UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO CENTRO TECNOLÓGICO DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA PROJETO DE GRADUAÇÃO

THIAGO VASCONCELLOS BIRRO

RESOLUÇÃO DO PROBLEMA DA CAVIDADE BIDIMENSIONAL ADIMENSIONAL UTILIZANDO O MÉTODO SPH (SMOOTHED PARTICLE HYDRODYNAMICS)

> VITÓRIA 2017

THIAGO VASCONCELLOS BIRRO

RESOLUÇÃO DO PROBLEMA DA CAVIDADE BIDIMENSIONAL ADIMENSIONAL UTILIZANDO O MÉTODO SPH (SMOOTHED PARTICLE HYDRODYNAMICS)

Projeto de graduação apresentado ao Departamento de Engenharia Mecânica do Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espírito Santo, para obtenção do título de bacharel em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Dr. Julio Tomás Aquije Chacaltana

Coorientador: Prof. Dr. Carlos Friedrich Loeffler Neto

VITÓRIA 2017

THIAGO VASCONCELLOS BIRRO

RESOLUÇÃO DO PROBLEMA DA CAVIDADE BIDIMENSIONAL ADIMENSIONAL UTILIZANDO O MÉTODO SPH (SMOOTHED PARTICLE HYDRODYNAMICS)

Projeto de graduação apresentado ao Departamento de Engenharia Mecânica do Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espírito Santo, para obtenção do título de bacharel em Engenharia Mecânica.

Aprovada em 28 de julho de 2017.

COMISSÃO EXAMINADORA

Professor Dr. Julio Tomás Aquije Chacaltana Universidade Federal do Espírito Santo Orientador

Professor Dr. Carlos Friedrich Loeffler Neto Universidade Federal do Espírito Santo Coorientador

Professor Dr. Antonio Manoel Ferreira Frasson

Universidade Federal do Espírito Santo

Professor Dr. Fabiano Petronetto do Carmo

Universidade Federal do Espírito Santo

VITÓRIA 2017

À Maria Lindinalva, Reinaldo e Thamires, razões da minha vida.

AGRADECIMENTOS

Como dito uma vez por Pierre Dac: "Aquele que na vida partiu do zero para não chegar a nada, não tem que agradecer a ninguém". Assim, gostaria de alguns agradecimentos.

Agradeço a minha família, por todo suporte nos momentos mais difíceis e delicados da minha vida. Agradeço aos meus pais, Maria Lindinalva Vasconcellos Birro e Reinaldo Oliveira Birro e minha irmã, Thamires Vasconcellos Birro, pelo incentivo constante, pelo carinho, pelas palavras confortantes, fazendo sempre acreditar que o sonho era possível.

Agradeço aos meus amigos, aqueles de longa data, que sempre acreditaram e incentivaram a continuar nessa dura jornada de cinco anos, mesmo eu não se fazendo muito presente devido aos desafios que me eram impostos diariamente.

Agradeço aos meus amigos da engenharia mecânica, que posso dizer, sem dúvida nenhuma, foram uma segunda família pelo grande tempo de convívio, dificuldades enfrentadas juntas e superadas, sendo também minha maior inspiração e incentivo para seguir nessa caminhada.

Agradeço imensamente aos meus amigos, companheiros e sonhadores da equipe AVES UFES, pelos quatro anos de convívio, pelas lindas histórias de superação, pelo trabalho árduo, pelo afeto e pelo conhecimento adquirido, sendo responsáveis, sem dúvida pelo meu crescimento profissional.

Agradeço aos meus grandes mestres, pelo conhecimento, confiança e pelo respeito à profissão. Em especial, a minha orientadora durante meu intercâmbio, Christine Espinosa, e aos professores Carlos Friedrich Loeffler Neto e Julio Tomás Aquije Chacaltana, fontes imensuráveis de conhecimento, dispostos a transmiti-los.

RESUMO

Métodos sem malha, ou Meshless, estão expandindo os seus domínios de atuação frente aos usuais métodos numéricos baseados em malhas, como o método dos elementos finitos e o método das diferenças finitas, para resolução de mecânicos computacionais envolvendo grandes problemas deformações, propagação de trincas e fraturas mecânicas. A grande vantagem dos métodos sem malha está na conectividade entre os pontos, não existindo a priori. Assim explorando um dos mais conhecidos métodos sem malhas, o método Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH), é proposto o seu emprego para a resolução do problema da cavidade bidimensional adimensional. Utilizando as principais formulações do SPH, é ajustado um código aberto para a adequação ao problema físico adimensional em questão. De forma a contribuir com o desenvolvimento do método, é avaliada uma nova subrotina considerando uma condição de contorno reflexiva. Finalmente, os resultados são comparados com os obtidos por outros autores a partir de diferentes técnicas de simulação e novas simulações pelo método dos volumes finitos, concluindo a aplicabilidade do SPH na resolução do problema para baixos números de Reynolds e razões de aspecto.

Palavras-Chave: Mecânica dos Fluidos, Problema da Cavidade Adimensional, Métodos sem Malha, SPH.

ABSTRACT

Meshless methods are expanding their field of application facing the usual grid-based methods (Finite Element Methods, Finite difference methods, etc.) to solve computational mechanics problems involving large deformation, crack growth and breakage of materials. The main feature of the Meshless method lies in the fact that no connectivity *a priori* is required among the nodes. In this way, using the main advantages of one of the most known Meshless method, the Smoothed Particle Hydrodynamics, this work proposes its utilization to solve the non-dimensional Shear-Driven Cavity Flow. At first, using the main formulations of SPH, a free code is adjusted in order to suit to the non-dimensional problem. A new reflective boundary condition is developed and evaluated for low Reynolds and aspect ratio numbers. Finally, the results are compared with the best-known validation cases of Shear Driven Cavity Flows and new numerical simulation carried out using the Finite Volume Method, concluding the viability of the new treatment to be applied in low Reynolds situation and low aspect ratio.

Keywords: Fluid Mechanics, Non-dimensional Shear-Driven Cavity Flow, Meshless Methods, SPH.

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1 - Esquematização do problema das cavidades bidimensionais	3
Figura 2 - Linhas de corrente para diferentes números de Reynolds	4
Figura 3 - Linhas de corrente (linha superior) e vorticidade (linha inferior)	5
Figura 4 - Metodologia para resolução de uma simulação numérica	9
Figura 5 –Diferença de discretização: (A) Meshless, (B) elementos finitos	11
Figura 6 - Kernel de Lucy e sua primeira derivada (gradiente)	15
Figura 7 - Kernel Gaussiano e a primeira derivada (gradiente)	16
Figura 8 - Representação da função suave	18
Figura 9 - Formulação Scatter (esquerda) e Gather (direita)	22
Figura 10 - Violação da terceira lei de Newton	23
Figura 11 - Processo de adimensionalização	34
Figura 12 - Variação da força de Lennard-Jones para $RD * / r0 * = 1$	38
Figura 13 - Algoritmo de reflexão de partículas	39
Figura 14 - Fluxograma do programa	41
Figura 15 - Criação da malha estruturada com 1600 elementos	43
Figura 16 - Isocontorno de velocidade	44
Figura 17 - Linhas de corrente – $Re = 1$	44
Figura 18 - Distribuição inicial de partículas	45
Figura 19 - Localização inicial da força repulsiva	46
Figura 20 - Vetores normais ao contorno	47
Figura 21 - Distribuição inicial das partículas	48
Figura 22 - Evolução das linhas de corrente	49
Figura 23 - Linhas de corrente -: (A) Reflexão - (B) Força repulsiva	49
Figura 24 - Velocidade das partículas: reflexão – Paraview (90000 iterações)	50
Figura 25 - Perfil de velocidade $Vx * para x *= 0,5 - Re = 1$	50
Figura 26 - Perfil de velocidade $Vy *$ para $x = 0,5$ - $Re = 1$	51
Figura 27 - Erro absoluto Vx $*$ para força repulsiva e reflexão – (Ghia <i>et al</i> ,1982)	51
Figura 28 - Erro absoluto <i>Vy</i> ∗ para força repulsiva e reflexão – (Ghia <i>et al</i> ,1982)	.52
Figura 29 - Perfil de velocidade $Vy *$ para $x *= 0.5 - Re = 10$	53
Figura 30 - Perfil de velocidade $Vy *$ para $x *= 0,5 - Re = 10$	53
Figura 31 - Campo de velocidade para - $Re = 10$	55

Figura 32 - Perfil de velocidade $Vy *$ para $x *= 0.5 - Re = 10$	56
Figura 33 - Perfil de velocidade $Vy *$ para $x *= 0.5 - Re = 10$	56
Figura 34 - Comparativo do perfil de Velocidade $Vx * para x *= 0,5 - Re = 1$	58
Figura 35 - Comparativo perfil de velocidade $Vy * para y *= 0.5 - Re = 1$	59
Figura 36 - Cavidade retangular	60
Figura 37 - Malha para cavidade retangular	60
Figura 38 - Isocontorno de velocidade para $Re = 1$	61
Figura 39 - Linhas de corrente após 6000 Passos – Cavidade retangular	62
Figura 40 - Perfil $Vx * para x *= 0,5 - Re = 1$ - Cavidade Retangular	63
Figura 41 - Perfil $Vy * para y *= 0.25 - Re = 1$ - Cavidade retangular	63
Figura 42 - Linhas de corrente após 2500 passos – Cavidade retangular	64
Figura 43 - Perfil $Vx * para x *= 0,5 - Re = 50$ - Cavidade retangular	65
Figura 44 - Perfil $Vy *$ para $y *= 0,25 - Re = 50$ - Cavidade retangular	65
Figura 45 - Truncamento da função suave próximo a uma fronteira	73

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1 - Equações de conservação na forma Lagrangiano e Euleriana	9
Tabela 2 - Principais formulações com a discretização SPH - Continua	24
Tabela 3 - Conjunto de equações para a resolução do problema da cavidade	42
Tabela 4 - Propriedades do escoamento - cavidade quadrada adimensional	42
Tabela 5 - Parâmetros da cavidade	43
Tabela 6 - Propriedade da força repulsiva	46
Tabela 7 - Tabela de desvios do perfil $Vx * - Re = 10$	54
Tabela 8 - Tabela de desvios do perfil $Vy * - Re = 10$	54
Tabela 9 - Tabela de desvios do perfil $Vx * - Re = 100$	57
Tabela 10 - Tabela de desvios do perfil $Vx * - Re = 100$	57
Tabela 11 - Configuração da cavidade retangular	60
Tabela 12 - Propriedades do escoamento - cavidade retangular adimensional	62
Tabela 13 - Formulação SPH com termos artificiais - Continua	84

LISTA DE SIGLAS

- MDF Método das Diferenças Finitas
- MEF Método dos Elementos Finitos
- MEC Método dos Elementos de Contorno
- SPH Smoothed Particle Hydrodynamics
- CFL Courant-Friedrichs-Lewy
- MVF- Método dos Volumes Finitos

LISTA DE VÁRIAVEIS:

- $\overline{\overline{\delta_{ij}}}$ Tensor identidade
- Π_{ii} Viscosidade artificial
- H_i Calor artificial
- U_{∞} –Velocidade Superior da Cavidade
- f_a Módulo da força específica da partícula
- r_0 Raio de corte da força externa
- Π_1 Termo de viscosidade artificial
- Π_2 Termo de viscosidade artificial
- $\overline{\overline{\epsilon}}$ Tensor de deformação
- $\overline{\overline{\sigma}}$ Tensor de tensão
- $\overline{\overline{\tau}}$ Tensor de cisalhamento
- h Comprimento suave
- Ω Domínio de suporte da função suave
- v Vetor velocidade
- x Vetor posição da Partícula
- B- Constante da Equação de Tait
- D Constante de Força Repulsiva
- L Comprimento da Cavidade
- Ma Número de Mach
- R Distância relativa entre pontos
- RA- Razão de Aspecto
- Re Número de Reynolds
- T Temperatura
- V Volume
- W Função suave
- c Velocidade do som
- e Energia interna específica
- p Pressão hidrostática

- g Gravidade
- n Vetor normal à fronteira
- t Vetor tangencial à fronteira
- γ Constante da Equação de Tait
- δ Função Delta de Dirac
- ε Peso Corretivo XSPH
- θ Variação relativa da massa específica
- μ Viscosidade dinâmica
- v Viscosidade cinemática
- ρ Massa específica

Sobrescrito

* - Adimensional

Subscrito

- _i i-ésima artícula
- j- j-ésima partícula
- ij- Diferença de propriedade entre a i-ésima e j-ésima partícula
- 0 Condição de Referência

Símbolo

() – Operador SPH

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1			
2	OBJETIVOS	2			
2.1	1 OBJETIVOS GERAIS				
2.2	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	2			
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	3			
3.1	PROBLEMA DA CAVIDADE BIDIMENSIONAL	3			
	3.1.1 Equações governantes de conservação na forma contínua	6			
3.2	MÉTODOS MESHFREE	8			
3.3	SMOOTHED PARTICLE HYDRODYNAMICS	12			
	3.3.1 FUNDAMENTAÇÃO MATEMÁTICA	13			
	3.3.1.1 Representação integral de uma função	13			
	3.3.2 Representação integral da derivada de uma função	17			
	3.3.3 Aproximação discreta por partículas	18			
	3.3.4 Domínio de suporte e domínio de influência	21			
4	SPH APLICADO À DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL	24			
4	SPH APLICADO À DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL	24 FLUIDOS			
4 5 CC	SPH APLICADO À DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL ASPECTOS MÉTODO SPH APLICADO À DINÂMICA DOS OMPUTACIONAL:	24 FLUIDOS 26			
4 5 C 5.1	SPH APLICADO À DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL ASPECTOS MÉTODO SPH APLICADO À DINÂMICA DOS OMPUTACIONAL: COMPRIMENTO SUAVE VARIÁVEL	FLUIDOS			
4 5 CC 5.1	SPH APLICADO À DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL ASPECTOS MÉTODO SPH APLICADO À DINÂMICA DOS OMPUTACIONAL: COMPRIMENTO SUAVE VARIÁVEL	FLUIDOS 26 26 27			
4 5 5 .1	SPH APLICADO À DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL ASPECTOS MÉTODO SPH APLICADO À DINÂMICA DOS OMPUTACIONAL: COMPRIMENTO SUAVE VARIÁVEL	FLUIDOS 26 26 27 28			
4 5 5 .1 5.2 5.3	SPH APLICADO À DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL ASPECTOS MÉTODO SPH APLICADO À DINÂMICA DOS OMPUTACIONAL:	FLUIDOS 26 26 27 28 30			
4 5 5 .1 5.2 5.3 5.4	SPH APLICADO À DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL ASPECTOS MÉTODO SPH APLICADO À DINÂMICA DOS MPUTACIONAL: COMPRIMENTO SUAVE VARIÁVEL	FLUIDOS 26 26 27 28 30 33			
4 5 5 .1 5.2 5.3 5.4 5.5	SPH APLICADO À DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL ASPECTOS MÉTODO SPH APLICADO À DINÂMICA DOS OMPUTACIONAL: COMPRIMENTO SUAVE VARIÁVEL. 5.1.1 Simetria de Interação Particular. COMPRESSIBILIDADE ARTIFICIAL. INTEGRAÇÃO TEMPORAL. CONTROLE DE AGLUTINAÇÃO DE PARTÍCULAS. ADIMENSIONALIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE NAVIER-STOKES.	FLUIDOS 26 26 27 28 30 33 34			
4 5 5 .1 5.2 5.3 5.4 5.5 5.6	SPH APLICADO À DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL ASPECTOS MÉTODO SPH APLICADO À DINÂMICA DOS OMPUTACIONAL: COMPRIMENTO SUAVE VARIÁVEL 5.1.1 Simetria de Interação Particular. 2 COMPRESSIBILIDADE ARTIFICIAL. 3 INTEGRAÇÃO TEMPORAL. 4 CONTROLE DE AGLUTINAÇÃO DE PARTÍCULAS. 5 ADIMENSIONALIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE NAVIER-STOKES. 5 TRATAMENTO NA FRONTEIRA	FLUIDOS 26 26 27 28 30 33 34 34			
4 5 5 .1 5.2 5.3 5.4 5.5 5.6	SPH APLICADO À DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL ASPECTOS MÉTODO SPH APLICADO À DINÂMICA DOS OMPUTACIONAL: COMPRIMENTO SUAVE VARIÁVEL 5.1.1 Simetria de Interação Particular. COMPRESSIBILIDADE ARTIFICIAL INTEGRAÇÃO TEMPORAL CONTROLE DE AGLUTINAÇÃO DE PARTÍCULAS. ADIMENSIONALIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE NAVIER-STOKES. TRATAMENTO NA FRONTEIRA 5.6.1	FLUIDOS 26 26 27 28 30 30 33 34 34 36 36			
4 5 5 .1 5.2 5.3 5.4 5.5 5.6	SPH APLICADO À DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL ASPECTOS MÉTODO SPH APLICADO À DINÂMICA DOS OMPUTACIONAL: COMPRIMENTO SUAVE VARIÁVEL 5.1.1 Simetria de Interação Particular. COMPRESSIBILIDADE ARTIFICIAL. INTEGRAÇÃO TEMPORAL CONTROLE DE AGLUTINAÇÃO DE PARTÍCULAS. ADIMENSIONALIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE NAVIER-STOKES. TRATAMENTO NA FRONTEIRA 5.6.1 Força Repulsiva 5.6.2 Reflexão de partículas	FLUIDOS 26 26 27 28 30 30 33 34 34 36 38			
4 5 5 .2 5.3 5.4 5.5 5.6 6	SPH APLICADO À DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL ASPECTOS MÉTODO SPH APLICADO À DINÂMICA DOS OMPUTACIONAL: COMPRIMENTO SUAVE VARIÁVEL 5.1.1 Simetria de Interação Particular. COMPRESSIBILIDADE ARTIFICIAL INTEGRAÇÃO TEMPORAL CONTROLE DE AGLUTINAÇÃO DE PARTÍCULAS. ADIMENSIONALIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE NAVIER-STOKES. TRATAMENTO NA FRONTEIRA 5.6.1 Força Repulsiva 5.6.2 Reflexão de partículas	FLUIDOS 26 26 27 28 30 33 34 34 36 36 38 40			

6.2	ANÁ	LISE DE TRATAMENTO NA FRONTEIRA	45			
7	7 RESULTADOS					
7.1	AVA	LIAÇÃO DOS RESULTADOS PARA REYNOLDS 1	48			
7.2	ANÁ	LISE PARA NÚMERO DE REYNOLDS SUPERIORES	52			
	7.2.1	Cavidade para reynolds 10	52			
	7.2.2	Cavidade para reynolds 100	55			
7.3	EFE	TO DO NÚMERO DE <i>MACH</i> NA SOLUÇÃO	58			
7.4	ANÁ	LISE PARA CAVIDADE COM RAZÃO DE ASPECTO 1:2	59			
7.5	CAV	IDADE RETANGULAR PARA REYNOLDS 1	61			
7.6	CAV	IDADE RETANGULAR PARA REYNOLDS 50	64			
8	 8 CONSIDERAÇÕES FINAIS					
9	BIBLIC	GRAFIASERRO! INDICADOR NÃO	DEFINIDO.			
9 10	BIBLIC APÊ	GRAFIASERRO! INDICADOR NÃO	DEFINIDO.			
9 10 10.2	BIBLIC APÊ 1 CON	GRAFIASERRO! INDICADOR NÃO NDICEERRO! INDICADOR NÃO ISISTENCIA DO MÉTODO SPH	DEFINIDO. DEFINIDO. 71			
9 10 10.4	BIBLIC APÊ 1 CON 10.1.1	GRAFIASERRO! INDICADOR NÃO NDICEERRO! INDICADOR NÃO ISISTENCIA DO MÉTODO SPH Consistência na Representação integral	DEFINIDO. DEFINIDO. 71 71			
9 10 10.4	BIBLIC APÊ 1 CON 10.1.1 10.1	GRAFIASERRO! INDICADOR NÃO NDICEERRO! INDICADOR NÃO ISISTENCIA DO MÉTODO SPH Consistência na Representação integral 1.1 Consistência da aproximação por partículas	DEFINIDO. DEFINIDO. 71 71 73			
9 10 10.2	BIBLIC APÊ 1 CON 10.1.1 10.1 2 DES VIER-ST	GRAFIASERRO! INDICADOR NÃO NDICEERRO! INDICADOR NÃO ISISTENCIA DO MÉTODO SPH Consistência na Representação integral 1.1 Consistência da aproximação por partículas ENVOLVIMENTO DAS FORMULAÇÕES SPH PARA EQU OKES	DEFINIDO. DEFINIDO. 71 71 73 AÇÕES DE 76			
9 10 10.2 10.2 NAV	BIBLIC APÊ 1 CON 10.1.1 10.1 2 DES VIER-ST 10.2.1	GRAFIASERRO! INDICADOR NÃO NDICEERRO! INDICADOR NÃO ISISTENCIA DO MÉTODO SPH Consistência na Representação integral 1.1 Consistência da aproximação por partículas ENVOLVIMENTO DAS FORMULAÇÕES SPH PARA EQU OKES Aproximação para equação da continuidade	DEFINIDO. DEFINIDO. 71 71 73 AÇÕES DE 76 76			
9 10 10.2 10.2 NAV	BIBLIC APÊ 1 CON 10.1.1 10.1 2 DES VIER-ST 10.2.1 10.2.2	GRAFIAS ERRO! INDICADOR NÃO NDICE ERRO! INDICADOR NÃO ISISTENCIA DO MÉTODO SPH ERRO! INDICADOR NÃO Consistência na Representação integral ENVOLVIMENTO DAS FORMULAÇÕES SPH PARA EQU OKES Aproximação para equação da continuidade Aproximação de partículas para a equação de momento	DEFINIDO. DEFINIDO. 71 71 73 AÇÕES DE 76 76 77			
9 10 10.2	BIBLIC APÊ 1 CON 10.1.1 10.1 2 DES VIER-ST 10.2.1 10.2.2 10.2.3	GRAFIAS ERRO! INDICADOR NÃO NDICE ERRO! INDICADOR NÃO ISISTENCIA DO MÉTODO SPH ERRO! INDICADOR NÃO Consistência na Representação integral ENVOLVIMENTO DAS FORMULAÇÕES SPH PARA EQU OKES Aproximação para equação da continuidade Aproximação de partículas para a equação de momento Aproximação de partícula para equação de energia	DEFINIDO. DEFINIDO. 71 71 73 AÇÕES DE 76 76 77 79			
9 10 10.2 10.2 NAV	BIBLIC APÊ 1 CON 10.1.1 10.1 2 DES VIER-ST 10.2.1 10.2.2 10.2.3 3 VISC	OGRAFIAS ERRO! INDICADOR NÃO NDICE ERRO! INDICADOR NÃO ISISTENCIA DO MÉTODO SPH ERRO! INDICADOR NÃO Consistência na Representação integral ENVOLVIMENTO DAS FORMULAÇÕES SPH PARA EQU OKES Aproximação para equação da continuidade Aproximação de partículas para a equação de momento Aproximação de partícula para equação de energia	DEFINIDO. DEFINIDO. 71 71 73 AÇÕES DE 76 76 77 79 79 			
9 10.10.2 10.2 NAV	BIBLIC APÊ 1 CON 10.1.1 10.1.2 2 DES VIER-ST 10.2.1 10.2.2 10.2.3 3 VISC 4 CAL	PGRAFIAS ERRO! INDICADOR NÃO NDICE ERRO! INDICADOR NÃO ISISTENCIA DO MÉTODO SPH Consistência na Representação integral 1.1 Consistência da aproximação por partículas ENVOLVIMENTO DAS FORMULAÇÕES SPH PARA EQU OKES Aproximação para equação da continuidade Aproximação de partículas para a equação de momento Aproximação de partícula para equação de energia COSIDADE ARTIFICIAL	DEFINIDO. DEFINIDO. 71 71 73 AÇÕES DE 76 76 76 77 79 79 			

1 INTRODUÇÃO

Na busca da melhoria na qualidade de vida e na fabricação em processos industriais, a utilização de métodos numéricos tem tomado um papel importante. Os modelos matemáticos mais rebuscados tendem a apresentar soluções mais verossímeis com resultados experimentais, pois apresentam cada vez mais aspectos físicos do problema. Com o aumento da potência computacional, programas têm sido usados de maneira extensiva para a solução de problemas complexos, que envolvem mecânica do contínuo, eletromagnetismo, movimentos planetários, etc.

Dentre os principais avanços nos métodos numéricos computacionais está o desenvolvimento do método dos elementos finitos na década de 1950, onde um meio contínuo é repartido em vários elementos, os quais são conectados entre si através da malha. Por se tratar de um método robusto e amplamente desenvolvido, ele tem sido amplamente utilizado em problemas de engenharias por conseguir representar geometrias complexas e problemas lineares e não lineares (LIU e GU, 2004). Entretanto, métodos baseados em malhas apresentam complicações para solução de problemas que envolvam superfícies livres, fronteiras deformáveis, interfaces móveis e grandes deformações. Outro fator é o gasto de tempo na construção da malha, já que em muito dos casos, sua preparação consome mais tempo que a própria simulação. (PATINO-NARINO e FERREIRA, 2015)

Nesse contexto, métodos sem malhas, também conhecidos como *Meshless*, têm ganhado cada vez mais notoriedade para a simulação desses tipos de problemas, já que os pontos que compõem o domínio não necessitam *a priori* de conectividade entre eles (LIU G. R., 2005). Dentre os métodos sem malhas mais difundidos está o *Smoothed Particle Hydrodynamics* (SPH), sendo amplamente aplicados a problemas envolvendo mecânica do contínuo, cobrindo algumas lacunas dos métodos baseados em malhas.

Desta forma, o atual projeto de graduação visa estudar a aplicação do método SPH no problema clássico das cavidades bidimensionais adimensionais, presente em diversos campos de atuação, averiguando a sua empregabilidade com os resultados obtidos para diferentes números de Reynolds e razões de aspectos.

2 OBJETIVOS

2.1 OBJETIVOS GERAIS

Esse projeto visa compreender o fenômeno das cavidades bidimensionais adimensionais, averiguando o comportamento para diferentes números de Reynolds e razões de aspecto, utilizando como ferramenta de solução o método *Smoothed Particle Hydrodynamics*, através do aprimoramento do código desenvolvido por Liu e Liu (2003). Os resultados são avaliados com diversos outros estudos realizados e por comparações com o método dos volumes finitos.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Desenvolvimentos de novos incrementos no código desenvolvido em Fortran, baseado em tratamento próximo à fronteira;
- Desenvolvimento de uma metodologia para resolver um mesmo problema em diferentes escalas;
- Avaliação do comportamento para baixos números de Reynolds e razões de aspecto.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1 PROBLEMA DA CAVIDADE BIDIMENSIONAL

Presente em problemas de engenharia ou em ciências que estudam a atmosfera e seus ambientes, o problema da cavidade bidimensional (*Shear-Driven Cavity Flow*) é uma das principais referências de estudo para validação de métodos numéricos e novas técnicas, por apresentar um escoamento com características complexas, apesar da simples geometria, como ilustrado na figura 1. (FRIGO, 2004)



Figura 1 - Esquematização do problema das cavidades bidimensionais

Esse tipo de escoamento pode ser encontrado em depressões e vales, cascos de embarcações, estádios de esportes, carrocerias de veículos, dentre outros (NUNES PINTO, 2013). Sua modelagem consiste em uma cavidade quadrada, estando em contato com uma aresta superior móvel, com velocidade U_{∞} , conforme ilustrado na figura 1. Inicialmente, a cavidade está preenchida por um fluído incompressível e em repouso. O escoamento se desenvolve até a estabilização dos vórtices, atingindo o

regime permanente. Um valor adimensional e de suma importância para descrever o problema é o número de Reynolds, definido como

$$Re = \frac{\rho U_{\infty}L}{\mu} \tag{1}$$

Sendo ρ a massa específica do fluido, *L* o comprimento da cavidade e μ a viscosidade dinâmica do fluido.

Dentre os trabalhos mais difundidos está o de Ghia *et al.* (1982), onde o problema das cavidades foi investigado com o método numérico *Multgrid.* A principal vantagem desse trabalho são os valores tabelados para linhas centrais de velocidade, feitos com moderados e altos números de Reynolds, contemplando valores de 100, 400, 1000, 3200, 5000, 7500 e 10000. Algumas linhas de correntes são mostradas na figura 2.

Figura 2 - Linhas de corrente para diferentes números de Reynolds



Fonte: (GHIA, GHIA e SHIN, 1982)

Em um trabalho posterior, Aydin e Fener (2000) desenvolveram um estudo empregando o Método dos Elementos de Contorno – MEC (*Boundary Element Method*) mostrando resultados superiores àqueles obtidos com a utilização do Método dos Volumes Finitos (MVF), Método dos Elementos Finitos (MEF) e Método das Diferenças Finitas (MDF). Esse estudo contemplou cavidades quadradas com baixos, moderados e altos números de Reynolds. Entretanto, houve a perda de precisão na velocidade central para altos números de Reynolds.

Posteriormente, Marques e Doricio (2006) realizaram um estudo comparativo entre métodos *meshfree* e o método dos volumes finitos, comparando-se as vorticidades e os perfis de velocidades para diferentes números de Reynolds.

No mesmo ano, estudos utilizando cavidades retangulares bidimensionais com razões de aspectos - *RA* - entre 1,5 até 4 foram tratados por Patil *et al.* (2006). De forma geral, a razão de aspecto é definida como a altura sobre o comprimento. Nesse trabalho foram feitas simulações com diferentes Reynolds, utilizando a formulação Lattice-Boltzman. Outra vantagem é a presença dos valores da componente x da velocidade para linha central vertical, podendo ser utilizada para comparação direta de resultados. Nesse estudo, observa-se a formação de múltiplos vórtices com o avanço do número de Reynolds, como mostrado na figura 3, utilizando 256 x 384 nós:

Figura 3 - Linhas de corrente (linha superior) e vorticidade (linha inferior)



Fonte: Patil et al. (2006) - Adaptado

Ainda em 2006, Chen e Hung conduziram um trabalho para cavidades com razões de aspectos entre 0,1 e 7, com baixos, moderados e altos números de Reynolds. Concluiu-se que para razões de aspectos menores do que 1 e Reynolds inferiores a 100, há a formação de grandes vórtices, ocupando quase toda a cavidade e a presença de vórtices nas quinas inferiores. Com o aumento do número

de Reynolds, a diferença de tamanho entre os vórtices de quina se torna ainda mais significante.

Em 2011, Góes propôs uma solução por programas em série e em paralelo para o problema das cavidades quadradas utilizando o método *Smoothed Particle Hydrodynamics.* Os resultados foram comparados com simulações utilizando o Método dos Volumes Finitos.

Finalmente, Nunes Pinto (2013) aplicou o método SPH para uma cavidade de 1 mm x 1 mm contendo água como fluido de estudo. Como abordagem utilizada, optou-se na comparação do perfil de velocidade nas linhas centrais da cavidade bem como o posicionamento do centro dos vórtices, comparando com os demais estudos já realizados. Os resultados obtidos com baixos números de Reynolds eram condizentes com os encontrados em diversos estudos.

3.1.1 EQUAÇÕES GOVERNANTES DE CONSERVAÇÃO NA FORMA CONTÍNUA

Para obter a solução do problema das cavidades, é necessário compreender as equações físicas governantes, as equações da continuidade, do momento e da energia:

• Equação da continuidade

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v} \tag{2}$$

• Equação do momento

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \overline{\mathbf{\sigma}} + \rho \mathbf{g}$$
(3)

• Equação da energia

$$\frac{de}{dt} = \frac{1}{\rho} \overline{\overline{\sigma}} : \overline{\overline{\varepsilon}} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{g}$$
(4)

Na formulação acima, **g** é a força de corpo específica e $\overline{\sigma}$ é o tensor de tensão, esse último sendo descrito por White (2000) para fluidos newtonianos como:

$$\overline{\overline{\sigma}} = -p\overline{\overline{\delta}} + 2\mu \left[\frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^{\mathrm{T}} \right) - \left(\frac{1}{3} \nabla \cdot \mathbf{v} \right) \overline{\overline{\delta}} \right]$$
(5)

Sendo δ o tensor unitário e p a pressão hidrodinâmica. Para diminuir a nomenclatura, o tensor viscoso é denominado por $\overline{\overline{\tau}}$, tal que

$$\overline{\overline{\tau}} = 2\mu \left[\frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^{\mathrm{T}} \right) - \left(\frac{1}{3} \nabla \cdot \mathbf{v} \right) \overline{\overline{\delta}} \right]$$
(6)

Onde

$$\bar{\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}} = \frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^{\mathrm{T}} \right) - \left(\frac{1}{3} \nabla \cdot \mathbf{v} \right) \bar{\boldsymbol{\delta}}$$
(7)

Além disso, produto *a*: *b* é definido como sendo

$$\overline{a}: b = Tr(b^T a) \tag{8}$$

Também fundamental para a solução do problema, é necessário definir as condições de contorno. Conforme indicado pela figura 1, a aresta superior apresenta uma velocidade horizontal definida U_{∞} . Já as demais fronteiras, apresentam a condição de velocidade nula. Com a definição das equações regentes e das condições de contorno, é preciso escolher e implementar um método numérico capaz de solucionar o problema.

3.2 MÉTODOS MESHFREE

Sintetizando o que foi discutido por Liu e Liu (2003), para servir a um propósito prático, simulações numéricas seguem um procedimento similar. Do modelo físico observado, hipóteses e simplificações matemáticas são assumidas. Esses modelos são expressos na forma das equações físicas governantes, utilizando condições de contorno e/ou condições iniciais. As equações governantes podem ser um grupo de equações diferenciais ordinárias ou parciais, equações integrais ou outras formas, enquanto as condições de contorno e iniciais são necessárias para determinar o campo de variáveis no tempo e no espaço.

Para a solução das equações governantes, a geometria do domínio deve ser discretizada. Em outras palavras, um domínio contínuo é dividido em uma quantidade finita de partes. Tradicionalmente essa divisão é feita por malhas, consistindo em um conjunto de nós conectados, nos quais armazenam os valores das variáveis avaliadas, no chamado método baseado em malha. Além disso, a precisão dos resultados está intimamente ligada ao tamanho das células e à sua distribuição.

Para simulações envolvendo problemas de mecânica do contínuo, as equações chaves necessárias são a da conservação de massa, a do momento e a da energia, devendo ser satisfeitas durante toda evolução do processo. Assim, com essas três equações e adicionando a natureza do meio, as condições de contorno e as condições iniciais, determina-se todo o comportamento do sistema. Normalmente, em apenas alguns casos particulares é possível se obter uma solução analítica dessas equações, sendo então imprescindível a discretização e aplicação de métodos numéricos para a resolução desses problemas, conforme a figura 4.



Figura 4 - Metodologia para resolução de uma simulação numérica

Fonte: Liu e Liu (2003)- Adaptado

Quanto à natureza dos métodos baseados em malha, duas formas de descrição das equações físicas governantes podem ser utilizadas: Euleriana e Lagrangiano. Um exemplo clássico para descrição Euleriana é o método das diferenças finitas (MDF), aproximando as derivadas parciais através da expansão por série de Taylor. As derivadas parciais são aproximadas por diferenças finitas e com o truncamento da série, substituídas em seguidas na equação matemática vigente. Já para o caso de descrição Lagrangiano, um exemplo é o Método dos Elementos Finitos (MEF), um dos métodos mais populares. Nessa formulação, as variáveis armazenadas nos nós são interpoladas sobre o elemento utilizando uma função polinomial.

Ao que diz respeito dos métodos baseados em malha, dependendo do tipo de descrição utilizada, a forma da equação de conservação é alterada. Por exemplo, para o caso de um escoamento sem condução de calor, as equações de conservações são mostradas na tabela 1:

Conservação	Descrição Lagrangiana	Descrição Euleriana
Massa	$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla \mathbf{v}$	$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \cdot \mathbf{v} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v}$
Momento	$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \nabla \cdot \overline{\boldsymbol{\sigma}} + \mathbf{g}$	$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} = \nabla \cdot \overline{\boldsymbol{\sigma}} + \mathbf{g}$
Energia	$\rho \frac{De}{Dt} = \overline{\overline{\sigma}} : \overline{\overline{e}} + \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{g}$	$\rho \frac{\partial e}{\partial t} + \rho \nabla e \cdot \mathbf{v} = \overline{\overline{\sigma}} : \overline{\overline{\varepsilon}} + \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{g}$

Tabela 1 - Equações de conservação na forma Lagrangiano e Euleriana

Fonte: Liu e Liu 2003 - Adaptado

Onde ρ , *e*, **v**, representam a massa específica, energia interna e a velocidade do fluido, respectivamente, enquanto $\overline{\sigma}$, $\overline{\epsilon}$ representam o tensor de tensão e o tensor de deformação, respectivamente. A diferença entre os dois conjuntos de equações está ligada à noção da derivada total do tempo (ou derivada substancial), sendo a combinação da derivada local e a derivada convectiva, conforme a equação 9.

$$\frac{DF}{Dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \nabla F \cdot \mathbf{v}$$
(9)

A derivada substancial representa a taxa de variação de uma propriedade com o tempo em um determinado ponto somada à mudança devido ao transporte do fluxo, visto que as propriedades são espacialmente diferentes.

Contudo, alguns inconvenientes relacionados a essas duas descrições para os métodos baseados em malha citados por Liu e Liu (2003) são:

- a) Gasto excessivo de tempo para a criação de malhas rebuscadas, no qual mais tempo pode ser gasto no desenvolvimento da malha do que na solução do problema;
- b) Dificuldade em analises adaptativa, nas quais é necessário o processo de remalhagem;
- c) Perda de precisão em casos de grandes deformações;
- d) Problemas para o caso de fragmentação, visto que o caminho da fratura fica limitado ao caminho das células dos elementos;

Entretanto, uma diferente vertente é utilizada, nos chamados métodos sem malhas - *Métodos Meshfree*. Essa diferente proposição utiliza um conjunto de pontos espalhados no contorno e dentro do domínio para representar o próprio domínio e seu contorno, como ilustrado na figura 5. Esses pontos são chamados de nós de campo, os quais não formam uma malha e não necessitam de nenhuma informação *a priori* da relação dos demais para a interpolação ou aproximação das desconhecidas funções de campo. (LIU G. R., 2005)



Figura 5 – Diferença de discretização: (A) Meshless, (B) elementos finitos

Fonte: Liu (2005) - Adaptado

Segundo Liu e Gu (2004), os métodos *Meshfree* são classificados no tamanho da escala: microscópico, mesoscópico ou macroscópio. Um método típico para o caso microscópico é o Método Dinâmico Molecular (*Molecular Dynamics Method*). Já os casos mesoscópicos incluem *Dissipative Particle Dynamics, Lattice Gas Cellular Automata*. Referente aos casos macroscópicos estão *Paticles-in-Cell, Marker-and-Cell, Fluid-in-Cell* e *Smoothed Particle Hidrodynamics*.

Dessa forma, este projeto de graduação visa o estudo de casos de aplicação de um dos métodos *Meshfree:* O *Smoothed Particle Hydrodynamics - SPH*, tendo em vista os diversos casos de aplicação, tais quais:

- I. Escoamento incompressíveis/compressíveis
- II. Explosões
- III. Impacto e penetração
- IV. Interação fluido-Estrutura
- V. Jatos livres

Assim, após a discretização do domínio e das equações, o problema se transforma em um sistema de equações algébricas, sendo resolvidos pelas rotinas numéricas existentes. Esses algoritmos numéricos devem ser traduzidos em um código computacional de alguma linguagem de programação. Existe uma série de programas com códigos abertos envolvendo simulações SPH. Para esse projeto, visa-se a adaptação do código proposto por Liu e Liu (2003) para casos de escoamentos para baixo número de Reynolds.

3.3 SMOOTHED PARTICLE HYDRODYNAMICS

O Método Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) é um método numérico Lagrangiano de partículas proposto por Gingold e Monanghan (1977) e Lucy (1977), que, desde sua invenção para solução de problemas astrofísicos, tem sido usado sistematicamente para análises de resposta dinâmica em mecânica dos sólidos e em escoamento com grandes deformações.

Conforme Michel (2007), o método SPH consiste na modelagem do comportamento de um fluido ou um de corpo como um conjunto de massas pontuais, distribuídas de forma arbitrária e interagindo entre elas, por meio de uma região de influência. Os métodos baseados em partículas se diferenciam dos métodos baseados em malha no quesito conectividade nodal: nos métodos sem malhas, a conectividade nodal varia com o tempo. Dessa forma, essa propriedade permite modelar de forma mais realista o escoamento de fluidos e problemas envolvendo grandes deslocamentos e grandes deformações.

Quanto a sua metodologia, Paiva Neto (2007) descreve que o *SPH* tem como princípio a interpolação das propriedades de um meio e das aproximações das derivadas espaciais através de um conjunto discreto de partículas. Assim, torna-se possível a transformação das equações diferenciais parciais que regem o fenômeno físico em um conjunto de equações diferenciais ordinárias.

A formulação SPH é normalmente dividida em duas etapas. A primeira se trata da representação integral de uma função, pela chamada função suave ou aproximação de Kernel, enquanto a segunda, envolve a discretização do domínio em partículas, na chamada aproximação por partícula.

3.3.1 FUNDAMENTAÇÃO MATEMÁTICA

3.3.1.1 Representação integral de uma função

Paiva Neto (2007) descreve que o primeiro passo chave consiste na representação integral de uma função f(x) definida em um domínio Ω através da convolução com a distribuição do delta de Dirac

$$f(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} f(\boldsymbol{\zeta}) \,\delta(\mathbf{x} - \boldsymbol{\zeta}) d\boldsymbol{\zeta} \tag{10}$$

Sendo x , $\zeta \in \mathbb{R}^3$. A função delta de Dirac é dada por

$$\delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\zeta}) = \begin{cases} 1 & \boldsymbol{x} = \boldsymbol{\zeta} \\ 0 & \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{\zeta} \end{cases}$$
(11)

De uma maneira similar, mas utilizando uma função suave, ou função de Kernel, $W(x - \zeta, h)$, a representação integral da função se torna

$$f(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} f(\boldsymbol{\zeta}) W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\zeta}, h) d\boldsymbol{\zeta}$$
(12)

Nessa formulação, h representa o comprimento suave. Para uma fácil identificação, o operador SPH é definido pelo símbolo (), de forma que

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} f(\boldsymbol{\zeta}) W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\zeta}, h) d\boldsymbol{\zeta}$$
(13)

Entretanto, para que a função suave possa ser utilizada na representação integral de uma função, uma série de condições deve ser satisfeitas.

I. Geralmente ela é escolhida como sendo uma função par, isto é:

$$W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\zeta}, h) = W(\boldsymbol{\zeta} - \boldsymbol{x}, h)$$
(14)

II. A função deve obedecer à condição de normalização, isto é:

$$\int_{\Omega} W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\zeta}, h) \, d\boldsymbol{\zeta} = 1 \tag{15}$$

III. A função suave deve tender para o delta de Dirac, à medida que o comprimento suave tende a zero

$$\lim_{h \to 0} W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\zeta}, h) = \delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\zeta})$$
(16)

IV. A função deve ser compacta, isso é

$$W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\zeta}, h) = 0 \text{ se } |\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\zeta}| > kh$$
(17)

Onde *kh* representa o raio de influencia, definindo região de influência da função suave. Percebe-se assim que os erros podem ser estimados dentro dessa região, também denominada de domínio de suporte. Para isso, uma expansão em série de Taylor é feita para f(x). Então:

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} \left[f(\mathbf{x}) + f'(\mathbf{x})(\boldsymbol{\zeta} - \mathbf{x}) + r((\boldsymbol{\zeta} - \mathbf{x})^2) \right] W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\zeta}, h) d\boldsymbol{\zeta}$$
$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = f(\mathbf{x}) \int_{\Omega} W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\zeta}, h) d\boldsymbol{\zeta} + f'(\mathbf{x}) \int_{\Omega} (\boldsymbol{\zeta} - \mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\zeta}, h) d\boldsymbol{\zeta} + r(h^2)$$

Assim, como W é uma função par, a função $(\zeta - x)W(x - \zeta, h)$ deve ser ímpar, para que sua integral seja zero. Logo:

$$\int_{\Omega} (\boldsymbol{\zeta} - \boldsymbol{x}) W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\zeta}, h) d\boldsymbol{\zeta} = 0$$

$$\langle f(\boldsymbol{x}) \rangle = f(\boldsymbol{x}) + r(h^2)$$
(18)

Dessa forma, percebe-se que o operador SPH possui um truncamento de segunda ordem. Entretanto, a função suave apresentará um truncamento de segunda ordem, caso ela seja par e a condição de normalização seja satisfeita.

Além disso, como outra consequência direta das condições I e II, a função suave é sempre maior ou igual à zero.

$$W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\zeta}, h) \ge 0 \tag{19}$$

Qualquer função que apresente essas características pode ser utilizada como a função suave. Originalmente, Lucy (1977) utilizou uma função ilustrada na figura 6 e descrita como:

$$W(\mathbf{x} - \zeta, h) = W(R, h) = \alpha_d \begin{cases} (1+3R)(1-3R)^3 & R \le 1\\ 0 & R > 0 \end{cases}$$
(20)

Sendo α_d uma constante dependendo da dimensão do problema, isso é, 5/ 4*h*, 5/ πh^2 e 105/16 πh^2 para os casos uni, bi e tridimensionais, respectivamente. Na equação 20 acima, *R* representa a distância relativa entre os pontos *x* e ζ , isto é:

$$R = \frac{r}{h} = \frac{|\mathbf{x} - \boldsymbol{\zeta}|}{h} \tag{21}$$



Figura 6 - Kernel de Lucy e sua primeira derivada (gradiente)

Fonte: Liu e Liu (2003) - Adaptado por Nunes Pinto (2013)

Em outro trabalho, Gingold e Monaghan (1977) utilizaram a função gaussiana como função suave, isto é

$$W(R,h) = \alpha_d \exp\left(-R^2\right) \tag{22}$$

Onde α_d vale $1/\pi^{\frac{1}{2}}h$, $1/\pi h^2$ e $1/\pi^{\frac{3}{2}}h^2$ para os casos uni, bi e tridimensionais, respectivamente. Essa função é bem suave para altas derivadas, emas apresenta uma região de influência, aumentando o tempo computacional do problema, como mostrado na figura 7.



Figura 7 - Kernel Gaussiano e a primeira derivada (gradiente)

Fonte: Liu e Liu (2003) - Adaptado por Nunes Pinto (2013)

Em 1995, Monaghan e Lattanzio utilizaram em seu trabalho um *Spline* cúbico como função suave, conhecido como *B-Spline*.

$$W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\zeta}, h) = W(R, h) = \alpha_d \begin{cases} \frac{2}{3} - R^2 + \frac{1}{2}R^3 & 0 \le R \le 1\\ \frac{1}{6}(2 - R)^3 & 1 \le R \le 2\\ 0 & R > 2 \end{cases}$$
(23)

Onde α_d vale1/*h*, 15/7 πh^2 e 3/2 πh^3 para os casos uni, bi e tridimensionais, respectivamente. Essa função é a que mais vem sendo utilizada em novos estudos, pois possui semelhanças com a função de Gauss e por ter uma menor região de influência. Entretanto, essa função apresenta a segunda derivada linear e apresenta um grau maior de complexibilidade, por ser segmentada em trechos.

3.3.2 REPRESENTAÇÃO INTEGRAL DA DERIVADA DE UMA FUNÇÃO

A aproximação do gradiente de uma função escalar pela representação integral da função é dada por

$$\langle \nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} \nabla_{\zeta} f(\zeta) W(\mathbf{x} - \zeta, h) d\zeta$$
(24)

Usando a regra do produto para o gradiente, a equação 24 pode ser reescrita como sendo

$$\langle \nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} \nabla_{\zeta} (f(\zeta)W(\mathbf{x}-\zeta,h)) d\zeta - \int_{\Omega} f(\zeta)\nabla_{\zeta}W(\mathbf{x}-\zeta',h) d\zeta$$
(25)

Dessa forma, pode-se aplicar o teorema da divergência de Gauss, transformando a primeira integral volumétrica do lado direito em uma integral sobre a superfície do domínio compacto

$$\langle \nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{S} \nabla_{\boldsymbol{\zeta}} (f(\boldsymbol{\zeta}) \cdot W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\zeta}, h)) \cdot \mathbf{n} dS - \int_{\Omega} f(\boldsymbol{\zeta}) \nabla_{\boldsymbol{\zeta}} W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\zeta}, h) d\boldsymbol{\zeta}$$
(26)

Sendo n o vetor normal unitário a superfície S. Considerando a propriedade de a função suave ser compacta, a primeira integral do lado direito tem o seu valor nulo para regiões específicas, quando não existe o truncamento da função. Logo, a equação 26 pode ser simplificada na forma

$$\langle \nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \rangle = -\int_{\Omega} f(\boldsymbol{\zeta}) \nabla_{\boldsymbol{\zeta}} W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\zeta}, h) \, d\boldsymbol{\zeta}$$
⁽²⁷⁾

Apesar de não ser válida em regiões próximas a fronteiras, essa aproximação é mantida, mas são feitas correções, como discutido nos apêndices.

Fazendo uma mudança de variável, chega-se em:

$$\langle \nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} f(\boldsymbol{\zeta}) \nabla_{\mathbf{x}} W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\zeta}, h) \, d\boldsymbol{\zeta}$$
(28)

3.3.3 APROXIMAÇÃO DISCRETA POR PARTICULAS

As formas das integrais contínuas, tanto das funções quanto de suas derivadas (equações 13 e 29), podem ser discretizadas utilizando as partículas contidas no domínio compacto, no processo conhecido como aproximações de partículas, como ilustrado na figura 8. Assim, o volume infinitesimal $d\zeta$ é então representado por um volume finito de uma partícula *j*, equivalente a ΔV_i

$$m_j = \rho_j \Delta V_j \tag{29}$$





Fonte: Liu (2003) - Adaptado por Michel (2007)

Sendo ρ_j a massa específica da partícula j (j = 1,2,3...N). Dessa forma, discretizando a representação integral contínua:

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} f(\boldsymbol{\zeta}) W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\zeta}, h) d\boldsymbol{\zeta}$$
$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = \sum_{j=1}^{N} f(\mathbf{x}_j) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) \Delta V_j$$
$$\langle f(\mathbf{x}_i) \rangle = \sum_{j=1}^{N} f(\mathbf{x}_j) W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h) \frac{1}{\rho_j} (\rho_j \Delta V)_j$$

$$\langle f(\boldsymbol{x}) \rangle = \sum_{j=1}^{N} f(\boldsymbol{x}_j) W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_j, h) \frac{1}{\rho_j} (m_j)_j$$
(30)

$$\langle f(\boldsymbol{x}_i) \rangle = \sum_{j=1}^{N} \frac{f(\boldsymbol{x}_j) W_{ij} m_j}{\rho_j}$$
(31)

Sendo

$$W_{ij} = W(x_i - x_j, h) \tag{32}$$

Portanto, com essa formulação, o valor da função na partícula *i* é aproximado por ponderações das partículas vizinhas, desde que contidas no domínio de suporte mostrado na figura 8. De maneira análoga, o gradiente da função $f(x_i)$ discretizado é dado por

$$\langle \nabla f(\boldsymbol{x}_i) \rangle = \sum_{j=1}^{N} \frac{f(\boldsymbol{x}_j) \nabla_j W_{ij} m_j}{\rho_j}$$
(33)

Sendo

$$\nabla_{\mathbf{i}}W_{ij} = \frac{(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}}$$
(34)

Tal que

$$r_{ij} = |\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j| \tag{35}$$

Portanto, para determinar o valor da função, é importante ter o valor da massa específica de cada uma das partículas. Considerando a conservação de massa de cada uma delas, a massa específica da *i*-ésima partícula pode ser aproximada como

$$\rho_i = \sum_{j=1}^N m_j W_{ij} \tag{36}$$

Monaghan (1992) propõe duas aproximações para a representação do gradiente de uma função. A equação do gradiente (equação 29) pode ser reescrita como sendo função da massa específica. Graças à propriedade do operador gradiente em relação ao produto de duas funções escalares, tem-se

$$\nabla(\rho f) = \nabla \rho f + \nabla f \rho$$

Assim:

$$\rho \nabla f = \nabla(\rho f) - \nabla \rho f$$
$$\nabla f = \frac{[\nabla(\rho f) - \nabla \rho f]}{\rho}$$
(37)

A segunda maneira advém de uma dedução semelhante, mas utilizando as propriedades quanto à divisão entre duas funções escalares

$$\nabla\left(\frac{f}{\rho}\right) = \frac{(\rho\nabla f - f\nabla\rho)}{\rho^2}$$
$$\nabla\left(\frac{f}{\rho}\right) = \frac{\nabla f}{\rho} - \frac{f\nabla\rho}{\rho^2}$$

Finalmente,

$$\nabla f = \rho \left[\nabla \left(\frac{f}{\rho} \right) + \frac{f \nabla \rho}{\rho^2} \right]$$
(38)

O mesmo procedimento utilizado na dedução da equação 31 pode ser empregado para os termos do lado direito das equações 37 e 38. Assim, a discretização do gradiente pode ser expressa de duas formas diferentes

$$\langle \nabla f(\boldsymbol{x}_{i}) \rangle = \frac{1}{\rho_{i}} \left[\sum_{j=1}^{N} m_{j} [f(\boldsymbol{x}_{j}) - f(\boldsymbol{x}_{i})] \nabla_{i} W_{ij} \right]$$
(39)

$$\langle \nabla f(\boldsymbol{x}_i) \rangle = \rho_i \left[\sum_{j=1}^N m_j \left[\frac{f(\boldsymbol{x}_j)}{\rho_j^2} + \frac{f(\boldsymbol{x}_i)}{\rho_i^2} \right] \nabla_i W_{ij} \right]$$
(40)

Uma boa vantagem dessa formulação é a presença do termo $f(x_i)$ no equacionamento. Além disso, dada duas funções, $f_1 \in f_2$, então

$$\langle f_1 + f_2 \rangle = \langle f_1 \rangle + \langle f_2 \rangle \tag{41}$$

$$\langle f_1 f_2 \rangle = \langle f_1 \rangle \langle f_2 \rangle \tag{42}$$

3.3.4 DOMÍNIO DE SUPORTE E DOMÍNIO DE INFLUÊNCIA

Segundo Liu e Liu. (2003), por definição, o domínio de suporte do ponto de campo x = (x, y, z) é toda aquela região na qual os pontos contidos nelas transmitem a informação para o ponto x. Já o domínio de influência é definido como todo domínio onde um nó exerce influência. Entretanto, não necessariamente o nó é um ponto de campo. Para Liu e Liu (2003):

- Ao utilizar a noção de domínio de suporte, essa consideração é baseada no ponto de campo x. Já em relação à noção ao domínio de influência, essa aproximação é baseada em nós;
- Caso o nó *i* esteja contido no domínio de suporte do ponto *x*, é dito que o nó exerce uma influência no ponto *x*, estando portanto no domínio de influência de *i*;
- Caso o ponto de campo x seja um nó i, assim o nó passa a ter um domínio de influência e um domínio de suporte, podendo fazer até que ambos sejam iguais.

Por se tratar de um método particular, o ponto de campo x sempre está sobre a partícula (nó), tendo então a partícula ambos os domínios. Essa discussão é necessária devido a duas aproximações de partículas utilizado pelo método SPH, os chamados modelos *Scatter* e *Gather*. Para a fomulação *Scatter*, a partícula i utiliza as partículas que a cobrem com domínio de influência, como mostrado na figura 9. Já na formulação *Gather*, à partícula i utiliza todas as outras partículas que estão contidas em seu domínio de suporte, conforme ilustrado na figura 9. Para uma partícula SPH, a noção do domínio de suporte está ligada ao comprimento suave h.


Figura 9 - Formulação Scatter (esquerda) e Gather (direita)

Fonte: Livemore Software Technology Corporation (2007) - Adaptado

Matematicamente, as duas formulações diferem apenas em um termo na representação integral da função e da sua derivada. Para a integração do tipo *Gather*, o comprimento suave é parâmetro apenas de x, isto é

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} f(\boldsymbol{\zeta}) W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\zeta}, h(\mathbf{x})) d\boldsymbol{\zeta}$$
(43)

$$\langle \nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} \nabla_{\zeta} f(\zeta) W(\mathbf{x} - \zeta, h(\mathbf{x})) d\zeta$$
(44)

Já para a formulação do tipo Scatter, o comprimento suave é função de ζ

$$\langle f(\mathbf{x})\rangle = \int_{\Omega} f(\boldsymbol{\zeta}) W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\zeta}, h(\boldsymbol{\zeta})) d\boldsymbol{\zeta}$$
(45)

$$\langle \nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} \nabla_{\zeta} f(\zeta) W(\mathbf{x} - \zeta, h(\zeta)) d\zeta$$
(46)

Entretanto, um problema pode acontecer quando os domínios compactos de duas partículas vizinhas são apresentam o mesmo tamanho. Essa situação ocorre

quando o domínio compacto da partícula i englobar a partícula j, mas quando o domínio compacto de j não englobar a partícula i, como mostrado na figura 10:

i khi j khj

Figura 10 - Violação da terceira lei de Newton

Essa situação apresenta resultados não físicos, pois acarreta na violação da 3^a lei de Newton. Em outras palavras, a partícula i exerce uma força sobre a partícula j, mas a recíproca não é verdadeira independentemente do tipo de formulação (*Gather* ou *Scatter*). Alguns métodos corretivos serão explorados posteriormente no capítulo 5.

4 SPH APLICADO À DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL

Com a aplicação das formulações SPH para as equações de conservação de massa, momento e energia, chega-se às seguintes equações aplicadas à dinâmica dos fluidos, como mostradas na tabela 2 e demonstradas no apêndice.

Tabela 2 - Principais formulações com a discretização SPH - Continua

I. Conservação de massa:

$$\rho_i = \sum_{j=1}^N m_j W_{ij} \tag{47}$$

$$\frac{D\rho_i}{Dt} = \rho_i \sum_{j=1}^N m_j (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \cdot \frac{\nabla_i W_{ij}}{\rho_j}$$
(48)

$$\frac{D\rho_i}{Dt} = \sum_{j=1}^N m_j \big[\mathbf{v}(\mathbf{x}_i) - \mathbf{v}(\mathbf{x}_j) \big] \cdot \nabla_i W_{ij}$$
(49)

$$\rho_{i} = \frac{\sum_{j=1}^{N} m_{j} W_{ij}}{\sum_{j=1}^{N} \frac{m_{j}}{\rho_{j}} W_{ij}}$$
(50)

II. Conservação do momento:

$$\frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} = \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{p_j + p_i}{\rho_i \rho_j}\right) \nabla_i W_{ij} + \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{\mu \overline{\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}}_i + \mu \overline{\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}}_j}{\rho_i \rho_j}\right) \cdot \nabla_i W_{ij}$$
(51)

$$\frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} = \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2}\right) \nabla_i W_{ij} + \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{\mu \overline{\overline{\epsilon}}_i}{\rho_i^2} + \frac{\mu \overline{\overline{\epsilon}}_j}{\rho_j^2}\right) \cdot \nabla_i W_{ij}$$
(52)

Tabelas 2 - Principais formulações com a discretização SPH - Final

III. Conservação de energia:

$$\frac{de_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{p_j}{\rho_j^2} + \frac{p_i}{\rho_i^2} \right) \mathbf{v}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij} m_j + \frac{2\mu_i}{\rho_i} \overline{\overline{\mathbf{\varepsilon}}}_i : \overline{\overline{\mathbf{\varepsilon}}}_i$$
(53)

$$\frac{de_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} m_j \frac{p_j + p_i}{\rho_j \rho_i} \mathbf{v}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij} + \frac{2\mu_i}{\rho_i} \overline{\overline{\varepsilon}}_i : \overline{\overline{\varepsilon}}_i$$
(54)

Fonte: Liu e Liu (2003) - Adaptado

Para cada uma dos tipos de conservação, é necessário escolher uma formulação para a solução do problema com o método SPH.

Outro fato a ser considerado é que, ao observar as equações, no que diz respeito à massa específica, percebe-se duas vertentes diferentes, isto é, para a atualização do seu valor em cada instante de tempo. Assim sendo, pode-se utilizar tanto a representação discreta da função, aplicando diretamente à representação SPH à massa específica ou utilizando a equação da continuidade. Essa análise é mais bem detalhada no apêndice.

5 ASPECTOS DO MÉTODO SPH APLICADO À DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL

5.1 COMPRIMENTO SUAVE VARIÁVEL

O comprimento suave apresenta uma grande importância na parte computacional, já que altera diretamente os cálculos e a precisão da solução. Para exemplificar, com a utilização de um comprimento h pequeno, a quantidade de partículas dentro do domínio compacto pode não ser suficiente. Entretanto, caso o valor de h seja elevado, a função não será nem tão compacta e nem tão suave, afetando também a solução do problema. De forma usual, o comprimento h suave é adotado como sendo entre 1 e 2 vezes o espaçamento das partículas.

Após as primeiras formulações em 1977, inúmeras técnicas para melhorar o desempenho do método SPH para outros campos de aplicações. Uma delas foi introduzida por Monaghan (1992), onde *h* se adaptava em função da massa específica das partículas, de maneira a compensar os erros cometidos durante a interpolação. Esses erros eram causados devido a fortes relaxamentos do meio modelado, resultado que fora confirmado por demais estudos realizados (ALIMI, SERNA, *et al.*, 2003) (KATZ., 1989) (PAPALOIZOU, 1994). O tratamento mais simples para atualizar o comprimento, em função da massa específica de partícula, pode ser dado por

$$h = h_0 \left(\frac{\rho_0}{\rho}\right)^{\frac{1}{d}} \tag{55}$$

Sendo h_0 o comprimento suave inicial, ρ_0 a massa específica inicial e *d* a dimensão do problema.

Posteriormente, outro método que leva em conta a evolução do comprimento suave no tempo em termo da equação da continuidade foi desenvolvido: (MONAGHAN, 1992)

$$\frac{dh}{dt} = -\frac{1}{d}\frac{h}{\rho}\frac{d\rho}{dt}$$
(56)

5.1.1 SIMETRIA DE INTERAÇÃO PARTICULAR

No caso do comprimento suave variável no tempo e no espaço, cada partícula poderá ter o seu próprio h. Dessa forma, o problema de desequilíbrio mostrado na figura 10 acontece, devido à violação da 3^a lei de Newton. Entretanto, medidas corretivas podem ser tomadas, como por exemplo, manter a interação simétrica entre as partículas. Um dos métodos de obter essa simetria, desenvolvido por Benz (1989 e 1990), é utilizar h como a média aritmética entre duas partículas que estão interagindo, isto é

$$h_{ij} = \frac{h_i + h_j}{2} \tag{57}$$

Uma segunda forma é a utilização de uma média geométrica:

$$h_{ij} = \frac{h_i + h_j}{h_i h_j} \tag{58}$$

Ou ainda, pode-se utilizar o valor máximo ou o mínimo entre dois comprimentos

$$h_{ij} = \max\left(h_i, h_j\right) \tag{59}$$

$$h_{ij} = \min\left(h_i, h_j\right) \tag{60}$$

Existem vantagens e desvantagens de cada uma das formulações mostradas acima. Ao utilizar uma aproximação baseada no valor máximo e ou na média aritmética, o algoritmo tende a utilizar mais partículas. Já a média geométrica, ela tende a utilizar menos partículas vizinhas. A cada caso, deve-se avaliar qual é a melhor solução caso haja um desbalanceamento de forças internas. Por ser a mais usual, será explorado nesse trabalho o comprimento suave médio entre duas partículas.

5.2 COMPRESSIBILIDADE ARTIFICIAL

Ao analisar as equações de transporte, nota-se nas equações de momento e energia a presença de um termo de gradiente de pressão. Se o campo de pressão for conhecido, basta aplicá-lo diretamente na representação discreta SPH de momento e energia. Esse caso é usual quando o fluido em estudo é um gás, uma vez que o campo de pressão pode ser determinado a partir da equação de estado, isto é: $p = p(\rho, T)$. Entretanto, para o caso de fluido incompressível, a mesma formulação não pode ser utilizada, pois em princípio, a massa específica é constante e não está relacionada com o campo de pressão. Entretanto, embora seja possível a sua implementação, a atual equação de estado para fluídos incompressíveis acarretaria em intervalos de tempo extramente pequenos.

Outra abordagem seria tal como usual no método dos volumes finitos (MVF), utilizando um acoplamento pressão-velocidade pode ser desenvolvido e resolvido pelo algoritmo SIMPLE, desenvolvido por Patankar e Spalding (1972). Entretanto, um maior tempo computacional seria necessário para a implementação dessa vertente.

Sendo assim, um conceito de compressibilidade artificial pode ser utilizado, onde fluídos incompressíveis são considerados como compressível por meio de uma equação de estado quasi-incompressível. Monaghan (1994) utilizou a pressão de Tait para a modelagem de escoamento de superfícies livre

$$p = B\left[\left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\lambda} - 1\right] \tag{61}$$

Onde λ é uma constante, usualmente adotada como 7 na maioria dos casos. ρ_0 é definido como uma massa específica de referência, enquanto *B* é um parâmetro que depende do problema. Para a maioria dos casos, *B* é adotado como a pressão inicial (MORRIS e MONAGHAN, 1997) (SCHLATTER, 1999)

Liu e Liu (2003) fornecem outra possibilidade para baixos números de Reynolds, no caso uma equação artificial de estado em função da velocidade do som c e da massa específica ρ

$$p = c^2 \rho \tag{62}$$

Entretanto, a velocidade do som deve ser escolhida cuidadosamente para garantir a eficiência e a precisão da solução. O valor da velocidade do som deve ser suficientemente alto para que o fluido seja considerado com quasi-incompressível, entretanto não devendo ser tão grande para que o incremento temporal seja tão proibitivo do ponto de vista computacional, como será discutido posteriormente. Monaghan (1994) afirma que, para a massa específica variar no máximo 1%, é preciso que o número de Mach seja menor que 0,1. Essa variação, mesmo que ínfima, se torna inevitável com o movimento das partículas, mas uma variação de 1% na massa específica ainda possui uma aproximação de Kernel satisfatória (MORRIS e MONAGHAN, 1997).

Percebe-se, portanto, que para a formulação quasi-incompressível, a equação de energia não se faz necessária para a determinação do campo de pressão. Dessa forma, para as análises subsequentes, o valor da energia interna não é tratado nesse trabalho. O mesmo não pode ser dito quando o fluído de trabalho é gasoso, uma vez que as formulações de pressões necessitam de duas propriedades intensivas. Assim, a temperatura está intimamente relacionada com a energia interna, sendo a massa específica e energia interna necessária para a determinação do campo de pressão.

Morris (1997) mostra que o quadrado da velocidade do som deve ser proporcional ao maior dos três valores

$$c^2 \sim \frac{V^2}{\delta}, \frac{\nu V}{L\delta}, \frac{FL}{\theta}$$
 (63)

Onde *F* é uma força de corpo por unidade de massa, *V* uma velocidade de referência, *L* um comprimento de referência, ν a viscosidade cinemática, ρ_0 a massa específica de referência, e θ definido por

$$\theta = \frac{\Delta \rho}{\rho_0} \tag{64}$$

5.3 INTEGRAÇÃO TEMPORAL

Por se tratar de um método explicito as equações discretas SPH podem ser integradas com qualquer método usual, como por exemplo, os métodos de Euler, Leap-Frog, corretor preditivo, Runge-Kutta ou outros. Entretanto, tendo em vista o número de interações necessárias entre partículas, é interessante a utilização de um método que não comprometa tanto o desempenho do programa e nem o resultado da simulação.

Dentre os métodos existentes, o mais simplista existente é o de Euler, correspondendo a aproximação da derivada por meio de uma diferença finita, isto é

$$\boldsymbol{a} = \frac{d\mathbf{v}}{dt} \approx \frac{\mathbf{v}(t + \Delta t) - \mathbf{v}(t)}{\Delta t}$$
(65)

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{x}}{dt} \approx \frac{\mathbf{x}(t + \Delta t) - \mathbf{x}(t)}{\Delta t}$$
(66)

Assim, para determinar a velocidade e a posição da partícula, basta reorganizar as equações 65 e 66

$$\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}(t) + \mathbf{a}\Delta t$$
(67)

$$\mathbf{x}(\mathbf{t} + \Delta \mathbf{t}) = \mathbf{x}(\mathbf{t}) + \mathbf{x}\Delta t$$
(68)

Entretanto, com esse método, a derivada apresenta uma precisão de primeira ordem, o que acaba sendo não desejável por conta de instabilidades: (PAIVA NETO, 2007) (CHAPRA, 2013)

$$\mathbf{x}(\mathbf{t} + \Delta \mathbf{t}) = \mathbf{x}(\mathbf{t}) + \mathbf{x}\Delta t + O(\xi^2)$$
(69)

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{\mathbf{x}(t + \Delta t) - \mathbf{x}(t)}{\Delta t} + O(\xi)$$
(70)

Em contra partida, um método alternativo que requer baixo armazenamento de memória e apresenta precisão de segunda ordem é o Leap-Frog. Como ao

Término do primeiro passo de tempo, as taxas de variação de massa específica, velocidade e energia são utilizadas para avançar as mesmas em metade do passo de tempo

$$t = t_0 + \Delta t$$

$$\rho_i \left(t_0 + \frac{\Delta t}{2} \right) = \rho_i(t_0) + \frac{\Delta t}{2} \frac{D\rho_i(t_0)}{Dt}$$

$$e_i \left(t_0 + \frac{\Delta t}{2} \right) = e_i(t_0) + \frac{\Delta t}{2} \frac{De_i(t_0)}{Dt}$$

$$\mathbf{v}_i \left(t_0 + \frac{\Delta t}{2} \right) = \mathbf{v}_i(t_0) + \frac{\Delta t}{2} \frac{D\mathbf{v}_i(t_0)}{Dt}$$

$$\mathbf{x}_i \left(t_0 + \frac{\Delta t}{2} \right) = \mathbf{x}_i(t_0) + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{v}_i(t_0 + \frac{\Delta t}{2})$$
(71)

Para que haja consistência em cada avanço de tempo subsequente, primeiramente deve-se prever a massa específica, velocidade e energia em metade do avanço de tempo para coincidir a posição

$$\rho_{i}(t) = \rho_{i}(t - \Delta t/2) + \frac{\Delta t}{2} \frac{D\rho_{i}(t - \Delta t)}{Dt}$$

$$e_{i}(t) = e_{i}(t - \Delta t/2) + \frac{\Delta t}{2} \frac{De_{i}(t - \Delta t)}{Dt}$$

$$\mathbf{v}_{i}(t) = \mathbf{v}_{i}(t - \Delta t/2) + \frac{\Delta t}{2} \frac{D\mathbf{v}_{i}(t - \Delta t)}{Dt}$$

$$(72)$$

Ao fim do subsequente avanço no tempo, as variáveis são avançadas no esquema Leap-frog convencional:

$$t = t + \Delta t$$

$$\rho_i \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right) = \rho_i (t - \Delta t/2) + \frac{\Delta t}{2} \frac{D\rho_i(t)}{Dt}$$

$$e_i \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right) = e_i (t - \Delta t/2) + \frac{\Delta t}{2} \frac{De_i(t)}{Dt}$$

$$\mathbf{v}_i \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right) = \mathbf{v}_i (t - \Delta t/2) + \frac{\Delta t}{2} \frac{D\mathbf{v}_i(t)}{Dt}$$

$$\mathbf{x}_i \left(t_0 + \frac{\Delta t}{2} \right) = \mathbf{x}_i (t) + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{v}_i (t_0 + \frac{\Delta t}{2})$$
(73)

Além disso, por se tratar de um método explicito, o esquema Leapfrog está sujeito à condição de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL), no qual a velocidade de propagação

numérica não deve exceder a velocidade de propagação física do problema. (LIU e LIU, 2003)

Para determinação do menor incremento de tempo possível, foi adotada a metodologia proposta por Morris (1997), na qual três condições devem ser respeitadas

$$\Delta t_1 \le \frac{0.25h}{c} \tag{74}$$

$$\Delta t_2 \le 0.25 \min\left(\frac{h}{f_a}\right)^{1/2} \tag{75}$$

$$\Delta t_3 \le 0,125 \left(\frac{h^2}{\nu}\right) \tag{76}$$

Onde f_a é a força específica da partícula, no caso aceleração. Assim, para que as três condições sejam satisfeitas simultaneamente, é necessário tomar como referência o menor incremento de tempo, isto é

$$\Delta t \le \min(\Delta t_1, \Delta t_2, \Delta t_3) \tag{77}$$

5.4 CONTROLE DE AGLUTINAÇÃO DE PARTÍCULAS

Para fazer com que partículas que estejam próximas movam-se com velocidades próximas, uma técnica desenvolvida por Monaghan (1989,1992) propõe a inserção da contribuição média das partículas vizinhas para o cálculo da velocidade das partículas. Essa técnica, denominada de XSPH, propõe que a velocidade das partículas seja corrigida por

$$\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \mathbf{v}_i - \varepsilon \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} \mathbf{v}_{ij} W_{ij}$$
(78)

Sendo ε uma constante que com variação de $0 \le \varepsilon \le 1$ e \mathbf{v}_i a velocidade da partícula, determinada da maneira convencional tratada anteriormente. Em seu trabalho, Liu e Liu (2003) informam que, para a maioria dos casos, o valor $\varepsilon = 0,3$ apresenta resultados satisfatórios para corrigir a aglutinação de partículas.

5.5 ADIMENSIONALIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE NAVIER-STOKES

Para a resolução dos problemas das cavidades em um âmbito mais geral, foi optada pela utilização das equações de Navier-Stokes em sua forma adimensional. Esse procedimento é importante para que se consiga realizar o mesmo problema em diversas escalas. Em outras palavras, conhecendo um conjunto de parâmetros para uma dada geometria, pode-se adimensionalizar os mesmos para que seja possível ampliar e reduzir a escala, conforme ilustrado na figura 11.





Por utilizar à formulação quasi-incompressível, a equação de energia é independente e não é parâmetro de entrada para nenhuma outra propriedade, portanto seu estudo não se faz necessário. Para a adimensionalização, os parâmetros utilizados estão listados na equação 79.

$$x^{*} = \frac{x}{L}$$

$$y^{*} = \frac{y}{L}$$

$$\mathbf{v}^{*} = \frac{\mathbf{v}}{U_{\infty}}$$
(79)

$$\rho^* = \frac{\rho}{\rho_0}$$
$$p^* = \frac{p}{\rho_0 U_\infty^2}$$
$$t^* = \frac{t U_\infty}{L}$$

Sendo L, U_{∞}, ρ_0 o comprimento, a velocidade e a massa específica característicos do problema. Sendo assim, adimensionalizando a equação de conservação de massa e energia, desconsiderando os efeitos da gravidade, tem-se

$$\frac{D\rho^*}{Dt^*} = -\rho^* \nabla \cdot \mathbf{v}^* \tag{80}$$

$$\rho^* \frac{D\mathbf{v}^*}{Dt^*} = -\frac{1}{\rho^*} \nabla \cdot p^* \overline{\mathbf{\delta}} + \frac{1}{Re} \nabla \cdot \left(\nabla \mathbf{v}^* + \nabla \mathbf{v}^{*\mathrm{T}} - \left(\frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{v}^*\right) \overline{\mathbf{\delta}} \right)$$
(81)

Comparando com as equações na forma dimensional, percebe-se que o fator Re^{-1} corresponde ao termo de viscosidade dinâmica μ . Portanto, em um código dimensional, para utilizá-lo na forma adimensional, basta ajustar o valor da viscosidade conforme o número de Reynolds desejado. Usando um procedimento semelhante para a equação quasi-incompressível da pressão, obtém-se

$$p^* = \frac{1}{Ma^2}\rho^* \tag{82}$$

Sendo o número de Mach Ma definido por:

$$Ma = \frac{\|\mathbf{v}\|}{c} \tag{83}$$

Novamente, comparando com a equação na forma dimensional, percebe-se que o termo Ma^{-2} equivale a c^2 . Em suma, para a utilização das equações na forma adimensional, basta o ajuste dos termos de viscosidade dinâmica μ e velocidade do som *c* para que funcionem como sendo o *Re* e *Ma*, respectivamente.

5.6 TRATAMENTO NA FRONTEIRA

5.6.1 FORÇA REPULSIVA

Devido ao truncamento próximo à fronteira, um grande esforço deve ser utilizado no tratamento das partículas localizadas no entorno da mesma. Para essas partículas, apenas as partículas localizadas em seu domínio ou em seu contorno devem ser utilizadas para a contribuição da representação da integral discretizada da função, uma vez que não existem partículas além da fronteira. Segundo Liu e Liu (2003), essa contribuição de apenas um dos lados não apresenta bons resultados, devido à interface sólida. Em outras palavras, apesar da velocidade ser nula nas superfícies, o mesmo não pode ser dito para outras propriedades, como a massa específica, por exemplo.

Recentemente, algumas proposições foram feitas para a melhora dessa problemática. Monaghan (1994) propõe a inserção de partículas virtuais na fronteira, exercendo uma força do tipo Lennard-Jones nas partículas reais

$$\boldsymbol{F} = D\left[\left(\frac{r_0}{r_{ij}}\right)^{n_1} - \left(\frac{r_0}{r_{ij}}\right)^{n_2}\right] \frac{\boldsymbol{x}_{ij}}{r_{ij}^2}$$
(84)

Nesse caso, D é uma constante com ordem de grandeza do quadrado da máxima velocidade, enquanto r_0 é o raio de corte. Os valores de n_1 e n_2 são usualmente iguais a 12 e 4, respectivamente. Pode-se escrever apenas o módulo da força por unidade de massa como sendo

$$F = \frac{D}{r_{ij}} \left[\left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{n_1} - \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{n_2} \right]$$
(85)

Para poder analisar de uma maneira mais ampla, optou-se por adimensionalizar a força e os seus parâmetros. Dessa forma, a força adimensional adotada é dada por

$$F^* = \frac{F}{U_{\infty}^2/L} \tag{86}$$

Substituindo a relação 85 na equação 86, tem-se

$$F^* = \frac{LD}{U_{\infty}^2 r_{ij}} \left[\left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{n_1} - \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{n_2} \right]$$
(87)

Assim, dois novos parâmetros adimensionais são criados, envolvendo a distância entre as partículas e a constante de Lennard-Jones:

$$r_{ij}^* = \frac{r_{ij}}{L} \tag{88}$$

$$D^* = \frac{D}{U_{\infty}^2} \tag{89}$$

Outro parâmetro que pode ser adimensionalizado é o raio de corte, definido como

$$r_0^* = \frac{r_0}{L}$$
(90)

Portanto, a equação 87 pode ser reescrita como sendo

$$F^* = \frac{D^*}{r_{ij}^*} \left[\left(\frac{r_0^*}{r_{ij}^*} \right)^{n_1} - \left(\frac{r_0^*}{r_{ij}^*} \right)^{n_2} \right]$$
(91)

Para analisar de maneira mais clara, pode-se criar uma variável R tal que

$$R = \frac{r_{0}^{*}}{r_{ij}^{*}}$$
(92)

Dessa forma, a equação 91 pode ser alterada na forma

$$F^* = \frac{RD^*}{r_0^*} [R^{n_1} - R^{n_2}]$$
(93)

Entretanto, quando a distância entre as partículas se aproxima de zero, a razão *R* tende a infinito. Além disso, quando R > 1, a força de Lennard-Jones teria sua inversão de sentido. Para valores da razão *R* acima de 1, ou seja a distância entre as partículas é igual ou superior a distância de corte, a força de interação teria um crescimento de atração muito forte. Por esse motivo, é definido que a força repulsiva é nula para razões *R* superiores a 1, como mostrado na figura 12.

Figura 12 - Variação da força de Lennard-Jones para $RD^*/r_0^* = 1$



Portando, com a adimensionalização da força, a metodologia poderá ser exportada para qualquer escala, como será mostrado posteriormente nos casos de aplicações.

5.6.2 REFLEXÃO DE PARTÍCULAS

Outra condição de contorno que pode ser implementada é a reflexão de partículas mediante a uma fronteira. Nesse algoritmo, primeiramente a nova posição da partícula é calculada sem a presença de um obstáculo. Caso a partícula atravesse a fronteira, deve-se determinar o ponto P no qual a intercepta. Em seguida, deve-se determinar a distância d entre a partícula e a reta tangente à fronteira no ponto P. Finalmente, a partícula é espelhada pela distância d em relação à reta tangente, conforme ilustrado pela figura 13.



Figura 13 - Algoritmo de reflexão de partículas

Nessas condições, as novas componentes do vetor velocidade serão:

Componente normal

$$\boldsymbol{n} \cdot \mathbf{v}_{t+\Delta t} = -\xi \boldsymbol{n} \cdot \mathbf{v}_{t+\Delta t}^{\prime}$$
(94)

Componente tangencial

.

$$\boldsymbol{t} \cdot \boldsymbol{v}_{t+\Delta t} = \boldsymbol{t} \cdot \boldsymbol{v}_{t+\Delta t} \tag{95}$$

n é definido como o vetor normal unitário à reta tangente, e t como o vetor tangente unitário a curva e ξ perdas devido ao impacto. Além disso, o mesmo procedimento deve ser feito com a aceleração da partícula.

6 METODOLOGIA

A metodologia adotada ao problema das cavidades consiste no estudo e aplicação do código desenvolvido por Liu e Liu (2003) e aprimorado adicionando uma nova condição de contorno reflexiva, em Fortran 77,. Por se tratar de um código aberto, a mudança e a inserção de subrotinas se tornam mais simples. Dessa forma, a metodologia de solução do problema pode ser definida através do fluxograma do programa, ilustrado na figura 14.

No módulo inicial, é definida a distribuição inicial de partícula, condições de contorno, condições iniciais e propriedades do fluido. Em seguida, começa uma varredura no tempo. Em cada instante de tempo, é determinado os pares que interagem entre si. A função suave utilizada foi o *Spline* cúbico. Quanto à conservação da massa, foi utilizada a formulação normalizada, visando à diminuição de oscilações dos valores da massa específica. Depois, são determinadas as taxas de variação e feita a correção da velocidade pelo método XSPH.

Figura 14 - Fluxograma do programa



De forma a generalizar o resultado, independentemente do fluido de trabalho utilizado, optou-se pela solução do problema adimensional, tornando-se mais simples a exportação dos resultados para quaisquer escalas de estudo desejadas. O conjunto base de equações utilizadas nessa formulação foi:

Tabela 3 - Conjunto de equações para a resolução do problema da cavidade

I. Conservação de massa:

$$\rho_i = \frac{\sum_{j=1}^N m_j W_{ij}}{\sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} W_{ij}}$$

II. Conservação do momento:

$$\frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} = \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2}\right) \nabla_i W_{ij} + \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{\mu \overline{\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}}_i}{\rho_i^2} + \frac{\mu \overline{\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}}_j}{\rho_j^2}\right) \cdot \nabla_i W_{ij}$$

Quanto ao tipo de função suave empregada, optou-se pela utilização do *Spline* cúbico (equação 23), por ser próxima à representação de Gauss e por ser segmentada em trechos.

Além dos estudos mencionados na revisão bibliográfica, uma segunda fonte de comparação foi tomada utilizando o método dos volumes finitos com o programa *Fluent* (ANSYS® Academic Research, Release 16.2). As propriedades do escoamento são definidas na tabela:

Propriedade	
Massa específica adimensional inicial (ρ^*)	1
Reynolds (Re)	1
Mach (Ma)	0,1

Tabela 4 - Propriedades do escoamento - cavidade quadrada adimensional

Quanto à geometria e as condições de contorno, a cavidade apresenta os seguintes valores:

Propriedade	Valor
Comprimento adimensional	1
Velocidade adimensional - Borda superior	1

Tabela 5 - Parâmetros da cavidade

Por se tratar de um escoamento laminar, nenhum modelo de turbulência se faz necessário.

Para o modelo em volumes finitos, uma malha estruturada quadrilátera foi feita, com um total de 1600 elementos, conforme a imagem mostrada na figura 15.



Figura 15 - Criação da malha estruturada com 1600 elementos

Para análise dos resultados, os isocontornos de velocidade bem como as linhas de corrente que cortam o seguimento de reta $x^* = 0.5$ são mostrados nas figuras 16 e 17.









6.1 DISCRETIZAÇÃO DA GEOMETRIA

Para realizar a mesma simulação com o método SPH, o domínio da geometria foi discretizado com 40 x 40 partículas, com espaçamento igual em x^* e em y^* (0,025), tal como mostrado na figura 18:





Para a representação do contorno, foram utilizadas 320 partículas virtuais, apresentando o mesmo espaçamento das partículas do domínio.

6.2 ANÁLISE DE TRATAMENTO NA FRONTEIRA

Para estabelecer o melhor tratamento na fronteira, tanto a condição de força repulsiva quanto a reflexiva foram testadas e comparadas com os resultados presentes no trabalho de Liu e Liu (2003) e com simulação numérica realizada no *Fluent* ®. Quanto à comparação, foram utilizados os perfis de velocidades centrais para validação, isto é:

- V_x^* para $y^* = 0.5$
- V_y^* para $x^* = 0.5$

Para a condição de força repulsiva, foram determinados os valores das constantes adimensionais de força através do caso padrão tratada por Liu e Liu (2003), cuja metodologia é detalhada no apêndice. Os valores referentes às propriedades da força são mostrados na tabela 6 e figura 19.

Propriedade adimensional	Valor
r_0^*	0,0125
D^*	10 ⁴
r_{ij}^*	0,025

Tabela 6 - Propriedade da força repulsiva



Figura 19 - Localização inicial da força repulsiva

Já para a condição de contorno reflexiva, é necessária apenas a definição da normal de cada uma das superfícies, para que seja possível a reflexão das grandezas físicas vetoriais, como mostrado na figura 20.



Figura 20 - Vetores normais ao contorno

7 RESULTADOS

7.1 AVALIAÇÃO DOS RESULTADOS PARA REYNOLDS 1

Ao executar a simulação, nos primeiros instantes de tempos ($\Delta t^* = 5, 0 \cdot 10^{-6}$), percebe-se um fenômeno numérico que não representa o comportamento do físico do problema, independente do tratamento das partículas próximas à fronteira. Nota-se uma explosão das partículas, partindo das extremidades para o centro, e em seguida o rearranjo particular. Esse fenômeno ilustrado na figura 21 pode ser explicado pela inicialização do campo de pressão e a organização simétrica das partículas, fazendo com que as partículas localizadas próximas ao contorno sejam impelidas para o centro.





Em seguida, as partículas se rearranjam, se aproximando à condição de regime permanente, conforme mostrado nas figuras 22 e 23:



Figura 22 - Evolução das linhas de corrente

Após 90000 iterações, percebe-se que a forma do escoamento tende a um comportamento característico, com a formação de vórtices centrados em $x^* = 0.5$, tal como esperado em outros estudos do mesmo caso. As linhas de corrente para ambos os casos de estudos são mostradas na figura 23:



Figura 23 - Linhas de corrente -: (A) Reflexão - (B) Força repulsiva

Para melhor exploração do campo de velocidade, foi desenvolvida uma subrotina para escrita de um arquivo de saída no formato Tecplot, sendo possível avaliar o domínio no programa gratuito *Paraview*, como mostrado na figura 24.



Figura 24 - Velocidade das partículas: reflexão - Paraview (90000 iterações)

Para avaliação dos resultados de ambas as metodologias, os perfis de velocidades centrais, isto é V_x^* para $x^* = 0,5$ e V_y^* para $y^* = 0,5$, foram comparados à simulação em volumes finitos e o resultado apresentado por Liu e Liu (2003), conforme as figuras 25 e 26.



Figura 25 - Perfil de velocidade V_x^* para $x^* = 0.5 - Re = 1$



Figura 26 - Perfil de velocidade V_{y}^{*} para x = 0.5 - Re = 1

Os erros absolutos de ambos os tratamentos foram estudados para se concluir qual seria a melhor metodologia a se explorar para os próximos estudos. As figuras 27 e 28 abaixo mostram os valores dos desvios para as duas velocidades centrais.



Figura 27 - Erro absoluto V_x^* para força repulsiva e reflexão – (Ghia *et al*, 1982)



Figura 28 - Erro absoluto V_{ν}^* para força repulsiva e reflexão – (Ghia *et al* ,1982)

De maneira geral, os maiores desvios entre os modelos SPH e os estudo de Ghia, Ghia e Shin (1982) se apresentam no perfil de velocidade V_x^* . Por apresentar menores erros, o modelo de reflexão se mostrou mais satisfatório em relação ao modelo utilizando força repulsiva. Além disso, o modelo de força repulsiva necessita de modificações sempre que é modificado o nível discretização do domínio, o que não é necessário quando se utiliza uma reflexão de partículas.

7.2 ANÁLISE PARA NÚMERO DE REYNOLDS SUPERIORES

Utilizando o modelo reflexivo, diferentes números de Reynolds são investigados, comparando com diferentes trabalhos realizados. De maneira análoga, foram levantadas as curvas referentes aos perfis de velocidade $V_x^* \in V_y^*$ ·para $x^* = 0,5$ e $y^* = 0,5$ respectivamente.

7.2.1 CAVIDADE PARA REYNOLDS 10

Para a comparação da simulação SPH, foram utilizados os trabalhos de Marques e Doricio (2006). Após 120000 iterações, com $\Delta t^* = 5,0 \cdot 10^{-6}$, atingiu-se os perfis descritos nas figuras 29 e 30:



Figura 29 - Perfil de velocidade V_y^* para $x^* = 0.5 - Re = 10$

Figura 30 - Perfil de velocidade V_y^* para $x^* = 0.5 - Re = 10$



Para melhor comparação, os resultados foram detalhados na tabela 7 e 8.

y *	V_x^* - Marques e Dorício (2006)	Perfil V_x^* * - reflexão	Erro relativo - reflexão (%)
0,074	-0,044	-0,0353	19,77
0,124	-0,066	-0,0538	18,48
0,173	-0,086	-0,0693	19,42
0,224	-0,106	-0,0839	20,85
0,274	-0,124	-0,0973	21,53
0,325	-0,144	-0,1102	23,47
0,377	-0,164	-0,1222	25,49
0,428	-0,176	-0,1323	24,83
0,452	-0,184	-0,136	26,09
0,479	-0,188	-0,1389	26,12
0,53	-0,19	-0,1394	26,63
0,581	-0,184	-0,1302	29,24
0,631	-0,16	-0,1069	33,19
0,683	-0,114	-0,0637	44,12
0,733	-0,038	-0,0016	95,79
0,759	0,002	0,0405	1925,00
0,785	0,062	0,092	48,39
0,835	0,21	0,2272	8,19
0,861	0,302	0,3188	5,56
0,883	0,402	0,4058	0,95
0,925	0,588	0,5998	2,01

Tabela 7 - Tabela de desvios do perfil $V_x^* - Re = 10$

Tabela 8 - Tabela de desvios do	perfil $V_y^* - Re = 10$
---------------------------------	--------------------------

x *	<i>V</i> [*] _y - Marques e Dorício (2006)	Perfil V_y^* - reflexão	Erro relativo - reflexão (%)
0,9475	0,143	-0,0509	135,6
0,9215	0,161	-0,0688	142,7
0,8975	0,167	-0,0815	148,8
0,8463	0,164	-0,0978	159,6
0,7925	0,122	-0,1004	182,3
0,73	0,061	-0,0879	244,1
0,67	0,019	-0,0646	440,0
0,6113	-0,041	-0,0345	15,9
0,5525	-0,092	0,0006	100,7
0,4938	-0,134	0,0384	128,7
0,4363	-0,172	0,0754	143,8
0,3488	-0,186	0,1266	168,1
0,2613	-0,173	0,166	196,0
0,23	-0,14	0,1745	224,6
0,2013	-0,107	0,1766	265,0

Assim, de acordo com as tabelas 7 e 8, percebe-se um maior desvio próximo à região central dos vórtices. A figura 31 mostra os vetores de velocidade de todas as partículas para Re = 10.





Em relação ao estudo de caso anterior, perceberam-se mais instabilidades e explosões próximas ao ponto (1,1) no contorno, com maior quantidade de partículas em relação ao estudo com Re = 1.

7.2.2 CAVIDADE PARA REYNOLDS 100

Ao se trabalhar número de *Reynolds* igual a 100, notaram-se problemas quanto à formação dos vórtices na cavidade. Para diminuir o tempo de simulação, o número de *Mach* foi aumentado para 0,15. Assim, foi possível utilizar um passo de tempo de $\Delta t = 5,0 \cdot 10^{-5}$. Após 4000 iterações,os perfis obtidos estão ilustrados nas figuras 32 e 33.



Figura 32 - Perfil de velocidade V_y^* para $x^* = 0.5 - Re = 10$

Figura 33 - Perfil de velocidade V_y^* para $x^* = 0.5 - Re = 10$



Novamente, a tabela 9 apresenta os desvios entre o valor encontrado por Ghia *et al.* (1982) e os atuais, utilizando o método SPH.

y *	<i>V</i> _x [*] - Ghia e <i>t al.</i> (1982)	Perfil V_x^* * - reflexão	Erro relativo - reflexão (%)
0,0625	-0,0419	-0,04	4,53
0,0703	-0,0478	-0,0454	5,02
0,1016	-0,0643	-0,0632	1,71
0,1719	-0,1015	-0,0886	12,71
0,2813	-0,1566	-0,1115	28,80
0,453	-0,2109	-0,1433	32,05
0,5	-0,2058	-0,1522	26,04
0,6172	-0,1364	-0,1559	14,30
0,7344	0,0033	-0,0234	809,09
0,8516	0,2315	0,3088	33,39
0,953	0,6872	0,7091	3,19
0,9609	0,7372	0,7528	2,12
1	1	1	0,00

Tabela 9 - Tabela de desvios do perfil $V_{\chi}^* - Re = 100$

Tabela 10 - Tabela de desvios do perfil $V_x^* - Re = 100$

<i>x</i> *	<i>V</i> [*] _y - Ghia e <i>t al.</i> (1982)	Perfil V_y^* - reflexão	Erro relativo - reflexão (%)
0	0	0	
0,0703	0,1009	0,0933	7,53
0,0781	0,1089	0,1064	2,30
0,0938	0,1232	0,1315	6,74
0,1563	0,1608	0,1913	18,97
0,2266	0,1751	0,1763	0,69
0,2344	0,1753	0,1719	1,94
0,5	0,0545	-0,0038	106,97
0,8047	-0,2453	-0,157	36,00
0,8594	-0,2245	-0,1482	33,99
0,9063	-0,1691	-0,1087	35,72
0,9453	-0,1031	-0,0595	42,29
0,9531	-0,0886	-0,0474	46,50
0,9609	-0,0739	-0,0353	52,23
1	0	0	
7.3 EFEITO DO NÚMERO DE MACH NA SOLUÇÃO

Após a mudança do número de *Mach* para o caso de Re = 100, optou-se por avaliar a influencia dele em relação à solução do problema. Foram feitas simulações e analisados os perfis de velocidade, considerando três situações: Ma = 0,1; 0,14 e 0,2, como mostrado nas figuras 34 e 35.

Figura 34 - Comparativo do perfil de Velocidade V_x^* para $x^* = 0.5 - Re = 1$





Figura 35 - Comparativo perfil de velocidade V_y^* para $y^* = 0.5 - Re = 1$

Nota-se que o número de *Mach* atua como um mecanismo de ajuste da curva, com pequenas oscilações para o perfil V_x^* , mas com grandes defasagens para o perfil V_x^* . Apesar de Monaghan (1994) mencionar sobre os problemas para *Ma* superiores a 0,1, ao utilizar a equação da massa específica normalizada, os problemas de oscilações da massa específica não existiram. Assim, o único cuidado necessário seria a utilização de *Ma* inferior a 0,3.

7.4 ANÁLISE PARA CAVIDADE COM RAZÃO DE ASPECTO 1:2

Depois de realizadas as simulações das cavidades quadradas, foi investigado o comportamento para uma cavidade retangular, onde a altura é metade da largura, como mostrado na figura 36.

Figura 36 - Cavidade retangular



De forma análoga, os parâmetros da cavidade retangular adimensional foram definidos na tabela 11,

	<u> </u>	~ 1		
Tahela 11	- Confidua	racao da	cavidade	retandular
	- Connigui	açao da	Caviadae	rotangular
	0	2		0

Propriedade	Valor
Comprimento adimensional (horizontal)	1
Velocidade adimensional - Borda superior	1

Para a comparação de resultados, foram realizadas simulações com programa *Fluent*®, com um total de 800 elementos, como mostrado na figura 37:

Figura 37 - Malha para cavidade retangular



7.5 CAVIDADE RETANGULAR PARA REYNOLDS 1

Além da avaliação para uma cavidade quadrada, decidiu-se analisar uma cavidade com razão de aspecto de 1:2. Uma vez não encontrados trabalhos para a simulação de cavidades com essa proporção, optou-se pela comparação com simulações numéricas utilizando o método dos volumes finitos. Utilizando a malha mostrada na figura 37 e utilizando 5000 passos de tempos, com incrementos variados, atingiu-se a configuração mostrada na figura 38.



Figura 38 - Isocontorno de velocidade para Re = 1

Em seguida, foi realizada a simulação SPH, considerando um total de 800 partículas e $\Delta t^* = 5,0 \cdot 10^{-5}$. Com as propriedades definidas na tabela 12, encontraram-se as configurações mostradas nas figuras 39, 40 e 41:

Propriedade	Valor
Massa específica adimensional inicial (ρ^\ast)	1
Reynolds (<i>Re</i>)	1
Mach (<i>Ma</i>)	0,14

Tabela 12 - Propriedades do escoamento - cavidade retangular adimensional

Figura 39 - Linhas de corrente após 6000 Passos – Cavidade retangular





Figura 40 - Perfil V_x^* para $x^* = 0.5 - Re = 1$ - Cavidade Retangular





De forma análoga à cavidade quadrada, foi notado um desvio maior referente ao perfil de velocidade. Quanto aos vórtices formados, nota-se uma estabilidade nas linhas de corrente.

7.6 CAVIDADE RETANGULAR PARA REYNOLDS 50

Outra configuração testada para a cavidade com razão de aspecto 1:2 foi considerando Re = 50. O número de Mach foi mantido o mesmo da simulação anterior, isto é, Ma = 0,14.

Utilizando $\Delta t^* = 5,0 \cdot 10^{-5}$, a configuração atingida após 2500 iterações é mostrada nas figuras 42, 43 e 44.







Figura 43 - Perfil V_x^* para $x^* = 0.5 - Re = 50$ - Cavidade retangular

Figura 44 - Perfil V_y^* para $y^* = 0,25 - Re = 50$ - Cavidade retangular



Para essa condição, notou-se uma maior proximidade em relação aos dados simulados utilizando o método dos volumes finitos.

8 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho é exposto o problema de mecânica dos fluidos da cavidade bidimensional adimensional. Para a solução do problema em questão, é utilizado o método numérico Smoothed Particle Hydrodynamics, (SPH), discutindo sobre as suas principais formulações, métodos de solução, vantagens, desvantagens, validações e limites de aplicações.

Para a solução do problema, utilizou-se como base um código Fortran 77 desenvolvido por Liu e Liu (2003), incrementando uma condição de contorno reflexiva. Essa condição obteve certa vantagem em relação à força repulsiva de Lennard – Jones, proposta originalmente no código.

Após diversas análises e discussões, observa-se que a aplicabilidade do método SPH para o estudo de escoamentos com baixos números de Reynolds é satisfatória, tanto para a cavidade quadrada quanto para cavidade com razão de aspecto 1:2. Sua capacidade de dar representatividade ao fenômeno físico é colocada à posta, através de comparações com estudos previamente realizados.

Outro ponto importante a ser mencionado é o papel do número de *Mach* na simulação. Percebeu-se que, para o mesmo número de Reynolds, ele atua como um elemento de ajuste da curva, sendo capaz de diminuir o tempo para se chegar a um estado próximo ao escoamento característico do problema. De forma indireta, ele atua no campo de pressão, que por sua vez atua na formação dos vórtices. Para a relação convergência e representatividade dos resultados, deve-se trabalhar com um valor entre 0,1 e 0,25, respeitando o limite de um escoamento subsônico (Ma = 0,3).

Como problemas identificados estão: a concentração de partículas próximas à quina direita superior, causando instabilidade em todo o escoamento e o gradiente do campo de pressão próximo às fronteiras. Este último é explicado devido ao truncamento da função de Kernel nessa região, portando acaba causando um gradiente muito forte próximo ao contorno, apesar do campo de pressão ser constante. Ambos os problemas influenciam diretamente a qualidade da solução obtida, sendo necessária cautela na escolha de parâmetros e atenção para evitar grandes explosões.

Uma alternativa para diminuir os problemas relacionados ao truncamento é utilizar mais partículas fantasmas (Orger, 2006) ou ainda outros modelos de recuperação de consistências do SPH, como as variantes NCSPH, CSPH ou MSPH.

Para solução de problemas de aglomeração de partículas, duas vertentes podem ser trabalhadas: utilização do método de reinicialização dos pontos ou aplicar pequenos deslocamentos às partículas, ambos funcionando como um filtro após uma quantidade de iterações. O primeiro método visa retirar as partículas que se aglutinam em um determinado ponto, através de um procedimento dual Langrangiano - Euleriano. Já o segundo método visa justamente a quebra de simetria, uma das causas da grande variação do gradiente de pressão.

Portanto, esse trabalho mostra que o SPH é uma boa ferramenta para a descrição do fenômeno da cavidade bidimensional adimensional, para Reynolds inferiores a 100 e razões de aspecto inferiores a um.

9 **BIBLIOGRAFIA**

ALIMI, J. M. et al. Smooth particle hydrodynamics : importance of correction terms in adaptative resolution algorithms. **Journal of Computational Physics**, p. 157–174, 2003.

ANSYS® ACADEMIC RESEARCH, R. 1. 2. Fluent.

AYDIN, M.; FENNER, T. Boundary element analysis of driven cavity flow for low and moderate Reynolds numbers. **International Journal for Numericalal Methods in Fluids**, v. 37, p. 45-64, 2001.

BENZ, W. **Smoothed Particle Hydrodynamics:** A Review. Les Arcs, France: NATO Workshop, 1989.

BENZ, W. **Smoothed Particle Hydrodynamics:** A review In Numerical Modeling of Non-linear Stellar Pulsation: Problems and Prospects. Boston: Kluwe rAcademic, 1990.

CHAPRA, S. C. **Métodos numéricos aplicados com MATLAB para engenheiros** e cientistas. 3^a. ed. Porto Alegre, RS: AMGH, 2013. 655 p.

CHEN, J. K.; E, B. J.; T.C., C. A corrective smoothed particle method for boundary value problems in heat conduction. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 46, p. 231-252, julho 1999.

CHEN, M.; HUNG, K. C. Vortex structure of steady flow in a rectangular cavity. **Computers & Fluids**, v. 35, p. 1046-1062, dez 2006.

EVRARD, A. E. Beyond N-Body:3D cosmological gas dynamics. **Monthly Notices of the Royal Astronomical Society**, Cambridge, 1988. 235:911.

FRIGO, L. M. Simulação Numérica de escoamentos Incompressíveis Tridimensionais Turbulentos e em Transição. UNESP. Ilha Solteira, p. 139. 2004.

GHIA, U.; GHIA, N.; SHIN, C. T. High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multi-Grid Method. **Journal of Computational Physics**, v. 48, p. 387-411, 1982.

GINGOLD, R. A.; MONAGHAN, J. J. Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars., 181, 1977. 375-389.

KATZ., L. H. A. N. Treesph : a unification of SPH with the hierarchical tree method. **The astrophysical journal supplement series**, 70, 1989. 419–446.

LATTANZIO, J. C.; MONAGHAN J.J., P. H. . S. M. P. Controlling Penetration. **SIAM** Journal on Scientific and Statistical, 1986.

LIU G. R., G. Y. T. An Introduction to Meshfree Methods and Their Programming Reference. Dordrecht: Springer, 2005.

LIU, G. R.,; LIU, M. B. **Smoothed Particle Hydrodynamics, a meshfree particle method**. Singapura: World Scientific Publishing, 2003.

LIU, G. R.; GU, Y. T. Boundary mesh free methods based on the boundary point interpolation methods. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, v. 28, p. 475-487, 2004.

LIVEMORE SOFTWARE TECHNOLOGY CORPORATION. Simulation numérique et dynamique transitoirenon-linéaire - La méthode S.P.H. Smoothed Particle Hydrodynamics. [S.I.]: [s.n.], 2007.

LUCY, L. B. Numerical approach to testing the fission hypothesis. **Astronomical Journal**, v. 82, p. 1013 - 1024, 1977.

MARQUES, A. C. H.; DORICIO, J. L. O Problemada Cavidade Bidimensional: Solução do Fluxo Incompressíveis Através do Método de Volumes Finitos e Meshless. **XXVIII Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computac**, São Paulo, 2006.

MENDES, M. L. Utilização o do Método da Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas Aplicado à Resolução de Problemas Eletromagnéticos. Belo Horizonte, p. 74. 2010. Dissertação (Mestrado em Engenharia Elétrica) - Universidade Federal de Minas Gerais.

MICHEL, Y. Phenomene D'impact A Haute Vitesse Sur Cibles Minces Fragiles-Application Au Projet De Laser Megajoule Et A La Problematique Des Debris Spatiaux. Toulouse: Université Toulouse III - Paul Sabatier, 2007.

MONAGHAN, J. J. An introduction to SPH. **Computer Physics Communications**, v. 48, p. 89-96, 1988.

MONAGHAN, J. J. On the problem of penetration in particle methods. **Journal of Computational physics**, v. 82, p. 1-15, 1989.

MONAGHAN, J. J. Smoothed Particle Hydrodynamics. **Annual Review of Astronomical and Astrophysics**, 1992. ISSN 543-574.

MONAGHAN, J. J. **Heat conduction with discontinuous conductivity**. Applied Mathematics Reports and Preprints, Monash University. Melbourne. 1995.

MORRIS, P. J.; MONAGHAN, J. J. A Switch to Reduce SPH Viscosity. **Journal of Computational Physics**, v. 136, p. 41-50, 1997.

NUNES PINTO, W. J. Aplicação do método lagrangiano SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) para a solução do problema das cavidades. UFES. Vitória, p.

129. 2013. 129 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) - Universidade Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico.

ORGER, G. Aspects théoriques de la méthode SPH et applications à l'hydrodynamique à surface libre. Nantes. 2006.

PAIVA NETO, A. **Uma abordagem Lagraneana Para simulação de fluidos viscoplásticos e multifásicos**. Rio de Janeiro: Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2007. 84 p. Tese (Doutorado em Matemática Aplicada) - Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada.

PAPALOIZOU, R. N. A. J. Variable smoothing lengths and energy conservation in smoothed particle hydrodynamics. **Monthly Notices of the Royal Astronomical Society**, Londres, 270, 1994. 1–20.

PATANKAR, S. V.; SPALDING, B. D. A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three-Dimensional Parabolic Flows. **Int. J. Heat Mass Transfer**, v. 15, p. 1787-1806, Outubro 1972.

PATIL, D. V.; LAKSHMISHA, K. N.; ROGG, B. Lattice Boltzmann simulation of liddriven flow in deep cavities. **Computers & Fluids**, v. 35, p. 1116-1125, 2006.

PATINO-NARINO, E. A.; FERREIRA, F. O. S. Implementação do Método Smoothed Particle Hydrodynamics para Modelagem de Escoamento de Fluido Interagindo com Estrutura. Lisboa: Congresso de Métodos Numéricos em Engenharia, 2015.

RANDLES, P. W.; LIBERSKY, L. D. Smoothed particle hydrodynamics: some recent improvements and applications. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 138, p. 375-408, Dez 1996.

SCHLATTER, B. **Modeling Fluid Flow Using Smoothed Sarticle Hydrodynamics**. Oregon State University. Corvallis. 1999.

TREESPH, L. H. A. N. K. a unification of SPH with the hierarchical tree method. **Astrophysical Journal Supplement Series**, v. 70, p. 419-446, 1989.

VON NEUMMAN, J.; D., R. R. A Method fo the Numerical Calculation of Hydrodynamic shocks. **Journal of Applied Physics**, v. 21, p. 232-247., 1950.

WHITE, F. M. Viscous Fluid Flow. 3^a. ed. New York: McGraw-Hill, 2000.

10 APÊNDICE

10.1 CONSISTÊNCIA DO MÉTODO SPH

Um importante parâmetro para definir quão boa uma aproximação de uma função é denominado de *ordem de consistência*. Se um método reproduz com exatidão uma função constante, ele é dito de consistência C^0 . Caso represente com exatidão um polinômio de grau 1, o método é dito de consistência C^1 e assim por diante. O método de aproximação torna-se mais robusto a medida que o grau de consistência aumenta (MENDES, 2010)

Dessa maneira, uma discussão acerca da consistência do método SPH deve ser feita em duas formas: A primeira trata-se aproximação da função suave, aproximando-a da função Delta de Dirac na representação integral da função. A segunda trata-se na aproximação por partículas, já na etapa de integração. A avaliação é feita nas seções subsequentes. (MENDES, 2010)

10.1.1 CONSISTÊNCIA NA REPRESENTAÇÃO INTEGRAL

Primeiramente, para que a aproximação SPH tenha ordem de consistência zero, é necessário que ela seja capaz de reproduzir uma função constante. Assim, a seguinte função constante é definida:

$$u(x) = c \tag{96}$$

Logo, aplicando a representação integral da função:

$$\int_{\Omega} u(\boldsymbol{\zeta}) W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\zeta}, h) \, d\boldsymbol{\zeta} = c$$
$$\int_{\Omega} c W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\zeta}, h) \, d\boldsymbol{\zeta} = c$$
$$c \int_{\Omega} W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\zeta}, h) \, d\boldsymbol{\zeta} = c$$

$$\int_{\Omega} W(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\zeta},h)\,d\boldsymbol{\zeta}=1$$

Portanto, a aproximação satisfaz a ordem de consistência C^0 , desde que satisfaça todas as condições das funções suave.

Em seguida, deve-se verificar a consistência C^1 . Para isso, a aproximação integral da função deverá ser capaz de reproduzir uma função linear da forma:

$$u(x) = c_1 x + c_0 (97)$$

Portanto:

$$\int_{\Omega} u(\boldsymbol{\zeta}) W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\zeta}, h) \, d\boldsymbol{\zeta} = c_1 x + c_0$$
$$\int_{\Omega} (c_1 \boldsymbol{\zeta} + c_0) W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\zeta}, h) \, d\boldsymbol{\zeta} = c_1 x + c_0$$

$$c_1 \int_{\Omega} \zeta W(\boldsymbol{x} - \zeta, h) \, d\zeta + c_0 \int_{\Omega} W(\boldsymbol{x} - \zeta, h) \, d\zeta = c_1 \int_{\Omega} \zeta W(\boldsymbol{x} - \zeta, h) + c_0 \tag{98}$$

Assim, pela definição:

$$\int_{\Omega} \zeta W(x-\zeta,h) d\zeta = x$$
(99)

Portando, a relação é demonstrada:

$$c_1 \int_{\Omega} \boldsymbol{\zeta} W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\zeta}, h) \, d\boldsymbol{\zeta} + c_0 \int_{\Omega} W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\zeta}, h) \, d\boldsymbol{\zeta} = c_1 x + c_0 \tag{100}$$

Demonstrações similares podem ser reproduzidas para casos de ordem superiores

10.1.1.1 Consistência da aproximação por partículas

Liu e Liu (2003) mostram que toda discussão anterior não garante obrigatoriamente a consistência para a aproximação por partículas. As condições de consistências C^0 e C^1 para partículas são dadas por:

$$\sum_{j=1}^{N} W(x - x_j h) \Delta x_j = 1$$
 (101)

$$\sum_{j=1}^{N} (x - x_j) W(x - x_j h) \Delta x_j = 0$$
 (102)

Entretanto, um problema é encontrado próximo ao contorno, devido ao truncamento da função na fronteira, como mostrado na figura 45. Assim, a condição de consistência discreta não é mais garantida, fazendo com que a equação 15 seja menor do que 1.

Figura 45 - Truncamento da função suave próximo a uma fronteira



Fonte: Liu e Liu (2003) -Adaptado

Outro problema que está relacionado à consistência discreta é a distribuição não uniforme das partículas, que mesmo para as partículas interiores, a consistência $C^0 \in C^1$ não é garantida.

Para resolver esse problema, algumas aproximações já foram desenvolvidas. Uma aproximação geral, proposta por Liu e Gu (2003), escreve a aproximação de partícula de ordem k de consistência pela seguinte equação:

$$W(x - x_j, h) = b_0(x, h) + b_1(x, h) \left(\frac{x - x_j}{h}\right) + b_2(x) \left(\frac{x - x_j}{h}\right)^2 + \cdots.$$
 (103)

$$W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_{\boldsymbol{j}}, h) = \sum_{l=1}^{k} b_l(\boldsymbol{x}, h) \left(\frac{\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_{\boldsymbol{j}}}{h}\right)^l$$
(104)

Após discretizar as equações de ordem de consistência, substituindo a equação 104 nas equações 101 e 102, têm-se:

$$\sum_{j=1}^{N} \left[\sum_{l=1}^{k} b_l(x,h) \left(\frac{x-x_j}{h}\right)^l\right] \Delta x_j = 1$$
$$\sum_{j=1}^{N} \frac{x-x_j}{h} \left[\sum_{l=1}^{k} b_l(x,h) \left(\frac{x-x_j}{h}\right)^l\right] \Delta x_j = 0$$
$$\vdots$$
$$\sum_{j=1}^{N} \left(\frac{x-x_j}{h}\right)^k \left[\sum_{l=1}^{k} b_l(x,h) \left(\frac{x-x_j}{h}\right)^l\right] \Delta x_j = 0$$

Finalmente:

:

$$\sum_{l=0}^{k} b_l(\boldsymbol{x}, h) \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_j}{h}\right)^l \Delta \boldsymbol{x}_j = 1$$

$$\sum_{l=0}^{k} b_l(\boldsymbol{x}, h) \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_j}{h}\right)^{l+1} \Delta \boldsymbol{x}_j = 0$$

$$\vdots$$

$$\sum_{l=0}^{k} b_l(\boldsymbol{x}, h) \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_j}{h}\right)^{l+k} \Delta \boldsymbol{x}_j = 0$$
(105)

Para simplificações, considerando $m_k(x, h)$ como sendo:

$$m_k(\boldsymbol{x},h) = \sum_{l=1}^k \left(\frac{\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_j}{h}\right)^{l+k}]\Delta \boldsymbol{x}_j$$
(106)

Com essa notação, o sistema de equação 99 pode ser reescrito na forma matricial, como sendo:

$$\begin{bmatrix} m_0(\mathbf{x},h) & m_1(\mathbf{x},h) & \dots & m_k(\mathbf{x},h) \\ m_1(\mathbf{x},h) & m_2(\mathbf{x},h) & \dots & m_{k+1}(\mathbf{x},h) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_k(\mathbf{x},h) & m_{k+1}(\mathbf{x},h) & \dots & m_{k+k}(\mathbf{x},h) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0(\mathbf{x},h) \\ b_1(\mathbf{x},h) \\ \vdots \\ b_k(\mathbf{x},h) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$
(107)

Ou com uma notação mais curta:

$$Mb = I \tag{108}$$

Nesse caso, M é definida como a matriz de momento, b o vetor de coeficientes e I o vetor de constantes. Com a determinação do vetor de coeficientes, a função suave é construída tendo ordem de consistência igual a k.

Diferentes aproximações para retomar a consistência da aproximação de partículas já foram produzidas. Entretanto, Liu e Liu (2003) listam alguns pontos problematicos devido a retomada da ordem de consistência

- A nova função suave pode se tornar negativa em algumas partes, atribuindo valores negativos à massa específica e a energia, resultando em colapso do cálculo.
- II. A função pode não decrescer monotonicamente com o aumento da distância das partículas
- III. A função pode não ser simétrica, violando os princípios básicos da escolha da função suave.

Tratamentos especiais podem ser feitos para as partículas localizadas próximas às fronteiras do problema, como será discutido posteriormente.

10.2 DESENVOLVIMENTO DAS FORMULAÇÕES SPH PARA EQUAÇÕES DE NAVIER-STOKES

10.2.1 APROXIMAÇÃO PARA EQUAÇÃO DA CONTINUIDADE

Nessa formulação, cada partícula representa um elemento do fluido, possuindo velocidade, massa, pressão, etc. O primeiro termo a ser aproximado é a massa específica, pois está presente em todas as equações mostradas acima. Existem duas formulações diferentes para o seu cálculo. A primeira fora discutido anteriormente, utilizando diretamente a noção de representação discreta da função, conforme a equação 36:

$$\rho_i = \sum_{j=1}^N m_j W_{ij} \tag{36}$$

Entretanto, num ponto de vista de otimização computacional, Liu e Liu (2003) descrevem que a formulação 36 não é interessante para o cálculo da massa específica, pois é necessário calculá-la em um ciclo prévio, aumentando o tempo computacional. Dessa forma, uma segunda formulação utiliza a equação de continuidade, isto é:

$$\frac{D\rho_i}{Dt} = -\rho_i \sum_{j=1}^N m_j(\mathbf{v}_j) \cdot \frac{\nabla_i W_{ij}}{\rho_j}$$
(109)

A equação 109 pode ser ainda escrita de outra forma, utilizando as propriedades da representação discreta da derivada. Considerando o gradiente de uma função constante unitária, tem-se:

$$\nabla 1 = \int 1 \nabla W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\zeta}, h) d\boldsymbol{\zeta}$$
$$\sum_{j=1}^{N} \frac{\nabla_i W_{ij} m_j}{\rho_j} = 0$$
$$\rho_i \mathbf{v}_i \sum_{j=1}^{N} \frac{\nabla_i W_{ij} m_j}{\rho_j} = \rho_i \sum_{j=1}^{N} \frac{m_j \mathbf{v}_i \nabla_i W_{ij}}{\rho_j} = 0$$
(110)

Logo, a relação 110 pode ser somada à equação 109, resultando em:

$$\frac{D\rho_i}{Dt} = \rho_i \sum_{j=1}^N m_j (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \cdot \frac{\nabla_i W_{ij}}{\rho_j}$$
(111)

Pode se contrair a equação 111 utilizando a notação:

$$\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j \tag{112}$$

Uma terceira forma de calcular a massa específica pode ser derivada a partir da equação 37, isto é:

$$\rho \nabla \cdot \mathbf{v} = \sum_{j=1}^{N} m_j [\mathbf{v}(\mathbf{x}_j) - \mathbf{v}(\mathbf{x}_i)] \cdot \nabla_i W_{ij}$$
(113)

Dessa forma, substituindo a equação 113 na equação da conservação de massa:

$$\frac{D\rho_i}{Dt} = \sum_{j=1}^{N} m_j \left[\mathbf{v}(\mathbf{x}_i) - \mathbf{v}(\mathbf{x}_j) \right] \cdot \nabla_i W_{ij}$$
(114)

Para casos que envolva explosões e impactos a alta velocidade, um método adaptado da aproximação da massa específica por soma foi desenvolvido (Randies e Libersky -1996 ; Chen *et al.*,1999-a;2000) normalizando o lado direito da equação 36:

$$\rho_{i} = \frac{\sum_{j=1}^{N} m_{j} W_{ij}}{\sum_{j=1}^{N} \frac{m_{j}}{\rho_{j}} W_{ij}}$$
(115)

Essa expressão aprimora o resultado próximo a fronteiras livres e a interfaces entre dois materiais diferentes, com descontinuidade da massa específica.

10.2.2 APROXIMAÇÃO DE PARTÍCULAS PARA A EQUAÇÃO DE MOMENTO

O procedimento para obter a formulação discreta SPH para a equação do momento é similar ao procedimento feito anteriormente para a equação da continuidade. Assim, aplicando a formulação SPH no lado esquerdo da equação da conservação de momento, tem-se:

$$\frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} = \frac{1}{\rho_i} \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{\overline{\overline{\sigma}_j}}{\rho_j}\right) \nabla_i W_{ij}$$
(116)

Como feito anteriormente com a derivada da função constante unitária, podese adicionar a identidade apresentada em 119 e adiciona-la em 118:

$$\sum_{j=1}^{N} \frac{\overline{\overline{\sigma}}_{i}}{\rho_{i}} \frac{m_{j} \nabla_{i} W_{ij}}{\rho_{j}} = \frac{\overline{\overline{\sigma}}_{i}}{\rho_{i}} \sum_{j=1}^{N} \frac{m_{j} \nabla_{i} W_{ij}}{\rho_{j}} = 0$$
(117)

$$\frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} = \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{\overline{\overline{\sigma}}_j + \overline{\overline{\sigma}}_i}{\rho_i \rho_j} \right) \nabla_i W_{ij}$$
(118)

Outra formulação pode ser derivada a partir da equação 40 desenvolvida anteriormente:

$$\frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} = \sum_{j=1}^N m_j (\frac{\overline{\overline{\sigma}}_i}{\rho_i^2} + \frac{\overline{\overline{\sigma}}_j}{\rho_j^2}) \nabla_i W_{ij}$$
(119)

Essa é uma formulação bastante encontrada nas literaturas, pois a simetria reduz erros oriundos de inconsistência do problema.

Os termos de pressão e o tensor de deformação podem ser introduzidos nas equações 118 e 119:

$$\frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} = \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{p_j + p_i}{\rho_i \rho_j}\right) \nabla_i W_{ij} + \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{\mu \overline{\mathbf{\epsilon}}_i + \mu \overline{\mathbf{\epsilon}}_j}{\rho_i \rho_j}\right) \nabla_i W_{ij}$$
(120)

E:

$$\frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} = \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2}\right) \nabla_i W_{ij} + \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{\mu \overline{\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}}_i}{\rho_i^2} + \frac{\mu \overline{\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}}_j}{\rho_j^2}\right) \nabla_i W_{ij}$$
(121)

Além disso, o tensor de deformação pode ser calculado pela aplicação do operador SPH discreto na equação 7:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{i}} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} \frac{m_j}{\rho_j} \mathbf{v}_{\boldsymbol{j}} \nabla_{\boldsymbol{i}} W_{ij}^T + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} \frac{m_j}{\rho_j} \left(\mathbf{v}_{\boldsymbol{j}} \nabla_{\boldsymbol{i}} W_{ij}^T \right)^T - \left(\frac{1}{3} \sum_{j=1}^{N} \frac{m_j}{\rho_j} \mathbf{v}_{\boldsymbol{j}} \cdot \nabla_{\boldsymbol{i}} W_{ij} \right) \overline{\boldsymbol{\delta}}$$
(122)

Semelhante à relação 117, duas expressões podem ser desenvolvidas e adicionadas à equação 122:

$$\sum_{j=1}^{N} \frac{m_j \mathbf{v}_i \nabla_i W_{ij}^T}{\rho_j} = \mathbf{v}_i \sum_{j=1}^{N} \frac{\nabla_i W_{ij}^T m_j}{\rho_j} = 0$$
(123)

$$\sum_{j=1}^{N} \frac{m_j \mathbf{v}_i \cdot \nabla_i W_{ij}}{\rho_j} = \mathbf{v}_i \cdot \sum_{j=1}^{N} \frac{m_j \nabla_i W_{ij}}{\rho_j} = 0$$
(124)

$$\overline{\overline{\varepsilon}}_{i} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} \frac{m_{j}}{\rho_{j}} \mathbf{v}_{ji} \nabla_{i} W_{ij}^{T} + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} \frac{m_{j}}{\rho_{j}} \left(\mathbf{v}_{ji} \nabla_{i} W_{ij}^{T} \right)^{T} - \left(\frac{1}{3} \sum_{j=1}^{N} \frac{m_{j}}{\rho_{j}} \mathbf{v}_{ji} \cdot \nabla_{i} W_{ij} \right) \overline{\overline{\delta}}$$
(125)

Modelos utilizando fluidos não newtonianos também podem ser derivados com uma metodologia similar à utilizada.

10.2.3 APROXIMAÇÃO DE PARTÍCULA PARA EQUAÇÃO DE ENERGIA

Para a equação de energia (equação 4), Liu e Liu (2003) decompõem o termo σ : $\dot{\epsilon}$ em duas frentes: A energia de pressão e a energia oriunda da viscosidade. A parcela oriunda da pressão é dada por:

$$-\frac{p}{\rho}\overline{\overline{\delta}}:\overline{\overline{\epsilon}}=-\frac{p}{\rho}\left[tr(\overline{\overline{\epsilon}}^T\overline{\overline{\delta}})\right]$$

Nesse caso, pelo fato do tensor δ ser unitário, então:

$$-\frac{p}{\rho}\overline{\overline{\delta}}:\overline{\overline{\epsilon}}=-\frac{p}{\rho}\left[tr(\overline{\overline{\epsilon}}^T\overline{\overline{\delta}})\right]=-\frac{p}{\rho}\left[tr(\overline{\overline{\epsilon}}^T)\right]$$

Portanto:

$$-\frac{p}{\rho}\overline{\boldsymbol{\delta}}:\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}=-\frac{p}{\rho}\nabla\cdot\mathbf{v}$$
(126)

Portanto, com essa formulação, a parcela de energia devido à pressão pode ser aproximada pela utilização equação da continuidade, isto é:

$$-\frac{p}{\rho}\overline{\delta}:\overline{\varepsilon} = -\frac{p}{\rho}\nabla\cdot\mathbf{v} = \frac{p}{\rho^2}\frac{D\rho}{Dt}$$
(127)

Dessa maneira, pode-se utilizar então a formulação SPH proposta para a equação da continuidade, demonstrada através da equação 39, isto é:

$$\langle \frac{p}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{v} \rangle = \frac{p_i}{\rho_i^2} \sum_{j=1}^N m_j (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \cdot \nabla_i W_{ij}$$
(128)

Uma alternativa à formulação apresentada na equação 128 é a utilização das propriedades do operador divergente aplicado diretamente à equação 126. Sendo assim:

$$-\frac{p}{\rho}\nabla\cdot\mathbf{v} = -\nabla\cdot\left(\mathbf{v}\frac{p}{\rho}\right) + \mathbf{v}\cdot\nabla\left(\frac{p}{\rho}\right)$$
(129)

Aplicando a transformação discreta SPH (equação 33) para a equação 129:

$$\langle -\frac{p}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{v} \rangle = -\sum_{j=1}^{N} \frac{p_j}{\rho_j} \mathbf{v}_j \cdot \frac{\nabla_i W_{ij} m_j}{\rho_j} + \mathbf{v}_i \cdot \sum_{j=1}^{N} \frac{p_j}{\rho_j} \frac{\nabla_i W_{ij} m_j}{\rho_j}$$
$$\langle -\frac{p}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{v} \rangle = \sum_{j=1}^{N} p_j \mathbf{v}_{ij} \cdot \frac{\nabla_i W_{ij} m_j}{\rho_j^2}$$
(130)

Entretanto, a formulação mais usual para a parcela de energia oriunda da pressão advém da soma da equação 130 e 128. Assim:

$$\langle -\frac{p}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{v} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{p_j}{\rho_j^2} + \frac{p_i}{\rho_i^2} \right) \mathbf{v}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij} m_j$$
(131)

Novamente, essa equação é preferida em relação às demais por conta da simetria, reduzindo assim a propagação de erros durante a simulação. Uma formulação de simetria também pode ser desenvolvida a partir da combinação da equação 126 e a representação integral discreta da continuidade, dada pela equação 2. Dessa forma, tem-se:

$$-\frac{p}{\rho}\nabla\cdot\mathbf{v} = \frac{p}{\rho^{2}}\frac{D\rho}{Dt}$$

$$\langle \frac{p}{\rho}\nabla\cdot\mathbf{v}\rangle = \frac{p_{i}}{\rho_{i}^{2}}\left[\rho_{i}\sum_{j=1}^{N}m_{j}(\mathbf{v}_{i}-\mathbf{v}_{j})\cdot\frac{\nabla_{i}W_{ij}}{\rho_{j}}\right]$$

$$\langle \frac{p}{\rho}\nabla\cdot\mathbf{v}\rangle = \frac{p_{i}}{\rho_{i}}\sum_{j=1}^{N}m_{j}(\mathbf{v}_{i}-\mathbf{v}_{j})\cdot\frac{\nabla_{i}W_{ij}}{\rho_{j}}$$
(132)

A fim de conseguir a simetria, deve-se encontrar uma equação com o termo p_i . Para isso, aplica-se uma segunda propriedade do operador divergente:

$$-\frac{p}{\rho}\nabla\cdot\mathbf{v} = -\frac{1}{\rho}[\nabla\cdot(p\mathbf{v}) - \mathbf{v}\cdot\nabla(p)]$$
(133)

Então, aplicando a transformação discreta SPH (equação 33) para os termos do lado direito da equação 133:

$$\langle -\frac{p}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{v} \rangle = -\frac{1}{\rho_i} \sum_{j=1}^N p_j \mathbf{v_j} \cdot \frac{\nabla_i W_{ij} m_j}{\rho_j} + \frac{\mathbf{v_i}}{\rho_i} \cdot \sum_{j=1}^N p_j \frac{\nabla_i W_{ij} m_j}{\rho_j}$$
$$\langle -\frac{p}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{v} \rangle = \frac{1}{\rho_i} \sum_{j=1}^N p_j \mathbf{v_{ij}} \cdot \frac{\nabla_i W_{ij} m_j}{\rho_j}$$
(134)

Assim, obtido o termo $\langle -\frac{p}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{v} \rangle$ em função de p_j , a nova equação simétrica é obtida pela média da equação 134 com a equação 132:

$$\langle -\frac{p}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{v} \rangle = \frac{1}{2} \left[\sum_{j=1}^{N} m_j \frac{p_j + p_i}{\rho_j \rho_i} \mathbf{v}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij} \right]$$
(135)

As equações 128, 132 e 135 podem ser combinadas, dando origem a duas formulações simétricas para a representação discreta SPH da equação da energia:

$$\frac{de_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{p_j}{\rho_j^2} + \frac{p_i}{\rho_i^2} \right) \mathbf{v}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij} m_j + \frac{2\mu_i}{\rho_i} \overline{\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}}_i : \overline{\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}}_i$$
(136)

$$\frac{de_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} m_j \frac{p_j + p_i}{\rho_j \rho_i} \mathbf{v}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij} + \frac{2\mu_i}{\rho_i} \overline{\overline{\epsilon}}_i : \overline{\overline{\epsilon}}_i$$
(137)

10.3 VISCOSIDADE ARTIFICIAL

Para problemas que apresentam ondas de choques, tratamentos especiais se fazem necessário, pois caso contrário, oscilações não físicas podem aparecer em torno da região de choque. Liu e Liu (2003) descreve que as ondas de choques não são fisicamente uma descontinuidade, mas uma zona de transição limitante que possui uma espessura da ordem molecular significam caminhos livres. Nesses casos, a aplicação da conservação de massa, momento e energia através de uma onda de choque requer a transformação de energia cinética em calor. Em um sentido físico, essa transformação energética pode ser representada por uma dissipação viscosa. Com esse conceito, pode-se adicionar nas equações a viscosidade artificial de von Neumann-Richtmyer (VON NEUMMAN e D., 1950):

$$\Pi_{1} = \begin{cases} a_{1} \Delta x^{2} \rho (\nabla \cdot \mathbf{v})^{2} & \nabla \cdot \mathbf{v} < 0\\ 0 & \nabla \cdot \mathbf{v} \ge 0 \end{cases}$$
(138)

Sendo Π_1 a viscosidade artificial de von Neumann-Richtmyer. Esse termo é estar presente somente durante a compressão do material, a_1 é uma constante adimensional ajustável.

Além de Π_1 , Liu e Liu (2003) descrevem que um segundo termo linear de viscosidade artificial é adicionado, tendo como vantagem o amortecimento de oscilações suaves que não foram completamente amortecidas pelo termo quadrático:

$$\Pi_2 = \begin{cases} a_2 c \Delta x \rho \nabla \cdot \mathbf{v} & \nabla \cdot \mathbf{v} < 0\\ 0 & \nabla \cdot \mathbf{v} \ge 0 \end{cases}$$
(139)

Ambos os termos 139 e 140 são empregados nos mais diversos tipos de simulação hidrodinâmicas para a remoção de oscilações numéricas. Inicialmente, o método SPH era aplicado a problemas com baixo ou sem dissipação. Entretanto, modelos dissipativos foram incorporados com o aumento da dissipação (MONAGHAN, 1989) (LATTANZIO e MONAGHAN J.J., 1986)

$$\Pi_{ij} = \begin{cases} \frac{-\alpha_{\Pi} \overline{c_{ij}} \phi_{ij} + \beta_{\Pi} \phi_{ij}^2}{\bar{\rho}_{ij}} & \mathbf{x}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij} < 0 \\ 0 & \mathbf{x}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij} \ge 0 \end{cases}$$
(140)

Onde:

$$\phi_{ij} = \frac{h_{ij} \boldsymbol{x}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij}}{x_{ij}^2 + \varphi^2}$$
(141)

$$\overline{c_{ij}} = \frac{1}{2}(c_i + c_j) \tag{142}$$

$$\bar{\rho}_{ij} = \frac{1}{2}(\rho_i + \rho_j)$$
 (143)

$$h_{ij} = \frac{1}{2}(h_i + h_j)$$
(144)

$$\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j,\tag{145}$$

$$\mathbf{x}_{ij} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j \tag{146}$$

No conjunto de equações mostrado acima, as constantes $\alpha_{\Pi} e \beta_{\Pi}$ são usualmente iguais a 1 (MONAGHAN, 1988) (EVRARD, 1988). Já o φ é atribuído como sendo igual a $0,1h_{ij}$ para prevenir divergências numéricas quando duas partículas estão se aproximando (LIU e LIU, 2003). *c* e v representam a velocidade do som e a velocidade da partícula, respectivamente.

Entretanto, uma vez que a viscosidade artificial introduzida por Monaghan (1988) pode influenciar em regiões distantes da zona da onda de choque, foi desenvolvida uma segunda formulação, expressa por:

$$\Pi_{ij} = \frac{q_i}{\rho_i^2} + \frac{q_j}{\rho_j^2}$$
(147)

Sendo:

$$q_{i} = \begin{cases} \alpha_{\Pi} h_{i} \rho_{i} c_{i} |\nabla \cdot \mathbf{v}_{i}| + \beta_{\Pi} h_{i}^{2} \rho_{i} |\nabla \cdot \mathbf{v}_{i}|^{2} & \nabla \cdot \mathbf{v} < 0\\ 0 & \nabla \cdot \mathbf{v} \ge 0 \end{cases}$$
(148)

10.4 CALOR ARTIFICIAL

Apesar da viscosidade artificial descrita acima prover bons resultados para modelagem de ondas de choques, excessivo aquecimento ainda pode acontecer. Para esses casos, um termo de condução artificial pode ser introduzido na equação de energia. A forma de introduzir esse termo foi desenvolvida por Monaghan (1995), sendo adicionado quando necessário na forma:

$$H_i = 2\sum_{j=1}^{N} \frac{\bar{q}_{ij}}{\bar{\rho}_{ij}} \frac{e_i - e_j}{x_{ij}^2 + \varphi^2} \boldsymbol{x}_{ij} \cdot \boldsymbol{v}_{ij}$$
(149)

Sendo:

$$q_i = \alpha_{\Pi} h_i \rho_i c_i |\nabla \cdot \mathbf{v}_i| + \beta_{\Pi} {h_i}^2 \rho_i |\nabla \cdot \mathbf{v}_i|^2$$
(150)

$$q_{j} = \alpha_{\Pi} h_{j} \rho_{j} c_{j} |\nabla \cdot \mathbf{v_{j}}| + \beta_{\Pi} h_{j}^{2} \rho_{j} |\nabla \cdot \mathbf{v_{j}}|^{2}$$
(151)

$$\bar{q}_{ij} = q_i + q_j \tag{152}$$

Com a inserção dos novos termos, a nova formulação SPH para quantidade de movimento e energia é dada por:

Tabela 13 - Formulação SPH com termos artificiais - Continua

I. Conservação do momento:

$$\frac{D\mathbf{v}_{i}}{Dt} = \sum_{j=1}^{N} m_{j} \left(\frac{p_{j} + p_{i}}{\rho_{i}\rho_{j}}\right) \nabla_{i}W_{ij} + \sum_{j=1}^{N} m_{j} \left(\frac{\mu\overline{\mathbf{\bar{\varepsilon}}}_{i} + \mu\overline{\mathbf{\bar{\varepsilon}}}_{j}}{\rho_{i}\rho_{j}} + \Pi_{ij}\right) \nabla_{i}W_{ij} + \sum_{j=1}^{N} m_{j}\Pi_{ij}\nabla_{i}W_{ij}$$
$$\frac{D\mathbf{v}_{i}}{Dt} = \sum_{j=1}^{N} m_{j} \left(\frac{p_{i}}{\rho_{i}^{2}} + \frac{p_{j}}{\rho_{j}^{2}}\right) \nabla_{i}W_{ij} + \sum_{j=1}^{N} m_{j} \left(\frac{\mu\overline{\mathbf{\bar{\varepsilon}}}_{i}}{\rho_{i}^{2}} + \frac{\mu\overline{\mathbf{\bar{\varepsilon}}}_{j}}{\rho_{j}^{2}}\right) \nabla_{i}W_{ij} + \sum_{j=1}^{N} m_{j}\Pi_{ij}\nabla_{i}W_{ij}$$

Tabela 13- Formulação SPH de energia e quantidade de movimento com termos artificiais - Final

I. Conservação de energia:

$$\frac{de_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \left(\frac{p_j}{\rho_j^2} + \frac{p_i}{\rho_i^2} + \Pi_{ij} \right) \mathbf{v}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij} m_j + \frac{2\mu_i}{\rho_i} \overline{\mathbf{\varepsilon}}_i : \overline{\mathbf{\varepsilon}}_i + H_i$$
$$\frac{de_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{p_j + p_i}{\rho_j \rho_i} + \Pi_{ij} \right) \mathbf{v}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij} + \frac{2\mu_i}{\rho_i} \overline{\mathbf{\varepsilon}}_i : \overline{\mathbf{\varepsilon}}_i + H_i$$

Fonte: Liu e Liu (2003) - Adaptado

10.5 FORÇA REPULSIVA - CASO PADRÃO – LIU E LIU (2003)

O caso padrão utilizado por Liu e Liu (2003) consiste em uma cavidade quadrada de 1 mm x 1 mm. Partindo desse caso, descobriu-se os parâmetros adimensionais da força repulsivas, conforme metodologia mostrada na seção 10.1. Assim sendo, o espaçamento inicial entre as partículas é dado por:

$$r_{ij} = \frac{L}{n_p - 1} = \frac{0,001}{41 - 1} = 0,25 \ \mu m$$

Para este caso, Liu e Liu (2003) definem o valor do raio de "*cutoff*", ou raio de corte, como sendo metade do espaçamento entre as partículas:

$$r_0 = \frac{r_{ij}}{2} = 0,125 \ \mu m$$

Liu e Liu (2003) também definem o parâmetro adimensional *D* da força de Lennard-Jones como sendo:

$$D = 0.01 \, N. \frac{m}{kg}$$

Dessa forma, os parâmetros adimensionais discutidos anteriormente são calculados como sendo:

$$r_0^* = \frac{r_0}{L} = 0,0125$$
$$r_{ij}^* = \frac{r_{ij}}{L} = 0,025$$
$$U_\infty^2 = 10^{-6}N.\frac{m}{kg}$$
$$D^* = \frac{D}{U_\infty^2} = \frac{0,01}{10^{-6}} = 10^4$$
$$R = \frac{r_0^*}{r_{ij}^*} = 0,5$$

Entretanto, para melhor entender o efeito da força de repulsão, o gráfico abaixo representação a variação da força adimensional de repulsão pela razão de raios, mostrando em laranja o valor inicial da força para o valor de R = 0.5.

$$F^* = 4,0 \cdot 10^5 (R^{12} - R^4) \tag{153}$$