$$

Em seguida a partícula é advectada a partir de sua posição

$$\mathbf{x}^{t+1} = \mathbf{x}^t + \Delta t \frac{\mathbf{v}^{t+1} + \mathbf{v}^t}{2}. \quad (5.20)$$

A figura 5.6 ilustra os principais passos no método da projeção SPH.

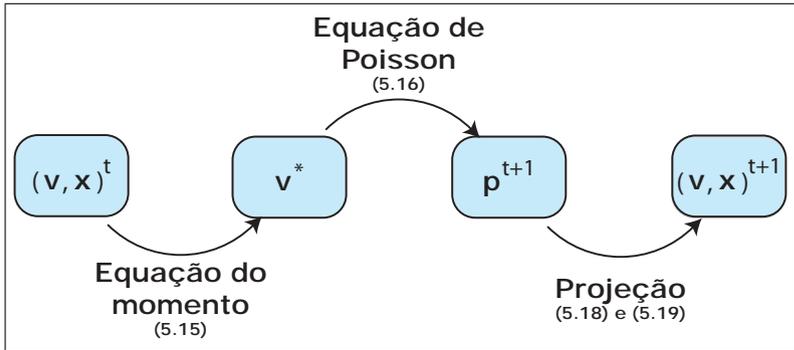


Figura 5.6: O método da projeção SPH.

5.4.3 Exemplo: vortex spin-down

O método da projeção será utilizado na simulação de um escoamento monofásico conhecido como *vortex spin-down*.

Um fluido está confinado em uma região retangular com uma velocidade inicial circular, formando assim um vórtice. A dissipação da velocidade na fronteira desse domínio faz com que o fluido desacelere. Para manter a incompressibilidade, porém, é esperado a formação de outros vórtices nas quinas do domínio.



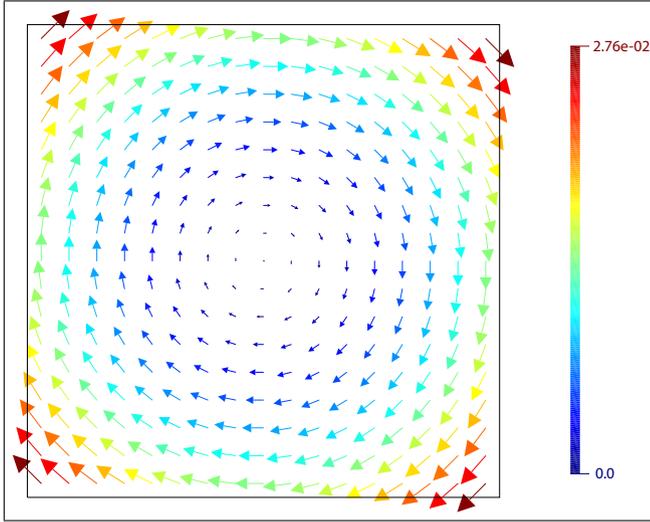


Figura 5.7: Campo de velocidade inicial do escoamento monofásico conhecido como vortex spin-down em um reticulado uniforme.

Nessa simulação, o fluido é confinado no domínio $\Omega = [0, 1]^2$ e discretizado por 14.273 partículas. A velocidade inicial $\mathbf{v} = (u, v)$ em cada partícula é dada por

$$u(x, y) = 0.25(y - 0.5) \quad , \quad v(x, y) = 0.25(0.5 - x)$$

onde (x, y) é a posição da partícula. A figura 5.7 ilustra a velocidade inicial. Outros parâmetros da simulação são: nenhuma força externa é adicionada ao sistema ($\mathbf{f} = 0$), a viscosidade dinâmica $\mu = 0,00118$ e a discretização temporal $\Delta t = 0,001$.

O perfil de velocidade do escoamento é mostrado na figura 5.8. O mapa de cores e o tamanho das setas estão associados à magnitude da velocidade na partícula, variando da mais baixa velocidade para a mais alta do centro do quadrado para a fronteira.

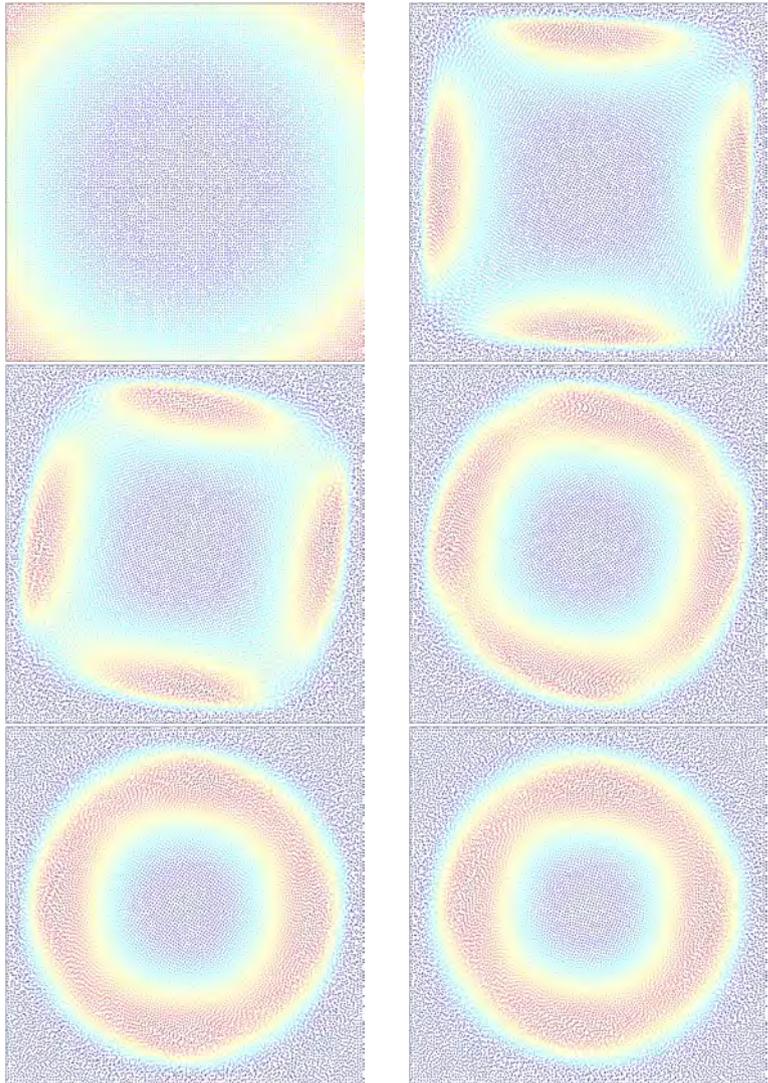


Figura 5.8: Problema vortex spin-down ($\mu = 0,00118$): (em ordem de leitura) configuração inicial, 2, 5, 10, 15 e 20 segundos.



Ao longo dessa simulação, para manter a incompressibilidade do escoamento, o surgimento de pequenos vórtices nos quatro cantos do domínio, além do vórtice central, são esperados. A figura 5.9 destaca o canto inferior direito do domínio Ω no instante de tempo dez segundos. Na figura 5.9(a) o campo de velocidade normalizado é ilustrado em algumas partículas da simulação. Na figura 5.9(b) algumas linhas integrais são ilustradas sobre o mapa de cores da magnitude da velocidade do escoamento. Observa-se o vórtice criado durante a simulação para manter a incompressibilidade da mesma.

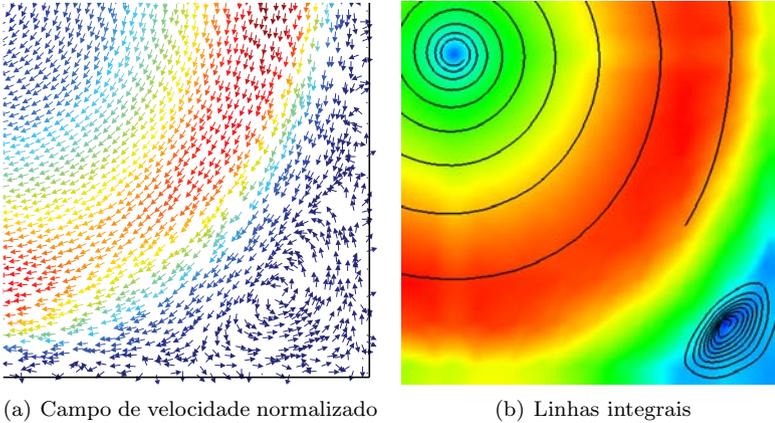


Figura 5.9: Problema vortex spin-down. Uma região do domínio Ω é destacada no instante de tempo dez segundos, na qual pode-se notar o surgimento de outros vórtices no domínio para manter a incompressibilidade do escoamento.

A figura 5.10 ilustra o mesmo problema com a viscosidade, porém, maior. A mesma configuração inicial para o escoamento ilustrado nas figuras 5.8 e 5.9 é utilizada, exceto para o coeficiente de viscosidade, que agora é igual a $\mu = 0,0118$. Esse coeficiente está relacionado à difusão do momento, ou seja, a difusão da velocidade do escoamento. Portanto, quanto maior o coeficiente de viscosidade μ , maior a difusão do momento e conseqüentemente maior a perda de velocidade no escoamento.

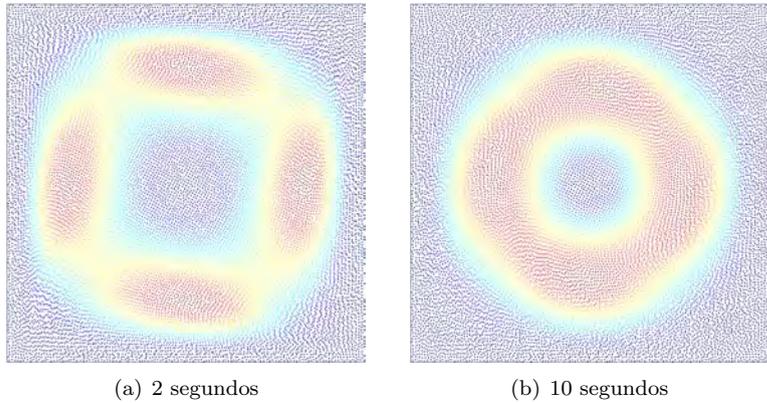


Figura 5.10: Problema vortex spin-down ($\mu = 0,0118$).

A figura 5.11 ilustra o decaimento da velocidade máxima durante as simulações para ambas as viscosidades. Para o fluido com maior viscosidade a velocidade do escoamento cai bruscamente. Enquanto a difusão da velocidade para o fluido de menor viscosidade ocorre de maneira mais lenta.

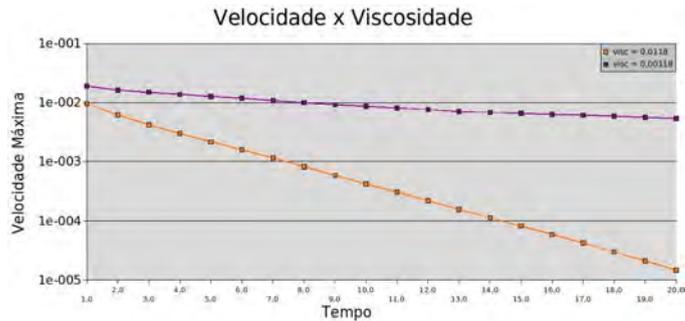


Figura 5.11: A velocidade máxima do problema vortex spin-down para ambas as viscosidades: alta 0,0118 e baixa 0,00118.



Capítulo 6

Aplicações

Nesse capítulo, mostraremos como as teorias e técnicas apresentadas até agora podem se juntar para obter simulações e interpretações de fenômenos físicos complexos. As aplicações requerem ingredientes diferentes do método SPH, exemplificando tanto a diversidade de aplicações possíveis quanto a dificuldade de escolher a formulação numérica certa para obter o resultado mais perto da física possível.

6.1 Fluidos viscoplásticos

No capítulo 3, apresentamos as equações de Navier-Stokes, as quais modelam o comportamento de um fluido newtoniano. Agora estamos interessados em descrever o comportamento de outra rica classe de fluidos, que ao contrário dos fluidos newtonianos, possuem a viscosidade variável. Essa classe é chamada de *fluidos viscoplásticos*. Do ponto de vista de uma partícula, as equações de governo de um escoamento de fluido viscoplástico são deduzidas de forma semelhante as equações de Navier-Stokes (3.18)–(3.9), onde a única diferença reside no cálculo do tensor extra-tensão \mathbb{T} .

O principal objetivo dessa seção é mostrar como o método SPH pode ser aplicado para simular com fidelidade os efeitos viscosos de um fluido viscoplástico. Além disso, vamos mostrar vários exemplos de animações realistas de deformações plásticas e mudanças de fase sólido-líquida que ocorrem em materiais viscoplásticos, tais como: metal, plástico, cera, polímero, argila e lava.



6.1.1 Plasticidade

Conceitualmente, um fluido é uma substância que se deforma continuamente quando submetida a uma tensão de cisalhamento, não importando quão pequena ela possa ser. Enquanto um sólido quando submetido à ação de uma tensão de cisalhamento, sofre uma deformação reversível até que um certo limite seja alcançado. A partir deste limite, o sólido não consegue mais recuperar a sua forma inicial. A propriedade de um corpo mudar de forma irreversível, ao ser submetido a uma tensão é chamada de *plasticidade*.

De acordo com o capítulo 3, um fluido newtoniano é um fluido no qual seu tensor extra-tensão \mathbb{T} possui uma dependência linear do tensor taxa de deformação \mathbb{D} . Caso contrário, ou seja, quando essa dependência é não-linear o fluido é chamado de *fluido não-newtoniano*.

Entre os fluidos não-newtonianos, o comportamento dos fluidos viscoplásticos é caracterizado quando uma tensão significante é aplicada no material antes que ele comece a fluir como um líquido (efeito pasta de dente), essa tensão crítica é conhecida como *tensão limite do escoamento*. Se a tensão aplicada é menor do que a tensão correspondente a plasticidade limite então o material se comporta como um sólido. Uma vez que a plasticidade limite é excedida, o material pode fluir como um fluido newtoniano. Ao contrário dos materiais viscoelásticos, materiais viscoplásticos não possuem memória, ou seja, deformações plásticas são deformações irreversíveis e permanentes sofridas por um corpo sob tensão (figura 6.1).

Fluidos não-newtonianos são estudados extensivamente em dinâmica dos fluidos computacional, e o estudo deles é conhecido como *reologia* [128]. Nessa seção, vamos mostrar os recentes avanços de Paiva *et al.* [130, 133, 134, 135] na simulação de materiais viscoplásticos através de uma versão SPH baseada na formulação física de *fluido newtoniano generalizado* proposta por Mendes *et al.* [111]. Neste livro vamos estudar apenas simulação de objetos viscoplásticos, o leitor interessado em simular fluidos viscoelásticos usando SPH pode consultar Clavet *et al.* [27].

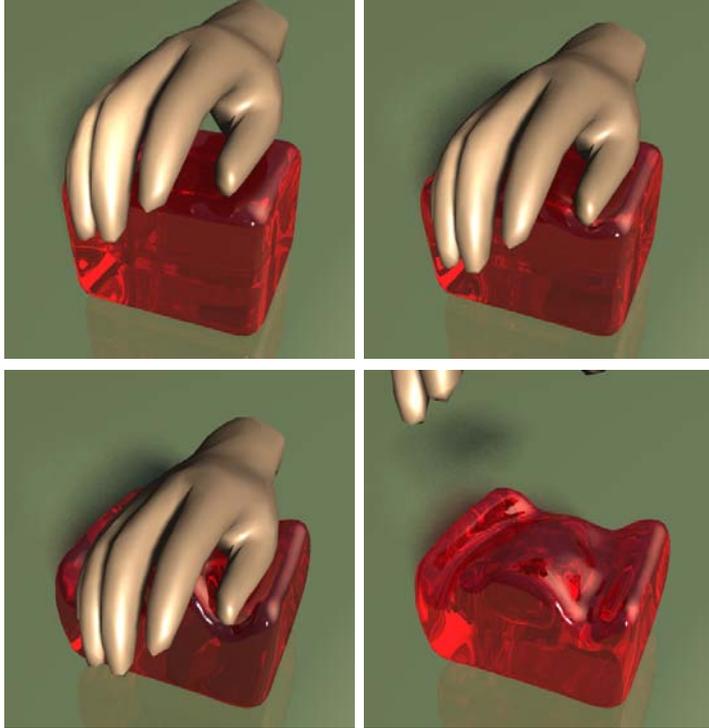


Figura 6.1: Comportamento de um material viscoplástico.

6.1.2 Fluido newtoniano generalizado

No modelo físico de fluido newtoniano generalizado, para cada partícula i do sistema, o tensor extra-tensão \mathbb{T}_i é representado matematicamente da seguinte forma:

$$\mathbb{T}_i = 2\mu(D_i)\mathbb{D}_i, \quad \text{com} \quad D_i = |\text{traço}(\mathbb{D}_i)| \quad (6.1)$$

e

$$\mu(D_i) = (1 - \exp[-(J + 1)D_i]) \left(D_i^{n-1} + \frac{1}{D_i} \right), \quad (6.2)$$

onde o tensor \mathbb{D}_i é dado pela equação (3.22).



Essa formulação modela a viscosidade do fluido μ como uma função não-linear em termos da intensidade da taxa de deformação D_i (figura 6.2), sendo inversamente proporcional à tensão de deformação aplicada ao material. A função da viscosidade μ depende apenas de dois parâmetros reológicos: o índice de comportamento do escoamento n e o termo J , conhecido como *jump number*. A grande vantagem dessa formulação é a representação de vários parâmetros reológicos, tais como a tensão limite do escoamento e o índice de consistência, de forma concisa através do parâmetro J .

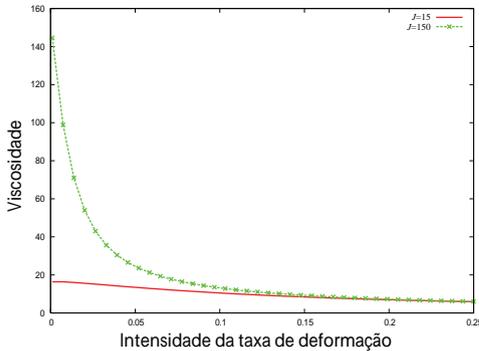


Figura 6.2: Gráfico da função de viscosidade baseada no modelo de fluido newtoniano generalizado.

A viscosidade do fluido é controlada da seguinte forma pela constante J , ou seja, quanto maior for o valor de J maior será a viscosidade (figura 6.3). Note que, na figura 6.2 quando $J = 15$ o fluido possui um comportamento newtoniano. Para simular o comportamento viscoplástico de um fluido o valor de n deve ser entre 0 e 1, logo em nossas simulações fixamos $n = 0.5$. Ao contrário dos métodos anteriores de simulação de materiais viscoplásticos baseados em modelos físicos da mecânica do contínuo [124, 79] a versatilidade da formulação de fluido newtoniano generalizado nos permite representar um sólido como um fluido não-newtoniano de alta viscosidade.

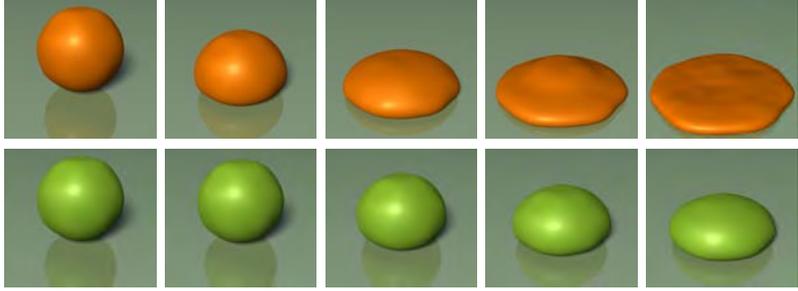


Figura 6.3: Variações da viscosidade de um fluido viscoplástico inicializado em uma esfera com 1200 partículas. Acima, reduzimos a viscosidade do fluido usando $J = 15$ e abaixo aumentamos a viscosidade com $J = 150$.

6.1.3 Aproximação SPH do tensor extra-tensão

O cálculo da aproximação SPH do tensor extra-tensão conforme a equação (6.1), necessita de uma etapa preliminar através do cálculo da aproximação SPH do tensor do campo de velocidade em cada partícula i , ou seja, da matriz jacobiana $\nabla \mathbf{v}_i$. Utilizando a aproximação SPH do gradiente (2.18) em cada coeficiente (k, l) da matriz jacobiana $\nabla \mathbf{v}_i$, segue que:

$$\frac{\partial v_k^i}{\partial x_l} = \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} (v_k^j - v_k^i) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_l^i}. \quad (6.3)$$

Após o cálculo do tensor \mathbb{D}_i , a viscosidade μ_i atribuída a uma partícula i é então calculada através da função (6.2) e em seguida o tensor extra-tensão \mathbb{T}_i é atualizado de acordo com a equação (6.1). Finalmente, o termo viscoso da equação do momento (3.34) pode ser calculado utilizando a aproximação SPH do divergente (2.22):

$$\frac{1}{\rho_i} \nabla \cdot \mathbb{T}_i = \sum_{j \in V_i} m_j \left(\frac{\mathbb{T}_i}{\rho_i^2} + \frac{\mathbb{T}_j}{\rho_j^2} \right) \cdot \nabla_i W_{ij}.$$



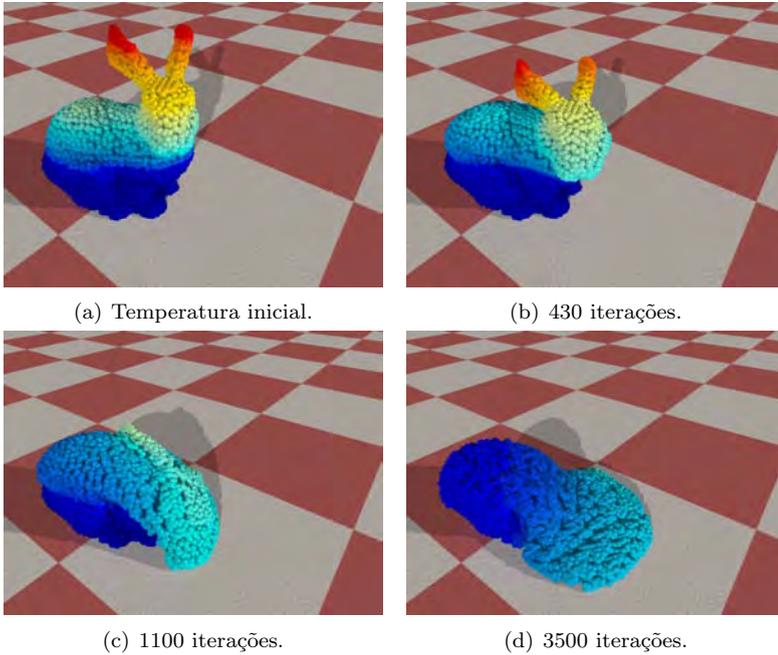


Figura 6.4: Temperatura das 10188 partículas do modelo Stanford Bunny: as partículas com cores escuras estão abaixo do ponto de fusão, e assim permanecem sólidas.

6.1.4 Transição de fase

A simulação de objetos que derretem e solidificam é uma tarefa delicada, pois é necessária a variação da viscosidade durante a transição de fase, de acordo com as propriedades do material. Em particular, nessa seção concentraremos na transição induzida pela temperatura entre as fases sólida e líquida. Essa transição é modelada através da variação da viscosidade em função da variação da temperatura de cada partícula de fluido. A variação temporal da temperatura é determinada através da equação do calor. Essa equação descreve o comportamento físico da difusão térmica de um material, transferindo energia térmica de uma região de alta temperatura para uma

região de baixa temperatura. A equação do calor é descrita, na forma lagrangeana, através da temperatura T e do coeficiente de difusão térmica k , da seguinte maneira:

$$\frac{DT}{Dt} = k\nabla^2 T. \quad (6.4)$$

No derretimento, a temperatura de algumas partes do objeto aumenta até alcançar o seu ponto de fusão no qual o objeto se torna líquido (figura 6.4). Nos escoamentos de lava, a temperatura pode decrescer abaixo do seu ponto de fusão fazendo com que ela se solidifique e altere a topologia do terreno inicial. Em ambos os casos, o jump number J decresce com a temperatura. Essa dependência é aproximada conforme a combinação linear:

$$J(T) = (1 - u)J_{max} + uJ_{min}, \quad \text{com} \quad u = \frac{T - T_{min}}{T_{max} - T_{min}}.$$

Perceba que a função de viscosidade equação (6.2) decresce quando a temperatura aumenta e vice-versa. Em nossas simulações, assumimos que os objetos são homogêneos, isto é, possuem um coeficiente de difusão térmica constante.

Aproximação SPH da equação do calor

A equação do calor (6.4), que governa a transição entre as fases sólida e líquida, requer uma aproximação por partículas do laplaciano da temperatura $\nabla^2 T_i$. Para partícula i , as derivadas de segunda ordem podem ser aproximadas utilizando a convolução SPH usual dada pela aproximação do laplaciano (2.23). Daí, segue que:

$$\nabla^2 T_i = \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} T_j \nabla_i^2 W_{ij}. \quad (6.5)$$

Porém, a equação (6.5) possui algumas desvantagens além da sensibilidade à desordem de partículas. Primeiro, a transferência de calor de uma partícula i para uma partícula j pode ser positiva ou negativa devido à mudança de sinal da derivada de segunda ordem do núcleo (figura 2.3). Por outro lado, a física nos diz que uma partícula quente deve transferir calor para uma partícula fria sem se importar de que



maneira é feita a separação delas. Segundo, essa expressão não resulta em conservação de energia térmica em um processo adiabático.

Para evitar esses problemas, Müller *et al.* [123] adicionaram em seu modelo um núcleo com derivada de segunda ordem positiva exclusivo para o operador laplaciano. Observamos entretanto que, além desse modelo não ser correto do ponto de vista conceitual, ele também introduz mais avaliações no sistema. Por essas razões, usamos uma aproximação do operador laplaciano que envolve apenas derivadas de primeira ordem conforme a aproximação SPH do laplaciano (2.30):

$$\nabla^2 T_i = 2 \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} (T_i - T_j) \frac{\mathbf{x}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij}}{r_{ij}^2}. \quad (6.6)$$

Devido ao fato de $\mathbf{x}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij} \leq 0$, a equação acima tem a propriedade de que se $T_i > T_j$, então o fluxo de calor será realizado da partícula i para j e vice-versa.

6.1.5 Exemplos

O método descrito nessa seção foi utilizado com o objetivo de simular fenômenos físicos complexos. Os resultados que apresentaremos a seguir, respeitam a intuição física dos processos de deformação plástica, derretimento de objetos sólidos e escoamento de lava. A estabilidade numérica do SPH aparece claramente na figura 6.5, onde a cabeça do modelo Gargoye permanece bem definida mesmo quando o modelo está quase completamente derretido. Nesse caso, todas as 6976 partículas iniciam com a temperatura acima do ponto de fusão.

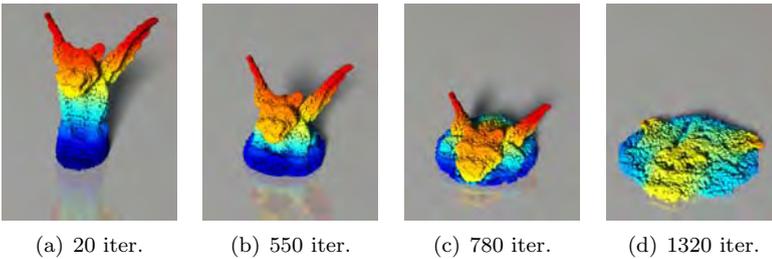


Figura 6.5: Escoamento do modelo Gargoye totalmente líquido.

A figura 6.6 mostra o derretimento do modelo Stanford Bunny com 10188 partículas. A simulação é inicializada com um gradiente linear de temperatura tal que a orelhas derretem enquanto o resto do corpo permanece frio e sólido.

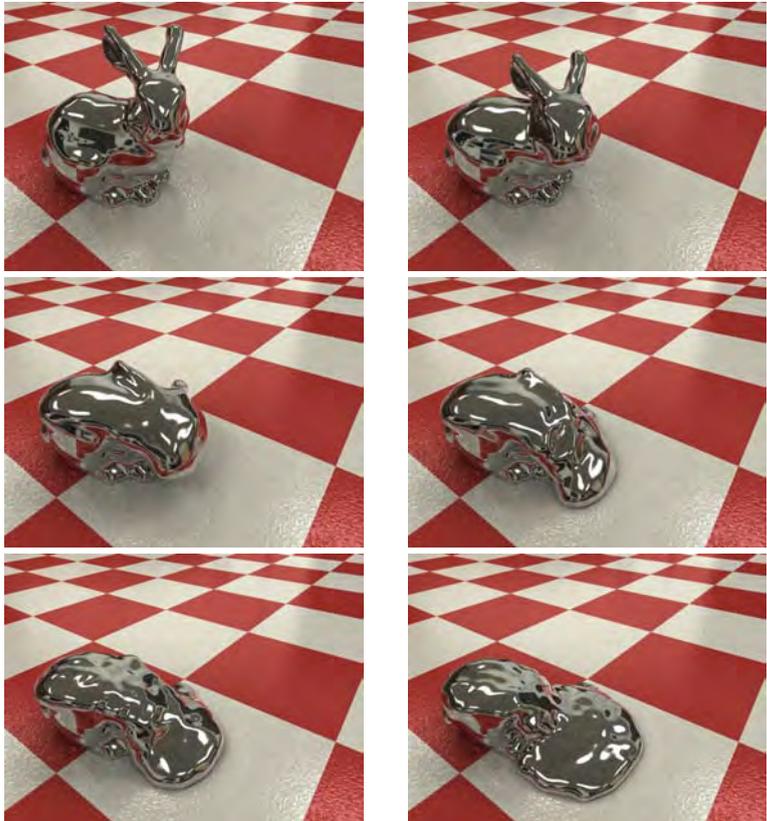
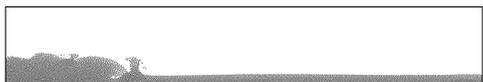


Figura 6.6: Evolução da superfície livre da simulação de derretimento do modelo Stanford Bunny, iniciando frio na base e quente no topo do modelo, com 0, 400, 800, 1200, 1800 e 4000 iterações.



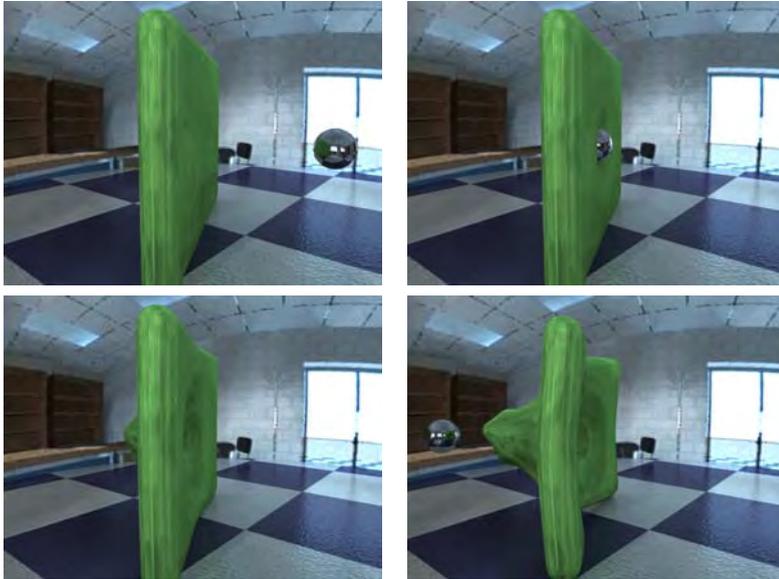


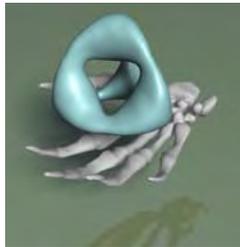
Figura 6.7: Colisão de uma esfera metálica contra uma parede plástica: após 0, 1300, 1500 e 2000 iterações.

O controle eficiente da viscosidade através da formulação de fluidos newtonianos generalizados permite resultados visualmente realistas. Essa formulação além de permitir simulações de fluidos viscoplásticos, também possibilita a simulação de objetos sólidos que sofrem deformações. A figura 6.7 mostra a simulação do impacto de uma esfera de metal contra uma parede plástica. Note que, momentos antes da esfera perfurar a parede, a energia dissipada pelo choque da esfera produz uma grande deformação no material.

No exemplo da figura 6.8, criamos um objeto viscoplástico a partir da superfície implícita conhecida como *chair* discretizado 7000 partículas e simulamos a sua interação com um objeto complexo representado pelo esqueleto de uma mão com 2351 triângulos. O método além de capturar muito bem os efeitos viscosos do material, permite que o objeto sofra grandes mudanças topológicas sem controle explícito de sua superfície livre. Observe que, mesmo após quase todo material escorrer entre os dedos e tocar o chão, parte dele fica

agarrado no esqueleto. A interação entre essa fronteira rígida e o material viscoplástico é feita geometricamente graças ao teste de colisão discutido no capítulo 4.

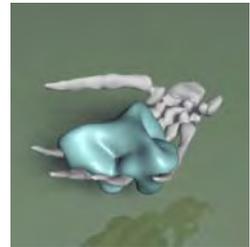
O exemplo ilustrado pela figura 6.9, exibe com fidelidade a morfologia vista em escoamentos reais de lava tais como o espalhamento da frente de lava na ausência de solidificação e o desenvolvimento de complexas e assimétricas estruturas em forma de dedos conhecidas como *lobos*. A formação dessas estruturas se deve à influência da topografia do terreno no escoamento da lava reproduzida graças novamente ao uso do teste de colisão.



(a) Objeto inicial.



(b) 600 iterações.



(c) 1400 iterações.



(d) 2800 iterações.

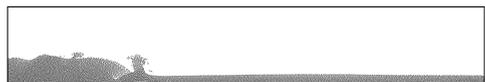


(e) 6000 iterações.



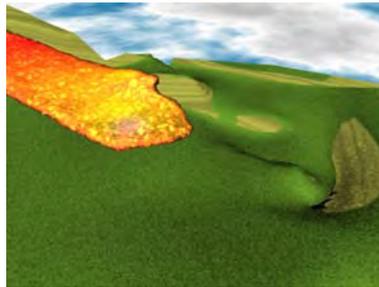
(f) 19000 iterações.

Figura 6.8: Superfície chair modelada como um material viscoplástico, interagindo com um objeto sólido complexo representado pelo esqueleto de uma mão.

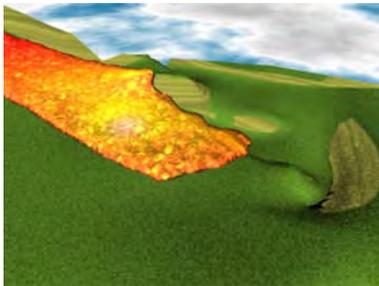




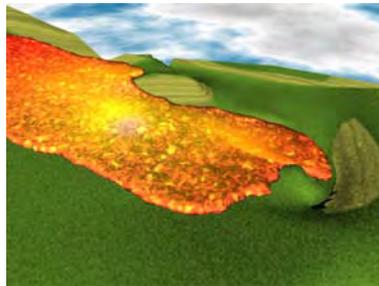
(a) 6169 iterações.



(b) 8649 iterações.



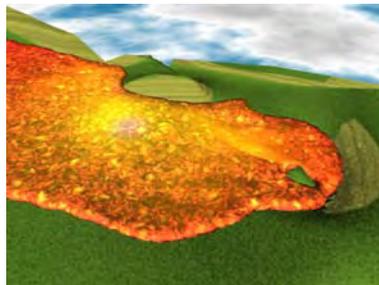
(c) 10329 iterações.



(d) 18969 iterações.



(e) 30909 iterações.



(f) 41909 iterações.

Figura 6.9: Escoamento de lava em um terreno virtual.

6.2 Decomposição de campos vetoriais

A crescente quantidade de vetores gerados por simulações, devido ao aumento de processamento dos computadores, torna a tarefa de visualização um problema delicado, o que é muito bem descrito por Helman e Hesselink [67]. A representação de dados por técnicas padrões como identificar através de uma seta todo vetor em um campo vetorial ou linhas integrais pode não ser muito informativa: visualizar milhões de setas ou linha integrais pode ser bastante confuso.

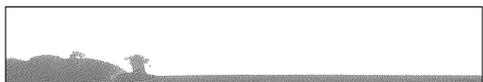
Existem duas possibilidades para evitar esse problema. A primeira, proposta por Helman e Hesselink [67], é enfatizar a topologia do campo vetorial [22, 164].

Calcular as localizações de feições características de um campo e somente mostrar essas características usando linhas, pontos ou qualquer objeto gráfico apropriado, é a segunda possibilidade. Isso é chamado de *visualização baseada em feições*. A visualização baseada em feições é de extrema importância para a interpretação do campo vetorial por engenheiros e cientistas. Por exemplo, como o comportamento do escoamento de um fluido ao redor de um corpo rígido movendo-se é responsável pela resistência aerodinâmica. Essas feições de um campo vetorial podem ser obtidas usando a equação de Poisson (capítulo 5) para determinar uma decomposição ortogonal do campo. Essa decomposição é chamada de *decomposição de Helmholtz-Hodge* e será obtida nesse capítulo.

6.2.1 Decomposição de Helmholtz-Hodge

A decomposição de Helmholtz-Hodge é aplicável em várias áreas da computação gráfica, tais como a detecção de vórtices nas imagens do escoamento de um fluido em torno do protótipo aerodinâmico de carros e aviões [162] e na estimativa de movimento dos tornados em campos de imagens de satélite [33].

Tradicionalmente, soluções numéricas dessa decomposição são obtidas por métodos que utilizam malhas, entre eles, diferenças finitas e elementos finitos. No entanto, esses métodos não são adequados para lidar com a amostragem de ponto-vetores sem nenhuma conexão explícita entre eles ou com simulações usando partículas. Nesse caso, métodos baseados em malhas exigiriam a trabalhosa tarefa de



geração de mapas topológicos. O propósito dessa sessão é apresentar uma nova técnica usando o método SPH para obter a decomposição de Helmholtz-Hodge [138]; chamaremos o nosso algoritmo, simplesmente, de método SPH-HH.

A decomposição de Helmholtz-Hodge diz que qualquer campo vetorial, definido em uma região simplesmente conexa, pode ser decomposto como soma de três componentes: uma componente com rotacional nulo, outra componente com divergente nulo e uma última componente com laplaciano nulo (figura 6.10).

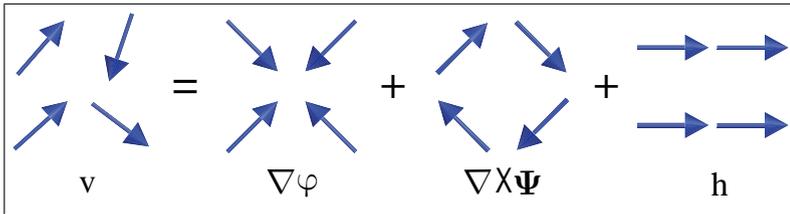


Figura 6.10: Decomposição de Helmholtz-Hodge para um campo vetorial.

Pela decomposição de Helmholtz-Hodge, um campo vetorial \mathbf{v} pode ser decomposto em três componentes

$$\mathbf{v} = \mathbf{d} + \mathbf{r} + \mathbf{h}, \quad (6.7)$$

onde a componente \mathbf{d} é um campo vetorial irrotacional, \mathbf{r} é um campo vetorial solenoidal e \mathbf{h} é um campo vetorial harmônico.

$$\nabla \times \mathbf{d} = 0$$

$$\nabla \cdot \mathbf{r} = 0$$

$$\nabla^2 \mathbf{h} = 0$$

Vale lembrar que um campo vetorial harmônico tem rotacional e divergente nulos.

Essa decomposição pode ser obtida através de um potencial escalar φ e um potencial vetorial Ψ com as seguintes propriedades.

$$\mathbf{d} = \nabla\varphi$$

$$\mathbf{r} = \nabla \times \Psi$$

$$\mathbf{h} = \mathbf{v} - \mathbf{d} - \mathbf{r}$$

Para campos vetoriais bi-dimensionais, porém, a decomposição requer uma definição introduzida por Polthier e Preuss [139]. Seja J um operador em campos vetoriais definido como a rotação de 90° no sentido horário

$$J(\mathbf{v}) = J(v_1, v_2) = (v_2, -v_1) . \quad (6.8)$$

A decomposição de Helmholtz-Hodge bi-dimensional em um campo vetorial é dada por

$$\mathbf{v} = \nabla\varphi + J(\nabla\psi) + \mathbf{h} . \quad (6.9)$$

onde a componente solenoidal é obtida aplicando o operador J sobre o gradiente de um potencial escalar ψ . A figura 6.11 ilustra a decomposição de Helmholtz-Hodge para um campo vetorial bi-dimensional.

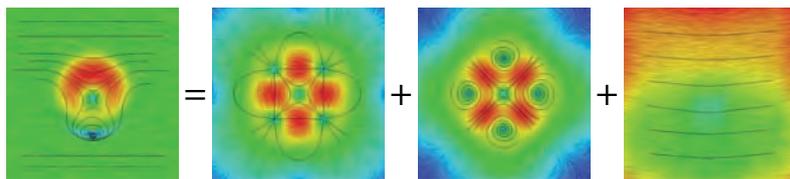


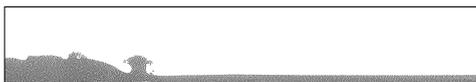
Figura 6.11: Decomposição de Helmholtz-Hodge obtida pelo método SPH-HH. Da esquerda para a direita: um campo vetorial e suas componentes irrotacional, solenoidal e harmônica. A visualização é dada pelo LIC com algumas linhas de fluxo.

O rotacional, em coordenadas cartesianas tri-dimensionais, é definido por

$$\nabla \times \mathbf{v} = \nabla \times (v_1, v_2, v_3) = \left(\frac{\partial v_3}{\partial y} - \frac{\partial v_2}{\partial z}, \frac{\partial v_1}{\partial z} - \frac{\partial v_3}{\partial x}, \frac{\partial v_2}{\partial x} - \frac{\partial v_1}{\partial y} \right) ,$$

onde $v_i = v_i(x, y, z)$. No espaço bi-dimensional, onde $v_i = v_i(x, y)$, é conveniente defini-lo como a função de valor real

$$\nabla \times \mathbf{v} = \nabla \times (v_1, v_2) = \frac{\partial v_2}{\partial x} - \frac{\partial v_1}{\partial y} .$$



Contudo, pela definição do operador J , o rotacional bi-dimensional pode ser reescrito como

$$\begin{aligned}
 \nabla \times \mathbf{v} &= \nabla \times (v_1, v_2) = \frac{\partial v_2}{\partial x} - \frac{\partial v_1}{\partial y} \\
 &= \nabla \cdot (v_2, -v_1) \\
 &= \nabla \cdot (J(v_1, v_2)) \\
 &= (\nabla \cdot J) \mathbf{v}
 \end{aligned} \tag{6.10}$$

Portanto, com as definições e notações adotadas para o caso bi-dimensional, as componentes da decomposição ainda retêm as propriedades:

1. $\mathbf{d} = \nabla\varphi$ é um campo irrotacional

$$\begin{aligned}
 \nabla \times (\nabla\varphi) &= (\nabla \cdot J) (\nabla\varphi) \\
 &= \nabla \cdot \left(\frac{\partial\varphi}{\partial y}, -\frac{\partial\varphi}{\partial x} \right) \\
 &= \frac{\partial^2\varphi}{\partial x\partial y} - \frac{\partial^2\varphi}{\partial y\partial x} \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

2. $\mathbf{r} = J(\nabla\psi)$ é um campo com divergente nulo

$$\begin{aligned}
 \nabla \cdot (J(\nabla\psi)) &= \nabla \cdot \left(J \left(\frac{\partial\psi}{\partial x}, \frac{\partial\psi}{\partial y} \right) \right) \\
 &= \nabla \cdot \left(-\frac{\partial\psi}{\partial y}, \frac{\partial\psi}{\partial x} \right) \\
 &= -\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y} + \frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y} \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

3. \mathbf{h} é um campo com divergente e rotacional nulos

$$\nabla \cdot \mathbf{h} = (\nabla \cdot J) \mathbf{h} = 0$$

Consequentemente, valem as seguintes igualdades

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{v} &= \nabla \cdot (\nabla \varphi) & + & \nabla \cdot (J(\nabla \psi)) & + & \nabla \cdot \mathbf{h} \\ &= \nabla \cdot (\nabla \varphi) & + & 0 & + & 0 \\ &= \nabla^2 \varphi \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\nabla \cdot J) \mathbf{v} &= \nabla \cdot (J(\nabla \varphi)) & + & \nabla \cdot (J(J(\nabla \psi))) & + & \nabla \cdot (J\mathbf{h}) \\ &= 0 & + & \nabla \cdot (-\nabla \psi) & - & \nabla \times \mathbf{h} \\ &= 0 & - & \nabla^2 \psi & - & 0 \\ &= & - & \nabla^2 \psi \end{aligned}$$

Essas propriedades levam ao seguinte sistema de equações de Poisson

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{v} &= \nabla^2 \varphi \\ (\nabla \cdot J) \mathbf{v} &= -\nabla^2 \psi \end{cases}, \quad (6.11)$$

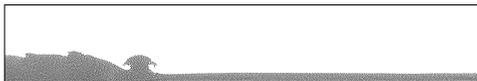
onde os potenciais φ e ψ (equações (6.9)) são soluções desse sistema.

Em domínios fechados, a unicidade dos potenciais φ e ψ é garantida adicionando ao sistema acima as condições de fronteira:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad (6.12)$$

onde \mathbf{n} é a normal na fronteira.

O sistema 6.11 será utilizado para obter as componentes irrotacional $\mathbf{d} = \nabla \varphi$ e solenoidal $\mathbf{r} = J(\nabla \psi)$ do campo vetorial \mathbf{v} dadas, respectivamente, pelos potenciais φ e ψ . Cada equação nesse sistema pode ser resolvida independentemente (seção 5.3). No que se segue, destacamos os principais passos da decomposição de Helmholtz-Hodge usando o método SPH-HH.



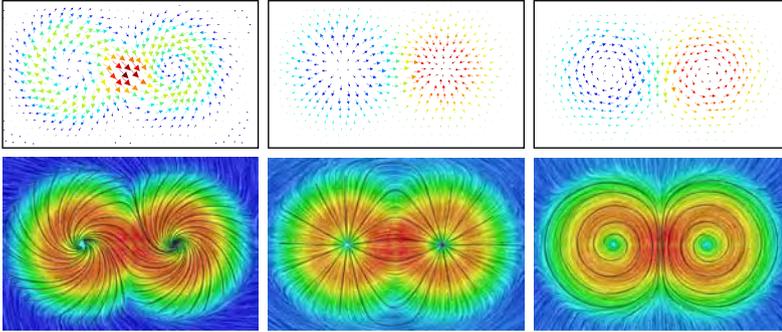


Figura 6.12: Decomposição de Helmholtz-Hodge obtida pelo método SPH-HH. Um campo vetorial \mathbf{v} (coluna da esquerda) é decomposto em uma componente irrotacional \mathbf{d} (coluna do meio) e uma componente solenoidal \mathbf{r} (coluna da direita). Podemos ver o campo vetorial em algumas das 18221 amostrar (topo) e o mapa de cores associado a magnitude do campo com alguma linhas integrais (base).

6.2.2 Algoritmo SPH de decomposição

Definição das partículas

Seja $\mathcal{V} = \{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\}$ um campo vetorial discreto definido em $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, onde $\mathbf{v}_i = \mathbf{v}(\mathbf{x}_i)$ com $\mathbf{x}_i \in \Omega$. Cada vetor \mathbf{v}_i é associado com uma partícula SPH indexada por i e posicionada em \mathbf{x}_i . O atributo massa é definido constante em todas as partículas, dado por $m = \frac{V_\Omega}{n}$ com $V_\Omega = Volume(\Omega)$. Finalmente, a densidade em cada partícula i é calculada diretamente da aproximação SPH para uma função (equação 2.13):

$$\rho_i = \sum_j m_j W^h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j).$$

A coluna da esquerda na figura 6.12 mostra um campo vetorial sintético representado por 493 vetores.

Condição de fronteira

As condições de fronteira (equação (6.12)) são diretamente incorporadas no sistema. Dada uma partícula i , que dista menos de $\frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{m_i}{\rho_i}}$ da fronteira. Ao invés de substituir uma das equações de Poisson (equação 6.11) pela respectiva condição de fronteira (equação 6.12), a qual deve ser considerada apenas em partículas *exatamente* na fronteira, adiciona-se ao lado direito da equação de Poisson o termo nulo dado pela condição de fronteira, o que leva a uma transição mais suave. Por exemplo, para o potencial ϕ , em uma dada partícula i próxima a fronteira, o lado esquerdo da equação de Poisson discretizada pelos operadores SPH nessa partícula é substituída por

$$\underbrace{\sum_j 2 \frac{m_j}{\rho_j} (\phi_j - \phi_i) F(\mathbf{x}_{ij})}_{\nabla^2 \phi} + \underbrace{\sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (\phi_j - \phi_i) \nabla_i W_{ij} \cdot \mathbf{n}_i}_{\nabla \phi \cdot \mathbf{n} = 0},$$

onde a normal \mathbf{n}_i é dada por uma média das normais vizinhas na fronteira.

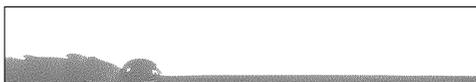
Inconsistência de partículas na fronteira

Como discutimos anteriormente, em partículas próximas a fronteira do domínio, os operadores SPH podem obter aproximações imprecisas devido a falta de partículas em direções específicas. Para contornar essa deficiência na aproximação usa-se partículas virtuais, conhecidas como *partículas fantasmas*. As partículas fantasmas são criadas próximas a fronteira do domínio, do lado externo, usando a mesma amostragem por disco de Poisson [43].

Como vimos no capítulo 4, qualquer atributo nas partículas fantasmas podem ser definidos pela seguinte aproximação SPH

$$A_i = \frac{\sum_{j \in V(x_i)} \frac{m_j}{\rho_j} A_j W^h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)}{\sum_{j \in V(x_i)} \frac{m_j}{\rho_j} W^h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)}, \quad (6.13)$$

onde a soma ocorre somente sobre as partículas originais vizinhas de uma partícula fantasma.



A figura 6.13 mostra um exemplo da geração das partículas fantasmas (a) e ilustra a extensão de um campo vetorial \mathbf{v} em uma partícula fantasma (b).

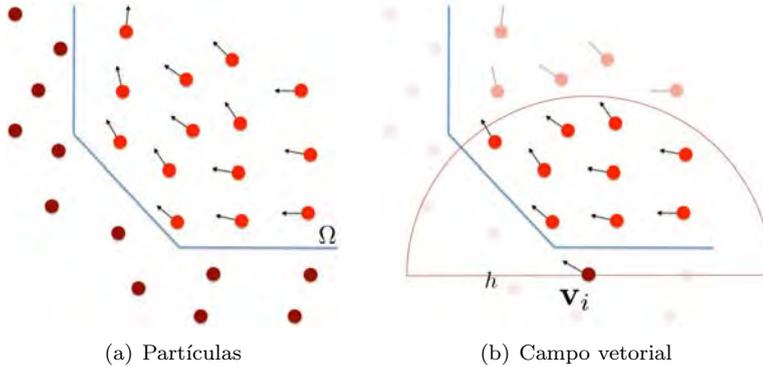


Figura 6.13: A geração das partículas fantasmas no método SPH-HH evita a aproximação imprecisa em partículas próximas a fronteira.

Para evitar que as partículas fantasmas incluam uma equação extra no sistema linear obtido pela discretização SPH da equação de Poisson (equações (5.9)), o que evita a aproximação de derivadas em suas posições, utiliza-se a aproximação (6.13) para representar o potencial de uma partícula fantasma da seguinte maneira. Dada uma partícula i , quando uma partícula vizinha j é uma partícula fantasma, então o potencial ϕ_j , na aproximação do laplaciano (equação 5.7) é substituído por

$$\phi_j = \frac{\sum_k \frac{m_k}{\rho_k} \phi_k W_{jk}}{\sum_k \frac{m_k}{\rho_k} W_{jk}}$$

onde a soma ocorre somente sobre as partículas originais.

Componente irrotacional

A componente de rotação nula \mathbf{d} é obtida pelo gradiente SPH do potencial φ dado pela equação de Poisson

$$\nabla^2 \varphi = \nabla \cdot \mathbf{v},$$

incluindo a compensação nas partículas próximas a fronteira discutida acima.

Resolvendo a equação de Poisson SPH, incluindo a condição de fronteira $\nabla \varphi \cdot \mathbf{n} = 0$, obtemos o potencial φ . Finalmente, a componente irrotacional é obtido aplicando o operador gradiente SPH (equação (2.18)):

$$\mathbf{d}_i = \nabla \varphi_i = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (\varphi_j - \varphi_i) \nabla_i W_{ij} \quad (6.14)$$

A coluna do meio na figura 6.12 mostra a componente irrotacional obtida pelo método SPH-HH de um campo vetorial sintético representado por 493 vetores.

Componente solenoidal

A componente de divergente nula é obtida da mesma maneira que a componente irrotacional. Primeiro a equação de Poisson associada ao potencial ψ

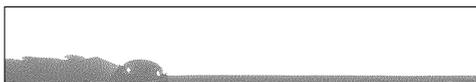
$$\nabla^2 \psi = -(\nabla \cdot \mathbf{J}) \mathbf{v},$$

é resolvida incluindo a condição de fronteira $\frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{n}} = 0$. Então, utiliza-se o operador gradiente SPH (equação (2.18))

$$\nabla \psi_i = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (\psi_j - \psi_i) \nabla_i W_{ij}$$

para calcular a componente solenoidal $\mathbf{r}_i = \mathbf{J}(\nabla \psi_i)$, aplicando o operador de rotação \mathbf{J} (equação 6.8) em $\nabla \psi_i$.

A coluna da direita na figura 6.12 mostra a componente solenoidal obtida pelo método SPH-HH de um campo vetorial sintético representado por 493 vetores.



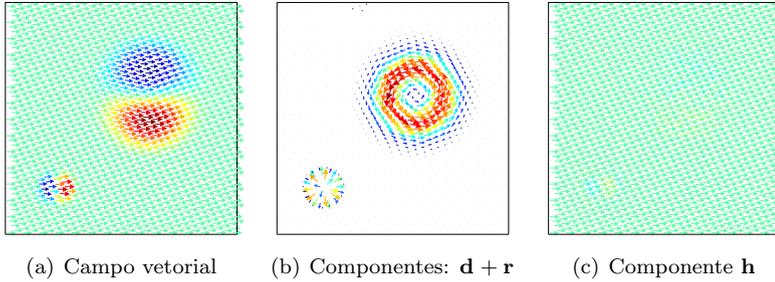


Figura 6.14: O método SPH-HH revela as componentes solenoidal $\mathbf{r} = J(\nabla\psi)$ e irrotacional $\mathbf{d} = \nabla\varphi$ do campo vetorial 2D (esquerda) mesmo com uma componente harmônica \mathbf{h} de magnitude maior do que as demais componentes, $10 \max(\|\mathbf{r}\|, \|\mathbf{d}\|)$ (visualização de $\frac{1}{3}$ das amostras).

Componente harmônica

Após calcular as componentes irrotacional e solenoidal, a componente harmônica é simplesmente determinada por

$$\mathbf{h} = \mathbf{v} - \mathbf{d} - \mathbf{r}.$$

Por exemplo, o campo sintético ilustrado na figura 6.14(a) foi construído analiticamente como a soma de três campos: um campo de rotação nula, outro com divergente nulo e um campo harmônico constante, porém com ordem de magnitude muito maior do que os demais campos. A figura 6.14(b) mostra a soma das componentes irrotacional e solenoidal obtidas pelo método SPH-HH, e a figura 6.14(c) mostra o campo harmônico, o qual é obtido consistentemente com a componente harmônica analítica.

6.2.3 Detecção automática de feições

A visualização baseada em feições é de extrema importância para a interpretação do campo vetorial por engenheiros e cientistas. Por exemplo, como o comportamento do escoamento de um fluido ao redor de um corpo rígido em movimento influencia a sua resistência aerodinâmica, experimentos desse tipo em dinâmica dos fluidos são importantes para determinar o formato de carros e aviões. Por exemplo, no caso das aeronaves, os vórtices são fundamentais para a capacidade de elevação (figura 6.15).

A decomposição de Helmholtz-Hodge é particularmente interessante para obter as feições de um campo vetorial. Em particular, no caso bi-dimensional, ambas as componentes são dadas por potenciais escalares. As singularidades de cada potencial, i.e., os pontos onde alguma componente é nula, são obtidas automaticamente no método SPH-HH, dadas pelas localizações das partículas que alcançam um mínimo ou um máximo local em um dos potenciais φ or ψ .

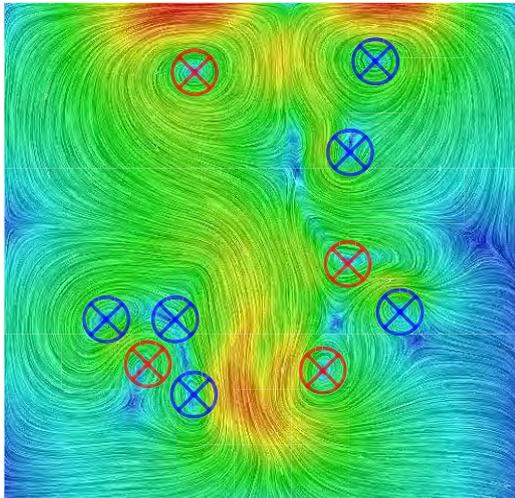
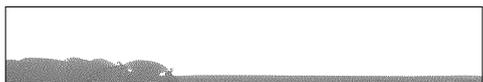


Figura 6.15: O método SPH-HH detecta os vórtices em um campo vetorial discreto com 6.400 partículas obtido em uma simulação de escoamento incompressível.



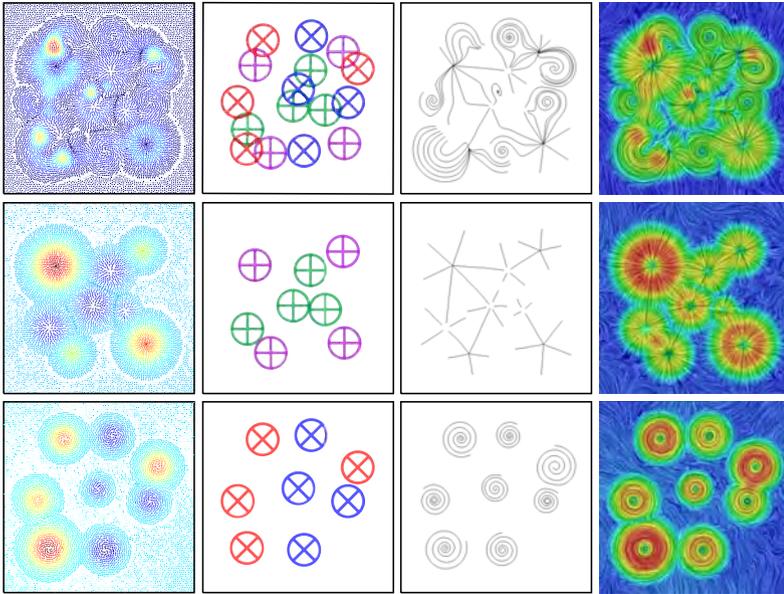


Figura 6.16: As singularidades de cada componente são obtidas automaticamente pelo método SPH-HH dados pelos pontos críticos dos potenciais φ e ψ . O campo é visualizado em todas as 5.001 partículas.

As singularidades da componente irrotacional $\mathbf{d} = \nabla\varphi$ são centros de sorvedouros (respectivamente fontes) para os máximos (respectivamente mínimos) de φ (figura 6.16). Para a componente solenoidal, $\mathbf{r} = J(\nabla\psi)$, as singularidades são os centros de vórtices no sentido horário (respectivamente anti-horário) para os mínimos (respectivamente máximos) de ψ .

Em seguida, estuda-se a decomposição SPH-HH em regiões não simplesmente conexas. A figura 6.17 mostra um campo vetorial obtido na simulação da interação entre um corpo rígido e um fluido usando um método de elementos finitos com domínios fictícios baseado em um multiplicador de Lagrange [38]. A decomposição detecta os centros de vórtices mesmo com a fronteira do corpo rígido.

A figura 6.18 mostra a decomposição de um campo turbulento ao redor de um objeto rígido [18], onde uma componente que circula o buraco é artificialmente incluída. Na figura da esquerda o campo

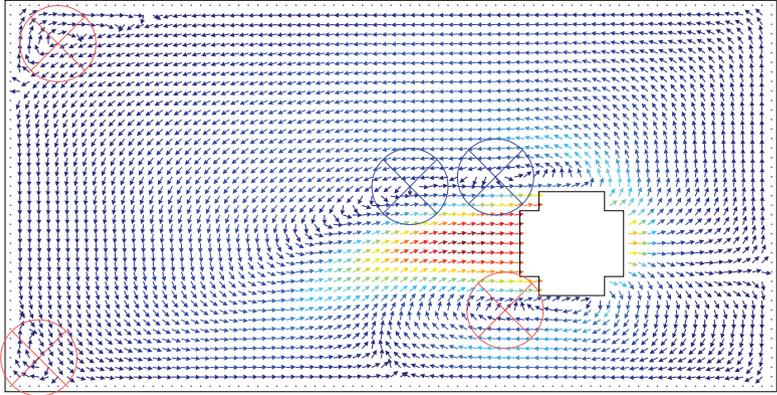


Figura 6.17: O método SPH-HH obtém a decomposição de um campo vetorial definidos em domínios com fronteiras complexas, representado por 3.216 partículas.

vetorial normalizado com as feições detectadas pelo método SPH-HH é ilustrado. A componente solenoidal e a componente harmônica são ilustradas, respectivamente, no centro e na direita. O campo harmônico não-trivial obtido pelo método circula o buraco, o que é característico de tais topologias.

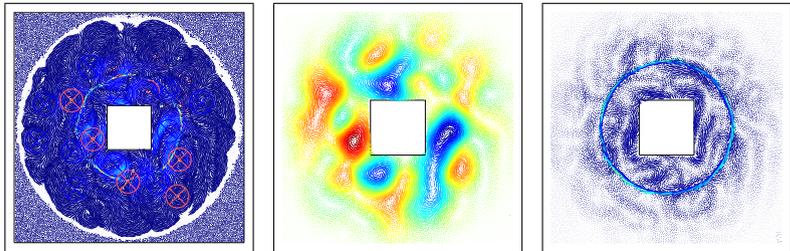


Figura 6.18: A decomposição SPH-HH de um campo turbulento ao redor de um objeto rígido, amostrado por 23.267 partículas.



6.3 Fluidos bifásicos

Existem vários trabalhos utilizando o método SPH para simular fluidos bifásicos. Nos trabalhos de Tartakovsky e Meakin [158] e Colagrossi e Landrini [29] ambas as fases são discretizadas usando SPH e a pressão é definida por uma equação do estado. Várias modificações são propostas nesses trabalhos a fim evitar que os campos de velocidade obtidos durante a simulação comprometam o resultado, pois a condição de incompressibilidade ($\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$) pode não ser verificada.

Existem também métodos híbridos, combinando métodos sem malha com outros métodos para simular fluidos bifásicos. Liu *et al.* [96] desenvolveram um método híbrido de partículas-malha, onde a fase mais densa é representada por partículas (método *moving particle semi-implicit* [81]), enquanto uma malha discretiza o fluido menos denso (método volume-of-fluid [69]). Um método híbrido utilizando o método SPH é apresentado por Paiva [130], onde a pressão é determinada sobre uma grade e então interpolada para as partículas que discretizam apenas uma das fases do escoamento bifásico.

O método apresentado nessa seção, discretiza as duas fases usando SPH e faz uso da solução do método da projeção SPH (capítulo 5) para simular o escoamento de tal forma que a condição de incompressibilidade para o campo de velocidade obtido seja garantida. Pequenas modificações foram feitas ao algoritmo apresentado na seção 5.4, adaptando-o a simulações de fluidos bi-fásicos. No que segue, os principais passos no algoritmo são brevemente apresentados com as modificações propostas.

6.3.1 Algoritmo SPH

A configuração inicial em uma simulação de fluidos bi-fásicos é dada da seguinte forma: inicialmente, todo o domínio é discretizado por partículas seguindo uma distribuição de disco de Poisson [43]. Em seguida, as partículas são divididas em dois conjuntos (as duas fases da simulação) de acordo com a sua posição inicial. Por último, os atributos de uma partícula são definidos de acordo com a fase a qual ela pertence. Outros detalhes intrínsecos da aplicação a fluidos bifásicos serão descritos adiante.

Campo de velocidade intermediário

No primeiro passo, um campo de velocidade intermediário \mathbf{v}^* é obtido pela equação do momento (equação (5.1)), sem o termo da pressão. A aproximação para o termo viscoso proposto por Morris et al [120] é utilizada, e a integração numérica é calculada utilizando o método explícito de Euler (seção 5.4). Assim, o campo \mathbf{v}^* em uma partícula i é obtido pela seguinte expressão

$$\mathbf{v}^*_i = \mathbf{v}^t_i + \Delta t \sum_j \frac{m_j (\mu_i + \mu_j) \mathbf{v}^t_{ij} \cdot \mathbf{x}_{ij} \nabla_i W_{ij}}{\rho_i \rho_j r_{ij}^2}, \quad (6.15)$$

onde Δt é a discretização temporal. O super-índice t indica que as variáveis são expressas no tempo t . A restrição ao campo de velocidade $\mathbf{v}^* = 0$ na fronteira do domínio $\delta\Omega$ é aplicada utilizando o conceito de camada-limite (capítulos 4 e 5).

Projeção no espaço de divergência livre

A projeção no sub-espaço de divergência nula do campo de velocidade \mathbf{v}^* define novos campos de velocidade e pressão. A pressão p é obtida pela solução da equação da seguinte equação de Poisson

$$-\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right) = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{v}^* \quad (6.16)$$

com a condição de Neumann $\frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} = 0$ na fronteira do domínio Ω .

A discretização dessa equação de Poisson é obtida fazendo

$$(\nabla \cdot \mathbf{v}^*)_i = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \left(\mathbf{v}^*_j - \mathbf{v}^*_i \right) \nabla_i W_{ij}$$

e

$$\nabla \cdot (k \nabla p) = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \frac{(k_i + k_j) (p_i - p_j)}{r_{ij}^2} (\mathbf{x}_{ij}) \nabla_i W_{ij}.$$



Cleary e Monaghan [28] propõem substituir

$$k_i + k_j \longrightarrow \frac{4k_i k_j}{k_i + k_j}$$

no caso da variável k ter uma descontinuidade. Em escoamentos bifásicos, a variável $k = \rho^{-1}$ pode ser descontínua em algumas regiões, como, por exemplo, na interface entre os dois fluidos, onde a densidade é descontínua. Portanto, reescrevemos o laplaciano como

$$\left(\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right) \right)_i = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \left(\frac{4}{\rho_i + \rho_j} \right) p_{ij} \frac{\mathbf{x}_{ij}}{r_{ij}^2} \nabla_i W_{ij}, \quad (6.17)$$

onde $p_{ij} = p_i - p_j$.

Ao invés de substituir a equação de Poisson (equação (6.16)) pela condição de Neumann $\mathbf{n} \cdot \nabla p = 0$, para a qual deve-se considerar a partícula exatamente na fronteira, utiliza-se o conceito de partículas fantasmas, o qual estende-se o domínio, acrescentando partículas fora da fronteira (capítulos 4 e 5).

O novo campo de velocidade é obtido utilizando a pressão calculada através da equação de Poisson

$$\mathbf{v}_i^{t+1} = \mathbf{v}_i^* - \Delta t \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right)_i, \quad (6.18)$$

onde o gradiente da pressão é dado pelo operador SPH

$$\left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right)_i = \frac{1}{\rho_i} \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (p_j - p_i) \nabla_i W_{ij}.$$

Dessa forma, o campo de velocidade obtido obedece a condição de incompressibilidade ($\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$).

Por último, obtemos as novas posições para as partículas, fazendo:

$$\mathbf{x}^{t+1} = \mathbf{x}^t + \Delta t \frac{\mathbf{v}^{t+1} + \mathbf{v}^t}{2}.$$

O seguinte pseudo-código destaca as principais etapas durante a simulação das equações de Navier-Stokes, na qual utiliza-se o método da projeção:

Algoritmo 1 Método da Projeção SPH

```

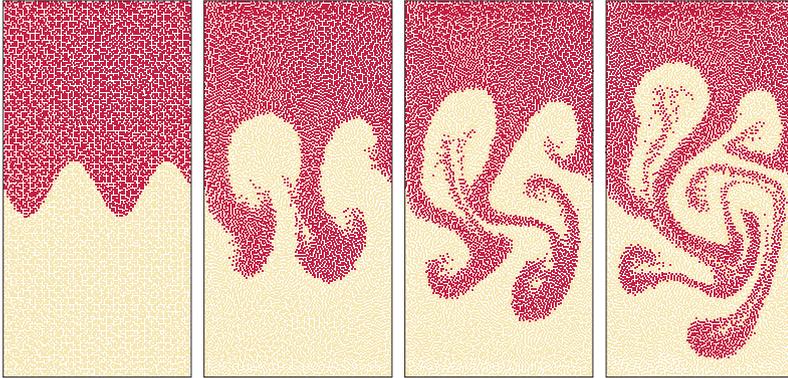
1: for  $i = 1$  to  $n$  do
2:    $\mathbf{v}_i^* = \mathbf{v}_i^t + \Delta t \left( \frac{1}{\rho} \nabla^2 \mathbf{v} \right)_i$ 
3: end for
4: for  $i = 1$  to  $n$  do
5:   CamadaLimite( $\mathbf{v}_i^*$ )
6: end for
7: for  $i = 1$  to  $n$  do
8:   Resolver o sistema:  $\frac{(\nabla \cdot \mathbf{v}^*)_i}{\Delta t} = \left( \nabla \cdot \left( \frac{1}{\rho} \nabla p \right) \right)_i$ 
9: end for
10: for  $i = 1$  to  $n$  do
11:    $\mathbf{v}_i^{t+1} = \mathbf{v}_i^* - \Delta t \left( \frac{1}{\rho} \nabla p \right)_i$ 
12: end for
13: for  $i = 1$  to  $n$  do
14:    $\mathbf{x}_i^{t+1} = \mathbf{x}_i^t + \Delta t \left( \frac{\mathbf{v}_i^t + \mathbf{v}_i^{t+1}}{2} \right)$ 
15: end for

```



6.3.2 Resultados

Instabilidades de Rayleigh-Taylor



(a) config. inicial (b) tempo: 2 segs (c) tempo: 4 segs (d) tempo: 6 segs

Figura 6.19: Instabilidades de Rayleigh-Taylor são criadas quando o fluido mais denso é acelerado para dentro do fluido menos denso.

Nesse exemplo, a *instabilidade de Rayleigh-Taylor* é simulada pelo método SPH. A instabilidade de Rayleigh-Taylor ocorre quando um fluido é acelerado dentro de outro fluido menos denso. Em nossa simulação isso ocorre quando um fluido de maior densidade é colocado sobre um fluido menos denso e um campo gravitacional é criado.

Uma das grandes vantagens do método SPH sobre os demais métodos com malhas é vista nesse exemplo. A interface entre dois diferentes fluidos é facilmente captada pelo método e pode ser visualizada durante toda a simulação, sem nenhum esforço adicional.

A dinâmica da instabilidade é vista na figura 6.19, onde um fluido mais denso (escuro) tem densidade duas vezes maior do que o fluido menos denso (claro).

O domínio $\Omega = [-0, 5; 0, 5] \times [-1; 1]$ é representado por 12.400 partículas, cujas posições iniciais foram definidas pela distribuição do disco de Poisson. A interface entre os dois fluidos é inicialmente dada pela função $y = -0,15 \text{sen}(\pi x)$.

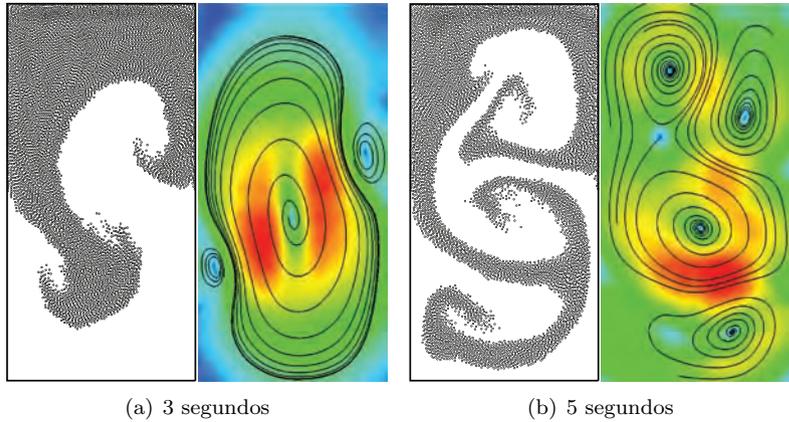


Figura 6.20: Linhas integrais obtidas a partir do campo de velocidade do escoamento. Ao lado, as partículas de apenas uma das fases do escoamento bi-fásico é ilustrada, o fluido mais denso.

O fluido menos denso (densidade igual a 1,0) é representado por 6.200 partículas com massa 0,000385, enquanto que o fluido com a densidade duas vezes maior é representado por 6.200 partículas com massa 0,00077. Outros parâmetros definidos para a simulação dessa instabilidade são: a gravidade, de magnitude 1,0; a viscosidade $\mu = 0,0118$ e passo de tempo $\Delta t = 0,001$.

No método proposto, um campo de pressões é calculado através de uma equação de Poisson, em cada instante de tempo. Daí, um campo de velocidade é obtido durante toda a simulação tendo divergência nula, garantindo a incompressibilidade do escoamento.

A figura 6.20 ilustra uma nova simulação da instabilidade de Rayleigh-Taylor, dessa vez com a superfície entre os fluidos definida por $y = -0,15\text{sen}(2\pi x)$. Os outros parâmetros da simulação são os mesmos da simulação anterior. As partículas que discretizam apenas uma das fases do escoamento bi-fásico (o fluido mais denso) são ilustradas ao lado de algumas linhas integrais obtidas pela integração de um ponto ao longo do campo de velocidade calculado durante o escoamento nos instantes de tempo dois e cinco segundos (tempo real de simulação) [86].



Imersão de uma gota

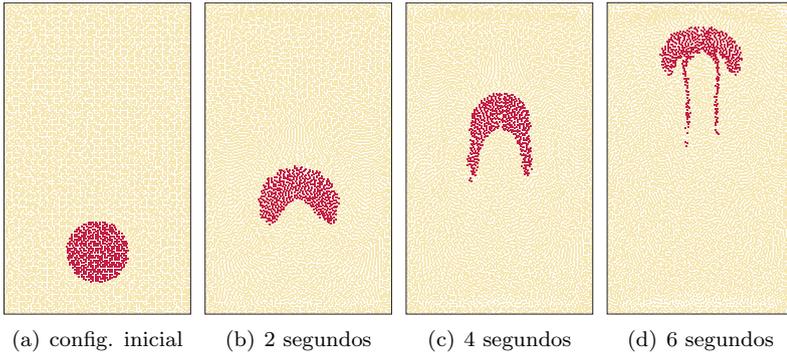


Figura 6.21: A dinâmica de uma gota: um fluido mais denso contém em seu interior uma gota de um fluido mais leve. O empuxo agindo na gota gera um movimento da mesma em direção ao topo do fluido mais denso. A configuração inicial e o resultado após 6 segundos de simulação (tempo real) são ilustrados.

O próximo exemplo simula a *dinâmica de uma gota* fluindo em direção ao topo de um fluido mais denso. Quando um fluido contém em seu interior uma gota de um fluido menos denso, a gota fica sujeita a uma força de empuxo, fazendo com que ela suba até a superfície (figura 6.21).

Na simulação, a densidade do fluido mais pesado é duas vezes a densidade do fluido mais leve (gota). A gota é discretizada por 547 partículas e o fluido mais denso por 9.873 partículas. A viscosidade do fluido e outros parâmetros da simulação são: a gravidade, de magnitude 1; a viscosidade $\mu = 0,0118$ e passo de tempo $\Delta t = 0,001$.

Quando uma gota de um fluido é mergulhada em um fluido mais pesado, devido à diferença de densidade, a pressão calculada pelo método da projeção através da equação de Poisson resulta em uma força de empuxo que age sobre a gota criando um movimento em direção ao topo do fluido mais denso. A forma esférica da gota é alterada para a forma de ferradura. Essa deformação também é observada em experimentos reais.

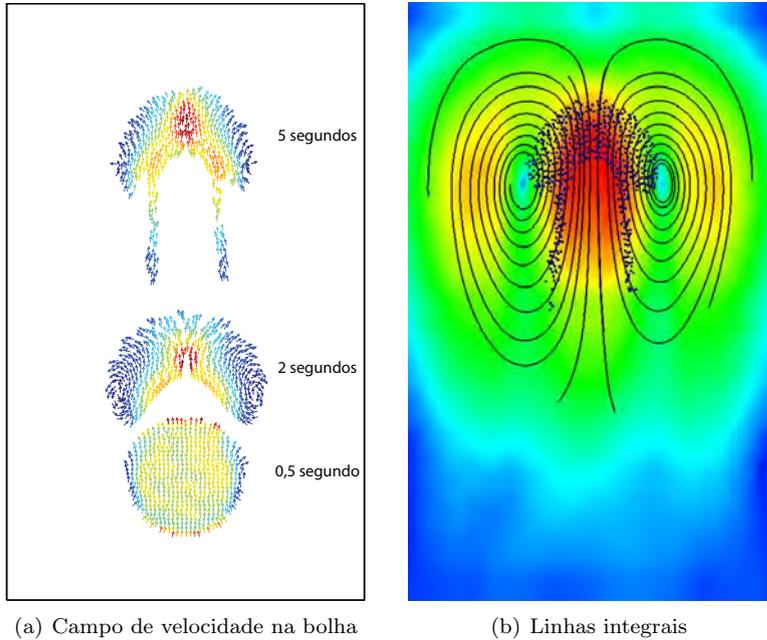


Figura 6.22: A figura da esquerda ilustra o campo de velocidade do escoamento apenas nas partículas da gota de fluido menos denso, nos instantes de tempo 0.5, 2 e 5 segundos. As partículas que representam a gota nessa simulação também são visualizadas na figura da direita, junto com algumas linhas integrais e a magnitude do campo.

Mais uma vez, pelo método da projeção SPH, um campo de velocidade é obtido durante toda a simulação tendo divergência nula, através do cálculo da pressão por uma equação de Poisson. Garantindo, portanto, a incompressibilidade do escoamento.

Na figura 6.22 o campo de velocidade do escoamento é ilustrado. Na figura da esquerda a velocidade nas partículas que discretizam a bolha é ilustrada em alguns instantes de tempo. A figura da direita ilustra algumas linhas integrais obtidas pela integração de um ponto inicial no campo de velocidade do escoamento no instante de tempo 5 segundos junto com o mapa de cores associado a magnitude da velocidade e as partículas que representam a gota nessa simulação.



Instabilidades de Kelvin-Helmholtz

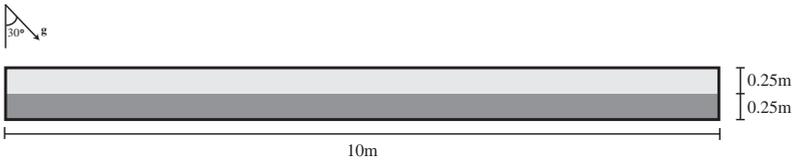


Figura 6.23: Instabilidade de Kelvin-Helmholtz ocorre quando, por exemplo, existe uma diferença de velocidades na interface entre os dois fluidos.

O último problema simulado é conhecido como a *instabilidade de Kelvin-Helmholtz*. A instabilidade de Kelvin-Helmholtz ocorre quando há uma diferença de velocidades na interface entre duas camadas de fluidos, não necessariamente de densidades diferentes.

Em nossa simulação, a instabilidade de Kelvin-Helmholtz é criada pela seguinte situação: em um longo reservatório (comprimento 20 vezes maior que a altura), um fluido menos denso é sobreposto a um fluido mais denso definindo uma interface plana entre os dois fluidos. Quando o reservatório é inclinado, fazendo com que o fluido mais denso se movimente para o fundo do reservatório, enquanto o fluido menos denso se movimente para o topo do reservatório, a diferença das velocidades nas camadas dos fluidos cria, na interface dos fluidos, a instabilidade de Kelvin-Helmholtz. A figura 6.23 ilustra o reservatório e a configuração inicial do problema.

Nessa simulação, cada fluido é discretizado por 20.000 partículas e a razão entre as densidades é 2. O ângulo de inclinação do reservatório e outros parâmetros dessa simulação são: a gravidade, de magnitude 1, 0; a viscosidade $\mu = 0,0118$, passo de tempo $\Delta t = 0,001$ e inclinação do reservatório é de 30° .

Inclinando o reservatório, quando a diferença de velocidades na interface entre os dois fluidos excede um valor, a instabilidade é criada. A figura 6.24 ilustra a evolução da instabilidade de Kelvin-Helmholtz após 10 segundos de simulação (tempo real). O fluido menos denso, porém, não é visualizado. Além disso, apenas a parte central do reservatório é ilustrada para uma melhor visualização das instabilidades.

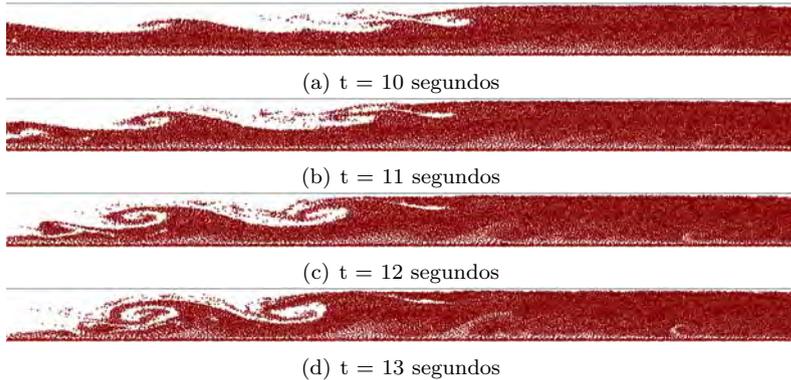


Figura 6.24: A instabilidade de Kelvin-Helmholtz ocorre quando existe uma diferença de velocidade entre duas camadas de fluidos. Quando essa diferença da velocidade excede um valor em sua magnitude, a instabilidade ocorre na interface entre essas duas camadas. Esse perfil de velocidade é criado ao inclinar um reservatório (figura 6.23) que contém um fluido mais denso sobreposto a um fluido menos denso. A instabilidade criada nessa simulação é ilustrada, onde somente o fluido mais denso é visualizado.



Apêndice A

Noções elementares de cálculo diferencial vetorial

Este apêndice coleta resultados básicos de cálculo diferencial à várias variáveis, na notação usada neste livro. Será visto apenas as definições essenciais com as propriedades usadas no livro, e convidamos os leitores a procurar livros de cálculo [107, 17, 159] para uma abordagem mais rigorosa.

Introduzimos os campos vetoriais no espaço pois, exceto para o operador rotacional, cobre o caso bi-dimensional. Para mais detalhes sobre o rotacional no plano, referimos à seção sobre decomposição de campos vetoriais. Consideramos que os campos são suficientemente diferenciáveis para validar as expressões, o que na maioria dos casos significa ser de classe pelo menos C^2 (permitindo assumir, pelo teorema de Clairaut-Schwarz que $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}$). Consideramos também que os domínios têm fecho compacto e são simplesmente conexos, esta última suposição sendo mais delicada nas simulações.



A.1 Campos vetoriais e operadores diferenciais

Campos escalares e vetoriais

O cálculo básico estuda funções de um parâmetro, cujo domínio é ou a linha real \mathbb{R} ou um sub-domínio dela. Consideramos aqui funções da posição espacial, tendo mais de uma dimensão. Uma função sobre tal domínio é chamada de *campo escalar*:

Definição. Um campo escalar sobre Ω é uma função

$$f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$$

Neste livro, olhamos casos onde Ω é \mathbb{R}^2 ou \mathbb{R}^3 ou um subconjunto deles. Nesta definição, a parte escalar se refere ao espaço imagem \mathbb{R} . Exemplos físicos de campos escalares são a pressão ou a temperatura do fluido.

Se um campo escalar associa números reais a pontos de \mathbb{R}^3 , um campo vetorial associa um vetor:

Definição. Um campo vetorial é uma função

$$\mathbf{f} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$$

onde Ω é um subconjunto de \mathbb{R}^3

Podemos interpretar o campo vetorial como 3 campos escalares $f_{1,2,3}$, que associam a um ponto cada componente do vetor

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = f_1(\mathbf{x})\mathbf{i} + f_2(\mathbf{x})\mathbf{j} + f_3(\mathbf{x})\mathbf{k} ,$$

onde usamos a base usual:

$$\begin{aligned} \mathbf{i} &= (1, 0, 0) \\ \mathbf{j} &= (0, 1, 0) \\ \mathbf{k} &= (0, 0, 1) \end{aligned}$$

O exemplo físico mais usado neste livro é o campo de velocidade do fluido.

Derivação de primeira ordem, matriz jacobiana

O próximo ponto é definir os operadores de derivação nos campos escalares e vetoriais. De fato, um campo escalar tem três derivadas parciais ($\frac{\partial f}{\partial x}$, $\frac{\partial f}{\partial y}$, $\frac{\partial f}{\partial z}$) e um campo vetorial, sendo essencialmente três campos escalares, tem nove derivadas parciais. Podemos agrupar todas estas derivadas numa matriz 3×3 , chamada de matriz jacobiana:

Definição. A matriz jacobiana de um campo vetorial $\mathbf{f} = f_1\mathbf{i} + f_2\mathbf{j} + f_3\mathbf{k}$ é a matriz

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} & \frac{\partial f_1}{\partial z} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} & \frac{\partial f_2}{\partial z} \\ \frac{\partial f_3}{\partial x} & \frac{\partial f_3}{\partial y} & \frac{\partial f_3}{\partial z} \end{bmatrix}$$

Tem muitas combinações destas derivadas parciais que definem operadores diferenciais, mas na prática, tem apenas três operadores diferenciais de primeira ordem interessantes do ponto de vista físico e geométrico: o gradiente, o divergente e o rotacional.

Operador gradiente e notação ∇

Definição. O gradiente de um campo escalar f é o campo vetorial

$$\text{grad } f = \frac{\partial f}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial f}{\partial y}\mathbf{j} + \frac{\partial f}{\partial z}\mathbf{k} .$$

Então o gradiente é um operador

$$\begin{aligned} \text{grad} : \text{campos escalares} &\mapsto \text{campos vetoriais} \\ f &\rightarrow \text{grad } f = \frac{\partial f}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial f}{\partial y}\mathbf{j} + \frac{\partial f}{\partial z}\mathbf{k} \end{aligned}$$

Neste livro, usamos a notação simbólica

$$\text{grad } f = \nabla f$$

onde o operador ∇ , chamado nabla é representado pelo vector de operadores

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y}\mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial z}\mathbf{k}$$



Observe que a notação ∇ pode ser usada para a matriz jacobiana com $\nabla \mathbf{f}$.

O gradiente corresponde à direção de maior crescimento do campo f . Em particular, os pontos estacionários de f são os pontos onde o gradiente de f é zero.

Operador divergente

Os dois outros operadores diferenciais atuam em campos de vetores: o divergente associa a um campo de vetor um campo escalar, enquanto o rotacional (no espaço) associa a um campo vetorial outro campo vetorial.

Definição. O divergente do campo vetorial $\mathbf{f} = f_1\mathbf{i} + f_2\mathbf{j} + f_3\mathbf{k}$ é

$$\operatorname{div} \mathbf{f} := \frac{\partial f_1}{\partial x} + \frac{\partial f_2}{\partial y} + \frac{\partial f_3}{\partial z} .$$

O divergente é então o traço da matriz jacobiana. Usando a notação simbólica, obtemos a mesma expressão através do produto escalar de vetores:

$$\operatorname{div} \mathbf{f} = \nabla \cdot \mathbf{f}$$

Assim

$$\begin{aligned} \operatorname{div} : \text{campos vetoriais} &\mapsto \text{campos escalares} \\ \mathbf{f} &\rightarrow \operatorname{div} \mathbf{f} = \nabla \cdot \mathbf{f} \end{aligned}$$

Veremos no final do apêndice que os campos sem divergente são importantes, pois conservam o fluxo. São geralmente qualificados de *solenoidais*. Em particular, correspondem a campos magnéticos em eletromagnetismo e a fluidos incompressíveis.

Operador rotacional no espaço

Definição. O rotacional de um campo vetorial $\mathbf{f} = f_1\mathbf{i} + f_2\mathbf{j} + f_3\mathbf{k}$ é o campo vetorial

$$\begin{aligned} \text{rot} : \text{campos vetoriais} &\mapsto \text{campos vetoriais} \\ \mathbf{f} &\rightarrow \text{rot}\mathbf{f} \end{aligned}$$

com

$$\text{rot}\mathbf{f} = \left(\frac{\partial f_3}{\partial y} - \frac{\partial f_2}{\partial z}\right)\mathbf{i} + \left(\frac{\partial f_1}{\partial z} - \frac{\partial f_3}{\partial x}\right)\mathbf{j} + \left(\frac{\partial f_2}{\partial x} - \frac{\partial f_1}{\partial y}\right)\mathbf{k} .$$

O rotacional são diferenças de cofatores da matriz jacobiana. Usando a notação simbólica, obtemos a mesma expressão através do produto vetorial:

$$\text{rot}\mathbf{f} = \nabla \times \mathbf{f}$$

Em particular, é simples verificar, usando o teorema de Clairaut-Schwarz sobre derivadas parciais mistas, que o gradiente de um campo escalar tem rotacional nulo:

$$\text{rot grad } f = \nabla \times \nabla f = 0 .$$

Assim, os campos gradientes são chamados de *irrotacionais* ou *conservativos*. É fácil mostrar que, de fato, num domínio simplesmente conexo, um campo tem rotacional nulo se e somente se é o gradiente de um campo escalar.

Operador de segunda ordem: laplaciano

Definição. O laplaciano de um campo escalar f é o campo escalar:

$$\begin{aligned} \nabla^2 : \text{campos escalares} &\mapsto \text{campos escalares} \\ f &\rightarrow \nabla^2 f = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} . \end{aligned}$$

Observamos que o laplaciano é o divergente do gradiente, o que pode ser escrito usando a notação simbólica, validando a notação ∇^2 :

$$\nabla^2 f = \nabla \cdot \nabla f$$



Relações de operadores no espaço

Tem muitas identidades úteis envolvendo gradiente, divergente e rotacional. São geralmente provadas usando cálculo direto e simetria de derivadas parciais (teorema de Clairaut-Schwarz), expandindo cada termo das equações.

Sejam f e g campos escalares, e \mathbf{f} , \mathbf{g} campos vetoriais. Temos então

1.

$$\nabla(fg) = f\nabla g + g\nabla f .$$

É uma consequência direta da regra de derivação de um produto. Observe que foi usada para definir o operador gradiente SPH na equação (2.16).

2.

$$\nabla(\mathbf{f}\mathbf{f}) = \nabla f \cdot \mathbf{f} + f\nabla \cdot \mathbf{f} .$$

É obtida expandindo os termos

$$\begin{aligned} \nabla(\mathbf{f}\mathbf{f}) &= \frac{\partial(f f_1)}{\partial x} + \frac{\partial(f f_2)}{\partial y} + \frac{\partial(f f_3)}{\partial z} \\ &= f_1 \frac{\partial f}{\partial x} + f_2 \frac{\partial f}{\partial y} + f_3 \frac{\partial f}{\partial z} + f \left(\frac{\partial f_1}{\partial x} + \frac{\partial f_2}{\partial y} + \frac{\partial f_3}{\partial z} \right) \\ &= \nabla f \cdot \mathbf{f} + f\nabla \cdot \mathbf{f} . \end{aligned}$$

Observe que foi usada para definir o operador divergente SPH na equação (2.17).

3.

$$\nabla \times (\mathbf{f}\mathbf{f}) = \nabla f \times \mathbf{f} + f\nabla \times \mathbf{f} .$$

Pode ser provada de maneira similar, componente por componente.

4.

$$\nabla \cdot (\mathbf{f} \times \mathbf{g}) = (\nabla \times \mathbf{f}) \cdot \mathbf{g} - \mathbf{f} \cdot \nabla \times \mathbf{g} .$$

Pode ser provada também expandindo os termos, similarmente a versão vetorial desta identidade.

5.

$$\nabla \times (\mathbf{f} \times \mathbf{g}) = (\nabla \cdot \mathbf{g})\mathbf{f} + (\mathbf{g} \cdot \nabla)\mathbf{f} - (\nabla \cdot \mathbf{f})\mathbf{g} - (\mathbf{f} \cdot \nabla)\mathbf{g}$$

$$\nabla(\mathbf{f} \cdot \mathbf{g}) = \mathbf{f} \times (\nabla \times \mathbf{g}) + \mathbf{g} \times (\nabla \times \mathbf{f}) + (\mathbf{f} \cdot \nabla)\mathbf{g} + (\mathbf{g} \cdot \nabla)\mathbf{f}$$

São mais delicadas a provar, mas pode-se usar o operador seguinte para simplificar:

$$(\mathbf{g} \cdot \nabla) = g_1 \frac{\partial}{\partial x} + g_2 \frac{\partial}{\partial y} + g_3 \frac{\partial}{\partial z} .$$

6.

$$\nabla \times \nabla f = 0$$

ou seja: o gradiente de um campo escalar é conservativo.

7.

$$\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{f}) = 0$$

ou seja: o rotacional de um campo de vetor é solenoidal.

8.

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{f}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{f}) - \nabla^2 \mathbf{f}$$

onde

$$\nabla^2 \mathbf{f} = (\nabla^2 f_1, \nabla^2 f_2, \nabla^2 f_3)$$

A.2 Interpretação geométrica e teoremas integrais

Os operadores gradiente, divergente e rotacional tem dois tipos de interpretação: uma ligada a geometria diferencial, onde de fato são casos particulares de derivação de formas diferenciais, e outra ligada a física, onde o gradiente é associado à variação de um campo escalar, o divergente à variação do fluxo e o rotacional à variação da velocidade angular de um escoamento. Estas duas interpretações são explicitadas nos teoremas integrais, chamados de Green, Stokes, Gauss, Ostrogradsky ou simplesmente teorema fundamental do cálculo dependendo das referências.



Fluxos e integrais de campos de vetores

O primeiro passo é definir a noção de fluxo e de trabalho de um campo vetorial. O fluxo de um campo vetorial \mathbf{f} através a superfície S corresponde à quantidade de matéria que, quando transportada por \mathbf{f} , atravessa S num sentido, diminuído da quantidade que atravessa S no outro sentido. Esta definição envolve uma soma perto de uma superfície, o que é calculável com integrais de superfície.

Se a superfície S é definida por uma parametrização $\mathbf{x}(u, v)$ num domínio $(u, v) \in U \subset \mathbb{R}^2$, uma integral sobre S pode ser calculada no domínio U como integral dupla por:

$$\iint_S f dS = \iint_U f(\mathbf{x}) \left\| \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u} \times \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial v} \right\| du dv .$$

O termo $\left\| \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u} \times \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial v} \right\|$ representa a norma do vetor normal a S , e corrige a distorção (jacobiano) da parametrização em relação a um plano. Este termo é geralmente anotado $dS = \left\| \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u} \times \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial v} \right\|$. Se a superfície S é fechada, indicamos isto na integral pelo símbolo \oiint_S em vez de \iint_S .

O fluxo corresponde a integral sobre S da quantidade de matéria que atravessa em cada sentido, ou seja o produto escalar do campo de velocidade \mathbf{f} com a normal unitária \mathbf{n} de S . Na expressão acima, isto permite juntar o jacobiano com o vetor unitário, simplificando a expressão do fluxo para:

$$\text{fluxo de } \mathbf{f} \text{ através } S = \iint_S \mathbf{f} \cdot \mathbf{n} dS = \iint_U \mathbf{f}(\mathbf{x}) \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u} \times \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial v} \right) du dv .$$

O caso do trabalho é similar. O trabalho de um campo vetorial representando uma força é a quantidade de energia gasta pela força ao longo de um movimento. Se a trajetória Γ do movimento for parametrizada por $\mathbf{x}(u)$ com $u \in]a, b[\subset \mathbb{R}$, o trabalho do campo vetorial \mathbf{f} pode ser calculado como a integral do produto escalar de \mathbf{f} pelo vetor tangente unitário do movimento, o que leva a seguinte expressão::

$$\text{trabalho de } \mathbf{f} \text{ ao longo de } \Gamma = \int_{\Gamma} \mathbf{f} \cdot d\mathbf{l} = \int_{]a, b[} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{x}'(u) du .$$

Se a curva Γ é fechada, indicamos isto na integral pelo símbolo \oint_{Γ} em vez de \int_{Γ} .

Teoremas de Stokes

A forma geral do teorema de Stokes relaciona a integral sobre um domínio Ω de uma derivada de um campo com a integral do campo sobre a fronteira $\partial\Omega$ do domínio:

$$\int_{\Omega} d\mathbf{f} = \oint_{\partial\Omega} \mathbf{f} .$$

Vimos que tem várias maneiras de definir derivadas de campo: derivada de função, divergente, rotacional. . . Cada operador corresponde a um tipo de integração: derivada para integral sobre um intervalo, divergente para fluxos, rotacional para trabalho. Tradicionalmente, cada caso tem um nome diferente: teorema fundamental do cálculo para intervalos, fórmula de Gauss, Ostrogradsky ou do divergente para superfícies, Green ou Stokes para curvas. Veremos cada um explicitamente agora, pois permitem entender o significado geométrico dos operadores diferenciais.

Intervalo, área e teorema fundamental do cálculo

O teorema fundamental do cálculo relaciona uma derivada (noção relacionada a tangente ou a velocidade de um movimento) com uma área (integral de intervalo). Apesar de não ser intuitivo, é simples prová-lo:

$$\int_{]a,b[} f' = f(b) - f(a) .$$

Observe que ele se encaixa na fórmula geral do teorema de Stokes: temos uma derivada no lado esquerdo, e a fronteira do domínio do lado direito (a fronteira do segmento $]a, b[$ são os pontos a e b).

Superfície, fluxo e teorema de Gauss

Temos uma fórmula similar para o caso de superfícies, relacionando uma integral de volume a um fluxo:

$$\iiint_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{f} \, d^3\mathbf{x} = \oiint_{\partial\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{n} \, dS .$$



Observe que a fronteira $\partial\Omega$ do domínio tri-dimensional Ω é uma superfície fechada, convencionalmente orientada para fora de Ω . Esta fórmula permite dar ao divergente uma interpretação física simples: a média do divergente de \mathbf{f} numa região é o fluxo atravessando esta região, ou seja, a quantidade de matéria que essa região ganhou ou perdeu. Em particular, um fluido incompressível não pode aumentar a quantidade de matéria num dado volume, o que pode ser traduzido exatamente pelo fato do campo de velocidade ter divergente nulo.

Curvas, trabalho e teoremas de Green e Stokes

O teorema de Stokes para curvas pode ser escrito de forma similar, relacionando um fluxo a um trabalho:

$$\iint_S \text{rot } \mathbf{f} \cdot \mathbf{n} \, dS = \oint_{\partial S} \mathbf{f} \cdot d\mathbf{l} .$$

Observe que a fronteira ∂S da superfície S é uma curva fechada, convencionalmente orientada de tal forma que o produto vetorial da normal de S e da tangente de ∂S aponte para dentro de S . Esta fórmula permite dar ao rotacional uma interpretação física simples: a média do rotacional de \mathbf{f} numa superfície é o trabalho de \mathbf{f} ao longo do bordo, chamado de circulação. Se o campo \mathbf{f} é conservativo (irrotacional), a circulação não muda após ter dado a volta a superfície. Caso contrário, o rotacional mede, através do seu fluxo, as mudanças de circulação.

Este teorema é mais simples no caso onde a superfície S é planar. No caso, o fluxo do rotacional se simplifica numa integral de região planar:

$$\iint_{\Omega} \left(\frac{\partial f_2}{\partial x} - \frac{\partial f_1}{\partial y} \right) d^2\mathbf{x} = \oint_{\partial\Omega} \mathbf{f} \cdot d\mathbf{l} .$$

Operadores diferenciais e integração na fronteira

Podemos mencionar primeiramente algumas relações derivadas dos teoremas anteriores e da integração por parte, que podem ser úteis na hora de considerar operadores SPH na fronteira:

1. Integração volumétrica de um gradiente:

$$\iiint_{\Omega} \nabla f \, d^3\mathbf{x} = \iint_{\partial\Omega} f \, \mathbf{n} \, dS .$$

Observe que o elemento de área a esquerda é vetorial, na direção da normal à superfície $\partial\Omega$.

2. Integração por parte com um gradiente:

$$\iiint_{\Omega} (\nabla f) g \, d^3\mathbf{x} = \iint_{\partial\Omega} f g \, \mathbf{n} \, dS - \iiint_{\Omega} f (\nabla g) \, d^3\mathbf{x} .$$

3. Integração por parte com um divergente e um gradiente:

$$\iiint_{\Omega} f (\nabla \cdot \mathbf{g}) \, d^3\mathbf{x} = \iint_{\partial\Omega} f \mathbf{g} \cdot \mathbf{n} \, dS - \iiint_{\Omega} (\nabla f) \cdot \mathbf{g} \, d^3\mathbf{x} .$$

4. Identidade de Green, obtida com integração por parte e teorema de Gauss:

$$\iiint_{\Omega} (\nabla f) \cdot (\nabla g) \, d^3\mathbf{x} = \iint_{\partial\Omega} f (\nabla g) \cdot \mathbf{n} \, dS - \iiint_{\Omega} f (\nabla^2 g) \, d^3\mathbf{x} .$$

Aplicação à equação de Poisson

Uma aplicação simples do teorema de Gauss é provar a unicidade (não a existência) da solução da equação de Poisson, usada na parte do método da projeção:

$$\nabla^2 f = g \quad \text{em } \Omega .$$

Veremos rapidamente a idéia da demonstração no caso que a condição de fronteira $f|_{\partial\Omega}$ é dada, mas a demonstração se estende diretamente para condições tipo von Neumann onde $\nabla f \cdot \mathbf{n}$ é especificado na fronteira.



Supondo que tenha duas soluções f_1 e f_2 para este enunciado. Por linearidade dos operadores, temos que a função

$$\tilde{f} = f_1 - f_2$$

é solução da equação de Laplace com fronteira nula:

$$\nabla^2 \tilde{f} = 0 \quad \text{com} \quad \tilde{f}|_{\partial\Omega} = 0$$

Agora considere a energia definida pela integral

$$E = \iiint_{\Omega} \|\nabla \tilde{f}\|^2 \, d\mathbf{x}^3 .$$

Usando a identidade de Green:

$$E = \iiint_{\Omega} \nabla \tilde{f} \cdot \nabla \tilde{f} \, d\mathbf{x}^3 = \oint_{\partial\Omega} \tilde{f} \nabla \tilde{f} \cdot \mathbf{n} \, dS - \iiint_{\Omega} \tilde{f} \nabla^2 \tilde{f} \, d\mathbf{x}^3 .$$

O segundo termo é nulo, pois \tilde{f} satisfaz a equação de Laplace. O primeiro termo também é nulo, pois a condição de fronteira de \tilde{f} é nula.

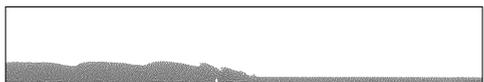
Obtemos então:

$$E = \iiint_{\Omega} \|\nabla \tilde{f}\|^2 \, d\mathbf{x}^3 = 0 \quad \text{e então} \quad \nabla \tilde{f} = 0 .$$

O campo \tilde{f} é então constante e, pela condição de fronteira, esta constante tem que ser nula. Assim $f_1 = f_2$, mostrando que, se a solução existe, é única.

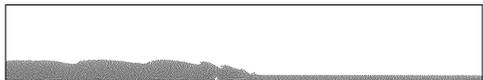
Bibliografia

- [1] C. Aguiar, T. Kodama, T. Osada, and Y. Hama. Smoothed particle hydrodynamics for relativistic heavy-ion collisions. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 27(1):75–94, 2001.
- [2] J. Anderson. *Computational Fluid Dynamics: The Basics with Applications*. McGraw-Hill, 1995.
- [3] S. Armfield and R. Street. The fractional-step method for the Navier-Stokes equations on staggered grids: the accuracy of three variations. *Journal of Computational Physics*, 153(2):660–665, 1999.
- [4] P. Artymowicz and S. Lubow. Dynamics of binary-disk interaction. 1: Resonances and disk gap sizes. *Astrophysical Journal*, 421(2):651–667, 1994.
- [5] S. Atluri and S. Shen. The meshless local Petrov-Galerkin (MLPG) method: a simple & less-costly alternative to the finite element and boundary element methods. *Computer Modeling in Engineering and Sciences*, 3(1):11–52, 2002.
- [6] S. Atluri and T. Zhu. A new meshless local Petrov-Galerkin (MLPG) approach in computational mechanics. *Computational Mechanics*, 22(2):117–127, 1998.
- [7] P. Balbuena and J. Seminario. *Molecular Dynamics*. Elsevier Science, 1999.
- [8] R. Barrett, M. Berry, T. Chan, J. Demmel, J. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine, and H. der Vorst.



- Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods.* SIAM, 1994.
- [9] R. Bartle. *The Elements of Integration and Lebesgue Measure.* Wiley, 1995.
- [10] G. Batchelor. *An Introduction to Fluid Dynamics.* Cambridge University Press, 2000.
- [11] J. Bell and D. Marcus. A second-order projection method for variable-density flows. *Journal of Computational Physics*, 101(2):334–348, 1992.
- [12] T. Belytschko, Y. Krongauz, D. Organ, M. Fleming, and P. Krysl. Meshless methods: an overview and recent developments. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 139(1–4):3–47, 1996.
- [13] T. Belytschko, W. Liu, and B. Moran. *Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures.* Wiley, 2000.
- [14] W. Benz. Smooth particle hydrodynamics - a review. In *Numerical Modelling of Nonlinear Stellar Pulsations Problems and Prospects*, 1990.
- [15] J.-D. Boissonnat and M. Yvinec. *Algorithmic geometry.* Cambridge University Press, 1998.
- [16] S. Borgani, K. Dolag, G. Murante, L. Cheng, V. Springel, A. Diaferio, L. Moscardini, G. Tormen, and L. T. P. Tozzi. Hot and cooled baryons in SPH simulations of galaxy clusters: physics and numerics. *Arxiv preprint astro-ph/0512506*, 2005.
- [17] H. J. Bortolossi. *Cálculo Diferencial a Várias Variáveis.* Editora PUC-Rio, 2003.
- [18] R. Bridson and M. Müller. Fluid simulation, 2007.
- [19] Z. Cai and S. Kim. A finite element method using singular functions for the Poisson equation: Corner singularities. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 39(1):286–299, 2001.

- [20] M. Carlson, P. Mucha, and G. Turk. Rigid fluid: animating the interplay between rigid bodies and fluid. *ACM Transactions on Graphics*, 23(3):377–384, 2004.
- [21] R. Castro, T. Lewiner, H. Lopes, G. Tavares, and A. Bordignon. Statistical optimization of octree searches. *Computer Graphics Forum*, 27(6):1557–1566, 2008.
- [22] G. Chen, K. Mischaikow, R. S. Laramée, and E. Zhang. Efficient Morse decompositions of vector fields. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, 14(4):848–862, 2008.
- [23] J. Chen, J. Beraun, and T. Carney. A corrective smoothed particle method for boundary value problems in heat conduction. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 46(2):231–252, 1999.
- [24] A. Chorin. Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Mathematics of Computation*, 22(104):745–762, 1968.
- [25] A. Chorin. On the convergence of discrete approximations to the Navier-Stokes equations. *Mathematics of Computation*, 23(106):341–353, 1969.
- [26] A. Chorin and J. Marsden. *A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics*. Springer, 1992.
- [27] S. Clavet, P. Beaudoin, and P. Poulin. Particle-based viscoelastic simulation. In *Symposium on Computer Animation*, pages 219–228, 2005.
- [28] P. Cleary and J. Monaghan. Conduction modelling using smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 148(1):227–264, 1999.
- [29] A. Colagrossi and M. Landrini. Numerical simulation of interfacial flows by smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 191(2):448–475, 2003.
- [30] F. Colin, R. Egli, and F. Lin. Computing a null divergence velocity field using smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 217(2):680–692, 2006.



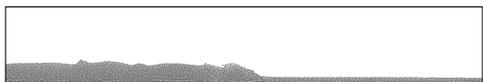
- [31] S. Cummins and J. Brackbill. An implicit particle-in-cell method for granular materials. *Journal of Computational Physics*, 180(2):506–548, 2002.
- [32] S. Cummins and M. Rudman. An SPH projection method. *Journal of Computational Physics*, 152(2):584–607, 1999.
- [33] A. Cuzol, P. Hellier, and E. Mémin. A low dimensional fluid motion estimator. *International Journal of Computer Vision*, 75(3):329–349, 2007.
- [34] O. Darrigol. *Worlds of Flow*. Oxford University Press, 2005.
- [35] B. de Foy and W. Dawes. Unstructured pressure-correction solver based on a consistent discretization of the Poisson equation. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 34(6), 2000.
- [36] M. Desbrun and M.-P. Gascuel. Animating soft substances with implicit surfaces. In *Siggraph*, pages 287–290, Aug. 1995.
- [37] M. Desbrun and M. P. Gascuel. Smoothed particles: a new paradigm for animating highly deformable bodies. In *EGCAS*, 1996.
- [38] C. Diaz-Goano, P. D. Minev, and K. Nandakumar. A fictitious domain/finite element method for particulate flows. *Journal of Computational Physics*, 192(1):105 – 123, 2003.
- [39] G. Dilts. Moving Least-Squares particle hydrodynamics. I: Consistency and stability. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 44(8):1115–1155, 1999.
- [40] G. Dilts. Moving least-squares particle hydrodynamics II: conservation and boundaries. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 48(10):1503–1524, 2000.
- [41] J. Dongarra, A. Lumsdaine, R. Pozo, and K. Remington. IML++ v.1.2 - Iterative Methods Library: Reference guide. *NASA*, 1996.

- [42] C. Duarte and J. Oden. H-p clouds - an h-p meshless method. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 12(6), 1996.
- [43] D. Dunbar and G. Humphreys. A spatial data structure for fast Poisson-disk sample generation. *ACM Transactions on Graphics*, 25(3):503–508, July 2006.
- [44] D. H. Eberly. *Game Physics*. Morgan Kaufmann, 2004.
- [45] H. Edelsbrunner. Weighted alpha-shapes. Technical Report 1760, University of Illinois, 1992.
- [46] S. Elcott, Y. Tong, E. Kanso, P. Schröder, and M. Desbrun. Stable, circulation-preserving, simplicial fluids. *ACM Transactions on Graphics*, 26(1):4:1–4:12, Jan. 2007.
- [47] M. Evans, F. Harlow, and E. Bromberg. The particle-in-cell method for hydrodynamic calculations. Technical report, Los Alamos National Laboratory, 1957.
- [48] R. Fedkiw, J. Stam, and H. W. Jensen. Visual simulation of smoke. In *Siggraph*, pages 15–22, 2001.
- [49] C. Fefferman. Existence and smoothness of the Navier-Stokes equation. Technical report, Clay Mathematics Institute, 2000.
- [50] D. Figueiredo. *Análise de Fourier e Equações Diferenciais Parciais*. Projeto Euclides. IMPA, 1977.
- [51] C. Fletcher. *Computational Techniques for Fluid Flows*. Springer, 1992.
- [52] C. Foias, O. Manley, R. Rosa, and R. Temam. *Navier-Stokes Equations and Turbulence*. Cambridge University Press, 2008.
- [53] A. Fortuna. *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações*. Editora da Universidade de São Paulo, 2000.
- [54] R. Freund and M. Nachtigal. QMR: a quasi-minimal residual method for non-Hermitian linear systems. *Numerische Mathematik*, 60(1):315–339, 1991.



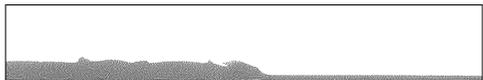
- [55] D. Fulk and D. Quinn. An analysis of 1-D smoothed particle hydrodynamics kernels. *Journal of Computational Physics*, 126(1):165–180, 1996.
- [56] R. Gentry, R. Martin, and B. Daly. An Eulerian differencing method for unsteady compressible flow problems. *Journal of Computational Physics*, pages 87–118, 1966.
- [57] F. Gibou, R. Fedkiw, L.-T. Cheng, and M. Kang. A second-order-accurate symmetric discretization of the Poisson equation on irregular domains. *Journal of Computational Physics*, 176(1):205–227, 2002.
- [58] R. Gingold and J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics - theory and application to non-spherical stars. *Monthly Notices of Royal Astronomical Society*, 181:375–389, 1977.
- [59] J. Gois, A. Nakano, L. Nonato, and G. Buscaglia. Front tracking with moving-least-squares surfaces. *Journal of Computational Physics*, 227(22):9643–9669, 2008.
- [60] G. Golub and C. V. Loan. *Matrix Computations*. The Johns Hopkins University Press, 1989.
- [61] J.-L. Guermond and L. Quartapelle. A projection FEM for variable density incompressible flows. *Journal of Computational Physics*, 165(1):167–188, 2000.
- [62] E. Guyon, J.-P. Hulin, L. Petit, and C. D. Mitescu. *Physical Hydrodynamics*. Oxford University Press, 2001.
- [63] S. Hadap and N. Magnenat-Thalmann. Modeling dynamic hair as a continuum. *Computer Graphics Forum*, 20(3):329–338, 2001.
- [64] L. Hageman and D. Young. *Applied Iterative Methods*. Dover, 2004.
- [65] T. Harada, S. Koshizuka, and Y. Kawaguchi. Sliced data structure for particle-based simulations on gpus. In *Graphite*, pages 55–62, 2007.

- [66] C. Hayhurst and R. Clegg. Cylindrically symmetric SPH simulations of hypervelocity impacts on thin plates. *International Journal of Impact Engineering*, 20(1-5):337–348, 1997.
- [67] J. Helman and L. Hesselink. Representation and display of vector field topology in fluid flow data sets. *Computer*, 22(8):27–36, 1989.
- [68] A. Hertzmann and D. Zorin. Illustrating smooth surfaces. In *Siggraph*, pages 517–526, 2000.
- [69] C. Hirt and B. Nichols. Volume of fluid/vof/ method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, 39(1):201–225, 1981.
- [70] M. H. Holmes. *Introduction to Numerical Methods in Differential Equations*. Springer, 2000.
- [71] J.-M. Hong, H.-Y. Lee, J.-C. Yoon, and C.-H. Kim. Bubbles alive. *ACM Transactions on Graphics*, 27(3):48:1–48:4, 2008.
- [72] X. Y. Hu and N. A. Adams. A multi-phase sph method for macroscopic and mesoscopic flows. *Journal of Computational Physics*, 213(2):844–861, 2006.
- [73] X. Y. Hu and N. A. Adams. An incompressible multi-phase sph method. *Journal of Computational Physics*, 227(1):264–278, 2007.
- [74] R. Iório and V. Iório. *Equações Diferenciais Parciais: uma Introdução*. Projeto Euclides. IMPA, 1988.
- [75] C. Isnard. *Introdução à Medida e Integração*. Projeto Euclides. IMPA, 2007.
- [76] G. Johnson, R. Stryk, and S. Beissel. SPH for high velocity impact computations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 139(1–4):347–373, 1996.
- [77] Z. Jomaa and C. Macaskill. The embedded finite difference method for the Poisson equation in a domain with an irregular boundary and Dirichlet boundary conditions. *Journal of Computational Physics*, 202(2):488–506, 2005.



- [78] G. Karniadakis, S. Orszag, and M. Israeli. High-order splitting methods for the incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 97:414–443, 1991.
- [79] R. Keiser, B. Adams, D. Gasser, P. Bazzi, P. Dutré, and M. Gross. A unified lagrangian approach to solid-fluid animation. In *Symposium on Point-Based Graphics*, pages 125–134, 2005.
- [80] K. Kim, S. Baek, and H. Sung. An implicit velocity decoupling procedure for the incompressible Navier-Stokes equations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 38:125–138, 2002.
- [81] S. Koshizuka, A. Nobe, and Y. Oka. Numerical analysis of breaking waves using the moving particle semi-implicit method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 26(7):751–769, 1998.
- [82] S. Koshizuka and Y. Oka. Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid. *Nuclear science and engineering*, 123(3):421–434, 1996.
- [83] P. Kristof, B. Benes, J. Krivánek, and O. Stava. Hydraulic erosion using smoothed particle hydrodynamics. *Computer Graphics Forum*, 28(2), 2009.
- [84] P. Kristof, B. Benes, J. Krivánek, and O. Stava. Hydraulic erosion using smoothed particle hydrodynamics. *Computer Graphics Forum*, 28(2), 2009.
- [85] O. Kum, W. Hoover., and H. Posch. Viscous conducting flows with smooth-particle applied mechanics. *Physical Review E*, 52(5):4899–4908, 1995.
- [86] M. Lage, F. Petronetto, A. Paiva, H. Lopes, T. Lewiner, and G. Tavares. Vector field reconstruction from sparse samples with applications. In *Sibgrapi*, pages 297–306, 2006.
- [87] P. Lax, R. Richtmyer, and A. THEOREM. Survey of the stability of linear finite difference equations. *Selected Papers*, 9(2):125, 2005.

- [88] W. Lee and W. Kluzniak. Newtonian hydrodynamics of the coalescence of black holes with neutron stars i: Tidally locked binaries with a stiff equation of state. *Arxiv preprint astro-ph/9808185*, 1998.
- [89] T. Lenaerts, B. Adams, and P. Dutré. Porous flow in particle-based fluid simulations. *ACM Transactions on Graphics*, 27(3):49:1–49:8, 2008.
- [90] T. Lenaerts and P. Dutré. Mixing fluids and granular materials. *Computer Graphics Forum*, 28(2):213–218, 2009.
- [91] T. Lewiner, H. Lopes, A. W. Vieira, and G. Tavares. Efficient implementation of marching cubes with topological guarantees. *Journal of Graphics Tools*, 8(2):234–241, 2003.
- [92] S. Li and W. Liu. *Meshfree Particle Methods*. Springer, 2004.
- [93] L. Libersky, A. Petschek, T. Carney, J. Hipp, and F. Allahdadi. High strain Lagrangian hydrodynamics: a three-dimensional SPH code for dynamic material response. *Journal of Computational Physics*, 109(1):67–75, 1993.
- [94] G. Liu and M. Liu. *Smoothed Particle Hydrodynamics: a mesh-free particle method*. World Scientific Publishing, 2003.
- [95] G. Liu and S. Quek. *Finite Element Method: A Practical Course*. Butterworth-Heinemann, 2003.
- [96] J. Liu, S. Koshizuka, and Y. Oka. A hybrid particle-mesh method for viscous, incompressible, multiphase flows. *Journal of Computational Physics*, 202(1):65–93, 2005.
- [97] K. Liu and R. Pletcher. A fractional step method for solving the compressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 226(2):1930–1951, 2007.
- [98] M. Liu and G. L. Z. Z. K. Lam. Computer simulation of high explosive explosion using smoothed particle hydrodynamics methodology. *Computers and Fluids*, 32(3):305–322, 2003.



- [99] M. Liu and G. Liu. Restoring particle consistency in smoothed particle hydrodynamics. *Applied Numerical Mathematics*, 56(1):19–36, 2006.
- [100] M. Liu, G. Liu, and K. Lam. Constructing smoothing functions in smoothed particle hydrodynamics with applications. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 155(2):263–284, 2003.
- [101] W. Liu and Y. Chen. Wavelet and multiple scale reproducing kernel methods. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 21(10):901–931, 2005.
- [102] W. Liu, S. Jun, S. Li, J. Adee, and T. Belytschko. Reproducing kernel particle methods for structural dynamics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 38(10), 1995.
- [103] W. Liu, S. Jun, and F. Z. Y. Reproducing kernel particle methods. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 20(8–9):1081–1106, 1995.
- [104] W. E. Lorensen and H. E. Cline. Marching cubes: A high resolution 3d surface construction algorithm. In *Siggraph*, pages 163–169, 1987.
- [105] L. Lucy. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *Astronomical Journal*, 82:1013–1024, 1977.
- [106] S. Maddison, J. Murray, and J. Monaghan. SPH simulations of accretion disks and narrow rings. *Publications of the Astronomical Society of Australia*, 13(2):66–70, 1996.
- [107] I. Malta, S. Pesco, and H. Lopes. *Cálculo a uma Variável*. Editora PUC-Rio, 2003.
- [108] J.-C. Marongiu, F. Leboeuf, J. Caro, E. Parkinso, and Y. Ji. Preconditioning of the sph-ale meshless method for the simulation of free surface flows in pelton turbines. In *Turbomachinery*, pages 697–709, 2009.
- [109] E. Medeiros, L. Velho, and H. Lopes. Restricted BPA: applying ball-pivoting on the plane. In *Sibgrapi*, pages 372–379, 2004.

- [110] S. T. Melo and F. M. Neto. *Mecânica dos Fluidos e Equações Diferenciais*. 18° Colúquio Brasileiro de Matemática. IMPA, 1991.
- [111] P. R. S. Mendes, E. S. S. Dutra, J. R. R. Siffert, and M. F. Naccache. Gas displacement of viscoplastic liquids in capillary tubes. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 145(1):1–11, 2007.
- [112] J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 30:543–574, 1992.
- [113] J. Monaghan. Simulating free surface flows with SPH. *Journal of Computational Physics*, 110(2):399–406, 1994.
- [114] J. Monaghan. Heat conduction with discontinuous conductivity. *Applied Mathematics Reports and Preprints*, 95:18, 1995.
- [115] J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics. *Reports of Progress in Physics*, 68(8):1703–1759, 2005.
- [116] J. Monaghan and J. Latanzio. A refined particle method for astrophysical problems. *Astronomy and Astrophysics*, 149(1):135–143, 1985.
- [117] J. J. Monaghan. On the problem of penetration in particle methods. *Journal of Computational Physics*, 82(1):1–15, 1989.
- [118] J. Morris. *Analysis of smoothed particle hydrodynamics with applications*. PhD thesis, Monash University, 1996.
- [119] J. Morris. A study of the stability properties of SPH. *Publications of the Astronomical Society of Australia*, 13:97–102, 1996.
- [120] J. Morris, P. Fox, and Y. Zhu. Modeling low Reynolds number incompressible flows using SPH. *Journal of Computational Physics*, 136(1):214–226, 1997.
- [121] J. Morris and J. Monaghan. A switch to reduce SPH viscosity. *Journal of Computational Physics*, 136(1):41–50, 1997.



- [122] J. P. Morris. Simulating surface tension with smoothed particle hydrodynamics. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 33(3):333–353, 2000.
- [123] M. Müller, D. Charypard, and M. Gross. Particle-based fluid simulation for interactive applications. In *Symposium on Computer Animation*, pages 154–159, 2003.
- [124] M. Müller, R. Keisser, A. Nealen, M. Pauly, M. Gross, and M. Alexa. Point based animation of elastic, plastic and melting. In *Symposium on Computer Animation*, pages 141–151, 2004.
- [125] M. Müller, B. Solenthaler, R. Keiser, and M. Gross. Particle-based fluid-fluid interaction. In *Symposium on Computer Animation*, pages 237–244, 2005.
- [126] G. Oger, E. Jacquin, P.-M. Guilcher, L. Brosset, J.-B. Deuff, D. L. Touzé, and B. Alessandrini. Simulations of complex hydro-elastic problems using the parallel sph model sph-flow. In *Spheric Workshop*, pages 331–338, 2009.
- [127] C. M. Oishi, M. F. Tomé, J. A. Cuminato, and S. McKee. An implicit technique for solving 3D low Reynolds number moving free surface flows. *Journal of Computational Physics*, 227(16):7446–7468, 2008.
- [128] R. G. Owens and T. N. Phillips. *Computational Rheology*. Imperial College Press, 2002.
- [129] P. W. P. W. Cleary, M. Prakash, J. Ha, N. Stokes, and C. Scott. Smooth particle hydrodynamics: status and future potential. *Progress In Computational Fluid Dynamics*, 7:70–90, 2007.
- [130] A. Paiva. *Uma abordagem lagrangeana para simulação de fluidos viscoplásticos e multifásicos*. PhD thesis, PUC-Rio, 2007.
- [131] A. Paiva, E. V. Brazil, F. Petronetto, and M. C. Sousa. Fluid-based hatching for tone mapping in line illustrations. *The Visual Computer*, 25(5–7):519–527, 2009.

- [132] A. Paiva, H. Lopes, T. Lewiner, and L. H. de Figueiredo. Robust adaptive meshes for implicit surfaces. In *Sibgrapi*, pages 205–212, 2006.
- [133] A. Paiva, F. Petronetto, T. Lewiner, and G. Tavares. Particle-based non-Newtonian fluid animation for melting objects. In *Sibgrapi*, pages 78–85, 2006.
- [134] A. Paiva, F. Petronetto, T. Lewiner, and G. Tavares. Simulating viscoplastic fluid using smoothed particle hydrodynamic. In *Brazilian Conference on Rheology*, pages 93–94, 2006.
- [135] A. Paiva, F. Petronetto, T. Lewiner, and G. Tavares. Particle-based viscoplastic fluid/solid simulation. *Computer-Aided Design*, 41(4):306–314, 2009.
- [136] P. Patsis and E. Athanassoula. SPH simulations of gas flow in barred galaxies. effect of hydrodynamical and numerical parameters. *Astronomy and Astrophysics*, 358:45–56, 2000.
- [137] F. Petronetto. *A equação de Poisson e a decomposição de Helmholtz-Hodge com operadores SPH*. PhD thesis, PUC-Rio, 2008.
- [138] F. Petronetto, A. Paiva, M. Lage, G. Tavares, H. Lopes, and T. Lewiner. Meshless Helmholtz-Hodge decomposition. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, 2009. to appear.
- [139] K. Polthier and E. Preuss. Identifying vector fields singularities using a discrete Hodge decomposition. In *Visualization and Mathematics III*. Springer, 2003.
- [140] H. Posch, W. Hoover, and O. Kum. Steady-state shear flows via nonequilibrium molecular dynamics and smooth-particle applied mechanics. *Physical Review E*, 52(2):1711–1720, 1995.
- [141] R. Pozo and K. Remington. SparseLib++ v.1.5 Sparse Matrix Class Library. reference guide. NASA, 1996.
- [142] E. Praun, H. Hoppe, M. Webb, and A. Finkelstein. Real-time hatching. In *Siggraph*, pages 579–584, 2001.



- [143] Y. Saad. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. SIAM, 2003.
- [144] J. Shen. On error estimates of projection methods for Navier-Stokes equations: first-order schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, pages 57–77, 1992.
- [145] J. Shen. On error estimates of some higher order projection and penalty-projection methods for Navier-Stokes equations. *Numerische Mathematik*, 62(1):49–73, 1992.
- [146] L. Sigalotti and H. López. Adaptive kernel estimation and SPH tensile instability. *Computers & Mathematics with Applications*, 55(1):23–50, 2008.
- [147] S. Smale. Mathematical problems for the next century. *Mathematical Intelligencer*, 20(2):7–15, 1998.
- [148] B. Solenthaler and R. Pajarola. Density contrast SPH interfaces. In *Symposium on Computer Animation*, pages 211–218, 2008.
- [149] B. Solenthaler and R. Pajarola. Predictive-corrective incompressible sph. *ACM Transactions on Graphics*, 2009. to appear.
- [150] B. Solenthaler, J. Schläfli, and R. Pajarola. A unified particle model for fluid-solid interactions. *Computer Animation and Virtual Worlds*, 18(1):69–82, 2007.
- [151] J. Stam. Stable fluids. In *Siggraph*, pages 121–128, 1999.
- [152] J. Stam and E. L. Fiume. Depicting fire and other gaseous phenomena using diffusion processes. In *Siggraph*, pages 129–136, 1995.
- [153] M. Steinmetz and E. Mueller. On the capabilities and limits of smoothed particle hydrodynamics. *Astrophysical Journal Supplement Series*, 268:391–410, 1993.
- [154] R. Stellingwerf and C. Wingate. Impact modeling with smooth particle hydrodynamics. *NASA*, 94, 1993.

- [155] J. Swegle and S. Attaway. On the feasibility of using smoothed particle hydrodynamics for underwater explosion calculations. *Computational Mechanics*, 17(3):151–168, 1995.
- [156] J. Swegle, D. Hicks, and S. Attaway. Smoothed particle hydrodynamics stability analysis. *Journal of Computational Physics*, 116(1):123–134, 1995.
- [157] H. Takeda, S. Miyama, and M. Sekiya. Numerical simulation of viscous flow by smoothed particle hydrodynamics. *Progress of Theoretical Physics*, 92(5):939–960, 1994.
- [158] A. Tartakovsky and P. Meakin. A smoothed particle hydrodynamics model for miscible flow in three-dimensional fractures and the two-dimensional Rayleigh-Taylor instability. *Journal of Computational Physics*, 207(2):610–624, 2005.
- [159] G. Tavares and M. Craizer. *Cálculo Integral a Várias Variáveis*. Editora PUC-Rio, 2003.
- [160] R. Temam. Une méthode d’approximation de la solution des équations de Navier-Stokes. *Bulletin de la Société Mathématique de France*, 98:115–152, 1968.
- [161] M. Tome and S. McKee. Gensmac: a computational marker and cell method for free surface flows in general domains. *Journal of Computational Physics*, 110(1):171–186, 1994.
- [162] Y. Tong, S. Lombeyda, A. Hirani, and M. Desbrun. Discrete multiscale vector field decomposition. *ACM Transactions on Graphics*, 22(3):445–452, 2003.
- [163] L. N. Trefethen and D. B. III. *Numerical Linear Algebra*. SIAM, 1997.
- [164] X. Tricoche, G. Scheuermann, and H. Hagen. Continuous topology simplification of planar vector fields. In *Visualization*, pages 159–166, 2001.
- [165] S. Watkins, A. Bhattal, N. Francis, J. Turner, and A. Whitworth. A new prescription for viscosity in smoothed



- particle hydrodynamics. *Astronomy and Astrophysics Supplement*, 119:177–187, 1996.
- [166] E. Weinan and J.-G. Liu. Projection method i : Convergence and numerical boundary layers. *Journal Numerical Analysis*, 32(4):1017–1057, 1995.
- [167] Y. Zhang, B. Solenthaler, and R. Pajarola. GPU accelerated SPH particle simulation and rendering, 2007.
- [168] Y. Zhang, B. Solenthaler, and R. Pajarola. Adaptive sampling and rendering of fluids on the gpu. In *Volume and Point-Based Graphics*, pages 137–146, 2008.
- [169] Y. Zhu and P. Fox. Simulation of pore-scale dispersion in periodic porous media using smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 182(2):622–645, 2002.
- [170] O. Zienkiewicz and R. Taylor. *The Finite Element Method*. Butterworth Herinemann, 2000.
- [171] O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor, and P. Nithiarasu. *The Finite Element Method for Fluid Dynamics*. Butterworth-Heinemann, 2000.