

Simulação de fluidos sem malha: uma introdução ao método sph

AFONSO PAIVA¹, FABIANO PETRONETTO^{2,3}, GEOVAN TAVARES² AND THOMAS LEWINER²

¹ Faculty of Mathematics — Universidade Federal de Uberlândia — Brazil

² Department of Mathematics — Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro — Brazil

³ Department of Mathematics — Universidade Federal do Espírito Santo — Brazil

sites.google.com/site/afonsopaiva/. www.matmidia.mat.puc--rio.br/fbipetro.

www.matmidia.mat.puc--rio.br/tavares. www.matmidia.mat.puc--rio.br/tomlew.

À Dora e Waltrudes.

À Cintia.

À Giodana e Adriano.

À Debora.

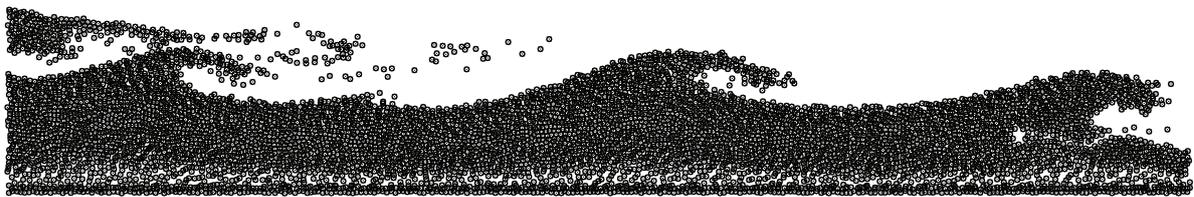


Figura 1: A instabilidade de Kelvin Helmholtz em fluidos bifásicos é reproduzida pelo método da projeção SPH.

Esse livro faz parte de um grande esforço do grupo Matmídia do departamento de matemática da PUC-Rio para

Preprint MAT. 06/09, communicated on May 12th, 20089 to the Department of Mathematics, Pontifícia Universidade Católica — Rio de Janeiro, Brazil. The corresponding work was published in as a book for the “27o Colóquio Brasileiro de Matemática”.

o entendimento de estruturas discretas e suas relações com o contínuo no contexto de computação gráfica. Enquanto que as estruturas discretas fazem parte de uma matemática que podemos chamar de knuthiana (estrutura computacional de algoritmos) e é típica do século XX, a matemática

contínua é euclidiana (estrutura das transformações) e milenar; a relação entre essas duas estruturas está longe de ser entendida. Este esforço de entendimento da relação do discreto com o contínuo é interdisciplinar, como é também uma parte considerável de computação gráfica, e envolve várias partes de matemática: dinâmica, geometria, topologia, análise numérica e teoria dos grafos, combinadas com outras de computação: teoria de algoritmos e programação.

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

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

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

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

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

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

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

Conteúdo

1	Introdução	2
	<i>Física básica dos escoamentos</i>	3
	<i>Desafios matemáticos</i>	5
	<i>Abordagem com estruturas</i>	5
	<i>Abordagem com convolução</i>	6
	<i>Aplicações de SPH</i>	6
	<i>Estrutura do livro</i>	10
2	Smoothed Particle Hydrodynamics	10
	<i>Contexto do método SPH</i>	11
	<i>Formulação de SPH</i>	11
	<i>Operadores SPH</i>	14
	<i>Núcleos SPH</i>	17
3	Dinâmica dos fluidos usando SPH	21
	<i>Navier-Stokes na forma lagrangeana</i>	21
	<i>Incompressibilidade</i>	23
	<i>Discretização SPH das Equações de Navier-Stokes</i>	24
4	Aspectos numéricos do método SPH	25
	<i>Integração temporal</i>	25
	<i>Tratamento da fronteira</i>	27
	<i>Busca de partículas vizinhas</i>	30
	<i>Visualização da superfície livre</i>	31
	<i>Exemplo completo</i>	33
5	Incompressibilidade SPH	35
	<i>Pressão em fluidos incompressíveis</i>	35
	<i>Método da projeção</i>	36
	<i>Solução SPH da equação de Poisson</i>	36
	<i>Método da projeção SPH</i>	40
6	Aplicações	41
	<i>Fluidos viscoplásticos</i>	41
	<i>Decomposição de campos vetoriais</i>	44
	<i>Fluidos bifásicos</i>	50
A	Noções elementares de cálculo diferencial vetorial	54
	<i>Campos vetoriais e operadores diferenciais</i>	54
	<i>Interpretação geométrica e teoremas integrais</i>	56
	Bibliografia	58

1 Introdução

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

Na matemática aplicada tradicional, os métodos numéricos de equações diferenciais, ordinárias e parciais, se concentraram por um longo tempo em estabelecer as condições de validade para os métodos desenvolvidos ao longo de todo o século passado, ou seja, garantir que o modelo discreto solucionado, no limite, a equação diferencial. Assim os métodos numéricos se tornaram de grande precisão mas foram perdendo a conexão com os fenômenos físicos que lhe originaram. Em dinâmica dos fluidos a virada do século XIX para o século XX sintetizou os grandes desenvolvimentos nos séculos anteriores em dois aspectos fundamentais: desenvolvimentos teóricos por um lado e experimentos em laboratório por outro. Nomes como Euler, Cauchy, Lagrange, Laplace, Poisson, Reynolds, Navier, Stokes, Prandtl, entre muitos outros foram nomes significativos desse período. Esse é o período da hidrodinâmica física, onde se procurava combinar os aspectos de modelagem e experimentais e que hoje é parte integral do universo de dinâmica dos fluidos. O livro *Worlds of Flow* [31] é um excelente texto sobre a história desse período.

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

Hoje, uma das principais características de dinâmica dos fluidos é a sua interdisciplinaridade [57]. Isso possibilita que pesquisadores formados nessa área possam trabalhar tanto na indústria quanto na universidade. A formação acadêmica exige que aquele interessado nessa área tenha, eventualmente, que dominar técnicas de topologia, geometria e análise acopladas a uma formação em computação científica e ciência da computação. É tal a sua importância que pesquisadores em dinâmica dos fluidos trabalham atualmente em institutos e departamentos de matemática, física, e engenharias em todo o mundo.

(a) Física básica dos escoamentos

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

O principal objetivo da mecânica dos fluidos é a procura do entendimento de como os elementos de fluido, se deslocam com seus vizinhos e influenciam tanto o compor-

tamento local, quanto global do fluido. Com isto queremos dizer que o movimento em uma região do fluido influencia e é influenciado por aquele das regiões vizinhas em escalas locais e globais. A resistência ao escoamento determina em boa parte o comportamento do fluido.

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

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

As energias, porém, podem provir de diversos fenômenos físicos e serem tratadas separadamente das duas primeiras leis acima na forma de um acoplamento [84].

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

As forças convectivas são devidas tanto a difusão quanto a advecção. A difusão vem de forças randômicas em consequência do movimento das moléculas do fluido e, portanto é a soma de forças que se dão em escalas muito pequenas. A advecção, por outro lado, é devida às forças que acontecem nas grandes escalas como, por exemplo, um fluido em turbulência ou submetido a uma fonte de calor.

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

Por último, a viscosidade é um dos ingredientes que mais desafiam aqueles que fazem simulação numérica ou experimentos em laboratórios. Duas características da viscosidade



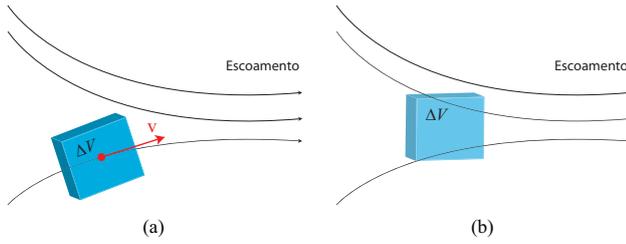


Figura 2: Escoamento de um fluido através de um elemento de fluido com volume ΔV : (a) Elemento de fluido se movendo ao longo de uma linha de corrente com velocidade v tangente a trajetória. (b) Elemento de fluido fixo no espaço com o escoamento passando através dele.

que tem uma importância preponderante são a difusão e o número de Reynolds. A difusão é definida como a variação espacial do gradiente da velocidade, o chamado laplaciano da velocidade, enquanto que o número de Reynolds expressa, na média, a relação entre as forças convectivas e as de difusão.

Abordagem lagrangeana

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

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

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

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

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

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

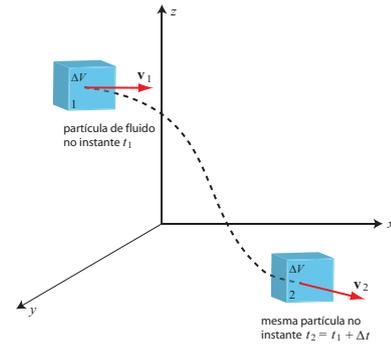


Figura 3: Elemento de fluido se deslocando com o escoamento.

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

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

Dada uma quantidade física genérica do fluido q , a função $q(\mathbf{x}, t)$ nos conta o valor de q em um elemento de fluido que ocupa uma posição \mathbf{x} no instante t , lembrando que o ponto \mathbf{x} é uma coordenada espacial. Então como calcular a variação temporal dessa quantidade em um determinado elemento de fluido que se desloca com o escoamento entre os pontos 1 e 2 (figura 3) em um intervalo de tempo Δt ? Mais ainda, como a variação temporal de um atributo físico em um elemento de fluido em movimento se relaciona com a variação de um atributo em um ponto fixo no espaço, isto é, como a forma lagrangeana se relaciona com a forma euleriana? Para responder a essas perguntas vamos calcular o que definimos como derivada da função $q(\mathbf{x}, t)$ em relação ao tempo.

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

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

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

$$\frac{Dq}{Dt} := \frac{\partial q}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla q. \quad (1)$$

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

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

Tabela 1: Equações do momento (topo) e da continuidade (base) nas descrições euleriana e lagrangeana.

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

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

As descrições euleriana e lagrangeana das equações de evolução da velocidade e da densidade de um fluido com certas propriedades mostradas na tabela 1 são bem diferentes. A equação na primeira linha é conhecida como *equação do momento*, enquanto na segunda linha a equação é chamada de *equação da continuidade*. Em ambas descrições, euleriana e lagrangeana, \mathbf{v} é a velocidade do escoamento, ρ é a densidade do fluido, \mathbf{f} é uma força externa que age sobre os elementos de fluido (por exemplo, força gravitacional), μ é a viscosidade do fluido, ou seja a variação da capacidade de fricção entre os elementos de fluido (essa variável é determinada experimentalmente e depende do material) e a razão $\frac{\rho}{\mu}$ é o número de Reynolds, usualmente denotado por Re . As equações mostradas na tabela 1, em ambas as formas, euleriana e lagrangeana, são conhecidas como as equações de Navier-Stokes. No capítulo 3 mostraremos com detalhes a dedução das equações de Navier-Stokes.

(b) Desafios matemáticos

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

Do ponto de vista teórico essas equações têm sido exploradas desde a primeira metade do século passado, seja sob restrições matemáticas ou físicas, seja mergulhando as equações de Navier-Stokes em um espaço mais amplo que permita encontrar soluções para todo tempo, além das condições iniciais dadas. Em geral se procuram condições que garantam diferenciabilidade, unicidade, propriedades intrinsecamente dinâmicas (existência de atratores, por

exemplo) e propriedades estatísticas das soluções (importantes no estudo de turbulência). O instituto de matemática Clay estabeleceu com um de seus prêmios do milênio “provar a existência de soluções únicas diferenciáveis para todo o tempo para as equações de Navier-Stokes definidas em um domínio do espaço” [43, 46, 128].

O arsenal de técnicas de análise numérica para aproximações de equações diferenciais ordinárias e parciais foi estabelecido no século passado. Entretanto quando as equações provêm da descrição de fenômenos físicos dinâmicos suas aproximações não podem violar as leis da física, ou seja os incrementos no espaço e no tempo não estão dissociados. A condição de Courant-Friedrichs-Lewy [65] é o exemplo típico disso, para o caso de aproximações por diferenças finitas.

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

(c) Abordagem com estruturas

A discretização das equações de Navier-Stokes na descrição euleriana é geralmente feita através de métodos numéricos que usam uma grade fixa discretizando todo o espaço da simulação (figura 4(a)), enquanto a descrição lagrangeana corresponde ao uso de uma malha móvel (figura 4(b)) ou de um sistema de partículas para discretizar somente o fluido (figura 4(c)).

Tradicionalmente os métodos com malha mais usados na solução de equações diferenciais parciais têm sido os de diferenças finitas e os de elementos finitos. De um modo geral se pré-estabelece uma topologia especificando que a avaliação em um ponto depende de uma maneira estruturada de avaliações em seus vizinhos. Nos métodos de



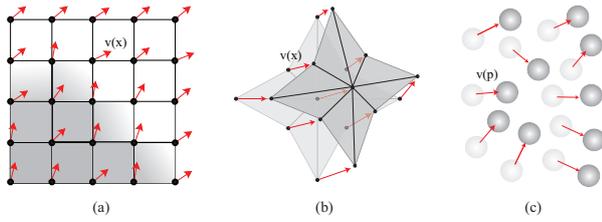


Figura 4: Discretização euleriana (a) com campo de velocidade $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ nos vértices \mathbf{x} da grade. A região cinza representa o fluido. Representações lagrangeanas: (b) discretização utilizando uma malha com campo de velocidade $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ nos vértices \mathbf{x} da malha; (c) discretização através de um sistema de partículas com campo de velocidade $\mathbf{v}(\mathbf{p})$ nas partículas \mathbf{p} do sistema.

diferenças finitas se define uma grade retangular fixa no espaço e a partir dela se calcula os valores em cada ponto. No método de elementos finitos interpreta-se as equações como um problema variacional num espaço de Hilbert, e aproximam-se as soluções por aquelas em espaços vetoriais de dimensão finita.

Em ambos os métodos, diferenças finitas e elementos finitos, o controle da malha é essencial em questões como adaptatividade, remalhamento, entre outros, o que faz com que o pré-processamento de dados seja uma etapa importante, mas cara, do processo. Essas questões se tornam críticas no caso de grandes deformações como acontece em dinâmica dos fluidos. Algumas referências nessas áreas são [65] para diferenças finitas, [147] em elementos finitos e [140] para uma introdução à álgebra linear computacional.

(d) Abordagem com convolução

Os métodos sem malha começaram com Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) proposto por Gingold e Monaghan [52] e Lucy [93], originalmente inventado para modelar fenômenos astrofísicos. Desde então, e principalmente a partir de sua aplicação em simulação de fraturas, esse método induziu várias áreas de pesquisas no que hoje se chama genericamente de métodos sem malha em equações diferenciais parciais.

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

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

convolução W , que:

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

podendo assim aproximar

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

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

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

- Reproducing kernel particle method (RKPM) [82];
- Meshless local Petrov Galerkin (MLPG) [149, 150];
- hp-clouds [154];
- Particle-in-cell (PIC) [152];
- Moving particle semi-implicit (MPS) [156].

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

As principais referências em métodos sem malha são [11, 80, 84]. Em particular, um excelente tutorial de SPH foi escrito por Monaghan [102] e uma visão geral desse método e suas aplicações em astrofísica, geologia, engenharia e outras pode ser encontrado no excelente site do grupo SPHERIC: <http://wiki.manchester.ac.uk/spheric/>. Existem ainda algumas implementações em software livre de SPH, <http://www.rchoetzlein.com/eng/graphics/fluids.htm> e <http://www.itm.uni-stuttgart.de/research/pasimodo/>.

(e) Aplicações de SPH

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

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

- equações diferenciais numéricas,



Figura 5: Exemplos de materiais viscoplásticos: derretimento de uma vela de cera e o escoamento de lava no *Pão de Açúcar*.

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

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

Fenômenos naturais

A modelagem de fenômenos naturais tais como fogo, fumaça, lava, cabelo, materiais granulares, bolhas, sangue, e outros têm no método SPH um ambiente de simulação. Assim começou o uso do método SPH em computação gráfica, na década 1990, com os trabalhos, apresentados no Siggraph de 1995, em simulação de lava, e em geral de objetos deformáveis, feita por Desbrun e Cani [32] e a modelagem de fogo, fumaça e fenômenos gasosos em geral, por Stam e Fiume [129]. Com isso chama-se atenção da comunidade de computação gráfica sobre a possibilidade de se usar um método sem malha para modelar fenômenos que podem ser de execução mais difícil quando feita com métodos com malha. Em 2001, Hadap e Magnenat-Thalmann modelaram a dinâmica do cabelo

humano [58]. Em [108] a simulação de lava, de fato uma lâmpada de lava, comum nas lojas de decoração, é revisitada e simulada usando SPH produzindo um agradável efeito visual. Em 2009, Paiva, Petronetto, Tavares e Lewiner [114, 117, 118] utilizaram uma abordagem SPH no contexto de fluidos não-newtonianos para simular, além de lava, objetos que derretem sobre o efeito da temperatura e que sofrem grande deformações (figura 5). Essa abordagem é discutida com detalhes no capítulo 6 do presente livro.

Fluidos multifásicos

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

No método SPH, é simples representar diferentes fases, por exemplo, associando a cada partícula uma única fase e as propriedades físicas relativas. Com isso é possível saber em um dado momento como está se comportando cada uma das partículas dos fluidos envolvidos numa simulação.

O cálculo da pressão é um passo essencial nesses casos. No método SPH, usualmente a pressão é obtida através de uma equação de estado [8], que é uma fórmula explícita para se calcular a pressão. Essa fórmula é, entretanto típica de fluidos compressíveis, como os gases. Nesse livro e em [117] a usamos para simular fluidos quase-incompressíveis. Obter a pressão através de uma equação explícita em simulações de fluidos multifásicos não é possível devido a descontinuidade da densidade na interface entre as fases. Se, entretanto, usarmos o método da projeção para fluidos





Figura 6: O modelo Stanford Bunny sofre uma grande deformação após colidir contra a face de David. Imagem retirada de Paiva *et al.* [118].

incompressíveis [24], então a pressão em cada passo de tempo é obtida implicitamente satisfazendo uma equação de Poisson, de tal forma que a descontinuidade da densidade não comprometa a simulação [121]. O cálculo da pressão é fundamental na simulação de instabilidades, em particular aquelas que ocorrem por diferença de densidades (figura 1).

Fenômenos multi-escalas

Um caso importante de multi-escala são os escoamentos em meios porosos, particularmente na parte de extração de petróleo. Um meio poroso finito é caracterizado pela relação entre o volume do espaço vazio, os poros, e todo o volume do espaço preenchido. Em um trabalho recente [78], usa-se a lei de Darcy como elemento essencial em uma escala macroscópica para a simulação de materiais como esponja ou tecidos que absorvem água. Podemos citar também o trabalho de Tong *et al.* [138], onde é feito uma mistura de fluidos e materiais granulares como areia.

Outro fenômeno físico explorado recentemente com o método descrito nesse livro é o de erosão geológica, de fato, erosão hidráulica. Quando um rio corre sobre uma formação rochosa a erode e assim há uma modificação desse ambiente pela troca de sedimento entre o fluido e essa formação. Em [73] um modelo híbrido combinando SPH com uma grade euleriana é explorado para simular o fenômeno de erosão hidráulica.

A simulação multiescala com SPH, embora já apontada pelos engenheiros no contexto de limites numéricos do método dos elementos finitos, já começa a ser explorada pela comunidade de computação gráfica para simulação de bolhas como um ambiente misto de euleriano e SPH [66], onde as pequenas bolhas são simuladas com SPH, em um ambiente de simulação euleriano com uma malha mais grossa.

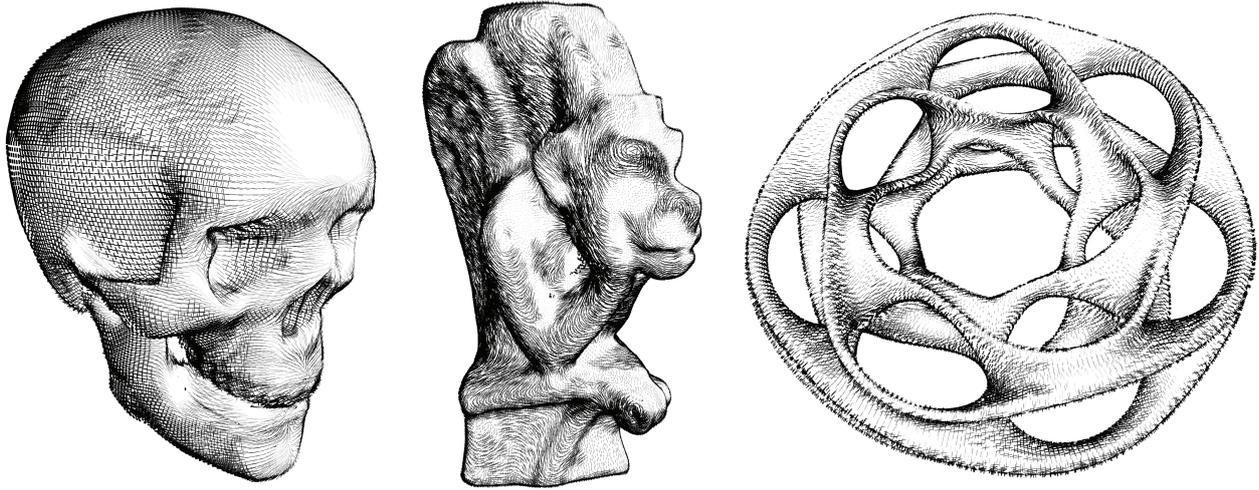


Figura 7: Ilustrações dos modelos complexos: skull (esquerda), gargoyle (meio) e uma superfície mínima de Scherk, geradas utilizando o método baseado no modelo físico de escoamento de fluidos com SPH. Imagem retirada de Paiva *et al.* [119].

Interatividade

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

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

Usar um número mínimo de partículas representa um sério desafio a modelagem de fluidos com SPH. O problema principal é como manter a simulação fisicamente aceitável enquanto se controla o número de partículas de modo que a simulação se dê a taxas próximas da interatividade. Um dos métodos pioneiros nessa área é proposto por Müller *et al.* [109], onde usa-se uma variação do método SPH para conseguir taxas interativas.

Nesse livro e em [118], incluímos um algoritmo geométrico para colisões que consegue melhorar a realidade física e ao mesmo tempo diminuir o custo computacional. Este tipo de algoritmo acelera consideravelmente simulações em domínios com topologia complexa (figura 6). Aqui também usamos uma estrutura de dados mais eficiente do que a tradicional octree e com isso mantemos o uso de memória constante. A programação em placas gráficas (GPUs) do método SPH é uma área de pesquisas inovadora. Embora no início tenha-se programado os algoritmos de busca em CPU, mais recentemente se faz todo

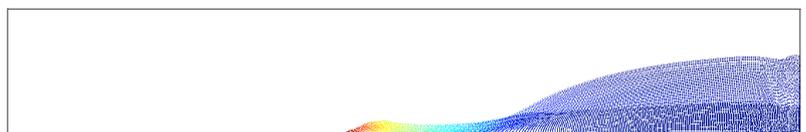
o processo em GPU [60]. Mais recentemente adaptividade e rendering foram acrescentados a todo o processo para dar grande realismo a programação do método em placa gráfica [144, 145].

Rendering

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

Existem diversas técnicas de se criar um render não fotorealista, uma delas é baseada em ilustrações com hachuras, técnica conhecida como *hatching*. Usualmente, o hatching é feito através do cálculo de campos vetoriais sobre a malha triangular da superfície do modelo de entrada utilizando quantidades diferenciais da geometria diferencial clássica [63, 125], tais como, caminhos geodésicos, campos de curvaturas principais e normal. Entretanto, o cálculo dessas quantidades requer que a malha de entrada tenha uma triangulação da superfície cuidadosamente gerada.

Um dos primeiros trabalhos a combinar rendering e SPH foi proposto por Paiva *et al.* em [119]. Eles criaram um novo método puramente físico de hatching de superfícies com geometria complexa e topologia arbitrária inspirado em simulação de escoamento de fluidos utilizando SPH (figura 7). Ao contrário dos métodos tradicionais, a geometria diferencial foi substituída por uma abordagem física, em outras palavras, o campo vetorial é calculado utilizando quantidades diferenciais de um escoamento de fluido (por exemplo, velocidade). A vantagem dessa abordagem é a de permitir processar objetos sem estrutura, como sopa de



triângulos.

Indústria do entretenimento

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

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

(f) Estrutura do livro

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

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

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

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

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

problemáticas dentro do contexto SPH.

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

O texto comporta alguns exercícios para verificar o acompanhamento do leitor, além de um pequeno apêndice de cálculo diferencial vetorial contendo as principais fórmulas de cálculo usadas no livro. Indicamos ainda que as figuras coloridas estão disponíveis eletronicamente, no endereço <http://www.matmidia.mat.puc-rio.br> na seção “Educação”. Os autores deste livro estão a disposição do leitor para qualquer esclarecimento, dúvida, sugestão, e podem ser encontrados fisicamente ou eletronicamente nas seguintes instituições: Afonso Paiva (Universidade Federal de Uberlândia), Fabiano Petronetto (Universidade Federal do Espírito Santo), Geovan Tavares e Thomas Lewiner (Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro).

Finalmente, o leitor pode usar este livro como *flick book*, virando as páginas para ver uma simulação de quebra de represa no canto inferior das páginas, reproduzidas em maior tamanho na figura 8.

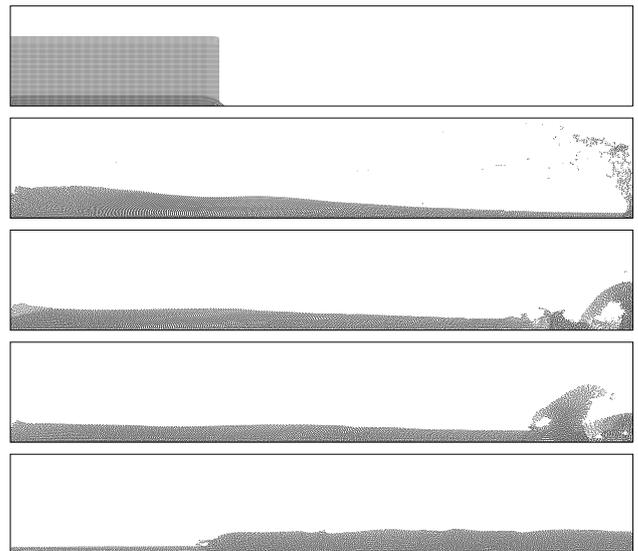


Figura 8: Simulação SPH de quebra de represa d’água com 20.700 partículas, usando colisão geométrica e equação de estado para o cálculo da pressão.

2 Smoothed Particle Hydrodynamics

Soluções numéricas de equações diferenciais parciais (EDP’s) são hoje de suma importância em áreas aplicadas, tais como engenharia, meteorologia, oceanografia e geolo-

gia, por auxiliarem na compreensão de uma ampla gama de fenômenos naturais modelados matematicamente por um conjunto de EDP's.

Dada a importância e abrangência dessas equações, existe um grande interesse na comunidade científica por estudos teóricos e experimentais que possam auxiliar em solucionar-las. A maior parte desses estudos teóricos considera hipóteses idealizadas, onde os fenômenos físicos relacionados às equações são tratados de forma isolada e simplificada [44, 67].

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

Uma terceira opção na busca da compreensão desses fenômenos é a modelagem numérica das equações que descrevem os mesmos. Recentemente tem havido um grande interesse nessa abordagem, principalmente pelo aumento da capacidade de processamento dos computadores e pelo desenvolvimento de códigos computacionais eficientes em obter soluções numéricas para essas equações.

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

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

(a) Contexto do método SPH

Desde sua introdução para resolver problemas astrofísicos em 1977 nos trabalhos de Lucy [93] e Gingold e Monaghan [52], o método SPH tem sido estudado e entendido para modelar uma maior variedade de problemas, incluindo, além de problemas astrofísicos [14, 77, 120], problemas em hidrodinâmica [1, 100, 105, 136, 146] e mecânica dos sólidos [158, 123].

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

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

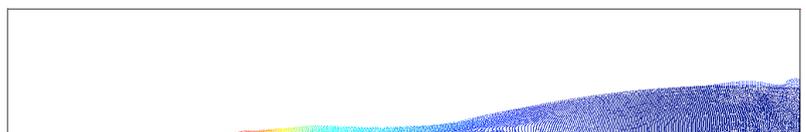
Mais ainda, como não é necessária nenhuma conectividade pré-definida entre as partículas da discretização, o método SPH é bastante atrativo para vários problemas onde outros métodos tradicionais encontram grandes dificuldades. Podemos citar como exemplos dessas dificuldades, no método de elementos finitos (MEF) [148] em simulações de fenômenos hidrodinâmicos, tais como explosão e impacto em alta velocidade, que possuem características especiais (grandes deformações do objeto, fronteiras deformáveis,...) que levam a grandes deformações na malha utilizada; e no método de diferenças finitas (MDF) [2] em simulações cujo domínio tem uma geometria complexa ou, simplesmente, irregular. Algumas aplicações do método SPH aos problemas citados são: impacto em alta velocidade [61, 69], explosão [81, 85, 131, 133] e simulações com geometrias complexas [74, 136].

Por último, outra característica atraente de SPH é a combinação da formulação lagrangeana com as partículas em simulações de escoamentos de fluidos. Ao contrário de outros métodos que não usam malhas [41, 50, 111], nos quais os elementos da discretização (nós ou partículas) são somente usados como pontos de interpolação, as partículas no método SPH também carregam propriedades físicas, movendo-se em função das interações entre si e de forças externas, e guardando toda a dinâmica do escoamento. Em particular, em simulações de escoamentos de fluidos, o método SPH captura facilmente a superfície livre ou a interface entre dois fluidos, tarefa esta bastante difícil ao utilizar métodos com malhas.

O método SPH, sendo um método de discretização por partículas, sem uso de malha e de formulação lagrangeana, tem sido usado em diferentes áreas para várias aplicações práticas. A formulação mais detalhada do método SPH será descrita nas próximas seções. Uma revisão de métodos sem malhas e/ou métodos de partículas é encontrado no trabalho de Li e Liu [80]. Em particular, vários outros trabalhos revisam o método SPH, destacando-se entre eles os de Benz [12] e de Monaghan [99].

(b) Formulação de SPH

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



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

Representação integral

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

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

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

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

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

A definição (2) é muitas vezes motivada pelo delta de Dirac. O delta de Dirac pode ser vista como uma distribuição $\delta(x)$ com

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

e satisfazendo

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

Essa definição, embora heurística, não deve ser tomada com rigor, principalmente porque nenhuma função pode ter as propriedades acima. De acordo com a teoria de integração de Lebesgue, se duas funções mensuráveis $f(x)$ e $g(x)$ são tais que $f(x) = g(x)$, exceto em um conjunto de medida nula ($\{0\}$), então $f(x)$ é integrável se, e somente se, $g(x)$ é integrável, e as integrais são iguais. Por isso, basta observar que $f(x) = \delta(x)$ e $g(x) = 0$ são iguais, exceto em $x = 0$, e diferem nos valores de sua integração. Uma definição rigorosa do delta de Dirac requer conceitos de teoria da medida [7, 68].

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

$$W^h(\mathbf{x}) = \frac{1}{h^n} W^1\left(\frac{1}{h} \|\mathbf{x}\|\right) , \quad (3)$$

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

$$\lim_{h \rightarrow 0} \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = f(\mathbf{u}) . \quad (4)$$

O núcleo W^h na representação integral (equação 2) é escolhido no método SPH satisfazendo (3) e, portanto, tendo as seguintes propriedades:

1. compacidade

$$W^h(\mathbf{x}) = 0 \text{ quando } \|\mathbf{x}\| > \kappa h \quad (5)$$

2. normalização

$$\int_{\mathbb{R}^n} W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = 1 \quad (6)$$

Na condição de compacidade (equação 5), o domínio efetivo (não-nulo) do núcleo W^h no ponto $\mathbf{u} \in \Omega$ é definida por

$$V(\mathbf{u}) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n ; \|\mathbf{x} - \mathbf{u}\| \leq \kappa h\} \quad (7)$$

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

Representação integral da derivada de uma função

Dada uma função $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^m$, definida em um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, para obtermos a representação integral de um operador diferencial da função f , utilizaremos o conceito de representação integral visto na seção anterior (equação 2), a condição de compacidade do núcleo W (equação 5) e o teorema de Gauss (ver Apêndice A).

Ao utilizar o conceito de representação integral (equação 2) para o operador diferencial $\nabla \cdot$ aplicado a função f obtemos

$$(\nabla \cdot f)^h(\mathbf{u}) \doteq \int_{\Omega} \nabla \cdot f(\mathbf{x}) W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} \quad (8)$$

Daí, usando a regra de derivação do produto

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

reescrevemos a equação (8) da seguinte forma

$$\begin{aligned} (\nabla \cdot f)^h(\mathbf{u}) &= \int_{\Omega} \nabla \cdot [f(\mathbf{x}) W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x})] d^n \mathbf{x} \\ &\quad - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} . \end{aligned} \quad (9)$$

Pelo teorema de Gauss (apêndice A(b)) o fluxo de um campo vetorial f através de uma superfície fechada S é igual ao divergente de f sobre a região R limitada por S . Portanto, usando-o na primeira integral na equação (9), temos

$$(\nabla \cdot f)^h(\mathbf{u}) = \int_{\partial\Omega} [f(\mathbf{x}) W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x})] \cdot \mathbf{n} dS - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x}. \quad (10)$$

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

Como o núcleo W^h é definido tendo suporte compacto, a integral de superfície na equação (10) é nula, exceto nos pontos cujo o suporte compacto contém pontos da superfície $\partial\Omega$. Portanto, para os pontos cujo suporte compacto está totalmente contido no domínio do problema, a equação (10) é simplificada da seguinte forma

$$(\nabla \cdot f)^h(\mathbf{u}) = - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x}. \quad (11)$$

Se o suporte intersecta a fronteira S do domínio, a integral de superfície na equação (10) pode ser não-nula. Sobre tais circunstâncias, isto é, se assumimos a equação (11) válida também nesses pontos, modificações devem ser feitas para avaliar os efeitos na superfície do domínio de integração. Veremos no capítulo 4 algumas alternativas para compensar a deficiência na aproximação em pontos próximos a superfície.

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

$$(\nabla f)^h(\mathbf{u}) = - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} W^h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x}. \quad (12)$$

Nas equações (11) e (12), notamos que a operação diferencial na função f é substituída por uma operação diferencial no núcleo W^h , onde o índice \mathbf{x} no operador diferencial ∇ representa a variável na qual é realizada a diferenciação. Em outras palavras, a representação integral da derivada de uma função segue os valores da função e da derivada espacial do núcleo, ao invés da derivada da própria função.

Aproximação por partículas

No método SPH, todo o sistema é representado por um número finito de partículas, distribuídas aleatoriamente no domínio do problema (figura 9).

As representações integrais obtidas para uma função f e suas derivadas em um ponto $\mathbf{u} \in \Omega$ (equações 2 e 11) podem ser discretizadas substituindo a integral no domínio Ω pelo somatório sobre todas as partículas que representam esse domínio. Usando, porém, a condição de compacidade (equação 5), a integração sobre o domínio do problema Ω se reduz à integração sobre o suporte compacto do núcleo e, portanto, o somatório também pode ser calculado localmente; operando-se apenas nas partículas que pertencem ao suporte compacto.

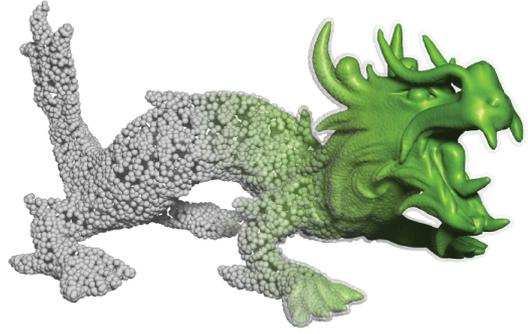


Figura 9: Representação do objeto por partículas.

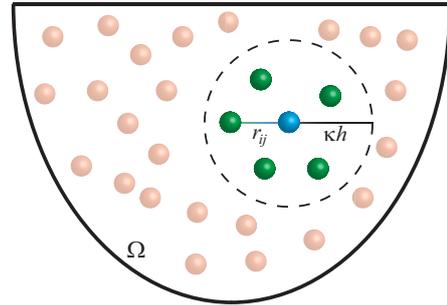


Figura 10: Somente partículas que pertencem ao suporte compacto da partícula i são usadas na aproximação por partículas.

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

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

onde ρ é a densidade da partícula.

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

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



$$\begin{aligned}
f^h(\mathbf{x}_i) &= \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) W^h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} \\
&= \int_{V_i} f(\mathbf{x}) W^h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} \\
&\approx \sum_{j \in V_i} f(\mathbf{x}_j) W^h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \Delta V_j \\
&\approx \sum_{j \in V_i} f(\mathbf{x}_j) W^h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \frac{1}{\rho_j} m_j
\end{aligned} \tag{13}$$

onde o somatório percorre todas as partículas que pertencem ao suporte do núcleo W^h no ponto \mathbf{x}_i (figura 10), definido por

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

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

Resumindo, as aproximações para uma partícula i são dadas por

$$\begin{aligned}
\left(\begin{array}{l} \text{função} \\ \text{escalar ou vetorial} \end{array} \right) \quad f_i &= \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} f_j W_{ij} \\
\left(\begin{array}{l} \text{divergente de uma} \\ \text{função vetorial} \end{array} \right) \quad \nabla \cdot \mathbf{f}_i &= \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} \mathbf{f}_j \cdot \nabla_i W_{ij} \\
\left(\begin{array}{l} \text{gradiente de uma} \\ \text{função escalar} \end{array} \right) \quad \nabla f_i &= \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} f_j \nabla_i W_{ij}
\end{aligned} \tag{14}$$

onde

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

com

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

Deve-se notar que o gradiente do núcleo é tomado com respeito a partícula i e portanto o sinal negativo nas equações (11) e (12) são removidos nas aproximações por partículas equações (14).

As aproximações por partículas (equações 14) discretizam as representações integrais contínuas de uma função e sua derivada, baseadas em um conjunto arbitrário de partículas. O uso dessa soma em partículas arbitrariamente distribuídas para aproximar a integral faz de SPH um método sem malha para integração numérica muito atraente para vários problemas, como por exemplo, simulações de fluidos que sofrem grandes deformações.

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

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

Computacionalmente, a eficiência do método também depende do número de partículas vizinhas, assim como da maneira como é determinada a vizinhança (conjunto de partículas vizinhas) de todas as partículas da simulação. No método SPH, o processo de encontrar a vizinhança de uma partícula é normalmente conhecido por *busca por partículas vizinhas*, ou simplesmente *busca por vizinhança*. Tal tarefa é de extrema importância ao método e será revisada na seção 4(c).

Segundo Liu e Liu [84] o número de partículas dentro do suporte compacto, em uma, duas e três dimensões, deve ser em torno de 5, 21 e 27, respectivamente. Essa análise considera as partículas distribuídas sobre uma grade com o comprimento suave $h = 1, 3\Delta x$, onde Δx é o espaço entre as partículas, e $k = 2$.

Vale citar, embora nas aplicações contidas neste livro o comprimento suave é mantido constante durante toda a simulação, em algumas aplicações do método SPH torna-se necessário determinar para cada partícula um comprimento suave, como por exemplo, em gases onde o fluido pode expandir ou contrair localmente [99, 132].

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

(c) Operadores SPH

As aproximações listadas na seção anterior (equações 14) para os operadores diferenciais são raramente usadas nos trabalhos que utilizam o método SPH. Outras aproximações resultantes de propriedades implícitas do próprio método, ou de identidades para os operadores diferenciais, se mostraram mais adaptadas à física do problema ou à definição matemática [106, 135].

Operadores de primeira ordem

Os operadores discretos obtidos na seção anterior são imprecisos e frequentemente não obedecem às propriedades de conservação associadas às equações no modelo contínuo quando aplicados à simulação de fluidos [80]. Entretanto, quando essa aproximação é combinada com um termo que contém a expressão nula

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

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

gradiente SPH I

$$\nabla f_i = \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} (f_j - f_i) \nabla_i W_{ij} \quad (15)$$

divergente SPH I

$$\nabla \cdot \mathbf{f}_i = \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} (\mathbf{f}_j - \mathbf{f}_i) \cdot \nabla_i W_{ij}. \quad (16)$$

Outras aproximações são encontradas na literatura. Para obter aproximações mais precisas para os operadores diferenciais em SPH, Monaghan [99] sugere escrever o gradiente de um campo escalar usando a regra da derivada do produto

$$\nabla f = \frac{1}{\rho} [\nabla(\rho f) - f \nabla \rho] \quad (17)$$

e similarmente o divergente de um campo vetorial como

$$\nabla \cdot \mathbf{f} = \frac{1}{\rho} [\nabla \cdot (\rho \mathbf{f}) - \mathbf{f} \cdot \nabla \rho]. \quad (18)$$

Daí, usando as equações (14), obtemos os operadores SPH descritos a seguir.

gradiente SPH II

$$\nabla f_i = \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j \in V_i} m_j (f_j - f_i) \nabla_i W_{ij} \right] \quad (19)$$

divergente SPH II

$$\nabla \cdot \mathbf{f}_i = \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j \in V_i} m_j (\mathbf{f}_j - \mathbf{f}_i) \cdot \nabla_i W_{ij} \right] \quad (20)$$

Note que cada expressão fora dos operadores diferenciais nas igualdades (17) e (18) são avaliadas na própria partícula. Observa-se também que essas aproximações são bastante semelhantes às aproximações obtidas anteriormente (equações 16 e 15). A diferença entre os conjuntos de operadores **I** e **II** é o uso do volume $\frac{m_j}{\rho_j}$ nas equações (15) e (16) ao invés de $\frac{m_j}{\rho_i}$ (observe a mudança de índice) utilizado nas equações (19) e (20). Segundo Colagrossi e Landrini [27], o primeiro conjunto de operadores fornece resultados mais precisos na simulação de escoamento bi-fásico com uma pequena variação de densidade entre os fluidos.

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

$$\frac{\nabla f}{\rho} = \frac{1}{\rho^{2-\sigma}} \nabla \left(\frac{f}{\rho^{\sigma-1}} \right) + \frac{f}{\rho^\sigma} \nabla \left(\frac{1}{\rho^{1-\sigma}} \right). \quad (21)$$

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

gradiente SPH III

$$\nabla f_i = \rho_i \left[\sum_{j \in V_i} m_j \left(\frac{f_j}{\rho_j^2} + \frac{f_i}{\rho_i^2} \right) \nabla_i W_{ij} \right] \quad (22)$$

divergente SPH III

$$\nabla \cdot \mathbf{f}_i = \rho_i \left[\sum_{j \in V_i} m_j \left(\frac{\mathbf{f}_j}{\rho_j^2} + \frac{\mathbf{f}_i}{\rho_i^2} \right) \cdot \nabla_i W_{ij} \right] \quad (23)$$

Uma característica dos operadores obtidos nessa seção é que a iteração entre partículas aparecem explicitamente no operador SPH. Note que nos conjuntos de operadores **I** e **II**, o termo $-f_j$ assegura que a aproximação dos operadores diferenciais para funções constantes seja exata. Mais ainda, em funções que diferem por uma constante, qualquer uma dessas aproximações, obtêm o mesmo resultado para ambas as funções [121].

Operador laplaciano SPH

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

De imediato, poderíamos obter a aproximação básica para o laplaciano de uma função escalar usando as representações integrais dos operadores gradiente e divergente (equações 11 e 12) para obtermos a representação integral do laplaciano

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

Consequentemente, obtêm-se o seguinte operador laplaciano

$$\nabla^2 f_i = \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} f_j \nabla_i^2 W_{ij} \quad (24)$$

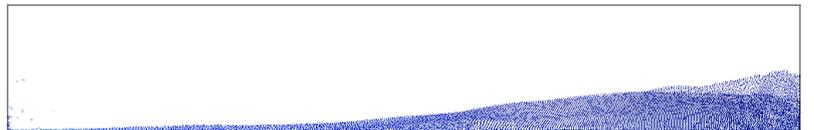
Porém, a equação (24) possui algumas desvantagens. Dentre elas, essa aproximação é muito sensível à desordem de partículas [26].

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

$$\nabla^2 f = \nabla \cdot (\nabla f), \quad (25)$$

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

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



Como exemplo, pode-se usar os operadores gradiente e divergente SPH definidos nas equações (19) e (20) para obter a seguinte aproximação resultante da composição desses dois operadores.

laplaciano SPH I

$$\nabla^2 f_i = \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j \in V_i} m_j \left((\nabla f)_j^h - (\nabla f)_i^h \right) \cdot \nabla_i W_{ij} \right] \quad (26)$$

onde

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

é a aproximação SPH para o gradiente da função f .

Outra aproximação encontrada na literatura de SPH [28] é dada pela seguinte identidade

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

Reescrevendo-a da seguinte forma

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

e aplicando diretamente os operadores laplaciano SPH básico e gradiente SPH II (equações 24 e 19) nos respectivos operadores encontrados na identidade acima, obtém-se uma nova aproximação descrita a seguir.

laplaciano SPH II

$$\nabla^2 f_i = \sum_{j \in V_i} m_j (f_j - f_i) \left(\nabla_i^2 W_{ij} - \frac{2}{\rho_i^2} \nabla_i W_{ij} \cdot \nabla \rho_i \right), \quad (27)$$

onde

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

e

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

No operador laplaciano SPH II (equação 27), o termo $\nabla \rho_i$ é pré-calculado usando um dos operadores gradiente SPH.

A desvantagem em usar os operadores laplacianos SPH definidos nas equações (26) e (27) está na necessidade de realizar, para cada partícula, dois somatórios para obter a aproximação SPH para o laplaciano de uma função, o que é computacionalmente muito caro. A próxima, e última, aproximação evita esse problema.

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

$$\begin{aligned} f(x, y) = & f(a, b) + (x - a) \frac{\partial f}{\partial x}(a, b) + (y - b) \frac{\partial f}{\partial y}(a, b) \\ & + \frac{1}{2} \left((x - a)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(a, b) + (y - b)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(a, b) \right) \\ & + (x - a)(y - b) \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(a, b) \\ & + O(\|(x, y) - (a, b)\|^3). \end{aligned} \quad (28)$$

Assumindo a igualdade dada pela expressão (28) sem os termos de ordem superior a dois, obtém-se a aproximação para a função f dada por

$$\begin{aligned} f(x, y) = & f(a, b) + (x - a) \frac{\partial f}{\partial x}(a, b) + (y - b) \frac{\partial f}{\partial y}(a, b) \\ & + \frac{1}{2} \left((x - a)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(a, b) + (y - b)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(a, b) \right) \\ & + (x - a)(y - b) \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(a, b) \end{aligned} \quad (29)$$

Cleary e Monaghan [26] utilizam as propriedades de simetria e normalização do núcleo W listadas na seção 2(d), para mostrar os seguintes resultados

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

e

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

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

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

Deixamos as demonstrações dos resultados para o leitor.

Portanto, multiplicando a expressão (29) por

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

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

$$\nabla^2 f(\mathbf{u}) = 2 \int \frac{f(\mathbf{u}) - f(\mathbf{x})}{\|\mathbf{u} - \mathbf{x}\|^2} (\mathbf{u} - \mathbf{x}) \nabla_u W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n x. \quad (30)$$

A aproximação (30) pode agora ser facilmente discretizada usando a aproximação por partículas, na qual usa-se apenas derivada de primeira ordem do núcleo.

laplaciano SPH III

$$\nabla^2 f_i = 2 \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} \frac{f_i - f_j}{r_{ij}} \mathbf{x}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij}. \quad (31)$$

O laplaciano definido pela equação (31) é obtido diretamente, isto é, sem a necessidade de calcular outras aproximações SPH.

Na tese de Petronetto [121] é apresentada uma comparação entre os principais operadores diferenciais definidos na literatura de SPH. As versões apresentadas para cada operador diferencial (gradiente, divergente e laplaciano) são analisadas estatisticamente. Em vários cenários, variando a densidade de partículas da representação de um domínio, funções analíticas definem propriedades nas partículas e, portanto são também conhecidos os valores dos operadores diferenciais para essa propriedade em cada partícula. A partir daí, as versões para um mesmo operador diferencial são utilizadas para obter as aproximações desejadas e os resultados encontrados são analisados e comparados.

(d) Núcleos SPH

O método SPH utiliza as representações integrais (2) e (11), para aproximar uma função e sua derivada, usando uma função suave W^h como núcleo. O núcleo é de extrema importância, pois não somente determina o padrão da aproximação, como também define a dimensão do suporte das partículas, e determina a consistência e, conseqüentemente, a precisão de ambas as aproximações: integral e por partículas.

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

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

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

2. o núcleo deve ser **normalizado**

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

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

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

4. o núcleo deve ser **positivo**

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

5. o núcleo deve ser **decrecente**

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

6. o núcleo deve ser **simétrico**

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

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

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

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

A quarta propriedade significa que o núcleo deve ser não-negativo no suporte. Essa propriedade não é necessária para a convergência, mas é importante para assegurar aproximações coerentes para propriedades físicas envolvidas em um dado problema. Por exemplo, valores negativos para o núcleo podem resultar em densidades negativas. Alguns trabalhos, porém, utilizam núcleos que em algumas regiões têm valores negativos; podemos citar o núcleo usado no trabalho de Monaghan e Lattanzio [97].

A quinta e sexta propriedades são importantes para determinar a influência (em relação ao núcleo) das interações entre partículas de acordo com a distância entre elas. Partículas mais próximas devem influenciar mais do que partículas mais distantes, enquanto que partículas à mesma distância, mas em diferentes posições, tenham a mesma influência. Essas propriedades não são fundamentais e, as vezes, são transgredidas [82].

Qualquer função, com as propriedades anteriores, pode ser empregada como um núcleo em SPH. Diferentes funções são encontradas em diversos trabalhos que utilizam o método SPH [33, 109]. Lucy [93] utilizou a seguinte função como núcleo:

$$W^h(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = W^h(R) = \alpha_d \begin{cases} (1 + 3R)(1 - R)^3, & 0 \leq R < 1 \\ 0, & R \geq 1 \end{cases} \quad (32)$$

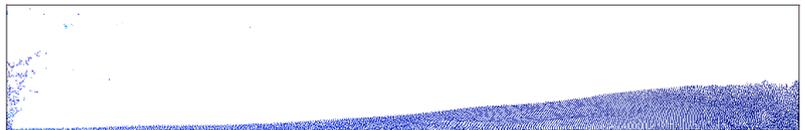
onde α_d é uma constante de normalização, obtida pela condição de normalização (propriedade 2), e R é a distância relativa entre duas partículas

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

Monaghan [99] afirma que é sempre melhor utilizar como núcleo uma função gaussiana. A seguinte função gaussiana foi utilizada em seu trabalho original [52] em astrofísica:

$$W^h(R) = \alpha_d e^{-R^2}. \quad (33)$$

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



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

Inicialmente, Monaghan e Lattanzio [97] utilizaram um núcleo spline cúbico

$$W^h(R) = \alpha_d \begin{cases} \frac{2}{3} - R^2 + \frac{1}{2}R^3, & 0 \leq R < 1 \\ \frac{1}{6}(2-R)^3, & 1 \leq R < 2 \\ 0, & R \geq 2 \end{cases} \quad (34)$$

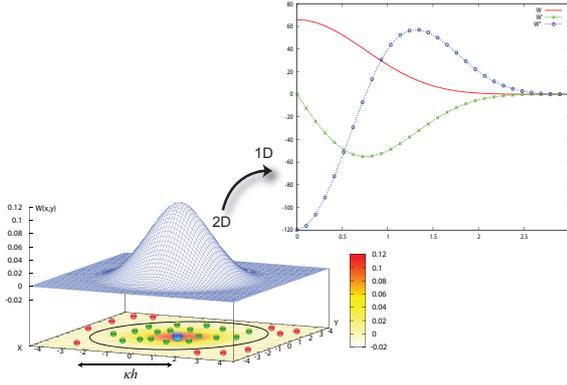


Figura 11: Função núcleo: partículas que distam mais do que κh não são utilizadas nas aproximações. Em destaque os gráficos do núcleo 1d e de suas derivadas de primeira e segunda ordem.

Posteriormente, Morris [103, 104] introduziu splines de graus mais alto que aproximam melhor a função gaussiana e são mais estáveis. A figura 11 ilustra o núcleo spline quártico definido por

$$W^h(R) = \alpha_d \begin{cases} (3-R)^5 - 6(2-R)^5 - 15(1-R)^5, & 0 \leq R < 1 \\ (3-R)^5 - 6(2-R)^5, & 1 \leq R < 2 \\ (3-R)^5, & 2 \leq R < 3 \\ 0, & R \geq 3 \end{cases} \quad (35)$$

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

Liu e Liu [86] propõem uma pequena alteração no núcleo proposto por Lucy (equação 32), assegurando resultados mais precisos e estáveis (figura 12). O novo núcleo de quarta ordem é dado pela seguinte expressão:

$$W^h(R) = \alpha_d \begin{cases} \frac{2}{3} - \frac{9}{8}R^2 + \frac{19}{24}R^3 - \frac{5}{32}R^4, & 0 \leq R < 2 \\ 0, & R \geq 2 \end{cases} \quad (36)$$

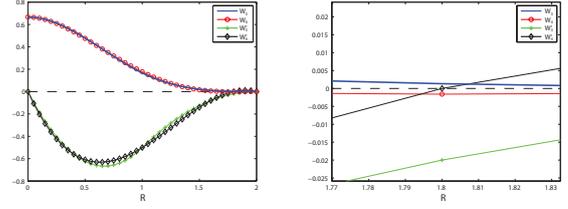


Figura 12: Núcleos 1D spline cúbico W_3 e quártico W_4 com suas respectivas derivadas ($\kappa = 2$ e $h = 1$).

onde, dada a dimensão d do problema, temos

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

O núcleo dado pela equação (36) satisfaz a condição de normalização; tem, assim como sua derivada, suporte compacto e aproxima o núcleo spline cúbico (equação 34) e, conseqüentemente, o núcleo gaussiano. Além dessas propriedades, tem a segunda derivada suave, e essa propriedade está diretamente ligada à questão da estabilidade do método SPH [103, 134]. Por outro lado, esse núcleo não possui as propriedades de positividade e decrescimento. A figura 12 ilustra esse núcleo de quarta ordem (equação 36) juntamente com o núcleo spline cúbico (equação 34).

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

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

onde $R = \|\mathbf{x}\|/h$. Essa é uma escolha natural para funções núcleos em SPH, embora alguns trabalhos utilizem núcleos que não repetem este padrão [90, 82, 127]. Uma análise do comportamento de vários núcleos em uma dimensão pode ser encontrada no trabalho de Fulk e Quinn [49].

Consistência do núcleo

No tradicional método de diferenças finitas (MDF), o conceito de *consistência* define o quanto um sistema de equações discretas se aproxima das EDP's que modelam o problema físico [2]. O teorema de equivalência de Lax-Richtmyer [76] diz que, dado um problema bem posto, isto é, um problema que depende continuamente das condições iniciais, em um esquema de interpolação numérica (em MDF) consistente a existência de estabilidade é uma condição necessária e suficiente para a convergência do sistema linear de equações obtidas pelo esquema.

De maneira semelhante, usando expansão em série de Taylor, uma análise das aproximações SPH pode ser considerada. Primeiramente, essa análise é considerada sobre as aproximações contínuas do método SPH, obtidas pelas representações integrais de uma função e suas derivadas (seção 2.b(i)). No que se segue, veremos que condições devem ser satisfeitas para que uma função defina um núcleo no método SPH de tal forma que as aproximações tenham certa ordem de precisão. Além disso, essas condições podem ser usadas para definir núcleos no método SPH de forma sistemática [86].

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

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

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

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k f^{(k)}(\mathbf{u})}{k!} (\mathbf{u} - \mathbf{x})^k + r_n(\mathbf{u} - \mathbf{x}) \quad (37)$$

de onde, substituindo essa série na representação integral, obtemos

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

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

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

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

De maneira análoga, podemos fazer uma análise para a representação integral da derivada de uma função. Deno-

tando a fronteira do domínio Ω por $S = \partial\Omega$ temos que

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

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

Da mesma forma que determinamos os momentos M_k , ao substituir a expansão em série de Taylor (equação 37) na segunda integral da igualdade acima, podemos dizer que, se as seguintes equações são satisfeitas, então $f'(\mathbf{u})$ é uma aproximação de ordem n .

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

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

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

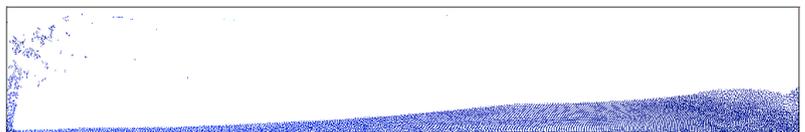
$$\int_S f(\mathbf{x}) W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} dS = 0$$

Essa igualdade foi usada na definição da representação integral da derivada de uma função (seção 2.b(i)). Além disso, o momento M'_0 pode ser facilmente obtido dado a restrição nula do núcleo a superfície S . Mais ainda, se essa restrição é satisfeita, os momentos M'_k (exceto $k = 0$) podem ser obtidos a partir dos momentos M_k pela a seguinte relação.

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

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

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



$$\begin{cases} f(\mathbf{u}) \doteq \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} \\ f'(\mathbf{u}) \doteq - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) W'(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} \\ f''(\mathbf{u}) \doteq \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) W''(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} \end{cases} \quad (38)$$

são aproximações de ordem n se o núcleo satisfaz

$$\begin{cases} M_0 = \int_{\Omega} W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = 1 \\ M_1 = \int_{\Omega} (\mathbf{u} - \mathbf{x}) W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = 0 \\ M_2 = \int_{\Omega} (\mathbf{u} - \mathbf{x})^2 W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = 0 \\ \vdots \\ M_n = \int_{\Omega} (\mathbf{u} - \mathbf{x})^n W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = 0 \end{cases} \quad (39)$$

e

$$\begin{cases} W(\mathbf{u} - \mathbf{x})|_S = 0 \\ W'(\mathbf{u} - \mathbf{x})|_S = 0. \end{cases} \quad (40)$$

A análise baseada em expansão em séries de Taylor está diretamente relacionada ao conceito de consistência para MDF. Similarmente, o conceito de consistência em métodos de elementos finitos (MEF) também pode ser aplicado ao método SPH. Em MEF a consistência é caracterizada pela maior ordem polinomial que pode ser exatamente reproduzida usando uma função base [87]. Pode-se mostrar que, no método SPH, a representação integral reproduz exatamente polinômios de grau menor que ou igual a n desde que as condições (39) sejam satisfeitas pelo núcleo. Por exemplo, para que um campo constante (ordem polinomial zero) $f(\mathbf{x}) = c$ possa ser exatamente reproduzido pela representação integral de uma função (equação 2), devemos ter

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

É fácil verificar que a condição de normalização, primeira equação nas condições (39), é a condição necessária para a representação integral aproximar exatamente um polinômio de ordem zero.

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

Exercício (médio). Mostre que a representação integral de uma função reproduz exatamente um polinômio de grau n se todos os momentos M_k (equações 39), $k = 0, 1, \dots, n$ forem satisfeitos pelo núcleo.

Consistência da aproximação por partículas

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

O problema no qual as aproximações por partículas dos momentos M_k 's (equações 39) não são satisfeitas em métodos de partículas é conhecido como *inconsistência de partículas* [10, 103]. A versão discreta da consistência é dada por:

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^N W(\mathbf{u} - \mathbf{x}_j) d^n \mathbf{x}_j = 1 \\ \sum_{j=1}^N (\mathbf{u} - \mathbf{x}_j)^k W(\mathbf{u} - \mathbf{x}_j) d^n \mathbf{x}_j = 0, \quad k = 1, \dots, n \end{cases} \quad (41)$$

onde N é o número de partículas que pertencem ao suporte compacto da partícula localizada em \mathbf{x} . Mas, essa consistência discreta não é sempre satisfeita. Podemos citar dois exemplos onde as equações (41) não são satisfeitas. O simples caso de partículas que estão próximas a fronteira do domínio de tal forma que o suporte compacto intersekte a fronteira ou, mesmo com o suporte contido no domínio, quando as partículas estão irregularmente distribuídas. A figura 13 ilustra esses casos.

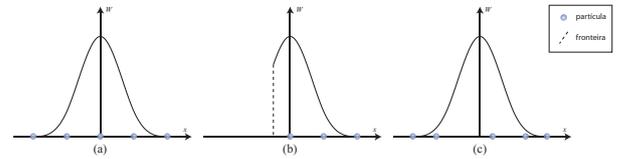


Figura 13: Aproximações por partículas. Da esquerda para a direita: (a) amostragem densa de partículas no suporte compacto; (b) o suporte compacto intersekte a fronteira do domínio e (c) uma distribuição irregular de partículas no suporte compacto.

Existem diferentes maneiras para tentar obter as condições de consistência na forma discreta [34, 35, 88, 83, 82]. Liu, Liu e Lam [86] descrevem um algoritmo para construção de um núcleo polinomial de grau n

$$W^h(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) = \sum_{I=1}^n b_I(\mathbf{x}, h) \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_j}{h} \right)^I, \quad (42)$$

tal que as condições de consistência discretas para uma aproximação de ordem n (equações 41) sejam satisfeitas.

Os coeficientes $b_I(\mathbf{x}, h)$ são determinados pelo algoritmo resolvendo o seguinte sistema, obtido ao substituir o núcleo polinomial (equação 42) em todos os momentos

discretos (equações 41).

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

onde

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

Após determinar os coeficientes $b_I(\mathbf{x}, h)$, o núcleo polinomial da equação (42) determina uma aproximação por partículas com consistência de ordem n (seção 2.b(ii)). Porém o elevado custo desse método deve ser levado em consideração, o qual concentra-se em construir essa matriz de momento e resolver o sistema determinado por ela para cada partícula. Mais ainda, para resolver o problema, a matriz deve ser não-singular e, portanto, a distribuição das partículas deve satisfazer certas condições. Por último, vale ressaltar, que o núcleo obtido pode não ter algumas propriedades desejáveis, como por exemplo: positividade e simetria.

3 Dinâmica dos fluidos usando SPH

Esse capítulo apresenta as equações matemáticas que modelam o comportamento físico dos escoamentos de fluidos e a aproximação numérica de cada uma dessas equações através do método SPH.

(a) Navier-Stokes na forma lagrangeana

A forma lagrangeana das equações de Navier-Stokes descreve o comportamento de um fluido no ponto de vista de um elemento de fluido infinitesimal que se move com velocidade \mathbf{v} junto com o escoamento e ocupa uma posição \mathbf{x} em certo instante de tempo t . Esse comportamento no espaço euclidiano é descrito através do conjunto de equações:

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbb{T} + \mathbf{g} \quad (43)$$

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v}. \quad (44)$$

Nas equações acima, ρ é a densidade do fluido, p é a pressão do fluido, o vetor $\mathbf{v} = (v_1, v_2, v_3)$ representa a velocidade do fluido, \mathbf{g} é o vetor da aceleração da gravidade e \mathbb{T} é um tensor simétrico 3×3 :

$$\mathbb{T} = \begin{pmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{pmatrix}. \quad (45)$$

Os coeficientes do tensor \mathbb{T} estão relacionados as forças internas de resposta do elemento de fluido a uma força externa aplicada sobre ele, essa força de resposta é denominada *tensão*. Assim, cada coeficiente τ_{ij} representa a tensão

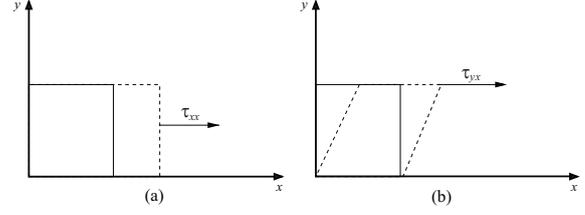


Figura 14: Tensões exercidas sobre um elemento de fluido. (a) Tensão normal tende a esticar ou a comprimir o elemento. (b) Tensão de cisalhamento tende a deformar o elemento.

exercida na direção j sobre um plano perpendicular ao eixo i . Esse tensor é chamado de *tensor extra-tensão* ou *tensor de tensões*. O divergente do tensor \mathbb{T} é dado por:

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

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

Equação de conservação do momento

A equação (43) é uma aplicação direta da segunda lei de Newton e diz respeito à conservação do momento, isto é, a taxa de variação temporal do momento do fluido é igual à resultante de forças \mathbf{F} que atuam sobre o fluido. Logo, um fluido pode ser representado por uma coleção de elementos de fluido, onde cada elemento de fluido possui massa m , tem velocidade \mathbf{v} , aceleração \mathbf{a} e ocupa um volume infinitesimal ΔV cuja forma pode variar ao longo do escoamento. Assim, para cada elemento de fluido podemos escrever a segunda lei de Newton através da famosa equação:

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a}. \quad (46)$$

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

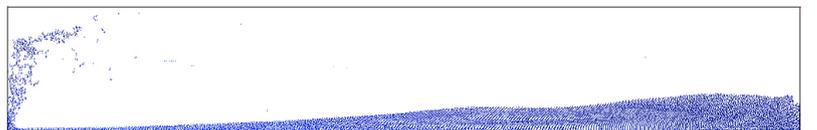
$$\mathbf{a} = \frac{D\mathbf{v}}{Dt}. \quad (47)$$

Usando a equação (47) podemos reescrever a equação (46) como:

$$\mathbf{F} = m \frac{D\mathbf{v}}{Dt}. \quad (48)$$

Agora nos resta falar das forças exercidas sobre um elemento de fluido. Essas forças são classificadas em *forças de campo* e *forças de superfície*. As forças de campo agem na massa do fluido como um todo, isto é, sobre cada elemento de fluido. Exemplos dessas forças são: a força gravitacional, eletromagnética e centrífuga. As forças de superfície agem diretamente na superfície do elemento de fluido e são decorrentes das:

1. *Forças de pressão*: agem perpendicularmente à superfície do elemento de fluido em decorrência da pressão exercida por um elemento exterior que envolve o elemento de fluido, pois em regiões de alta pressão, o elemento de fluido é comprimido. Enquanto



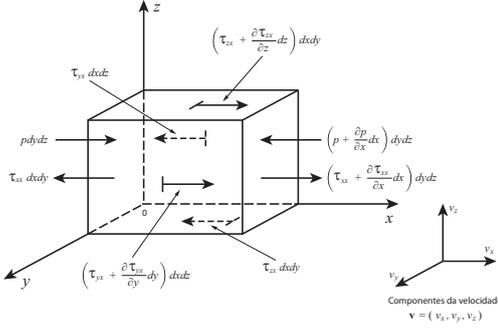


Figura 15: Forças exercidas sobre um elemento de fluido na direção do eixo x .

em regiões de baixa pressão, o elemento tende a se esticar. Portanto, as forças de pressão são proporcionais a variação temporal do volume do elemento de fluido.

2. *Tensões viscosas normais e de cisalhamento*: as tensões normais agem também perpendicularmente à superfície do elemento de fluido, alterando o seu volume (figura 14(a)). Enquanto que as tensões de cisalhamento agem tangencialmente à superfície do elemento por meio da fricção com elementos vizinhos causando-lhe uma deformação cisalhante (figura 14(b)). A distribuição dessas tensões nos coeficientes do tensor extra-tensão \mathbb{T} (equação (45)) se dá da seguinte forma: os coeficientes da diagonal de \mathbb{T} (τ_{xx} , τ_{yy} e τ_{zz}) são as tensões normais e os demais coeficientes (τ_{xy} , τ_{xz} , τ_{yx} , τ_{yz} , τ_{zx} , τ_{zy}) são as tensões de cisalhamento.

Consideremos um elemento de fluido com a forma de um paralelepípedo, utilizando a figura 15, vamos calcular a força resultante exercida sobre um elemento de fluido na direção do eixo x :

$$\begin{aligned}
 F_x &= - \left[\left(p + \frac{\partial p}{\partial x} dx \right) - p \right] dydz \\
 &+ \left[\left(\tau_{xx} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} dx \right) - \tau_{xx} \right] dydz \\
 &+ \left[\left(\tau_{yx} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} dy \right) - \tau_{yx} \right] dx dz \\
 &+ \left[\left(\tau_{zx} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} dz \right) - \tau_{zx} \right] dx dy \\
 &= \left(-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) dx dy dz, \tag{49}
 \end{aligned}$$

Se a força de campo por unidade de massa exercida sobre o elemento de fluido é $\mathbf{F} = (F_x, F_y, F_z)$ e a aceleração

do elemento é $\mathbf{a} = \left(\frac{Dv_x}{Dt}, \frac{Dv_y}{Dt}, \frac{Dv_z}{Dt} \right)$, então através da segunda lei de Newton (48) e pelo fato de $m = \rho \Delta V = \rho dx dy dz$ obtemos:

$$\begin{aligned}
 \rho dx dy dz \frac{Dv_x}{Dt} &= - \frac{\partial p}{\partial x} dx dy dz + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} dx dy dz \\
 &+ \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} dx dy dz + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} dx dy dz \\
 &+ F_x (\rho dx dy dz) \tag{50}
 \end{aligned}$$

Portanto, a equação do momento na direção x é:

$$\frac{Dv_x}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + F_x. \tag{51}$$

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

$$\frac{Dv_y}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + F_y, \tag{52}$$

$$\frac{Dv_z}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} + F_z. \tag{53}$$

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

$$\tau_{ij} = 2\mu \left[\mathbb{D}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \text{traço}(\mathbb{D}) \right] \tag{54}$$

com

$$\mathbb{D}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right), \tag{55}$$

lembrando que δ_{ij} é o delta de Kronecker e a constante de proporcionalidade μ é denominada de *coeficiente de viscosidade dinâmica do fluido*. No capítulo 6, abordaremos fluidos que possuem um comportamento mais complexo, onde a tensão τ possui uma dependência não-linear com o tensor \mathbb{D} .

Quando supomos que a única força de campo exercida sobre os elementos de fluido é a força gravitacional $\mathbf{F}_g = m\mathbf{g}$, podemos agrupar as equações do momento (51), (52) e (53) na forma vetorial para obter finalmente a equação do momento (43):

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

onde

$$\mathbb{T} = 2\mu \left[\mathbb{D} - \frac{1}{3} \text{traço}(\mathbb{D}) \mathbb{I} \right], \quad \text{com} \quad \mathbb{D} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T). \tag{56}$$

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

Equação de conservação da massa

A equação (44) obedece a lei de conservação da massa e é conhecida como equação da continuidade. Na mecânica dos fluidos, um volume arbitrário no espaço através do qual o fluido escoar, recebe o nome de *volume de controle*. Na ausência de fontes de massa ou de locais onde a massa possa desaparecer, o balanço de massa dentro de um volume de controle fixo no espaço pode ser traduzido como:

Fluxo de massa resultante através da fronteira do volume de controle	=	Variação temporal do decréscimo da massa no volume de controle
--	---	--

Assim, dado um volume de controle finito ocupado pelo fluido em um instante de tempo, vamos denotar por Ω esse volume e $S = \partial\Omega$ a sua superfície (fechada). A variação da quantidade total da massa dentro do volume Ω é dada por:

$$\int_S \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS = - \int_{\Omega} \frac{\partial \rho}{\partial t} d\Omega, \quad (57)$$

onde \mathbf{n} é um vetor normal (unitário e exterior) à superfície S . A expressão $\rho \mathbf{v}$ é denominada de *fluxo de massa*.

Utilizando o teorema de Gauss no lado esquerdo da equação (57) temos:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) d\Omega = - \int_{\Omega} \frac{\partial \rho}{\partial t} d\Omega.$$

Podemos reescrever a equação anterior da seguinte forma:

$$\int_{\Omega} \left[\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) + \frac{\partial \rho}{\partial t} \right] d\Omega = 0. \quad (58)$$

Supondo que o integrando da equação (58) seja contínua. Por outro lado, essa equação nos diz que a integral em um instante de tempo arbitrário, sobre um volume qualquer é nula. Isto só é possível se

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \quad (59)$$

Finalmente, a equação da continuidade na forma lagrangeana (equação 44) é deduzida diretamente da equação (59) e da seguinte identidade:

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = \rho \nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho. \quad (60)$$

Substituindo a equação (60) na equação (59) obtemos:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v}. \quad (61)$$

Os dois termos do lado esquerdo da equação (61) são a derivada material da densidade. Dai, a equação (61) se torna:

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

Observamos que deduzimos a equação da continuidade na forma euleriana (equação 59) para depois conseguir a forma lagrangeana (equação 44), tarefa realizada graças à derivada material. Uma dedução direta da equação da continuidade na forma lagrangeana pode ser encontrada em [84]; uma maneira mais elegante de demonstrar a equação da continuidade pode ser feita através do *teorema do transporte* [139].

(b) Incompressibilidade

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

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

Dessa maneira a equação da continuidade (44) toma a forma simples:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (62)$$

Matematicamente, um fluido que escoar através de um campo velocidade de divergência nula é incompressível. A restrição (62) é dita *condição de incompressibilidade*. Uma rica classe de fluidos incompressíveis são os líquidos. Entretanto, no mundo real nenhum fluido é realmente incompressível, até mesmo um líquido pode ter a sua densidade aumentada aplicando-se uma pressão suficiente.

Além disso, através da condição de incompressibilidade, podemos simplificar o tensor extra-tensão \mathbb{T} dado na equação (56):

$$\mathbb{T} = 2\mu \mathbb{D}, \quad \text{com} \quad \mathbb{T}_{ij} = \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right). \quad (63)$$

Utilizando a equação anterior temos:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbb{T} &= \mu [\nabla \cdot \nabla \mathbf{v} + \nabla \cdot (\nabla \mathbf{v}^T)] \\ &= \mu [\nabla (\nabla \cdot \mathbf{v}) + \nabla^2 \mathbf{v}] \\ &= \mu \nabla^2 \mathbf{v}, \end{aligned} \quad (64)$$

onde $\nabla^2 \mathbf{v} = (\nabla^2 v_1, \nabla^2 v_2, \nabla^2 v_3)$ é chamado de *vetor laplaciano*. Com isso, podemos simplificar a equação do momento (43):

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{g}. \quad (65)$$



Intuitivamente a viscosidade de um fluido descreve o quanto um fluido em movimento resiste à deformação, isto é, a maneira como a velocidade do fluido se dissipa. Logo, nada mais natural do que o surgimento do vetor laplaciano $\nabla^2 \mathbf{v}$ no termo das tensões viscosas na equação acima. Pois o operador diferencial relacionado à dissipação física é o operador laplaciano ∇^2 , para isso basta lembrar da equação do calor.

Portanto, para simular escoamentos de fluidos incompressíveis, utilizam-se as equações (62) e (65). Essas equações são conhecidas como as *equações de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis na forma lagrangeana*.

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

(c) Discretização SPH das Equações de Navier-Stokes

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

Aproximação SPH da equação do momento

A aceleração em cada partícula i é calculada através da equação do momento (65):

$$\frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} = -\frac{1}{\rho_i} \nabla p_i + \frac{\mu}{\rho_i} \nabla^2 \mathbf{v}_i + \mathbf{g}. \quad (66)$$

A idéia aqui é aplicar as regras de aproximação SPH, discutidas no capítulo 2, nos dois primeiros termos, pressão e viscosidade, do lado direito da equação (66). Primeiro vamos aproximar termo proveniente das forças exercidas pela pressão na partícula e em seguida vamos aproximar o termo viscoso $\frac{\mu}{\rho_i} \nabla^2 \mathbf{v}_i$.

Equações de estado Tradicionalmente no método SPH a pressão, ao contrário dos métodos com malha onde ela é a solução implícita de uma equação de Poisson [130], é uma função explícita da densidade local do fluido semelhante as equações de estado da termodinâmica [47].

Apesar do método SPH ter sido criado para simular fluidos compressíveis, podemos aproximar um fluido incompressível por um fluido *quase-incompressível* utilizando uma equação de estado [100]. Assim a pressão p_i pode ser calculada por uma equação de estado sugerida por Batchelor [8] e tem a forma:

$$p_i = B \left[\left(\frac{\rho_i}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right], \quad (67)$$

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

flutuações de densidade do fluido e é estimado por

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

onde c é a velocidade do som. A velocidade do som representa a velocidade pontual mais rápida de propagação de onda naquele meio, nas simulações SPH ela é escolhida como sendo aproximadamente dez vezes a maior velocidade esperada no escoamento do fluido, isto é, um número de Mach em torno de 0.1. A equação (67) é conhecida como *equação de Tait*. Posteriormente, Morris *et al.* [105] simularam fluidos quase-incompressíveis de alta viscosidade através da seguinte equação de estado:

$$p_i = c^2 (\rho_i - \rho_0). \quad (68)$$

O cálculo da pressão ainda continua sendo um ponto delicado nas simulações de fluidos incompressíveis usando SPH, pois há uma dificuldade de manter a incompressibilidade do fluido devido à falta de um controle explícito da densidade global. No capítulo 5 vamos mostrar uma variante do método SPH para simular escoamentos de fluidos incompressíveis, isto é, escoamentos que satisfazem a condição de incompressibilidade (62).

Gradiente da pressão Após atualizar a pressão em todas as partículas usando uma das equações de estado acima, podemos avaliar em cada partícula o gradiente da pressão na equação do momento (66). Uma maneira de calcular o gradiente da pressão é dada pela aproximação SPH do gradiente (22):

$$-\frac{1}{\rho_i} \nabla p_i = -\sum_{j \in V_i} m_j \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} \right) \nabla_i W_{ij}. \quad (69)$$

Termo viscoso O cálculo do termo viscoso $\frac{\mu}{\rho_i} \nabla^2 \mathbf{v}_i$ da equação do momento (66) pode ser aproximado numericamente através da aproximação SPH do laplaciano (31) aplicada em cada coeficiente do vetor laplaciano $\nabla^2 \mathbf{v}_i$:

$$\frac{\mu}{\rho_i} \nabla^2 \mathbf{v}_i = \frac{2\mu}{\rho_i} \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} \mathbf{v}_{ij} \frac{\mathbf{x}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij}}{r_{ij}^2}, \quad (70)$$

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

Finalmente, através das equações (69) e (70), para cada partícula i a versão SPH da equação do momento (66) é dada por:

$$\begin{aligned} \frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} = & - \sum_{j \in V_i} m_j \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} \right) \nabla_i W_{ij} \\ & + \frac{2\mu}{\rho_i} \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} \mathbf{v}_{ij} \frac{\mathbf{x}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij}}{r_{ij}^2} + \mathbf{g}. \end{aligned} \quad (71)$$

Aproximações SPH da densidade

Nos métodos SPH tradicionais, a aproximação da densidade em uma partícula i é feita diretamente através da aproximação SPH (13):

$$\rho_i = \sum_{j \in V_i} \rho_j W_{ij} \frac{m_j}{\rho_j} = \sum_{j \in V_i} m_j W_{ij}. \quad (72)$$

Entretanto, a aproximação (72) requer um ciclo extra de computação, pois a densidade é calculada antes dos outros parâmetros, tornando assim a simulação mais lenta no ponto de vista computacional. Outra opção para o cálculo da densidade é através da equação da continuidade (44), simplesmente aplicando a aproximação SPH do divergente (16) na equação (44). Assim, a versão SPH da equação da continuidade é da forma:

$$\frac{D\rho_i}{Dt} = -\rho_i \sum_{j \in V_i} (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) \cdot \nabla_i W_{ij} \frac{m_j}{\rho_j}. \quad (73)$$

A densidade da partícula i é obtida integrando a equação (73) em relação ao tempo.

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

4 Aspectos numéricos do método SPH

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

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

Além disto, os tipos de simulação influenciam na escolha das estruturas de dados a serem usadas. Por exemplo, escoamentos turbulentos de um líquido confinado acontecem em um volume limitado e o método SPH manipula informações densas durante um longo tempo simulado, enquanto a simulação de explosões de gases atualiza informações esparsas em um grande volume durante poucos instantes. Estes contextos mudam a combinatoria do

problema de simulação, como descrito nas seções 4(a) e 4(c).

Finalmente, as interações de fluido com outros meios são delicadas de modelar fisicamente, apesar de ter um efeito decisivo em particular no caso de fluidos incompressíveis. Essas interações, pelas suas complexidades, são geralmente tratadas localmente durante o algoritmo como detalhado nas seções 4(b) e 4(d).

Os exercícios deste capítulo, colocados ao longo do texto e no final de cada seção, são de três tipos: análise de uma formulação para calcular as equações físicas, análise de um algoritmo e implementação de um método. Uma visão geral do método, onde encaixam as seções deste capítulo, é ilustrada na figura 16, e detalhada na última seção

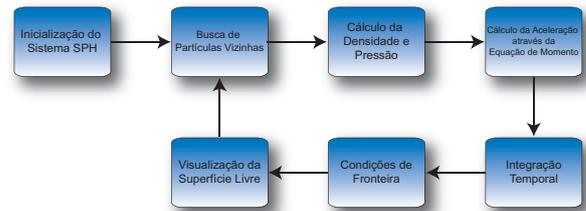


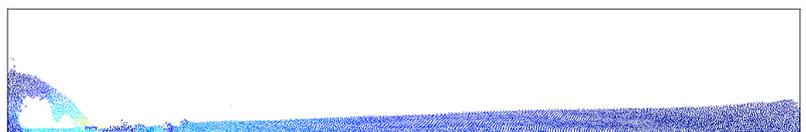
Figura 16: Visão geral do ciclo de simulação de um sistema SPH.

(a) Integração temporal

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

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

Portanto, a integração temporal se aparenta com a discretização de derivadas em reticulados (*grades*), onde os métodos de diferenças finitas são os mais usados [38]. Porém, no contexto temporal, tentamos calcular um ponto do reticulado em função apenas dos pontos inferiores (instantes anteriores). Quando o cálculo é direto, ou seja, quando temos apenas uma incógnita a resolver (o instante atual), o método é chamado de *explícito*. Ao contrário, tipicamente quando colocamos os instantes futuros como incógnita e isolamos o instante atual, o método é chamado de *implícito*. Essa última classe de métodos é delicado no contexto lagrangeano, e não será abordado neste



livro. Nos métodos explícitos, tem um meio termo entre a qualidade de aproximação a priori de uma discretização e o seu custo computacional. Nesta seção, revemos rapidamente dois métodos, Euler e leap-frog, e mencionaremos técnicas usuais para estimar o passo de tempo.

Método de Euler

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

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

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

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

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

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

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

A aproximação do método de Euler pode ser escrita, neste caso, como:

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

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

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

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

Integrador Leap-Frog

Um integrador mais atraente e tão simples quanto o método de Euler, mas com uma precisão de segunda ordem, é o integrador leap-frog [38]. Ele é baseado na estimativa de derivada como diferença centrada:

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

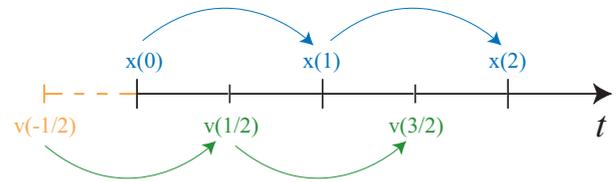


Figura 17: Esquema de integração leap-frog: posição \mathbf{x}_i e velocidade \mathbf{v}_i em uma partícula i são avaliadas de maneira intercalada em relação ao tempo t .

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

Na prática, a velocidade de cada partícula é calculada nos pontos médio dos intervalos de tempo (figura 17) e a posição nos pontos inteiros. Assim, posição e velocidade são avaliadas intercaladamente da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_i(t + \frac{1}{2}\Delta t) &= \mathbf{v}_i(t - \frac{1}{2}\Delta t) + \Delta t \mathbf{a}_i(t) \\ \mathbf{x}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{x}_i(t) + \Delta t \mathbf{v}_i(t + \frac{1}{2}\Delta t). \end{aligned} \quad (74)$$

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

$$\mathbf{v}_i(t) = \frac{1}{2} \left[\mathbf{v}_i\left(t + \frac{1}{2}\Delta t\right) + \mathbf{v}_i\left(t - \frac{1}{2}\Delta t\right) \right]. \quad (75)$$

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

$$\mathbf{v}_i\left(-\frac{1}{2}\right) = \mathbf{v}_i(0) - \frac{1}{2}\Delta t \mathbf{a}_i(0). \quad (76)$$

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

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

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

Estimativa de passo de tempo

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

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

Outra estimativa do passo de tempo é dada pela condição de estabilidade de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL), obtida em 1928, pelos professores Richard Courant, Kurt Friedrichs e Hans Lewy. Ela se aplica a priori para soluções através do método de diferenças finitas para fenômenos regidos por EDP's hiperbólicas. Ela pode ser extrapolada, no nosso contexto, em um passo de tempo adaptativo determinado pela expressão [105]:

$$\Delta t = 0.1 \min_i \left\{ \frac{h}{\|\mathbf{v}_i\| + c}, \frac{h^2 \rho_i}{8 \mu_i} \right\}. \quad (77)$$

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

(b) Tratamento da fronteira

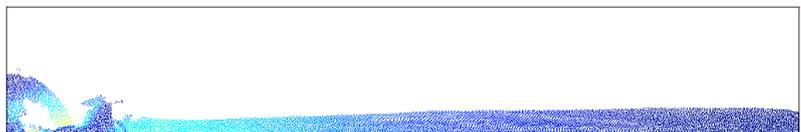
A simulação de fluidos a partir das equações de Navier-Stokes pode ser vista como um grande problema de equações diferenciais parciais. A solução desse tipo de equações depende fortemente das condições iniciais e de fronteira. O comportamento dos fluidos perto da fronteira, porém, tem uma física muito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

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

Operadores SPH na fronteira

A definição de continuidade, derivação e outras operações básicas de análise funcionam em uma vizinhança de um ponto do domínio. Portanto, trata-se essencialmente de conjuntos abertos. A fronteira de um fluido é o bordo do domínio, e portanto fechado. A definição de derivadas nestes casos é delicada. A solução matemática usual seria os teoremas de Stokes (recapitulados no apêndice), relacionando médias de derivadas em um domínio com médias no bordo desse domínio. Essa solução não cabe na prática, pois nem sempre podemos estimar essas médias no bordo. Outras soluções rigorosas poderiam ser propostas, porém precisar-se-ia entender melhor as próprias equações de Navier-Stokes, o que é um problema em aberto. Sobram então heurísticas. Mencionaremos duas heurísticas que exemplificam duas estratégias comuns: definir operadores truncados na fronteira e estender o domínio para a fronteira se tornar uma interface.

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



do núcleo:

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

Essa correção foi proposta por Chen-Beraun [21], porém, não podemos estendê-las para operadores de derivada, pois o valor médio dos núcleos derivados tem que ser 0. Por outro lado, a derivada na direção ortogonal à fronteira não é bem definida, portanto usa-se geralmente a normalização do núcleo não derivado.

A segunda estratégia consiste em estender o domínio, acrescentando partículas fora da fronteira, chamadas de partículas fantasmas (*ghost particles*) [100]. Nesse caso, a avaliação SPH continua geralmente igual à avaliação do interior do domínio, porém, as partículas fantasmas não podem ser transportadas (mudar de posição) normalmente para elas não entrem no interior do domínio. Agora é preciso definir a posição dessas partículas, e as quantidades físicas que elas carreguem para a aproximação SPH.

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

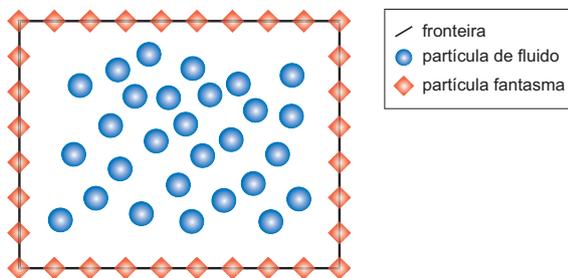


Figura 18: As partículas fantasmas são utilizadas para estender o domínio da simulação.

Outra opção para evitar esta deficiência é colocar partículas fantasmas regularmente em uma faixa fora da fronteira (ver figura 18). Isso tem a vantagem de garantir a concentração de partículas, porém torna mais trabalhoso a definição das propriedades físicas nestas partículas fantasmas. Imitando o caso anterior, podemos avaliar essas quantidades por simetria, usando a interpolação SPH dentro do domínio perto da posição simétrica à partícula fantasma.

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

Interação com a fronteira

A interação com a fronteira tem geralmente dois aspectos: confinar as partículas no domínio da simulação, isto é. evitar que as partículas escapem, e aproximar as forças físicas ocorrendo na fronteira. Detalharemos aqui duas técnicas para modelar fronteiras sólidas: potenciais repulsivos [100] e colisão [118].

O tratamento de fronteiras sólidas no SPH proposto por Monaghan em [100], aproveita a estratégia das partículas fantasmas descrita na seção anterior. No modelo dele, as partículas fantasmas geram forças altamente repulsivas e assim previnem a interpenetração de partículas do fluido nas fronteiras sólidas do problema. Essa força de repulsão é calculada usando uma expressão matemática semelhante à do potencial de Lennard-Jones utilizado em dinâmica molecular [5]. Portanto, a força de repulsão sobre uma partícula de fluido i que colide com uma partícula fantasma g é

$$\Gamma_{ig} = \begin{cases} C \left[\left(\frac{r_0}{r_{ig}} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r_{ig}} \right)^4 \right] \frac{\mathbf{x}_{ig}}{r_{ig}^2}, & \frac{r_0}{r_{ig}} \leq 1 \\ 0, & \frac{r_0}{r_{ig}} > 1 \end{cases}, \quad (78)$$

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

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

Para evitar esses problemas, pode-se usar uma abordagem puramente geométrica, calculando explicitamente a resposta da colisão com a fronteira (ver figura 19). Este

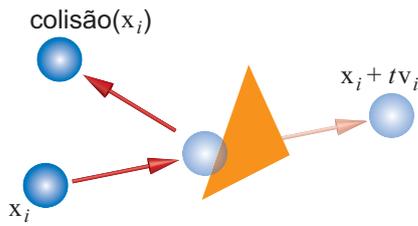
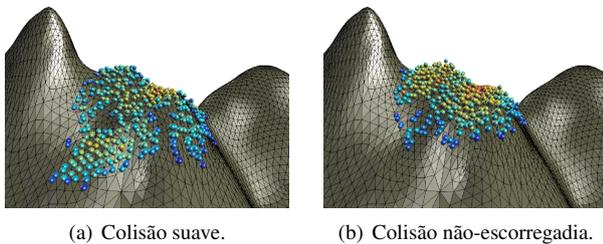


Figura 19: Resposta da colisão partícula \times triângulo.

tratamento é muito adequado quando a fronteira é descrita usando uma malha triangular, o caso mais comum na computação. A colisão atualiza a posição e a velocidade da partícula para as partículas cuja trajetória intersecta a fronteira. A dificuldade do método é detectar de forma eficiente este teste de interseção. Uma maneira eficiente é usar a estrutura de busca de partículas vizinhas, descrita no final deste capítulo [117].



(a) Colisão suave. (b) Colisão não-eskorregadia.

Figura 20: Simulação de um escoamento de lava após 1910 iterações com colisão suave (esquerda) e com colisão não-eskorregadia (direita), com os mesmos parâmetros: 545 partículas e 9566 triângulos na fronteira. O mapa de cores representa a densidade de cada partícula. A colisão suave faz a lava deslizar mais rapidamente.

As novas posição e velocidade da partícula podem seguir simplesmente a lei de Snell-Descartes (ver figura 19). Em uma colisão perfeitamente elástica é invertida apenas a componente normal da velocidade. Para colisões suaves, a componente tangencial e normal podem ser escaladas por coeficientes constantes entre 0 e 1, o coeficiente que dissipa a velocidade tangencial é chamado de *coeficiente de fricção* enquanto o que dissipa a velocidade normal é conhecido como *coeficiente de restituição*. Nos casos em que ambos os coeficientes são 0 a colisão é dita *não-eskorregadia* (ver figura 20). Esta dissipação simples na velocidade de resposta permite simular a absorção de energia gerada pela colisão com o bordo.

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

apenas ao potencial de Lennard-Jones. Calcule a energia cinética da partícula ao longo do tempo.

Condições de contorno

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

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

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

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

Exercício (difícil). No caso unidimensional, calcule a dissipação de calor ($\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla^2 T$) de uma barra identificada com o semi-eixo $x > 0$ e mantida à temperatura T_0



na fronteira $x = 0$, usando a solução diferencial, a solução SPH com partículas fixas nos pontos inteiros do eixo $x > 0$, com e sem camada limite.

(c) Busca de partículas vizinhas

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

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

Força bruta

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

Considere que o sistema tem n partículas, e que elas têm na média k vizinhos. Para se ter uma ordem de grandeza, n é da ordem de milhares a centenas de milhares, e k é de algumas dezenas. O tempo de busca será o número de pares distintos ordenados de partículas $\frac{n(n-1)}{4}$ vezes o tempo de achar os pares e efetuar os testes para ver se são duas partículas vizinhas, e ainda o tempo de retornar as kn vizinhas. Se n é muito grande, o tempo cresce como $O(n^2)$, que pode significar séculos de computação! Em compensação, esse sistema não usa nenhuma estrutura de dados e, portanto, não tem nenhum requisito de memória adicional.

Este método pode ser melhorado significativamente com duas observações. No caso que as partículas se movem pouco a cada passo, ou porque o passo de tempo é pequeno ou porque o fluido é muito viscoso, os vizinhos de

uma partícula raramente mudam. Assim, basta calcular os vizinhos apenas quando mudam; esse processo é chamado de *atualização preguiçosa*. Na verdade, podemos testar explicitamente se uma partícula vai mudar de vizinho: se ela percorreu mais de $\frac{1}{2}\kappa h$. Neste caso, temos que re-calcular os vizinhos dela e atualizar os vizinhos antigos. Isto ocorre a cada $\bar{t} = \frac{\kappa h}{2\bar{c}\Delta t}$ passos de tempo em média, onde \bar{c} é a velocidade média de uma partícula. O custo da busca é amortecido de um fator \bar{t} ao longo da simulação. Se \bar{t} for comparável com n , a busca força bruta com esta atualização preguiçosa pode ser muito eficiente.

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

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

Busca em grades

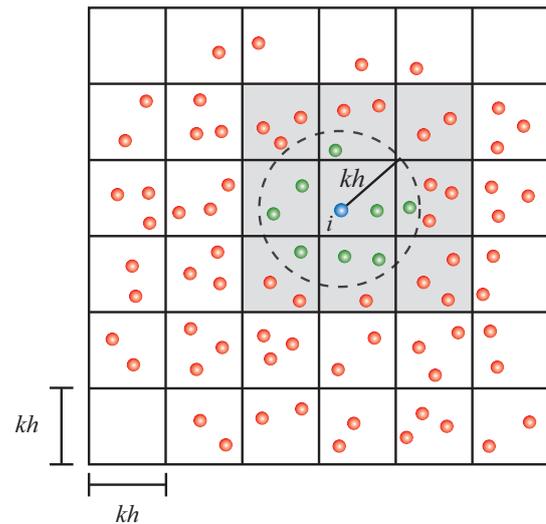


Figura 21: Busca das partículas vizinhas utilizando uma grade uniforme bi-dimensional com o espaçamento sendo o raio de influência κh . A região cinza representa as células da grade onde será realizada a busca.

É possível obter os vizinhos de uma partícula com um tempo que não cresce com o número de partículas (chamado de $O(1)$). Mais ainda, podemos acelerar a busca, porém estamos condicionados a gastar um pouco mais de memória. Esse caso é particularmente interessante se o raio h de cada partícula é constante ou tenha apenas pequenas variações, aplicação típica em simulações de líquido

ou, mais geralmente, fluidos incompressíveis. Nestes casos, podemos construir uma grade regular em cima do domínio de simulação, de intervalo κh_{max} em cada dimensão, onde h_{max} é o maior raio de uma partícula ao longo da simulação. Essa grade particiona as partículas de acordo com a posição delas. Pela escolha do intervalo, as partículas vizinhas da partícula i só podem estar na mesma célula ocupada pela partícula i ou em suas células diretamente adjacentes (figura 21). Assim, a busca por partículas que possuem uma distância menor do que κh a partir da partícula i é restrita a 3^n células, onde n é a dimensão do espaço.

Esse algoritmo é extremamente eficiente para domínios densos e compactos. Alguns cuidados podem ainda melhorá-lo: primeiro, para evitar desperdício de memória, deve-se orientar a grade, retangular, para cobrir o domínio com o mínimo de área fora do domínio. Isto é feito usualmente calculando as direções da grade por uma decomposição em valores singulares (SVD) da matriz de covariância dos pontos da fronteira. Segundo, em vez de apagar a grade a cada passo de tempo e preencher ela com as novas posições, pode-se apenas atualizá-la quando uma partícula sai de uma célula. Isto não muda a complexidade assintótica do algoritmo, mas geralmente melhora o seu desempenho. Finalmente, para evitar o carregamento de pedaços de memória em ordem não linear, acessando todas as células vizinhas, pode-se armazenar cada partícula na sua célula e nas suas vizinhas. Esta duplicação de memória permite procurar apenas em uma célula os seus vizinhos.

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

Busca em estruturas adaptativas

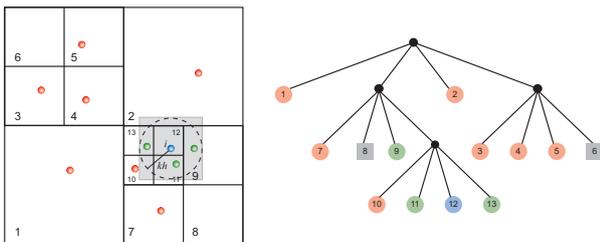


Figura 22: Estrutura de árvore utilizada no algoritmo de busca e a subdivisão hierárquica do espaço bi-dimensional. A busca é realizada através de um teste de intersecção do cubo envolvente da partícula i (região em cinza) com as células representadas pelos nós da árvore.

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

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

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

Esta estrutura de BSP pode ser particularizada se usar apenas planos perpendiculares aos eixos (kd-tree), e ainda se recordar cada célula no meio (octree, ver figura 22). Neste último caso, a estrutura tem certa regularidade que permite representar ela de forma otimizada, e ainda melhorar o tempo de busca [20].

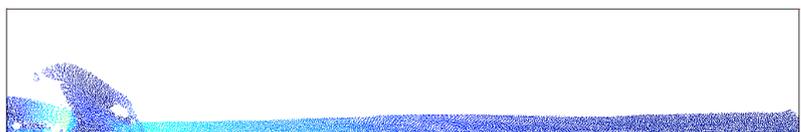
Finalmente, no caso extremo de gases esparsos, por exemplo, em simulação de astrofísica, as partículas podem estar tão dispersas que gerar uma estrutura a partir da geometria do domínio requeira memória demais. Neste caso, é possível codificar a posição de cada partícula de tal modo que seja fácil agrupar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

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

(d) Visualização da superfície livre

O objetivo de simular fluidos é extrair informações de um modelo físico, por exemplo, medir a sustentabilidade de um avião, avaliar a resistência de pilastras de plataformas de extração de petróleo, validar modelos de astrofísica... Estas informações são contidas nas propriedades físicas das partículas ao longo da simulação, porém apresentar uma lista de partículas com as suas respectivas propriedades não é muito cômodo! Existem inúmeros métodos para apresentar estas informações, agrupadas na linha de pesquisa de visualização científica, como por exemplo, a representação do campo vetorial de velocidade ou do fluxo, extração de trajetórias relevantes de matéria ou detecção dos vórtices... Descrever esses métodos fugiria do foco deste texto, porém um aspecto em particular é relevante para a simulação: a representação da superfície livre do fluido.

Primeiro, a geometria da superfície livre intervém na física do fluido, através da tensão superficial e da interface com outros meios. Por exemplo, um fluido tende a evitar altas curvaturas na sua superfície, ou ainda a interação da



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

União de bolas

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

O problema topológico dependendo do raio é um problema clássico de geometria computacional, baseado nos diagramas de Voronoi [13]. É possível calcular de forma não tão lenta uma estrutura discreta, chamada de α -shapes [39, 95], que retorna rapidamente a topologia da união de bola para diferentes raios, mesmo se estes raios variam proporcionalmente de partícula em partícula. Assim, pode-se escolher o menor raio possível para ter um fluido conexo. Note-se que, visto o custo de calcular essa estrutura, é recomendável construí-la apenas para alguns tempos de simulação, similarmente à avaliação preguiçosa da seção anterior.

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

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

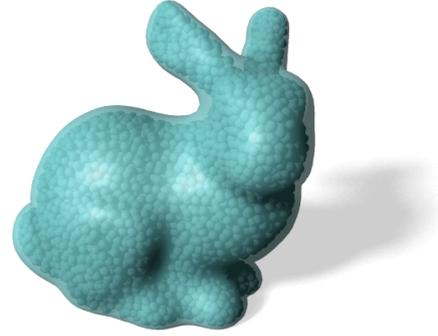


Figura 23: Visualização da superfície implícita extraída do modelo Stanford Bunny constituído de partículas.

Formulação implícita

A formulação acima, apesar de geometricamente simples, não respeita muito o modelo SPH. De fato, o operador SPH escalar para a função constante igual a 1 permite calcular diretamente a função densidade SPH $\chi(\mathbf{x})$ do fluido em qualquer ponto \mathbf{x} do espaço \mathbb{R}^3 [107]:

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

É então possível definir a superfície externa S do fluido de forma implícita por $S = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \chi(\mathbf{x}) = \chi_0\}$, onde escolhemos uma densidade mínima χ_0 . Observe que não devemos escolher $\chi_0 = 0$, pois sendo o núcleo do operador SPH estritamente positivo em um raio κh , obteríamos apenas a união de bolas de raio κh descrita anteriormente. O parâmetro χ_0 deve ser escolhido no intervalo $]0, 1[$, em geral perto de 1 (ver figura 23).

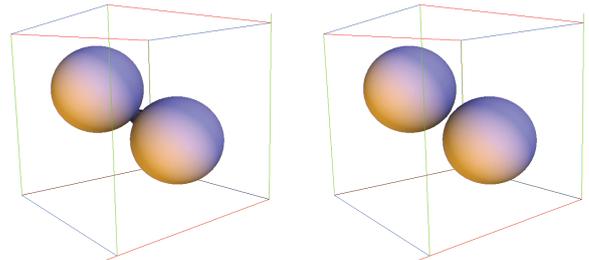


Figura 24: Superfície implícita de duas esferas próximas uma da outra. À esquerda a superfície é gerada através do algoritmo de MC original. À direita a superfície é gerada utilizando o algoritmo de MC com garantias topológicas.

Apesar de essa formulação ser mais compatível com o modelo físico, em particular com o termo de tensão superficial na versão SPH das equações de Navier-Stokes, estamos novamente com um problema de escolha de parâmetro

χ_0 . Esse parâmetro, além de influenciar a geometria, influencia a topologia. So que, neste caso, ele representa a topologia considerada pelo modelo SPH, e torna-se importante respeitá-la. Dentre os algoritmos para geração de superfície (malha triangular) a partir de uma equação implícita, como por exemplo, o método Marching Cubes [92], devemos então escolher um que trata corretamente a topologia [79, 115] (ver figura 24). Estes métodos requerem calcular a função densidade em uma grade (não necessariamente regular), e a curvatura máxima da superfície depende do χ_0 e da precisão da grade.

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

Advecção da superfície

Para evitar o custo de recalculando a superfície livre a cada passo, é possível calcular a evolução da superfície a partir da velocidade das partículas em volta. Esta estratégia pode ser aplicada a vários níveis da geração de superfície. Por exemplo, pode-se transportar diretamente os vértices da malha triangular que representa a superfície. Isto permite gerar a malha apenas uma vez, mas requer muitos cuidados para evitar que apareçam triângulos degenerados, além de problemas mais sérios para conservar o volume ou para manter a coerência quando houver mudança topológica. Finalmente, é possível gerar e transportar uma superfície diretamente a partir das partículas perto da superfície livre [54], apesar de não ser tão simples identificá-las. Porém, estes métodos permitem conservar o volume e outras propriedades físicas do fluido.

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

(e) Exemplo completo

Vimos na seção anterior que cada passo tem, já na sua formulação matemática, muitas variações para representar corretamente a física ou então produzir um algoritmo que execute em um tempo aceitável. Estas seções se encaixem segundo a figura 16, que pode ser traduzida no seguinte algoritmo:

- 1: Inicialize o sistema
- 2: **repeat**
- 3: Faça a busca das partículas vizinhas. (seção 4(c))
- 4: **for** cada partícula i **do**
- 5: Atualize a pressão p_i . (seção 3.c(i))
- 6: **end for**
- 7: **for** cada partícula i **do**
- 8: Calcule a derivada da densidade. (equação (73))

- 9: Calcule a aceleração. (equação do momento (71))
- 10: **end for**
- 11: **for** cada partícula i **do**
- 12: Atualize \mathbf{v}_i e ρ_i com o integrador temporal. (seção 4(a))
- 13: Aplique a condição de fronteira (seção 4(b)) e faça as correções numéricas. (essa seção)
- 14: **end for**
- 15: Atualize Δt usando a condição CFL.
- 16: $tempo = tempo + \Delta t$
- 17: **until** $tempo < tempo_{total}$

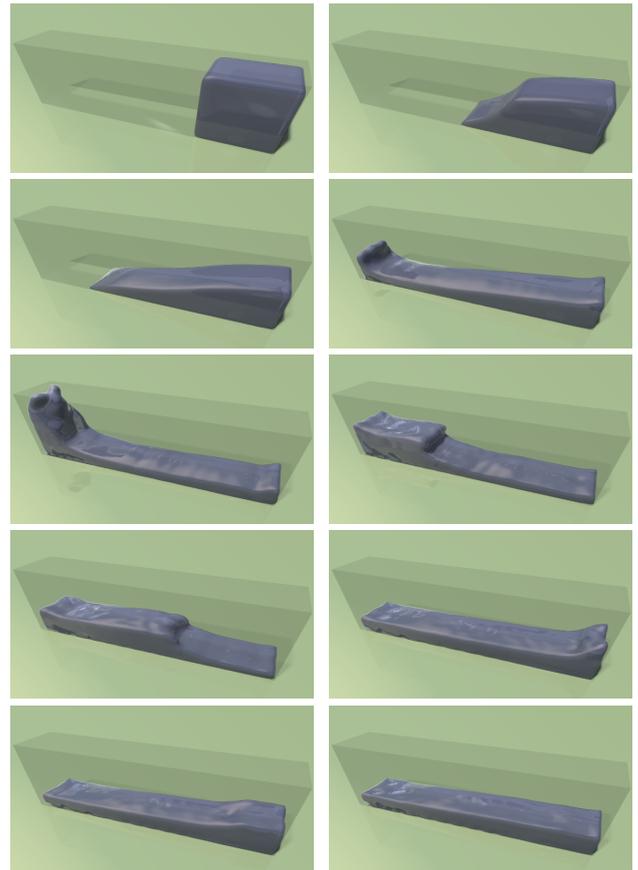
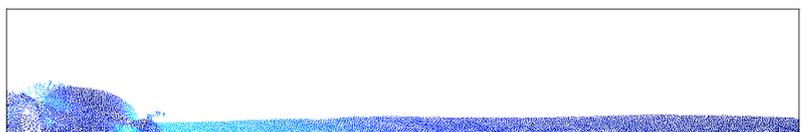


Figura 25: Simulação SPH da quebra de uma barragem utilizando 10^4 partículas.

Veremos esse processo, em particular os passos ainda não descritos (inicialização, correções numéricas) no exemplo clássico da aplicação do método SPH em superfície livre: a simulação da quebra de uma barragem [100] (*dam break*), ilustrado na figura 25 e no rodapé deste livro. O problema consiste em um volume de água confinado em uma região cúbica de um canal onde é instantaneamente retirada a barragem da represa. O método SPH é utilizado para simular o comportamento da queda da coluna de água.



Inicialização

O domínio é definido e discretizado. Nesse caso simples, o domínio é um paralelepípedo, e cada face dele é representada por dois triângulos retângulos. O fluido é inicialmente colocado em um paralelepípedo menor (ver figura 26). Dado o volume total do fluido V , a massa de uma

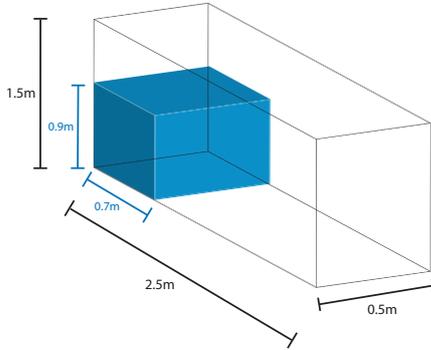


Figura 26: Configuração inicial do problema.

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

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

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

Na simulação do problema utilizamos 10^4 partículas (figura 25), portanto a massa de cada partícula vale $m_i = 3.15 \times 10^{-2}$ kg. As partículas são inicialmente geradas em uma grade uniforme onde o raio de influência κh é tomado como sendo 1.2 vezes o tamanho do espaçamento da grade, recomenda-se que em simulações SPH que o número de partículas vizinhas seja no mínimo 20 em simulações 2D e 56 em simulações 3D [84].

Estimativa dos parâmetros físicos

O sistema é iniciado com densidade inicial da água sendo $\rho_0 = 1000$ kg/m³, a viscosidade $\mu = 10^{-3}$ Ns/m² e a gravidade $\mathbf{g} = 9.8$ m/s². A velocidade característica do escoamento \mathbf{v}_e é estimada a partir da conservação de energia mecânica do sistema (transformação de energia potencial em cinética), segue que

$$\frac{m\mathbf{v}_e^2}{2} = mgH, \quad (79)$$

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

A velocidade do som não corresponde necessariamente à velocidade do som física. Isto é infelizmente uma necessidade da discretização, e cada modelo numérico terá uma

correção particular. Observe que foi o mesmo caso quando foram estabelecidas as velocidades do som para os modelos diferenciais da física.

Além disso, cada partícula carrega os seguintes atributos físicos:

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

Suavização da velocidade: XSPH

Com o objetivo de prevenir a interpenetração de partículas, a qual pode gerar aglomerados instáveis de partículas, Monaghan [98] introduziu a técnica XSPH que consiste em calcular uma média das velocidades das partículas vizinhas. A técnica permite que as partículas se movimentem de uma forma mais suave em um escoamento incompressível, reduzindo o problema de desordem de partícula nas simulações SPH (figura 27).

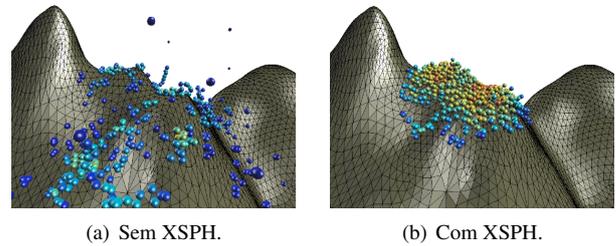


Figura 27: Simulação de um escoamento de lava após 1910 iterações, sem XSPH (esquerda) e com a correção XSPH (direita), com a mesma configuração da figura 20. A simulação explode sem XSPH, devido à distância arbitrariamente pequena entre as partículas.

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

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

Correção numérica: viscosidade artificial

Para evitar instabilidades numéricas devidas às oscilações nos campos vetoriais da velocidade e pressão, no caso da pressão ser calculada por uma equação de estado, existe uma técnica muito comum em elementos finitos e diferenças finitas que consiste em adicionar um termo de viscosidade artificial na equação de momento a fim de dissipar essas oscilações indesejadas. Isso é feito da seguinte forma:

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

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

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

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

É ainda possível calcular a pressão exatamente para garantir a incompressibilidade a partir de uma versão SPH da equação de Poisson [121], como será exposto no próximo capítulo.

5 Incompressibilidade SPH

Nesse capítulo apresentaremos uma variação do método SPH para a simulação de escoamentos incompressíveis, onde a condição de incompressibilidade do escoamento é obtida através do cálculo da pressão por uma equação de Poisson. Ao contrário de outros métodos, onde a equação de Poisson é resolvida em uma malha [40, 42, 117, 130], na discretização da equação de Poisson apresentada nesse capítulo, utilizam-se as partículas da discretização como estrutura. Portanto, a equação de Poisson é resolvida diretamente nas partículas, ao invés da pressão ser calculada em uma malha ou grade.

O cálculo da pressão usa essa solução SPH para a equação de Poisson no contexto do método da projeção. Este método projeta a velocidade obtida pela equação do momento num espaço de divergência livre, garantindo a conservação da massa (equação da continuidade). Essa projeção pode ser interpretada como a soma de um gradiente à velocidade (a sua componente irrotacional). Assim, a projeção substitui a força de pressão na equação do momento e ainda garante a incompressibilidade do fluido. A solução da equação de Poisson no contexto SPH permite a elaboração de simulações inteiramente lagrangeana usando o método da projeção.

(a) Pressão em fluidos incompressíveis

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

– equação do momento

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{f}, \quad (80)$$

– equação da continuidade

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (81)$$

requer que cada variável tenha uma equação para evoluir no tempo. Porém, não existe nenhum termo nessas equações que determine a variação temporal da pressão p .

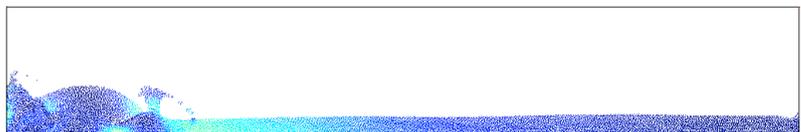
Vimos no capítulo 3 que no método SPH, tradicionalmente, um fluido incompressível é representado através de um fluido quase-incompressível, isto é, as equações de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis são resolvidas por meio de técnicas numéricas utilizadas em escoamentos compressíveis. Essa técnica é conhecida como *incompressibilidade artificial* [45].

Em particular, em aplicações do método SPH, tradicionalmente, a pressão é calculada através de uma equação de estado:

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

Em escoamentos incompressíveis, porém, p não poderia ser obtido em função da densidade, pois a densidade deveria ser constante, e assim ∇p representaria mais o erro de aproximação do que uma quantidade física. Em outras palavras, p não é uma grandeza termodinâmica em um escoamento incompressível. Resultados utilizando essa abordagem são aceitáveis em algumas aplicações, como por exemplo, para simulações de superfície livre com baixos números de Reynolds [105]. Em escoamentos confinados ou com altos números de Reynolds, porém, essa abordagem requer um passo de tempo de integração muito pequeno [29]. Além disso, nesses algoritmos, a condição de incompressibilidade do escoamento (equação 81) pode não ser satisfeita pelo campo de velocidade do escoamento.

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



(b) Método da projeção

O método da projeção foi introduzido na década de 60 por Chorin [23] para simular escoamentos incompressíveis eficientemente. Rigorosamente falando, o método da projeção é baseado na seguinte filosofia: em escoamentos incompressíveis, a pressão não exerce nenhum significado termodinâmico, comportando-se apenas como um meio (mais precisamente, um multiplicador de Lagrange) para obter a incompressibilidade do escoamento. Essa observação motivou um esquema de discretização no qual os campos de pressão e de velocidade são obtidos separadamente, e essa é a principal característica dos métodos da projeção.

O método da projeção pode ser separado em duas etapas. No primeiro passo, um campo de velocidade intermediário é calculado utilizando a equação do momento (equação 80) sem que a condição de incompressibilidade (equação 81) seja satisfeita. No segundo passo, o campo de velocidade intermediário é *projetado* no sub-espaço de divergência nula, obtendo assim os novos valores para os campos de velocidade e pressão.

Essa classe de métodos tem se tornado dominante na simulação de escoamentos incompressíveis [9, 29, 56, 112, 143]. Além disso, outros nomes para variações desse método podem ser encontrados na literatura, como método de passo fracionado [3, 91, 71] ou método de desacoplamento pressão-velocidade [153, 155].

A análise do método da projeção foi iniciada por Chorin [151] e Temam [161], onde condições de contorno periódica foram utilizadas. Posteriormente, para condição de fronteira não escorregadia (velocidade nula na fronteira), Shen [159, 160] mostrou a convergência e algumas estimativas de erros para vários métodos da projeção. Um estudo sobre várias versões numéricas do método da projeção foi realizado por Weina [143].

Baseado no método da projeção, uma formulação puramente lagrangeana para obter a incompressibilidade em SPH será apresentada no final desse capítulo, onde a condição incompressibilidade (equação 81) é obtida, dentro dos limites dos erros de discretização, resolvendo uma equação de Poisson para a pressão.

A importância da equação de Poisson para a pressão é que ela faz a ligação entre as equações do momento e da continuidade. Essa equação fornece valores de p que permite a velocidade, obtidas a partir da equação do momento, satisfazer a equação da continuidade, dentro dos limites dos erros de discretização dessas equações.

(c) Solução SPH da equação de Poisson

Veremos que a incompressibilidade do escoamento pode ser obtida através do cálculo da pressão por uma equação de Poisson. Ao contrário de outros métodos, onde a equação de Poisson é resolvida em uma malha [40, 42, 117, 130],

na discretização da equação de Poisson apresentada nessa seção, utilizam-se as partículas da discretização como estrutura, isto é, a equação de Poisson é resolvida diretamente nas partículas, ao invés da pressão ser calculada em uma malha ou grade.

A equação de Poisson é uma equação diferencial parcial utilizada em várias áreas, dentre elas: matemática, física e engenharia. Em eletrostática, por exemplo, pode-se escrever o campo elétrico E em termos de um potencial elétrico ϕ

$$E = -\nabla\phi$$

dado pela solução da equação de Poisson

$$\nabla^2\phi(\mathbf{r}) = -\frac{\rho(\mathbf{r})}{\epsilon}, \quad (82)$$

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

Em dinâmica dos fluidos, a pressão $p(\mathbf{r})$ em um escoamento incompressível satisfaz a equação de Poisson

$$\nabla^2 p(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r}), \quad (83)$$

onde a função $F(\mathbf{r})$ depende da velocidade do escoamento e de alguns parâmetros físicos do fluido.

Equação de Poisson

Seja Ω uma região em \mathbb{R}^2 limitada por uma superfície fechada $S = \partial\Omega$. Nessa seção, é apresentado um método para resolver a equação de Poisson

$$\nabla^2 u(x, y) = f(x, y) \quad (84)$$

em Ω , onde f é uma função dada. A solução $u(x, y)$ é chamada de potencial.

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

$$u(x, y) = \phi(x, y), \quad \forall (x, y) \in S. \quad (85)$$

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

$$\nabla u(x, y) \cdot \mathbf{n}(x, y) = \varphi(x, y), \quad \forall (x, y) \in S. \quad (86)$$

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

Encontrar uma solução analítica para uma equação de Poisson num domínio qualquer é em geral uma tarefa difícil e recorre-se então a métodos numéricos para encontrar soluções em um conjunto discreto de pontos no domínio

Ω . Pode-se citar a utilização dos métodos das diferenças finitas [51, 70] e dos elementos finitos [16].

A próxima seção propõe um método para resolver a equação de Poisson utilizando o método lagrangeano SPH. O operador laplaciano na equação de Poisson (equação 84) será substituído por uma de suas versões discretas deduzidas no capítulo 2. A aproximação em cada partícula que representa o domínio de interesse conduz, em geral, à obtenção de um sistema de grande dimensão, caracterizado por um alto grau de esparsidade. A solução desse sistema, por algum método numérico, encontra o potencial associado à equação de Poisson em cada partícula do sistema.

Discretização SPH

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

$$(\nabla^2 \phi)^h(\mathbf{x}_i) = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \frac{2(\phi(\mathbf{x}_i) - \phi(\mathbf{x}_j))}{r_{ij}} \mathbf{x}_{ij} \cdot \nabla_i W(\mathbf{x}_{ij}), \quad (87)$$

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

Os núcleos utilizados nesse livro têm a propriedade de simetria (seção 2(d)) e podem ser reescrito como

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

Consequentemente,

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

Consequentemente, a equação (87) é reescrita como

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

ou, de uma maneira mais simplificada, dada por

$$(\nabla^2 \phi)^h(\mathbf{x}_i) = \sum_j 2 \frac{m_j}{\rho_j} (\phi(\mathbf{x}_i) - \phi(\mathbf{x}_j)) F(\mathbf{x}_{ij}), \quad (88)$$

onde

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

Dessa forma, discretizando a equação de Poisson (equação 84) na partícula i , obtemos a seguinte equação linear

$$\sum_j 2 \frac{m_j}{\rho_j} (\phi(\mathbf{x}_i) - \phi(\mathbf{x}_j)) F(\mathbf{x}_{ij}) = f(\mathbf{x}_i) \quad (89)$$

que aplicada em cada partícula i do domínio do problema resulta num sistema de n equações lineares

$$\begin{cases} \sum_{j \in V_1} 2 \frac{m_j}{\rho_j} (\phi(\mathbf{x}_1) - \phi(\mathbf{x}_j)) F(\mathbf{x}_{1j}) = f(\mathbf{x}_1) \\ \sum_{j \in V_2} 2 \frac{m_j}{\rho_j} (\phi(\mathbf{x}_2) - \phi(\mathbf{x}_j)) F(\mathbf{x}_{2j}) = f(\mathbf{x}_2) \\ \vdots \\ \sum_{j \in V_i} 2 \frac{m_j}{\rho_j} (\phi(\mathbf{x}_i) - \phi(\mathbf{x}_j)) F(\mathbf{x}_{ij}) = f(\mathbf{x}_i) \\ \vdots \\ \sum_{j \in V_n} 2 \frac{m_j}{\rho_j} (\phi(\mathbf{x}_n) - \phi(\mathbf{x}_j)) F(\mathbf{x}_{nj}) = f(\mathbf{x}_n) \end{cases} \quad (90)$$

onde n é o número de partículas que discretizam o domínio e V_i é o conjunto de partículas vizinhas à partícula i .

O sistema linear de equações (90), obtido a partir da aplicação do operador laplaciano SPH em cada partícula i do domínio do problema, é representado matricialmente por

$$A\phi = \mathbf{b}, \quad (91)$$

sendo n o número de partículas que discretizam o domínio, a dimensão da matriz A é $n \times n$, o vetor solução ϕ de dimensão n é um vetor das variáveis do sistema com

$$\phi_i = \phi(\mathbf{x}_i)$$

e o vetor independente \mathbf{b} , também de dimensão n , é dado por

$$b_i = f(\mathbf{x}_i).$$

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

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

é obtida pela equação (89) aplicada na partícula i com

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

Exemplo

Na figura 28, a solução para a seguinte equação de Poisson é obtida pelo método SPH descrito nessa seção

$$\begin{cases} \nabla^2 u(x, y) = 6x - 2 & \text{em } \Omega = [-1, 1] \times [-1, 1] \subset \mathbb{R}^2 \\ u(x, y) = x^3 - y^2 + 10 & \text{se } (x, y) \in \partial\Omega \end{cases} \quad (92)$$

O domínio Ω é representado por um conjunto finito de partículas amostradas de acordo com uma distribuição disco de Poisson. Essa distribuição assegura uma amostragem uniforme na qual quaisquer dois pontos dessa amostragem distam mais do que uma distância mínima r , ou seja, dado um disco de raio r sobre um elemento qualquer da amostragem, não existe nenhum outro elemento pertencente a amostragem dentro desse disco. Uma



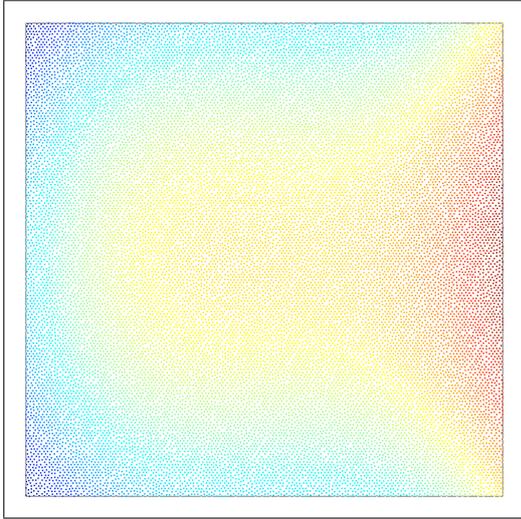


Figura 28: Solução da equação de Poisson usando o método SPH. O termo fonte é dado por $f(x, y) = 6x - 2$ e a solução é conhecida na fronteira do domínio ($u(x, y) = x^3 - y^2 + 10$), ou seja, é dada uma condição de fronteira de Dirichlet.

implementação do algoritmo descrito por Dunbar e Humphreys [37] é responsável pela posição inicial das partículas.

Definimos o volume para cada partícula como sendo o volume de Ω dividido pelo número de partículas da discretização do mesmo $\frac{m}{\rho} = \frac{Vol(\Omega)}{\#partículas}$. Além disso, partículas que estão próximas a fronteira de Ω tem o potencial definido pela condição de fronteira de Dirichlet $\phi_i = \phi(x_i, y_i) = 6x_i - 2$.

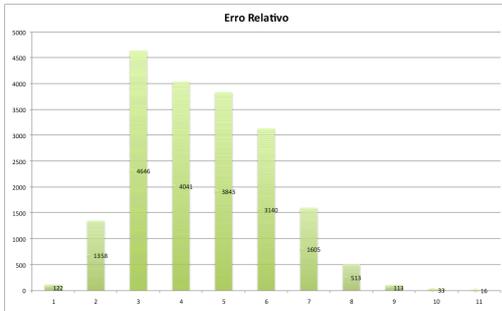


Figura 29: Erro relativo obtido pelo resultado encontrado com o método SPH para a solução da equação de Poisson (equação 92).

O erro relativo obtido com a solução encontrada com o método descrito acima para o exemplo dado pela equação (92) é ilustrado na figura 29. As partículas originais cujo potencial foram definidos pela condição de fronteira de Dirichlet (equação 92) não são levadas em consideração nessa análise estatística do erro.

Resolução do sistema

Pela construção da matriz A podemos observar que na i -ésima linha da mesma o coeficiente a_{ij} na coluna j é não-nulo se, e somente se, a partícula j é vizinha da partícula i . A figura 30 ilustra um simples exemplo.

Portanto, a matriz A é uma matriz com um elevado grau de esparsidade, já que em SPH o número de partículas vizinhas utilizadas no somatório da equação (88) pode ser consideravelmente menor do que o número de partículas usadas na discretização do domínio.

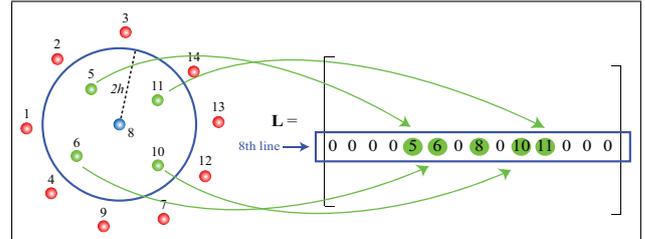


Figura 30: Construção da matriz A . A linha 8 da matriz tem como coeficientes não-nulos apenas as colunas, cujas partículas de mesmos índices pertencem à vizinhança $V_8 = \{5, 6, 8, 10, 11\}$ da partícula 8.

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

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

Os algoritmos que permitem trabalhar diretamente com matrizes esparsas são mais complexos do que os algoritmos utilizados no tratamento de matrizes cheias. Essa complexidade resulta não só da necessidade de se evitar sequências de operações redundantes, mas também do tipo de armazenamento utilizado. Foram utilizadas as bibliotecas SparseLib++ [124] e IML++ [36] para o armazenamento e manuseio de matrizes esparsas e para encontrar a solução do sistema linear.

Matrizes Esparsas Nas formulações antigas de elementos finitos, as matrizes esparsas são geralmente armazenadas em semi-banda ou em perfil. No método SPH proposto, a utilização de tais estruturas de armazenamento é inadequada. A distribuição irregular das partículas faria com

que qualquer uma dessas estruturas tivessem um elevado número de coeficientes nulos armazenados.

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

A matriz de tamanho 5×5

$$B = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 5 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 3 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 2 & 4 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \quad (93)$$

pode ser armazenada da seguinte forma

$$\begin{aligned} \mathbf{V} &= [5 \ 4 \ 3 \ 3 \ 2 \ 2 \ 2 \ 1 \ 1 \ -1 \ -1 \ 1] \\ \mathbf{I} &= [2 \ 4 \ 1 \ 3 \ 3 \ 4 \ 5 \ 2 \ 3 \ 1 \ 4 \ 5] \\ \mathbf{J} &= [2 \ 4 \ 1 \ 3 \ 4 \ 3 \ 5 \ 3 \ 2 \ 4 \ 1 \ 1] \end{aligned} \quad (94)$$

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

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

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

$$\begin{aligned} \mathbf{VL} &= [3 \ -1 \ 5 \ 1 \ 1 \ 3 \ 2 \ -1 \ 2 \ 4 \ 1 \ 2] \\ \mathbf{JL} &= [1 \ 4 \ 2 \ 3 \ 2 \ 3 \ 4 \ 1 \ 3 \ 4 \ 1 \ 5] \\ \mathbf{IL} &= [1 \ 3 \ 5 \ 8 \ 11 \ 13] \end{aligned} \quad (95)$$

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

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

e

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

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

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

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

O armazenamento em lista de vetores foi utilizado para guardar a matriz esparsa resultante da discretização da equação de Poisson em todas as partículas que representam o domínio do problema. A biblioteca `SparseLib++` [124] foi utilizada para tal propósito. A biblioteca `SparseLib++`, além de representar uma matriz esparsa em vários formatos de armazenamento, dentre eles o armazenamento compacto de linhas, também armazena vetores e fornece as operações básicas entre matrizes esparsas ou matrizes esparsas e vetores de maneira eficiente, como por exemplo multiplicação entre uma matriz esparsa e um vetor.

Métodos iterativos A necessidade de resolver sistemas de equações lineares aparece numa grande quantidade de problemas científicos. Vários pesquisadores têm publicado artigos que exaltam as virtudes dos métodos iterativos, em comparação aos métodos diretos para a solução de grandes sistemas de equações lineares. Muitos métodos demonstram potencialidades para solucionar tais problemas. A questão crucial é achar aquele que melhor se adapta ao problema que se tem em mãos, pois não há garantias de que um método que funciona bem para um tipo de problema irá funcionar bem para outro tipo. Vários métodos iterativos para solução de sistemas lineares e outros tópicos importantes são apresentados por Saad [126].

Os métodos iterativos trabalham pelo melhoramento contínuo da solução aproximada até que esta esteja precisa o suficiente. Esse amplo grupo de técnicas utiliza



aproximações sucessivas para chegar a soluções mais precisas a cada passo, para um dado sistema linear.

A eficiência dos métodos iterativos tem sido estudada para a solução de sistemas densos, não-simétricos. Pesquisadores de renome como Freund e Nachtigal [48], Golub e Van Loan [55], Hageman e Young [59] entre outros contribuíram enormemente para o estudo e desenvolvimento das técnicas iterativas.

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

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

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

Uma apresentação mais formal dos métodos iterativos pode ser encontrada em Barrett et al. [6] e inclui os seguintes métodos iterativos.

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

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

As matrizes relacionadas à discretização da equação de Poisson no método SPH, além do alto grau de esparsidade, podem ser assimétricas. Um método iterativo aplicável a matrizes assimétricas é o de Resíduo Quase-Mínimo, QMR (Quasi-Minimal Residual). A principal idéia por trás do método QMR é a solução do sistema tridiagonal, reduzido no sentido dos mínimos quadrados. Freund e Nachtigal [48] fornecem uma apresentação do método QMR com mais detalhes.

A biblioteca IML++ [36] foi utilizada para resolver o sistema de equações lineares obtido com a equação de Poisson discreta. Vários métodos iterativos são encontrados nessa biblioteca. Além desses, alguns pré-condicionadores também são implementados, dentre eles: Diagonal de Jacobi, Cholesky e LU.

(d) Método da projeção SPH

O método apresentado nessa seção faz uso da solução da equação de Poisson obtida no início desse capítulo para determinar um campo de pressão durante a simulação do escoamento de tal forma que a condição de incompressibilidade para o campo de velocidade obtido seja garantida.

Cada passo no tempo é simulado em duas etapas. A primeira delas obtém um campo intermediário de velocidade, sem garantir a incompressibilidade do escoamento. Na segunda etapa, o campo de velocidade é projetado em um espaço de divergência livre. O campo projetado garante a incompressibilidade do escoamento.

Campo de velocidade intermediário

No primeiro passo, um campo intermediário de velocidade \mathbf{v}^* é obtido pela equação do momento (equação 80), sem o termo da pressão.

O termo viscoso $\nu \nabla^2 \mathbf{v}$, onde ν é a viscosidade cinemática do fluido, precisa ser discretizado utilizando algum operador SPH. Em algumas implementações do método SPH [4, 29, 33, 94] a viscosidade artificial, introduzida para modelar frente de choques [102], é utilizada para modelar a força viscosa real, dada pelo termo $\nu \nabla^2 \mathbf{v}$. Morris, Fox e Zhu [105] afirmam que a viscosidade real modelada pela viscosidade artificial gera perfis de velocidades indesejados na simulação. Outras expressões têm sido utilizadas para calcular a força viscosa real, algumas utilizando somas de somas [142] (e, portanto, dobrando o esforço computacional), e outras utilizam a derivada segunda do núcleo para aproximar a viscosidade [109, 135], tornando o método suscetível a erros numéricos [105].

Em nossa implementação, a aproximação para o termo viscoso proposto por Morris et al [105] é utilizada

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

onde as diferenças entre as posições e as velocidades das

partículas i e j são denotadas por $\mathbf{x}_{ij} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$ e $r_{ij} = \|\mathbf{x}_{ij}\|$, respectivamente. Esta expressão é similar àquela utilizada por Monaghan [101] para modelar condução do calor.

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

$$\mathbf{v}^*_i = \mathbf{v}_i + \Delta t \sum_j \frac{m_j (\mu_i + \mu_j) \mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{x}_{ij} \nabla_i W_{ij}}{\rho_i \rho_j r_{ij}^2}, \quad (96)$$

onde Δt é o passo de tempo da discretização temporal.

A restrição

$$\mathbf{v}^* = 0 \quad \text{em } \delta\Omega$$

é aplicada ao campo obtido em 113 utilizando o conceito de camada limite (capítulo 4). Na camada-limite, a velocidade varia de zero, na superfície sólida, até a velocidade \mathbf{v}_∞ , na fronteira da camada limite. A velocidade \mathbf{v}_∞ é a velocidade do escoamento livre em relação à fronteira do domínio.

Projeção no espaço de divergência livre

O segundo passo no método é a projeção no sub-espaço de divergência nula do campo de velocidade intermediária obtido anteriormente. Um novo campo de velocidade é obtido

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}^* - \Delta t \frac{1}{\rho} \nabla p, \quad (97)$$

onde a pressão p é obtida pela solução da seguinte equação de Poisson

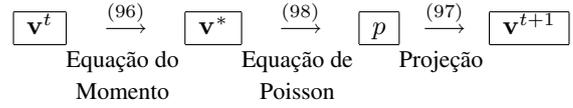
$$-\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right) = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{v}^* \quad (98)$$

com a condição de Neumann $\frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} = 0$ na fronteira do domínio Ω .

A condição de Neumann, dada pela componente do gradiente da pressão na direção normal a fronteira $S = \delta\Omega$, é imposta usando partículas fantasmas (capítulo 4), cujas posições são dinamicamente definidas de acordo com as partículas da discretização. O efeito dessas partículas é implicitamente incluído nas aproximações SPH da seguinte maneira: dada uma partícula i próxima à fronteira S , cada iteração com uma partícula vizinha j pode gerar uma nova iteração com uma partícula-fantasma j_{ghost} . Sendo que a partícula fantasma tem as seguintes propriedades:

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

O seguinte diagrama ilustra os principais passos no método da projeção SPH:



6 Aplicações

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

(a) Fluidos viscoplásticos

No capítulo 3, apresentamos as equações de Navier-Stokes, as quais modelam o comportamento de um fluido newtoniano. Agora estamos interessados em descrever o comportamento de outra rica classe de fluidos, que ao contrário dos fluidos newtonianos, possuem a viscosidade variável. Essa classe é chamada de *fluidos viscoplásticos*. Do ponto de vista de uma partícula, as equações de governo de um escoamento de fluido viscoplástico são deduzidas de forma semelhante as equações de Navier-Stokes (43)–(44), onde a única diferença reside no cálculo do tensor extra-tensão \mathbb{T} .

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

Plasticidade

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

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



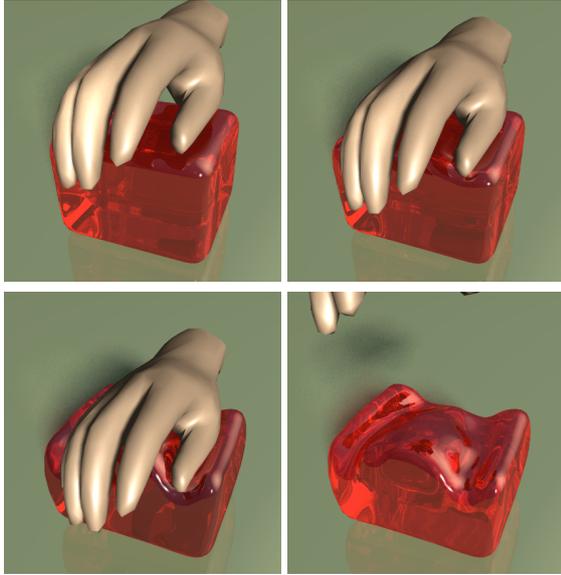


Figura 31: Comportamento de um material viscoplástico.

Entre os fluidos não-newtonianos, o comportamento dos fluidos viscoplásticos é caracterizado quando uma tensão significativa é aplicada no material antes que ele comece a fluir como um líquido (efeito pasta de dente), essa tensão crítica é conhecida como *tensão limite do escoamento*. Se a tensão aplicada é menor do que a tensão correspondente a plasticidade limite então o material se comporta como um sólido. Uma vez que a plasticidade limite é excedida, o material pode fluir como um fluido newtoniano. Ao contrário dos materiais viscoelásticos, materiais viscoplásticos não possuem memória, ou seja, deformações plásticas são deformações irreversíveis e permanentes sofridas por um corpo sob tensão (figura 31).

Fluidos não-newtonianos são estudados extensivamente em dinâmica dos fluidos computacional, e o estudo deles é conhecido como *reologia* [113]. Nessa seção, vamos mostrar os recentes avanços de Paiva *et al.* [117, 114, 116, 118] na simulação de materiais viscoplásticos através de uma versão SPH baseada na formulação física de *fluido newtoniano generalizado* proposta por Mendes *et al.* [96]. Neste livro vamos estudar apenas simulação de objetos viscoplásticos, o leitor interessado em simular fluidos viscoelásticos usando SPH pode consultar Clavet *et al.* [25].

Fluido newtoniano generalizado

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

$$\mathbb{T}_i = 2\mu(D_i)\mathbb{D}_i, \quad \text{com} \quad D_i = |\text{traço}(\mathbb{D}_i)| \quad (99)$$

e

$$\mu(D_i) = (1 - \exp[-(J+1)D_i]) \left(D_i^{n-1} + \frac{1}{D_i} \right), \quad (100)$$

onde o tensor \mathbb{D}_i é dado pela equação (56).

Essa formulação modela a viscosidade do fluido μ como uma função não-linear em termos da intensidade da taxa de deformação D_i (figura 32), sendo inversamente proporcional à tensão de deformação aplicada ao material. A função da viscosidade μ depende apenas de dois parâmetros reológicos: o índice de comportamento do escoamento n e o termo J , conhecido como *jump number*. A grande vantagem dessa formulação é a representação de vários parâmetros reológicos, tais como a tensão limite do escoamento e o índice de consistência, de forma concisa através do parâmetro J .

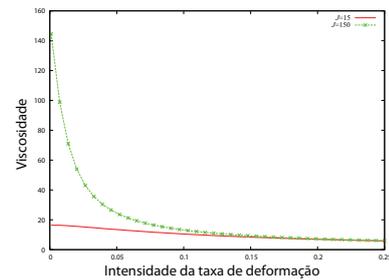


Figura 32: Gráfico da função de viscosidade baseada no modelo de fluido newtoniano generalizado.

A viscosidade do fluido é controlada da seguinte forma pela constante J , ou seja, quanto maior for o valor de J maior será a viscosidade (figura 33). Note que, na figura 32 quando $J = 15$ o fluido possui um comportamento newtoniano. Para simular o comportamento viscoplástico de um fluido o valor de n deve ser entre 0 e 1, logo em nossas simulações fixamos $n = 0.5$. Ao contrário dos métodos anteriores de simulação de materiais viscoplásticos baseados em modelos físicos da mecânica do contínuo [110, 72] a versatilidade da formulação de fluido newtoniano generalizado nos permite representar um sólido como um fluido não-newtoniano de alta viscosidade.

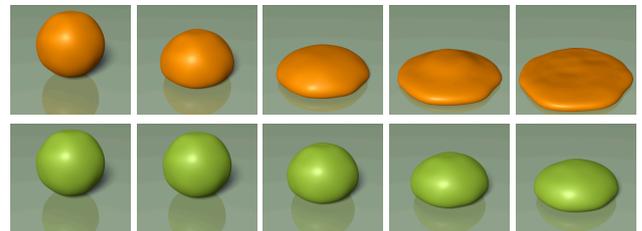


Figura 33: Variações da viscosidade de um fluido viscoplástico inicializado em uma esfera com 1200 partículas. Acima, reduzimos a viscosidade do fluido usando $J = 15$ e abaixo aumentamos a viscosidade com $J = 150$.

Aproximação SPH do tensor extra-tensão

Agora vamos calcular a aproximação SPH do tensor extra-tensão conforme a equação (99), mas antes precisamos calcular a aproximação SPH do tensor do campo de velocidade em cada partícula i , ou seja, da matriz jacobiana $\nabla \mathbf{v}_i$. Para isso vamos utilizar a aproximação SPH do gradiente (19) em cada coeficiente (k, l) da matriz $\nabla \mathbf{v}_i$:

$$\frac{\partial v_k^i}{\partial x_l} = \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} (v_k^j - v_k^i) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_l^i}. \quad (101)$$

Após o cálculo do tensor \mathbb{D}_i , a viscosidade μ_i atribuída a uma partícula i é então calculada através da função (100) e em seguida o tensor extra-tensão \mathbb{T}_i é atualizado de acordo com a equação (99). Finalmente, o termo viscoso da equação do momento (71) pode ser calculado pela aproximação SPH do divergente (23):

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

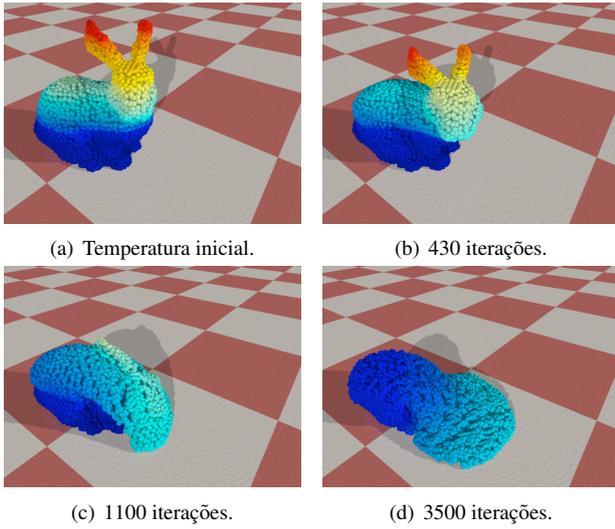


Figura 34: Temperatura das 10188 partículas do modelo Stanford Bunny: as partículas com cores escuras estão abaixo do ponto de fusão, e assim permanecem sólidas.

Transição de fase

A simulação de objetos que derretem e solidificam é uma tarefa delicada, pois é necessária a variação da viscosidade durante a transição de fase, de acordo com as propriedades do material. Em particular, nessa seção concentraremos na transição induzida pela temperatura entre as fases sólida e líquida. Modelamos essa transição variando a viscosidade de acordo com a temperatura de cada partícula de fluido. A variação da temperatura em relação ao tempo é determinada

pela *equação do calor*. Essa equação governa a difusão térmica de um material, transferindo energia térmica de uma região de alta temperatura para uma região de baixa temperatura.

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

$$\frac{DT}{Dt} = k \nabla^2 T. \quad (102)$$

No derretimento, a temperatura de algumas partes do objeto aumenta até alcançar o seu ponto de fusão no qual o objeto se torna líquido (figura 34). Nos fluxos de lava, a temperatura pode decrescer abaixo do seu ponto de fusão fazendo com que a lava se solidifique e altere a topologia do terreno inicial. Em ambos os casos, o jump number J decresce com a temperatura. Aproximamos essa dependência através de uma combinação linear em termos da temperatura:

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

Perceba que a função de viscosidade equação (100) decresce quando a temperatura aumenta e vice-versa. Em nossas simulações, assumimos que os objetos são homogêneos, isto é, possuem um coeficiente de difusão térmica constante.

Aproximação SPH da equação do calor A equação do calor (102), que governa a transição entre as fases sólida e líquida, requer uma aproximação por partículas do laplaciano da temperatura $\nabla^2 T_i$. Para partícula i , as derivadas de segunda ordem podem ser aproximadas utilizando a convolução SPH usual dada pela aproximação do laplaciano (24):

$$\nabla^2 T_i = \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} T_j \nabla_i^2 W_{ij}. \quad (103)$$

Porém, a equação (103) possui algumas desvantagens além da sensibilidade à desordem de partículas. Primeiro, a transferência de calor de uma partícula i para uma partícula j pode ser positiva ou negativa devido à mudança de sinal da derivada de segunda ordem do núcleo (figura 11). Por outro lado, a física nos diz que uma partícula quente deve transferir calor para uma partícula fria sem se importar de que maneira é feita a separação delas. Segundo, essa expressão não resulta em conservação de energia térmica em um processo adiabático.

Para evitar esses problemas, Müller *et al.* [109] adicionaram em seu modelo um núcleo com derivada de segunda ordem positiva exclusivo para o operador laplaciano. Observamos entretanto que, além desse modelo ser errado do ponto de vista conceitual, ele também introduz mais avaliações no sistema. Por essas razões, usamos uma aproximação do operador laplaciano que envolve apenas derivadas de primeira ordem conforme a aproximação SPH do laplaciano (31):



$$\nabla^2 T_i = 2 \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} (T_i - T_j) \frac{\mathbf{x}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij}}{r_{ij}^2}. \quad (104)$$

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

Exemplos

Utilizamos o método descrito nesse capítulo com a finalidade de simular fenômenos físicos complexos. Nosso principal objetivo está ilustrado nos exemplos que apresentaremos a seguir, onde os resultados respeitam a intuição física dos processos de deformação plástica, derretimento de objetos sólidos e fluxos de lava. A estabilidade numérica do SPH aparece claramente na figura 35, onde a cabeça do modelo Gargoyle permanece bem definida mesmo quando o modelo está quase completamente derretido. Nesse caso, todas as 6976 partículas iniciam com a temperatura acima do ponto de fusão e fluem como fluido não-Newtoniano.

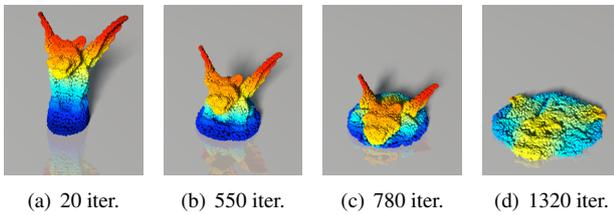


Figura 35: Derretimento do modelo Gargoyle totalmente líquido.

A figura 36 mostra o derretimento do modelo Stanford Bunny com 10188 partículas. A simulação é inicializada com um gradiente linear de temperatura tal que a orelhas derretem enquanto o resto do corpo permanece frio e sólido.

O controle eficiente da viscosidade através da formulação de fluidos newtonianos generalizados permite resultados visualmente realistas. Essa formulação além de permitir simulações de fluidos viscoplásticos, também possibilita a simulação de objetos sólidos que sofrem deformações. A figura 37 mostra a simulação do impacto de uma esfera de metal contra uma parede plástica. Note que, momentos antes da esfera perfurar a parede, a energia dissipada pelo choque da esfera produz uma grande deformação no material.

No exemplo da figura 38, criamos um objeto viscoplástico a partir da superfície implícita conhecida como *chair* discretizado 7000 partículas e simulamos a sua interação com um objeto complexo representado pelo esqueleto de uma mão com 2351 triângulos. O método além de capturar muito bem os efeitos viscosos do material, permite que o objeto sofra grandes mudanças topológicas sem controle explícito de sua superfície livre. Observe que, mesmo após quase todo material escorrer entre os de-

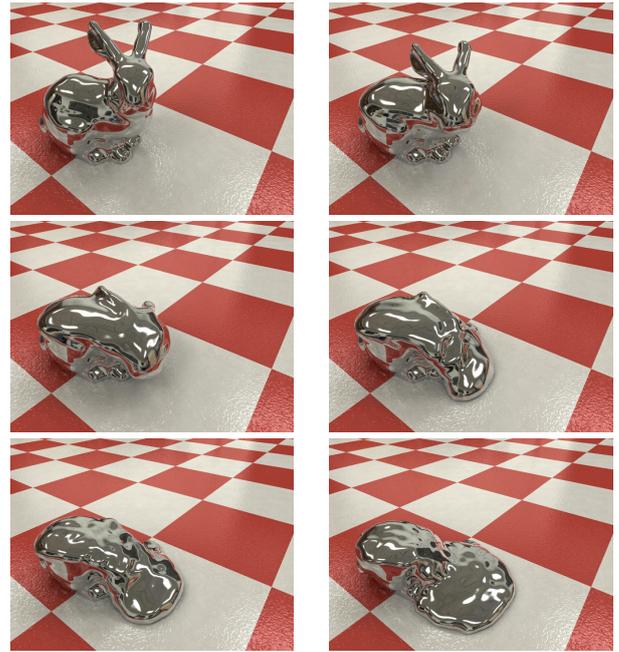


Figura 36: Evolução da superfície livre da simulação de derretimento do modelo Stanford Bunny, iniciando frio na base e quente no topo do modelo, com 0, 400, 800, 1200, 1800 e 4000 iterações.

dos e tocar o chão, parte dele fica agarrado no esqueleto. A interação entre fronteira essa rígida e o material viscoplástico é feita geometricamente graças ao teste de colisão discutido no capítulo 4.

O exemplo ilustrado pela figura 39, exibe com fidelidade a morfologia vista em escoamentos reais de lava tais como o espalhamento da frente de lava na ausência de solidificação e o desenvolvimento de complexas e assimétricas estruturas em forma de dedos conhecidas como *lobos*. A formação dessas estruturas se deve à influência da topografia do terreno no escoamento da lava reproduzida graças novamente ao uso do teste de colisão.

(b) Decomposição de campos vetoriais

A crescente quantidade de vetores gerados por simulações, devido ao aumento de processamento dos computadores, torna a tarefa de visualização um problema delicado, o que é muito bem descrito por Helman e Hesselink [62]. A representação de dados por técnicas padrões como identificar através de uma seta todo vetor em um campo vetorial ou linhas integrais pode não ser muito informativa: visualizar milhões de setas ou linha integrais pode ser bastante confuso.

Existem duas possibilidades para evitar esse problema. A primeira, proposta por Helman e Hesselink [62], é enfatizar a topologia do campo vetorial [22, 141].

Calcular as localizações de feições características de um campo e somente mostrar essas características usando

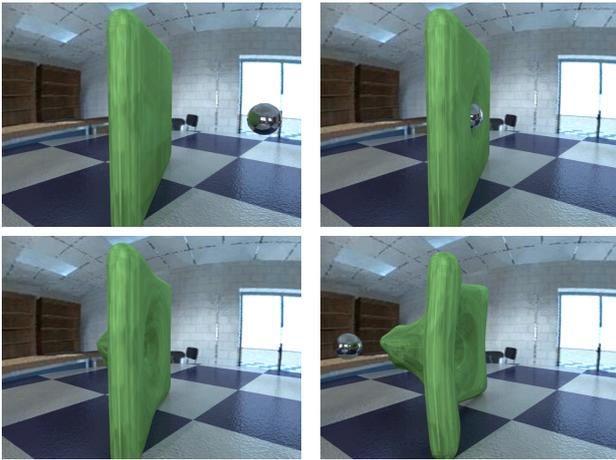


Figura 37: Colisão de uma esfera metálica contra uma parede plástica: após 0, 1300, 1500 e 2000 iterações.

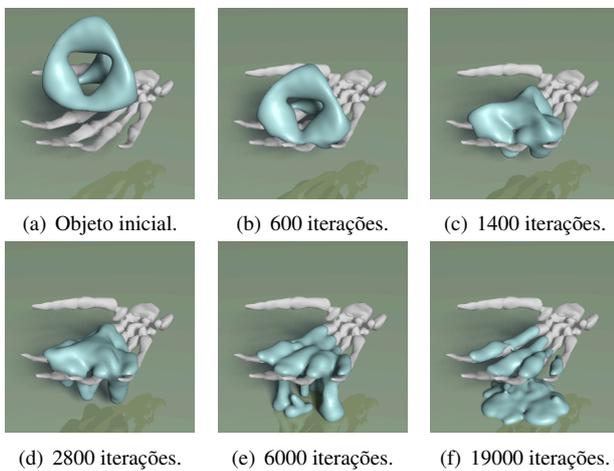


Figura 38: Superfície chair modelada como um material viscoplástico, interagindo com um objeto sólido complexo representado pelo esqueleto de uma mão.

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

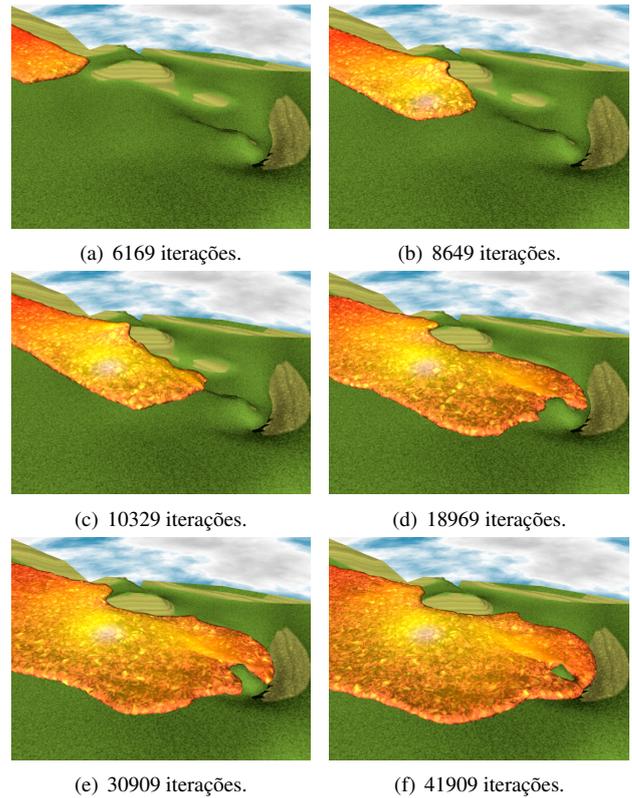


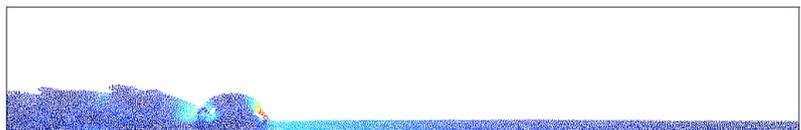
Figura 39: Escoamento de lava em um terreno virtual.

Decomposição de Helmholtz-Hodge

A decomposição de Helmholtz-Hodge é aplicável em várias áreas da computação gráfica, tais como a detecção de vórtices nas imagens do escoamento de um fluido em torno do protótipo aerodinâmico de carros e aviões [137] e na estimativa de movimento dos tornados em campos de imagens de satélite [30].

Tradicionalmente, soluções numéricas dessa decomposição são obtidas por métodos que utilizam malhas, entre eles, diferenças finitas e elementos finitos. No entanto, esses métodos não são adequados para lidar com a amostragem de ponto-vetores sem nenhuma conexão explícita entre eles ou com simulações usando partículas. Nesse caso, métodos baseados em malhas exigiriam a trabalhosa tarefa de geração de mapas topológicos. O propósito dessa sessão é apresentar uma nova técnica usando o método SPH para obter a decomposição de Helmholtz-Hodge, chamaremos o nosso algoritmo, simplesmente, de método SPH-HH.

A decomposição de Helmholtz-Hodge diz que qualquer campo vetorial, definido em uma região simplesmente conexa, pode ser decomposto como soma de três componentes: uma componente com rotacional nulo, outra componente com divergente nulo e uma última componente com laplaciano nulo (figura 40).



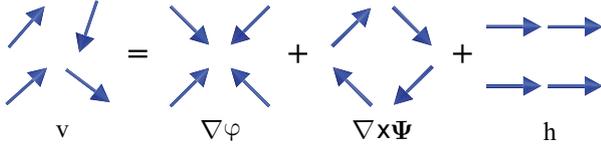


Figura 40: Decomposição de Helmholtz-Hodge para um campo vetorial.

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

$$\mathbf{v} = \mathbf{d} + \mathbf{r} + \mathbf{h}, \quad (105)$$

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

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{d} &= 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{r} &= 0 \\ \nabla^2 \mathbf{h} &= 0 \end{aligned}$$

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

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

$$\begin{aligned} \mathbf{d} &= \nabla \varphi \\ \mathbf{r} &= \nabla \times \Psi \\ \mathbf{h} &= \mathbf{v} - \mathbf{d} - \mathbf{r} \end{aligned}$$

Para campos vetoriais bidimensionais, porém, a decomposição requer uma definição introduzida por Polthier e Preuss [122]. Seja J um operador em campos vetoriais definido como a rotação de 90° no sentido horário

$$J(\mathbf{v}) = J(v_1, v_2) = (v_2, -v_1). \quad (106)$$

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

$$\mathbf{v} = \nabla \varphi + J(\nabla \psi) + \mathbf{h}. \quad (107)$$

onde a componente solenoidal é obtida aplicando o operador J sobre o gradiente de um potencial escalar ψ . A figura 41 ilustra a decomposição de Helmholtz-Hodge para um campo vetorial bi-dimensional.

O rotacional, em coordenadas cartesianas tridimensionais, é definido por

$$\nabla \times \mathbf{v} = \nabla \times (v_1, v_2, v_3) = \left(\frac{\partial v_3}{\partial y} - \frac{\partial v_2}{\partial z}, \frac{\partial v_1}{\partial z} - \frac{\partial v_3}{\partial x}, \frac{\partial v_2}{\partial x} - \frac{\partial v_1}{\partial y} \right),$$

onde $v_i = v_i(x, y, z)$. No espaço bi-dimensional, onde $v_i = v_i(x, y)$, é conveniente defini-lo como a função de valor real

$$\nabla \times \mathbf{v} = \nabla \times (v_1, v_2) = \frac{\partial v_2}{\partial x} - \frac{\partial v_1}{\partial y}.$$

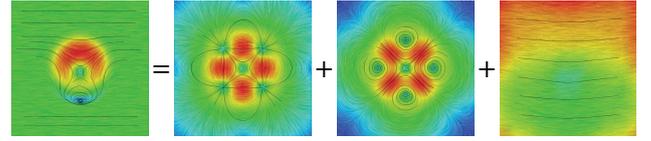


Figura 41: Decomposição de Helmholtz-Hodge obtida pelo método SPH-HH. A visualização é dada pelo LIC com algumas linhas de fluxo. Da esquerda para a direita: um campo vetorial e suas componentes irrotacional, solenoidal e harmônica.

Contudo, pela definição do operador J , o rotacional bidimensional pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{v} &= \nabla \times (v_1, v_2) = \frac{\partial v_2}{\partial x} - \frac{\partial v_1}{\partial y} \\ &= \nabla \cdot (v_2, -v_1) \\ &= \nabla \cdot (J(v_1, v_2)) \\ &= (\nabla \cdot J) \mathbf{v} \end{aligned} \quad (108)$$

Portanto, com as definições e notações adotadas para o caso bidimensional, as componentes da decomposição bi-dimensional ainda retêm as propriedades:

1. $\mathbf{d} = \nabla \varphi$ é um campo irrotacional

$$\begin{aligned} \nabla \times (\nabla \varphi) &= (\nabla \cdot J)(\nabla \varphi) \\ &= \nabla \cdot \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y}, -\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \\ &= \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y \partial x} \\ &= 0 \end{aligned}$$

2. $\mathbf{r} = J(\nabla \psi)$ é um campo com divergente nulo

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (J(\nabla \psi)) &= \nabla \cdot \left(J \left(\frac{\partial \psi}{\partial x}, \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \right) \\ &= \nabla \cdot \left(-\frac{\partial \psi}{\partial y}, \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \\ &= -\frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} \\ &= 0 \end{aligned}$$

3. \mathbf{h} é um campo com divergente e rotacional nulos

$$\nabla \cdot \mathbf{h} = (\nabla \cdot J) \mathbf{h} = 0$$

Consequentemente, valem as seguintes igualdades

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{v} &= \nabla \cdot (\nabla \varphi) + \nabla \cdot (J(\nabla \psi)) + \nabla \cdot \mathbf{h} \\ &= \nabla \cdot (\nabla \varphi) + 0 + 0 \\ &= \nabla^2 \varphi\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(\nabla \cdot J)\mathbf{v} &= \nabla \cdot (J(\nabla \varphi)) + \nabla \cdot (J(J(\nabla \psi))) + \nabla \cdot (J\mathbf{h}) \\ &= 0 + \nabla \cdot (-\nabla \psi) - \nabla \times \mathbf{h} \\ &= 0 - \nabla^2 \psi - 0 \\ &= -\nabla^2 \psi\end{aligned}$$

Essas propriedades levam ao seguinte sistema de equações de Poisson

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{v} = \nabla^2 \varphi \\ (\nabla \cdot J)\mathbf{v} = -\nabla^2 \psi \end{cases}, \quad (109)$$

onde os potenciais φ e ψ (equações 107) são soluções desse sistema.

Em domínios fechados, a unicidade dos potenciais φ e ψ é garantida adicionando ao sistema acima as condições de fronteira:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad (110)$$

onde \mathbf{n} é a normal na fronteira.

O sistema 109 será utilizado para obter as componentes irrotacional $\mathbf{d} = \nabla \varphi$ e solenoidal $\mathbf{r} = J(\nabla \psi)$ do campo vetorial \mathbf{v} dadas, respectivamente, pelos potenciais φ e ψ . Cada equação nesse sistema pode ser resolvida independentemente (seção 5.c(ii)). No que se segue, destacamos os principais passos da decomposição de Helmholtz-Hodge usando o método SPH-HH.

Algoritmo SPH de decomposição

Definição das partículas Seja $\mathcal{V} = \{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\}$ um campo vetorial discreto definido em $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, onde $\mathbf{v}_i = \mathbf{v}(\mathbf{x}_i)$ com $\mathbf{x}_i \in \Omega$. Cada vetor \mathbf{v}_i é associado com uma partícula SPH indexada por i e posicionada em \mathbf{x}_i . O atributo massa é definido constante em todas as partículas, dado por $m = \frac{V_\Omega}{n}$ com $V_\Omega = Volume(\Omega)$. Finalmente, a densidade em cada partícula i é calculada diretamente da aproximação SPH para uma função (equação 14):

$$\rho_i = \sum_j m_j W^h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j).$$

A coluna da esquerda na figura 42 mostra um campo vetorial sintético representado por 493 vetores.

Condição de fronteira As condições de fronteira (equação 110) são diretamente incorporadas no sistema. Dada uma partícula i , que dista menos de $\frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{m_i}{\rho_i}}$ da fronteira. Ao invés de substituir uma das equações de Poisson (equação 109) pela respectiva condição de fronteira (equação 110), o qual deve ser considerada apenas em partículas *exatamente* na fronteira, nós adicionamos ao lado direito da equação de Poisson o termo nulo dado pela condição de fronteira, o que leva a uma transição mais suave. Por exemplo, para o potencial ϕ , em uma dada partícula i próxima a fronteira, o lado esquerdo da equação de Poisson discretizada pelos operadores SPH nessa partícula é substituída por

$$\underbrace{\sum_j 2 \frac{m_j}{\rho_j} (\phi_j - \phi_i) F(\mathbf{x}_{ij})}_{\nabla^2 \phi} + \underbrace{\sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (\phi_j - \phi_i) \nabla_i W_{ij} \cdot \mathbf{n}_i}_{\nabla \phi \cdot \mathbf{n} = 0},$$

onde a normal \mathbf{n}_i é dada por uma média das normais vizinhas na fronteira.

Inconsistência de partículas na fronteira Como discutimos anteriormente, em partículas próximas a fronteira do domínio, os operadores SPH podem obter aproximações imprecisas devido a falta de partículas em direções específicas. Para contornar essa deficiência na aproximação, nós criamos partículas virtuais, conhecidas como *partículas fantasmas*. As partículas fantasmas são criadas próximas a fronteira do domínio, do lado externo, usando a mesma amostragem por disco de Poisson [37].

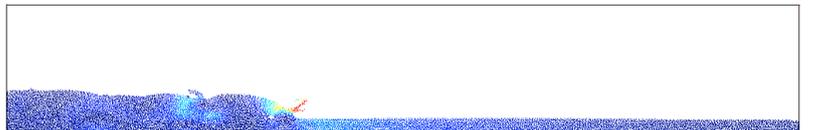
Como vimos no capítulo 4, qualquer atributo nas partículas fantasmas podem ser definidos pela seguinte aproximação SPH

$$A_i = \frac{\sum_{j \in V(x_i)} \frac{m_j}{\rho_j} A_j W^h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)}{\sum_{j \in V(x_i)} \frac{m_j}{\rho_j} W^h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)}, \quad (111)$$

onde a soma ocorre somente sobre as partículas originais vizinhas de uma partícula fantasma.

A figura 43 mostra um exemplo da geração das partículas fantasmas (a) e ilustra a extensão de um campo vetorial \mathbf{v} em uma partícula fantasma (b).

Para evitar que as partículas fantasmas incluam uma equação extra no sistema linear obtido pela discretização SPH da equação de Poisson (equações 90), o que evita a aproximação de derivadas em suas posições, nós utilizamos a aproximação (111) para representar o potencial de uma partícula fantasma da seguinte maneira. Dada uma partícula i , quando uma partícula vizinha j é uma partícula fantasma, então o potencial ϕ_j , na aproximação do laplaci-



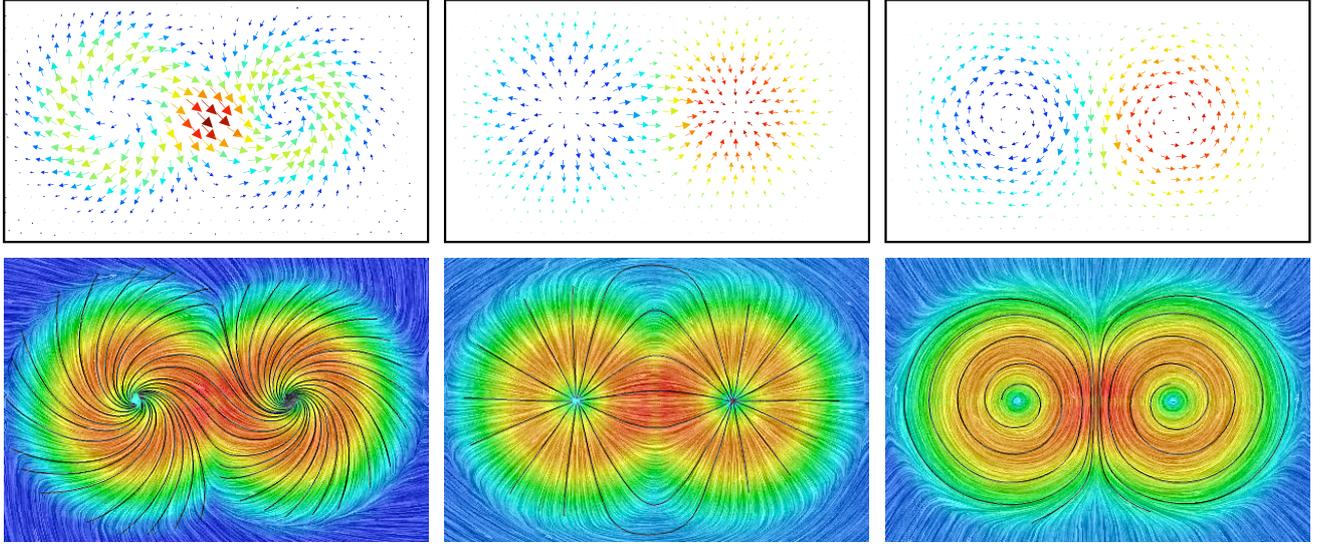


Figura 42: Decomposição de Helmholtz-Hodge obtida pelo método SPH-HH. O campo vectorial a vector field \mathbf{v} (coluna da esquerda) é decomposto em uma componente irrotacional \mathbf{d} (coluna do meio) e uma componente solenoidal \mathbf{r} (coluna da direita). Podemos ver o campo vectorial em algumas das 18221 amostrar (topo) e o mapa de cor da magnitude do campo com alguma linhas integrais (base).

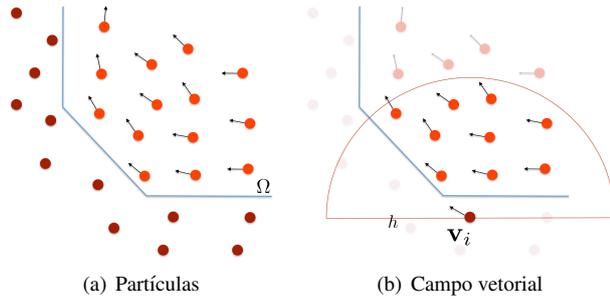


Figura 43: A geração das partículas fantasmas no método SPH-HH evita a aproximação imprecisa em partículas próximas a fronteira.

ano (equação 88) é substituído por

$$\phi_j = \frac{\sum_k \frac{m_k}{\rho_k} \phi_k W_{jk}}{\sum_k \frac{m_k}{\rho_k} W_{jk}}$$

onde a soma ocorre somente sobre as partículas originais.

Componente irrotacional A componente de rotação nula \mathbf{d} é obtida pelo gradiente SPH do potencial φ dado pela equação de Poisson

$$\nabla^2 \varphi = \nabla \cdot \mathbf{v},$$

incluindo a compensação nas partículas próximas a fronteira discutida acima.

Resolvendo a equação de Poisson SPH, incluindo a condição de fronteira $\nabla \varphi \cdot \mathbf{n} = 0$, obtemos o potencial φ . Finalmente, a componente irrotacional é obtido aplicando o operador gradiente SPH (equação 19):

$$\mathbf{d}_i = \nabla \varphi_i = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (\varphi_j - \varphi_i) \nabla_i W_{ij} \quad (112)$$

A coluna do meio na figura 42 mostra a componente irrotacional obtida pelo método SPH-HH de um campo vectorial sintético representado por 493 vetores.

Componente solenoidal A componente de divergente nula é obtida da mesma maneira que a componente irrotacional. Nós primeiro resolvemos a equação de Poisson associada ao potencial ψ

$$\nabla^2 \psi = -(\nabla \cdot \mathbf{J}) \mathbf{v},$$

incluindo a condição de fronteira $\frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{n}} = 0$. Então, nós usamos o operador gradiente SPH (equação 19)

$$\nabla \psi_i = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (\psi_j - \psi_i) \nabla_i W_{ij}$$

para calcular a componente solenoidal $\mathbf{r}_i = J(\nabla \psi_i)$, aplicando o operador de rotação J (equação 106) em $\nabla \psi_i$.

A coluna da direita na figura 42 mostra a componente solenoidal obtida pelo método SPH-HH de um campo vectorial sintético representado por 493 vetores.

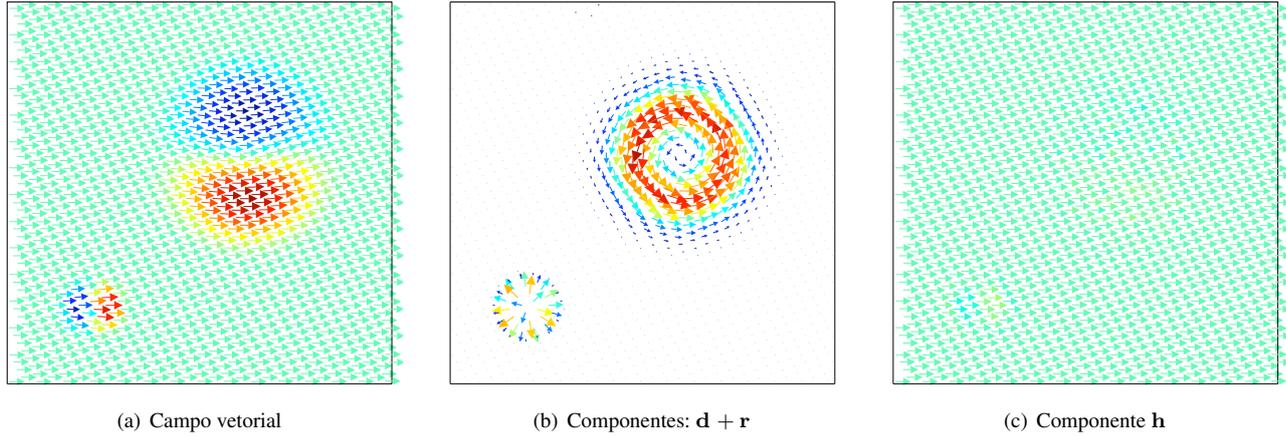


Figura 44: O método SPH-HH revela as componentes solenoidal $\mathbf{r} = J(\nabla\psi)$ e irrotacional $\mathbf{d} = \nabla\varphi$ do campo vetorial 2D (esquerda) mesmo com uma componente harmônica \mathbf{h} de magnitude maior do que as demais componentes, $10 \max(\|\mathbf{r}\|, \|\mathbf{d}\|)$ (visualização de $\frac{1}{3}$ das amostras).

Componente harmônica Após calcular as componentes irrotacional e solenoidal, a componente harmônica é simplesmente determinada por

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

Por exemplo, o campo sintético ilustrado na figura 44(a) foi construído analiticamente como a soma de três campos: um campo de rotação nula, outro com divergente nulo e um campo harmônico constante, porém com ordem de magnitude muito maior do que os demais campos. A figura 44(b) mostra a soma das componentes irrotacional e solenoidal obtidas pelo método SPH-HH, e a figura 44(c) mostra o campo harmônico, o qual é obtido consistentemente com a componente harmônica analítica.

Detecção automática de feições

A visualização baseada em feições é de extrema importância para a interpretação do campo vetorial por engenheiros e cientistas. Por exemplo, como o comportamento do escoamento de um fluido ao redor de um corpo rígido em movimento influencia a sua resistência aerodinâmica, experimentos desse tipo em dinâmica dos fluidos são importantes para determinar o formato de carros e aviões. Por exemplo, no caso das aeronaves, os vórtices são fundamentais para a capacidade de elevação (figura 45).

A decomposição de Helmholtz-Hodge é particularmente interessante para obter as feições de um campo vetorial. Em particular, no caso bi-dimensional, ambas as componentes são dadas por potenciais escalares. As singularidades de cada potencial, i.e., os pontos onde alguma componente é nula, são obtidas automaticamente no método SPH-HH, dadas pelas localizações das partículas que alcançam um mínimo ou um máximo local em um dos potenciais φ or ψ .

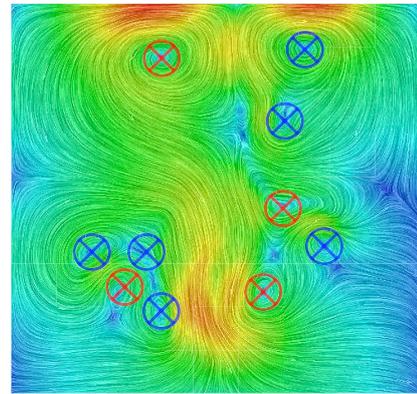
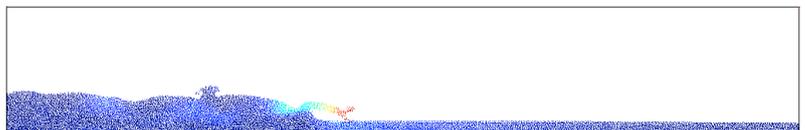


Figura 45: O método SPH-HH detecta os vórtices em um campo vetorial discreto com 6.400 partículas obtido em uma simulação de escoamento incompressível.

As singularidades da componente irrotacional $\mathbf{d} = \nabla\varphi$ são centros de sorvedouros (respectivamente fontes) para os máximos (respectivamente mínimos) de φ (figura 46). Para a componente solenoidal, $\mathbf{r} = J(\nabla\psi)$, as singularidades são os centros de vórtices no sentido horário (respectivamente anti-horário) para os mínimos (respectivamente máximos) de ψ .

Em seguida estudamos a decomposição SPH-HH em regiões não simplesmente conexas. A figura 47 mostra um campo vetorial obtido na simulação da interação entre um corpo rígido e um fluido usando um método de elementos finitos com domínios fictícios baseado em um multiplicador de Lagrange [53]. A decomposição detecta os centros de vórtices mesmo com a fronteira do corpo rígido.

A figura 48 mostra a decomposição de um campo tur-



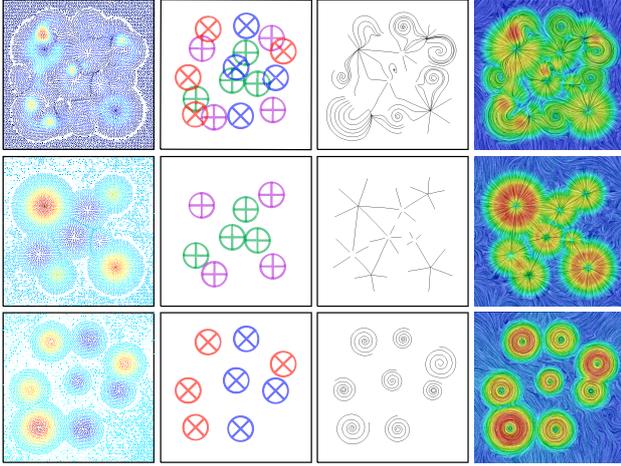


Figura 46: As singularidades de cada componente são obtidas automaticamente pelo método SPH-HH dados pelos pontos críticos dos potenciais φ e ψ . O campo é visualizado em todas as 5.001 partículas.

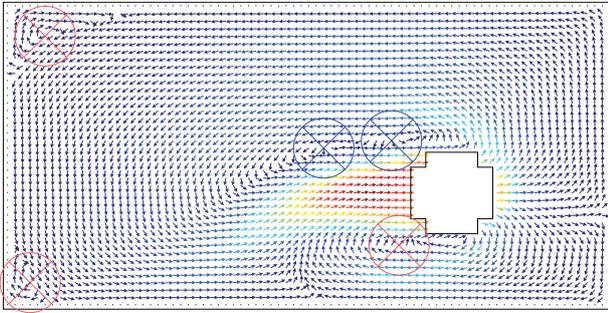


Figura 47: O método SPH-HH obtém a decomposição de um campo vetorial definidos em domínios com fronteiras complexas, representado por 3.216 partículas.

bulento ao redor de um objeto rígido [15], onde uma componente que circula o buraco é artificialmente incluída. Na figura da esquerda o campo vetorial normalizado com as feições detectadas pelo método SPH-HH é ilustrado. A componente solenoidal e a componente harmônica são ilustradas, respectivamente, no centro e na direita. O campo harmônico não-trivial obtido pelo método circula o buraco, o que é característico de tais topologias.

(c) Fluidos bifásicos

Existem vários trabalhos utilizando o método SPH para simular fluidos bifásicos. Nos trabalhos de Tartakovsky e Meakin [136] e Colagrossi e Landrini [27] ambas as fases são discretizadas usando SPH e a pressão é definida por uma equação do estado. Para evitar que os campos de velocidade obtidos durante a simulação comprometam o resultado, pois a condição de incompressibilidade ($\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$) pode não ser verificada, várias modificações foram propostas.

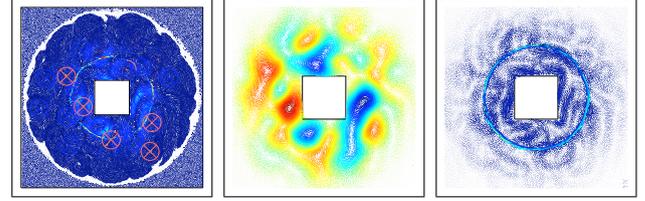


Figura 48: A decomposição SPH-HH de um campo turbulento ao redor de um objeto rígido, amostrado por 23.267 partículas.

Existem também métodos híbridos, combinados métodos sem malha com outros métodos para simular fluidos bifásicos. Liu *et al.* [89] desenvolveram um método híbrido de partículas-malha, onde a fase mais densa é representada por partículas (método *moving particle semi-implicit* [157]), enquanto uma malha discretiza o fluido menos denso (método volume-of-fluid [64]). Um método híbrido utilizando o método SPH é apresentado por Paiva [117], onde a pressão é determinada sobre uma grade e então interpolada para as partículas que discretizam apenas uma das fases do escoamento bifásico.

O método apresentado nessa seção, discretiza as duas fases usando SPH e faz uso da solução do método da projeção SPH (capítulo 5) para simular o escoamento de tal forma que a condição de incompressibilidade para o campo de velocidade obtido seja garantida. Os principais passos no algoritmo serão apresentados no que se segue.

Algoritmo SPH

O algoritmo SPH para a simulação de fluidos bifásicos será descrito a seguir. O método da projeção SPH visto no capítulo 5 será utilizado para que o campo de velocidade encontrado em todos os passos da simulação satisfaçam a condição de incompressibilidade ($\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$). Outros detalhes intrínsecos da aplicação a fluidos bifásicos serão descritos a diante.

Campo de velocidade intermediário No primeiro passo, um campo intermediário de velocidade \mathbf{v}^* é obtido pela equação do momento (equação 80), sem o termo da pressão. A aproximação para o termo viscoso proposto por Morris *et al.* [105] é utilizada, e a integração numérica é calculada utilizando o método explícito de Euler (seção 5(d)). Assim, o campo \mathbf{v}^* em uma partícula i é obtido pela seguinte expressão

$$\mathbf{v}^*_i = \mathbf{v}_i + \Delta t \sum_j \frac{m_j (\mu_i + \mu_j) \mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{x}_{ij} \nabla_i W_{ij}}{\rho_i \rho_j r_{ij}^2}, \quad (113)$$

onde Δt é a discretização temporal.

A restrição

$$\mathbf{v}^* = 0 \quad \text{em } \delta\Omega$$

é aplicada ao campo obtido em 113 utilizando o conceito de camada-limite. A figura 49 ilustra o efeito causado pela camada limite em um campo de velocidade. A figura da esquerda ilustra um campo de velocidade \mathbf{v}^* obtido pela aproximação 113, junto com a camada limite. Nessa camada, a magnitude da velocidade é alterada, indo de zero, na superfície do domínio, até a velocidade \mathbf{v}_∞ , na fronteira da camada limite. O resultado é ilustrado na figura da direita.

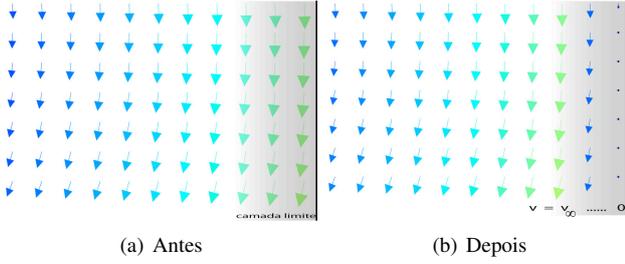


Figura 49: A figura ilustra a aplicação do conceito de camada limite em um campo de velocidade.

Projeção no espaço de divergência livre A projeção no sub-espaço de divergência nula do campo de velocidade define novos campos de velocidade e pressão. A pressão p é obtida pela solução da seguinte equação de Poisson (equação 98)

$$-\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right) = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{v}^* \quad (114)$$

com a condição de Neumann $\frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} = 0$ na fronteira do domínio Ω .

A discretização dessa equação de Poisson pode ser obtida usando algum dos operadores divergente SPH (capítulo 2), por exemplo:

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

e pelo operador laplaciano SPH Taylor (capítulo 2) aplicado aos termos da seguinte identidade:

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

com $k = \rho^{-1}$. Tem-se

$$\begin{aligned} \nabla^2 (kp) &= 2 \sum_j \frac{m_j (k_i p_i - k_j p_j)}{\rho_j r_{ij}^2} \mathbf{x}_{ij} \nabla_i W_{ij} \\ p \nabla^2 k &= 2 \sum_j \frac{m_j (k_i p_i - k_j p_i)}{\rho_j r_{ij}^2} \mathbf{x}_{ij} \nabla_i W_{ij} \\ k \nabla^2 p &= 2 \sum_j \frac{m_j (k_i p_i - k_i p_j)}{\rho_j r_{ij}^2} \mathbf{x}_{ij} \nabla_i W_{ij} \end{aligned} \quad (115)$$

onde, a aproximação é obtida para o termo

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

Clary e Monaghan [26] propõem substituir

$$k_i + k_j \longrightarrow \frac{4k_i k_j}{k_i + k_j}$$

no caso da variável k ter uma descontinuidade. Em escoamentos bifásicos, a variável $k = \rho^{-1}$ pode ser descontínua em algumas regiões, como, por exemplo, na interface entre os dois fluidos, onde a densidade é descontínua. Portanto, reescrevemos o laplaciano como

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right) = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \left(\frac{4}{\rho_i + \rho_j} \right) p_{ij} \frac{\mathbf{x}_{ij}}{r_{ij}^2} \nabla_i W_{ij}, \quad (116)$$

onde $p_{ij} = p_i - p_j$.

Ao invés de substituir a equação de Poisson (equação 98) pela condição de Neumann $\nabla \phi \cdot \mathbf{n} = 0$, para o qual deveríamos considerar a partícula exatamente na fronteira, utilizamos o conceito de partículas fantasmas.

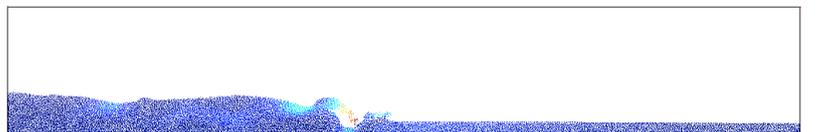
Por último o novo campo de velocidade é obtido fazendo

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}^* - \Delta t \frac{1}{\rho} \nabla p. \quad (117)$$

Onde a incompressibilidade é satisfeita.

O seguinte pseudo-código destaca as principais etapas durante a simulação das equações de Navier-Stokes, na qual utiliza-se o método de decoplamento pressão-velocidade:

- 1: **for** $i = 1$ to n **do**
- 2: $\mathbf{x}_i^* = \mathbf{x}_i^t + \Delta t \mathbf{v}_i^t$
- 3: **end for**
- 4: Cálculo do campo intermediário \mathbf{v}_i^*
- 5: Cálculo da pressão p_i^{t+1}
- 6: **for** $i = 1$ to n **do**
- 7: $\mathbf{v}_i^{t+1} = \mathbf{v}_i^* - \Delta t \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right)_i^{t+1}$
- 8: **end for**
- 9: **for** $i = 1$ to n **do**
- 10: $\mathbf{x}_i^{t+1} = \mathbf{x}_i^t + \Delta t \left(\frac{\mathbf{v}_i^t + \mathbf{v}_i^{t+1}}{2} \right)$
- 11: **end for**



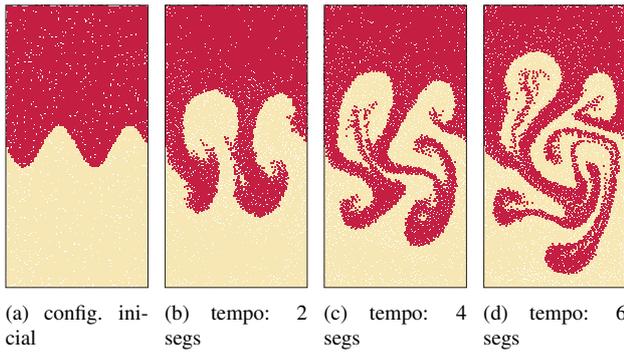


Figura 50: Instabilidades de Rayleigh-Taylor são criadas quando o fluido mais denso é acelerado para dentro do fluido menos denso. As imagens da simulação nos instantes de tempos 0, 2, 4 e 6 segundos ilustram a dinâmica das instabilidades.

Resultados

Instabilidades de Rayleigh-Taylor Nesse exemplo, a *instabilidade de Rayleigh-Taylor* é simulada pelo método SPH. A instabilidade de Rayleigh-Taylor ocorre quando um fluido é acelerado dentro de outro fluido menos denso. Em nossa simulação isso ocorre quando um fluido de maior densidade é colocado sobre um fluido menos denso e um campo gravitacional é criado.

Uma das grandes vantagens do método SPH sobre os demais métodos com malhas é vista nesse exemplo. A interface entre dois diferentes fluidos é facilmente captada pelo método e pode ser visualizada durante toda a simulação, sem nenhum esforço adicional.

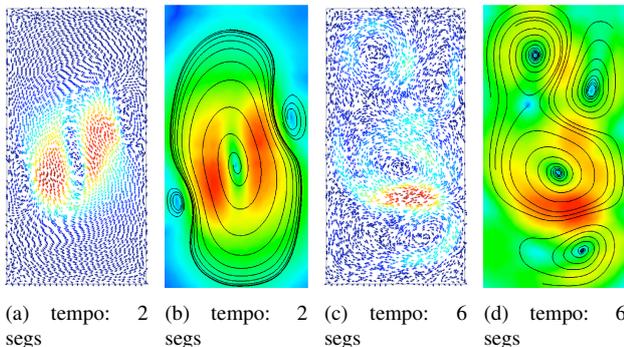


Figura 51: Os campos de velocidades do escoamento nos instantes de tempo dois e seis segundos são ilustrados em algumas partículas nas figuras 51(a) e 51(c), respectivamente. Ao lado de cada campo, algumas linhas integrais do mesmo são mostradas.

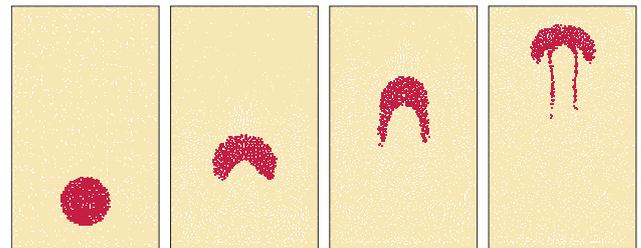
A dinâmica da instabilidade é vista na figura 50, onde um fluido mais denso (escuro) tem densidade duas vezes maior do que o fluido menos denso (claro).

O domínio $\Omega = [-0,5; 0,5] \times [-1; 1]$ é representado por 12.400 partículas, cujas posições iniciais foram definidas pela distribuição do disco de Poisson. A interface entre os dois fluidos é inicialmente dada pela função $y = -0,15\text{sen}(\pi x)$.

O fluido menos denso (densidade igual a 1,0) é representado por 6.200 partículas com massa 0,000385, enquanto que o fluido com a densidade duas vezes maior é representado por 6.200 partículas com massa 0,00077. Outros parâmetros definidos para a simulação dessa instabilidade são: a gravidade, de magnitude 1,0; a viscosidade $\mu = 0,0118$ e passo de tempo $\Delta t = 0,001$.

No método proposto, um campo de pressões é calculado através de uma equação de Poisson, em cada instante de tempo. Daí, um campo de velocidades é obtido durante toda a simulação tendo divergência nula, garantindo a incompressibilidade do escoamento.

O campo de velocidades calculado durante o escoamento é ilustrado na figura 51 nos instantes de tempo dois e seis segundos (tempo real de simulação). O campo de velocidades é ilustrado em algumas partículas nas figuras 51(a) e 51(c) e algumas linhas integrais, obtidas pela integração de um ponto ao longo de um campo aproximado [75], são desenhadas nas figuras 51(b) e 51(d)



(a) config. inicial (b) tempo: 2 segs (c) tempo: 4 segs (d) tempo: 6 segs

Figura 52: A dinâmica de uma gota: um fluido mais denso contém em seu interior uma gota de um fluido mais leve. O empuxo agindo na gota gera um movimento da mesma em direção ao topo do fluido mais denso. A configuração inicial e o resultado após 6 segundos de simulação (tempo real) são ilustrados.

Imersão de uma gota O próximo exemplo simula a *dinâmica de uma gota* fluindo em direção ao topo de um fluido mais denso. Quando um fluido contém em seu interior uma gota de um fluido menos denso, a gota fica sujeita a uma força de empuxo, fazendo com que ela suba até a superfície (figura 52).

Na simulação, a densidade do fluido mais pesado é duas vezes a densidade do fluido mais leve (gota). A gota é discretizada por 547 partículas e o fluido mais denso por 9.873 partículas. A viscosidade do fluido e outros parâmetros da simulação são: a gravidade, de magnitude 1,0; a viscosi-

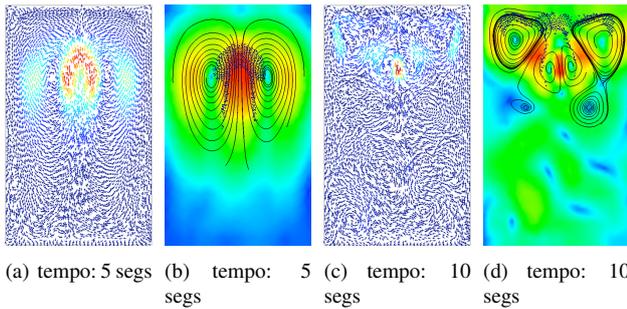


Figura 53: Na coluna da esquerda, o campo de velocidades do escoamento, nos instantes de tempo 5 e 10 segundos, é ilustrado em algumas partículas da discretização. As partículas que representam a gota nessa simulação também são visualizadas na coluna da direita, junto com algumas linhas integrais. Os mapas de cores em ambas as imagens representam a magnitude do campo de velocidade.

dade $\mu = 0,0118$ e passo de tempo $\Delta t = 0,001$.

Quando uma gota de um fluido é mergulhada em um fluido mais pesado, devido à diferença de densidade, a pressão calculada pelo método da projeção através da equação de Poisson resulta em uma força de empuxo que age sobre a gota criando um movimento em direção ao topo do fluido mais denso. A forma esférica da gota é alterada para a forma de ferradura. Essa deformação também é observada em experimentos reais.

Mais uma vez, pelo método da projeção SPH, um campo de velocidades é obtido durante toda a simulação tendo divergência nula, através do cálculo da pressão por uma equação de Poisson. Garantindo, portanto, a incompressibilidade do escoamento.

Na figura 53 o campo de velocidades do escoamento é ilustrado. Na coluna da esquerda o vetor velocidade do escoamento é ilustrado em algumas partículas da discretização. Na coluna da direita, algumas linhas integrais, obtidas pela integração de um ponto inicial em um campo aproximado [75], são ilustradas. As partículas que representam a gota nessa simulação também são visualizadas na coluna da direita. Os mapas de cores em ambas as imagens representam a magnitude do campo de velocidade.

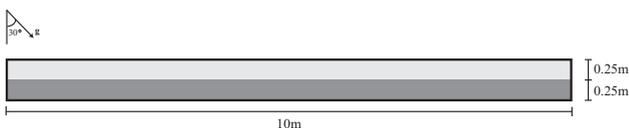


Figura 54: Instabilidade de Kelvin-Helmholtz ocorre quando, por exemplo, existe uma diferença de velocidades na interface entre os dois fluidos.

Instabilidades de Kelvin-Helmholtz O último problema simulado é conhecido como a *instabilidade de Kelvin-Helmholtz*. A instabilidade de Kelvin-Helmholtz ocorre quando há uma diferença de velocidades na interface entre duas camadas de fluidos, não necessariamente de densidades diferentes.

Em nossa simulação, a instabilidade de Kelvin-Helmholtz é criada pela seguinte situação: em um longo reservatório (comprimento 20 vezes maior que a altura), um fluido menos denso é sobreposto a um fluido mais denso definindo uma interface plana entre os dois fluidos. Quando o reservatório é inclinado, fazendo com que o fluido mais denso se movimente para o fundo do reservatório, enquanto o fluido menos denso se movimente para o topo do reservatório, a diferença das velocidades nas camadas dos fluidos cria, na interface dos fluidos, a instabilidade de Kelvin-Helmholtz. A figura 54 ilustra o reservatório e a configuração inicial do problema. Cada fluido é discretizado por 20.000 partículas e a razão entre as densidades é 2. O ângulo de inclinação do reservatório e outros parâmetros dessa simulação são: a gravidade, de magnitude 1, 0; a viscosidade $\mu = 0,0118$, passo de tempo $\Delta t = 0,001$ e inclinação do reservatório é de 30° .

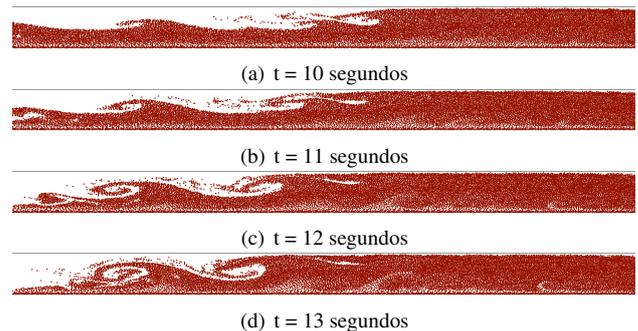
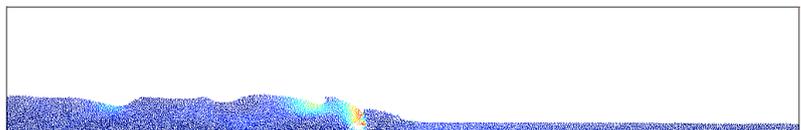


Figura 55: As instabilidades de Kelvin-Helmholtz ocorrem quando camadas de fluidos, não necessariamente de densidades diferentes, possuem velocidades diferentes. Quando a diferença de velocidades na interface entre os dois fluidos excede um valor, a instabilidade ocorre. Somente o fluido mais denso é ilustrado.

Inclinando o reservatório, quando a diferença de velocidades na interface entre os dois fluidos excede um valor, a instabilidade é criada. A figura 55 ilustra a evolução da instabilidade de Kelvin-Helmholtz após 10 segundos de simulação (tempo real). O fluido menos denso, porém, não é visualizado. Além disso, apenas a parte central do reservatório é ilustrada para uma melhor visualização das instabilidades.



A Noções elementares de cálculo diferencial vetorial

Este apêndice coleta resultados básicos de cálculo diferencial à várias variáveis, na notação usada neste livro. Será visto apenas as definições essenciais com as propriedades usadas no livro, e convidamos os leitores a procurar livros de cálculo [17, 18, 19] para uma abordagem mais rigorosa.

Introduzimos os campos vetoriais no espaço pois, exceto para o operador rotacional, cobre o caso bi-dimensional. Para mais detalhes sobre o rotacional no plano, referimos à seção sobre decomposição de campos vetoriais. Consideramos que os campos são suficientemente diferenciáveis para validar as expressões, o que na maioria dos casos significa ser de classe pelo menos C^2 (permitindo assumir, pelo teorema de Clairaut-Schwarz que $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}$). Consideramos também que os domínios têm fecho compacto e são simplesmente conexos, esta última suposição sendo mais delicada nas simulações.

(a) Campos vetoriais e operadores diferenciais

Campos escalares e vetoriais

O cálculo básico estuda funções de um parâmetro, cujo domínio é ou a linha real \mathbb{R} ou um sub-domínio dela. Consideramos aqui funções da posição espacial, tendo mais de uma dimensão. Uma função sobre tal domínio é chamada de *campo escalar*:

Definição. Um campo escalar sobre Ω é uma função

$$f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$$

Neste livro, olhamos casos onde Ω é \mathbb{R}^2 ou \mathbb{R}^3 ou um subconjunto deles. Nesta definição, a parte escalar se refere ao espaço imagem \mathbb{R} . Exemplos físicos de campos escalares são a pressão ou a temperatura do fluido.

Se um campo escalar associa números reais a pontos de \mathbb{R}^3 , um campo vetorial associa um vetor:

Definição. Um campo vetorial é uma função

$$\mathbf{f} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$$

onde Ω é um subconjunto de \mathbb{R}^3

Podemos interpretar o campo vetorial como 3 campos escalares $f_{1,2,3}$, que associam a um ponto cada componente do vetor

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = f_1(\mathbf{x})\mathbf{i} + f_2(\mathbf{x})\mathbf{j} + f_3(\mathbf{x})\mathbf{k},$$

onde usamos a base usual:

$$\begin{aligned}\mathbf{i} &= (1, 0, 0) \\ \mathbf{j} &= (0, 1, 0) \\ \mathbf{k} &= (0, 0, 1)\end{aligned}$$

O exemplo físico mais usado neste livro é o campo de velocidade do fluido.

Derivação de primeira ordem, matriz jacobiana

O próximo ponto é definir os operadores de derivação nos campos escalares e vetoriais. De fato, um campo escalar tem três derivadas parciais ($\frac{\partial f}{\partial x}$, $\frac{\partial f}{\partial y}$, $\frac{\partial f}{\partial z}$) e um campo vetorial, sendo essencialmente três campos escalares, tem nove derivadas parciais. Podemos agrupar todas estas derivadas numa matriz 3×3 , chamada de matriz jacobiana:

Definição. A matriz jacobiana de um campo vetorial $\mathbf{f} = f_1\mathbf{i} + f_2\mathbf{j} + f_3\mathbf{k}$ é a matriz

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} & \frac{\partial f_1}{\partial z} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} & \frac{\partial f_2}{\partial z} \\ \frac{\partial f_3}{\partial x} & \frac{\partial f_3}{\partial y} & \frac{\partial f_3}{\partial z} \end{bmatrix}$$

Tem muitas combinações destas derivadas parciais que definem operadores diferenciais, mas na prática, tem apenas três operadores diferenciais de primeira ordem interessantes do ponto de vista físico e geométrico: o gradiente, o divergente e o rotacional.

Operador gradiente e notação ∇

Definição. O gradiente de um campo escalar f é o campo vetorial

$$\text{grad } f = \frac{\partial f}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial f}{\partial y}\mathbf{j} + \frac{\partial f}{\partial z}\mathbf{k}.$$

Então o gradiente é um operador

$$\begin{aligned}\text{grad} : \text{campos escalares} &\mapsto \text{campos vetoriais} \\ f &\rightarrow \text{grad } f = \frac{\partial f}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial f}{\partial y}\mathbf{j} + \frac{\partial f}{\partial z}\mathbf{k}\end{aligned}$$

Neste livro, usamos a notação simbólica

$$\text{grad } f = \nabla f$$

onde o operador ∇ , chamado nabla é representado pelo vector de operadores

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y}\mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial z}\mathbf{k}$$

Observe que a notação ∇ pode ser usada para a matriz jacobiana com $\nabla \mathbf{f}$.

O gradiente corresponde à direção de maior crescimento do campo f . Em particular, os pontos estacionários de f são os pontos onde o gradiente de f é zero.

Operador divergente

Os dois outros operadores diferenciais atuam em campos de vetores: o divergente associa a um campo de vetor um campo escalar, enquanto o rotacional (no espaço) associa a um campo vetorial outro campo vetorial.

Definição. O divergente do campo vetorial $\mathbf{f} = f_1\mathbf{i} + f_2\mathbf{j} + f_3\mathbf{k}$ é

$$\text{div } \mathbf{f} := \frac{\partial f_1}{\partial x} + \frac{\partial f_2}{\partial y} + \frac{\partial f_3}{\partial z} .$$

O divergente é então o traço da matriz jacobiana. Usando a notação simbólica, obtemos a mesma expressão através do produto escalar de vetores:

$$\text{div } \mathbf{f} = \nabla \cdot \mathbf{f}$$

Assim

$$\begin{aligned} \text{div} : \text{campos vetoriais} &\mapsto \text{campos escalares} \\ \mathbf{f} &\rightarrow \text{div } \mathbf{f} = \nabla \cdot \mathbf{f} \end{aligned}$$

Veremos no final do apêndice que os campos sem divergente são importantes, pois conservam o fluxo. São geralmente qualificados de *solenoidais*. Em particular, correspondem a campos magnéticos em eletromagnetismo e a fluidos incompressíveis.

Operador rotacional no espaço

Definição. O rotacional de um campo vetorial $\mathbf{f} = f_1\mathbf{i} + f_2\mathbf{j} + f_3\mathbf{k}$ é o campo vetorial

$$\begin{aligned} \text{rot} : \text{campos vetoriais} &\mapsto \text{campos vetoriais} \\ \mathbf{f} &\rightarrow \text{rot } \mathbf{f} \end{aligned}$$

com

$$\text{rot } \mathbf{f} = \left(\frac{\partial f_3}{\partial y} - \frac{\partial f_2}{\partial z} \right) \mathbf{i} + \left(\frac{\partial f_1}{\partial z} - \frac{\partial f_3}{\partial x} \right) \mathbf{j} + \left(\frac{\partial f_2}{\partial x} - \frac{\partial f_1}{\partial y} \right) \mathbf{k} .$$

O rotacional são diferenças de cofatores da matriz jacobiana. Usando a notação simbólica, obtemos a mesma expressão através do produto vetorial:

$$\text{rot } \mathbf{f} = \nabla \times \mathbf{f}$$

Em particular, é simples verificar, usando o teorema de Clairaut-Schwarz sobre derivadas parciais mistas, que o gradiente de um campo escalar tem rotacional nulo:

$$\text{rot grad } f = \nabla \times \nabla f = 0 .$$

Assim, os campos gradientes são chamados de *irrotacionais* ou *conservativos*. É fácil mostrar que, de fato, num domínio simplesmente conexo, um campo tem rotacional nulo se e somente se é o gradiente de um campo escalar.

Operador de segunda ordem: laplaciano

Definição. O laplaciano de um campo escalar f é o campo escalar:

$$\begin{aligned} \nabla^2 : \text{campos escalares} &\mapsto \text{campos escalares} \\ f &\rightarrow \nabla^2 f = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} . \end{aligned}$$

Observamos que o laplaciano é o divergente do gradiente, o que pode ser escrito usando a notação simbólica, validando a notação ∇^2 :

$$\nabla^2 f = \nabla \cdot \nabla f$$

Relações de operadores no espaço

Tem muitas identidades úteis envolvendo gradiente, divergente e rotacional. São geralmente provadas usando cálculo direto e simetria de derivadas parciais (teorema de Clairaut-Schwarz), expandindo cada termo das equações.

Sejam f e g campos escalares, e \mathbf{f} , \mathbf{g} campos vetoriais. Temos então

1.

$$\nabla (fg) = f\nabla g + g\nabla f .$$

É uma consequência direta da regra de derivação de um produto. Observe que foi usada para definir o operador gradiente SPH na equação (17).

2.

$$\nabla (f\mathbf{f}) = \nabla f \cdot \mathbf{f} + f\nabla \cdot \mathbf{f} .$$

É obtida expandindo os termos

$$\begin{aligned} \nabla (f\mathbf{f}) &= \frac{\partial (ff_1)}{\partial x} + \frac{\partial (ff_2)}{\partial y} + \frac{\partial (ff_3)}{\partial z} \\ &= f_1 \frac{\partial f}{\partial x} + f_2 \frac{\partial f}{\partial y} + f_3 \frac{\partial f}{\partial z} + f \left(\frac{\partial f_1}{\partial x} + \frac{\partial f_2}{\partial y} + \frac{\partial f_3}{\partial z} \right) \\ &= \nabla f \cdot \mathbf{f} + f\nabla \cdot \mathbf{f} . \end{aligned}$$

Observe que foi usada para definir o operador divergente SPH na equação (18).

3.

$$\nabla \times (f\mathbf{f}) = \nabla f \times \mathbf{f} + f\nabla \times \mathbf{f} .$$

Pode ser provada de maneira similar, componente por componente.

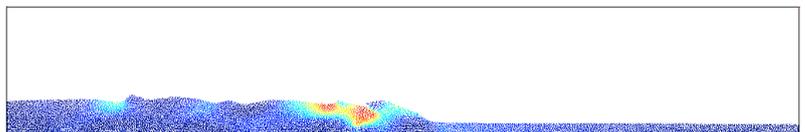
4.

$$\nabla \cdot (\mathbf{f} \times \mathbf{g}) = (\nabla \times \mathbf{f}) \cdot \mathbf{g} - \mathbf{f} \cdot \nabla \times \mathbf{g} .$$

Pode ser provada também expandindo os termos, similarmente a versão vetorial desta identidade.

5.

$$\nabla \times (\mathbf{f} \times \mathbf{g}) = (\nabla \cdot \mathbf{g})\mathbf{f} + (\mathbf{g} \cdot \nabla)\mathbf{f} - (\nabla \cdot \mathbf{f})\mathbf{g} - (\mathbf{f} \cdot \nabla)\mathbf{g}$$



$$\nabla(\mathbf{f} \cdot \mathbf{g}) = \mathbf{f} \times (\nabla \times \mathbf{g}) + \mathbf{g} \times (\nabla \times \mathbf{f}) + (\mathbf{f} \cdot \nabla) \mathbf{g} + (\mathbf{g} \cdot \nabla) \mathbf{f}$$

São mais delicadas a provar, mas pode-se usar o operador seguinte para simplificar:

$$(\mathbf{g} \cdot \nabla) = g_1 \frac{\partial}{\partial x} + g_2 \frac{\partial}{\partial y} + g_3 \frac{\partial}{\partial z}.$$

6.

$$\nabla \times \nabla f = 0$$

ou seja: o gradiente de um campo escalar é conservativo.

7.

$$\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{f}) = 0$$

ou seja: o rotacional de um campo de vetor é solenoidal.

8.

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{f}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{f}) - \nabla^2 \mathbf{f}$$

onde

$$\nabla^2 \mathbf{f} = (\nabla^2 f_1, \nabla^2 f_2, \nabla^2 f_3)$$

(b) Interpretação geométrica e teoremas integrais

Os operadores gradiente, divergente e rotacional tem dois tipos de interpretação: uma ligada a geometria diferencial, onde de fato são casos particulares de derivação de formas diferenciais, e outra ligada a física, onde o gradiente é associado à variação de um campo escalar, o divergente à variação do fluxo e o rotacional à variação da velocidade angular de um escoamento. Estas duas interpretações são explicitadas nos teoremas integrais, chamados de Green, Stokes, Gauss, Ostrogradsky ou simplesmente teorema fundamental do cálculo dependendo das referências.

Fluxos e integrais de campos de vetores

O primeiro passo é definir a noção de fluxo e de trabalho de um campo vetorial. O fluxo de um campo vetorial \mathbf{f} através a superfície S corresponde à quantidade de matéria que, quando transportada por \mathbf{f} , atravessa S num sentido, diminuído da quantidade que atravessa S no outro sentido. Esta definição envolve uma soma perto de uma superfície, o que é calculável com integrais de superfície.

Se a superfície S é definida por uma parametrização $\mathbf{x}(u, v)$ num domínio $(u, v) \in U \subset \mathbb{R}^2$, uma integral sobre S pode ser calculada no domínio U como integral dupla por:

$$\iint_S f dS = \iint_U f(\mathbf{x}) \left\| \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u} \times \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial v} \right\| du dv.$$

O termo $\left\| \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u} \times \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial v} \right\|$ representa a norma do vetor normal a S , e corrige a distorção (jacobiano) da parametrização em relação a um plano. Este termo é geralmente anotado

$dS = \left\| \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u} \times \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial v} \right\|$. Se a superfície S é fechada, indicamos isto na integral pelo símbolo \oiint_S em vez de \iint_S .

O fluxo corresponde a integral sobre S da quantidade de matéria que atravessa em cada sentido, ou seja o produto escalar do campo de velocidade \mathbf{f} com a normal unitária \mathbf{n} de S . Na expressão acima, isto permite juntar o jacobiano com o vetor unitário, simplificando a expressão do fluxo para:

$$\text{fluxo de } \mathbf{f} = \iint_S \mathbf{f} \cdot \mathbf{n} dS = \iint_U \mathbf{f}(\mathbf{x}) \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u} \times \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial v} \right) du dv.$$

O caso do trabalho é similar. O trabalho de um campo vetorial representando uma força é a quantidade de energia gasta pela força ao longo de um movimento. Se a trajetória Γ do movimento for parametrizada por $\mathbf{x}(u)$ com $u \in]a, b[\subset \mathbb{R}$, o trabalho do campo vetorial \mathbf{f} pode ser calculado como a integral do produto escalar de \mathbf{f} pelo vetor tangente unitário do movimento, o que leva a seguinte expressão:

$$\text{trabalho de } \mathbf{f} = \int_{\Gamma} \mathbf{f} \cdot d\mathbf{l} = \int_{]a, b[} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{x}'(u) du.$$

Se a curva Γ é fechada, indicamos isto na integral pelo símbolo \oint_{Γ} em vez de \int_{Γ} .

Teoremas de Stokes

A forma geral do teorema de Stokes relaciona a integral sobre um domínio Ω de uma derivada de um campo com a integral do campo sobre a fronteira $\partial\Omega$ do domínio:

$$\int_{\Omega} d\mathbf{f} = \oint_{\partial\Omega} \mathbf{f}.$$

Vimos que tem várias maneiras de definir derivadas de campo: derivada de função, divergente, rotacional... Cada operador corresponde a um tipo de integração: derivada para integral sobre um intervalo, divergente para fluxos, rotacional para trabalho. Tradicionalmente, cada caso tem um nome diferente: teorema fundamental do cálculo para intervalos, fórmula de Gauss, Ostrogradsky ou do divergente para superfícies, Green ou Stokes para curvas. Veremos cada um explicitamente agora, pois permitem entender o significado geométrico dos operadores diferenciais.

Intervalo, área e teorema fundamental do cálculo O teorema fundamental do cálculo relaciona uma derivada (noção relacionada a tangente ou a velocidade de um movimento) com uma área (integral de intervalo). Apesar de não ser intuitivo, é simples prová-lo:

$$\int_{]a, b[} f' = f(b) - f(a).$$

Observe que ele se encaixa na fórmula geral do teorema de Stokes: temos uma derivada no lado esquerdo, e a fronteira do domínio do lado direito (a fronteira do segmento $]a, b[$ são os pontos a e b).

Superfície, fluxo e teorema de Gauss Temos uma fórmula similar para o caso de superfícies, relacionando uma integral de volume a um fluxo:

$$\iiint_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{f} \, d^3\mathbf{x} = \oiint_{\partial\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{n} \, dS.$$

Observe que a fronteira $\partial\Omega$ do domínio tri-dimensional Ω é uma superfície fechada, convencionalmente orientada para fora de Ω . Esta fórmula permite dar ao divergente uma interpretação física simples: a média do divergente de \mathbf{f} numa região é o fluxo atravessando esta região, ou seja, a quantidade de matéria que essa região ganhou ou perdeu. Em particular, um fluido incompressível não pode aumentar a quantidade de matéria num dado volume, o que pode ser traduzido exatamente pelo fato do campo de velocidade ter divergente nulo.

Curvas, trabalho e teoremas de Green e Stokes O teorema de Stokes para curvas pode ser escrito de forma similar, relacionando um fluxo a um trabalho:

$$\iint_S \operatorname{rot} \mathbf{f} \cdot \mathbf{n} \, dS = \oint_{\partial S} \mathbf{f} \cdot d\mathbf{l}.$$

Observe que a fronteira ∂S da superfície S é uma curva fechada, convencionalmente orientada de tal forma que o produto vetorial da normal de S e da tangente de ∂S aponte para dentro de S . Esta fórmula permite dar ao rotacional uma interpretação física simples: a média do rotacional de \mathbf{f} numa superfície é o trabalho de \mathbf{f} ao longo do bordo, chamado de circulação. Se o campo \mathbf{f} é conservativo (irrotacional), a circulação não muda após ter dado a volta a superfície. Caso contrário, o rotacional mede, através do seu fluxo, as mudanças de circulação.

Este teorema é mais simples no caso onde a superfície S é planar. No caso, o fluxo do rotacional se simplifica numa integral de região planar:

$$\iint_{\Omega} \left(\frac{\partial f_2}{\partial x} - \frac{\partial f_1}{\partial y} \right) d^2\mathbf{x} = \oint_{\partial\Omega} \mathbf{f} \cdot d\mathbf{l}.$$

Operadores diferenciais e integração na fronteira Podemos mencionar primeiramente algumas relações derivadas dos teoremas anteriores e da integração por parte, que podem ser úteis na hora de considerar operadores SPH na fronteira:

1. Integração volumétrica de um gradiente:

$$\iiint_{\Omega} \nabla f \, d^3\mathbf{x} = \oiint_{\partial\Omega} f \mathbf{n} \, dS.$$

Observe que o elemento de área a esquerda é vetorial, na direção da normal à superfície $\partial\Omega$.

2. Integração por parte com um gradiente:

$$\iiint_{\Omega} (\nabla f) g \, d^3\mathbf{x} = \oiint_{\partial\Omega} f g \mathbf{n} \, dS - \iiint_{\Omega} f (\nabla g) \, d^3\mathbf{x}.$$

3. Integração por parte com um divergente e um gradiente:

$$\iiint_{\Omega} f (\nabla \cdot \mathbf{g}) \, d^3\mathbf{x} = \oiint_{\partial\Omega} f \mathbf{g} \cdot \mathbf{n} \, dS - \iiint_{\Omega} (\nabla f) \cdot \mathbf{g} \, d^3\mathbf{x}.$$

4. Identidade de Green, obtida com integração por parte e teorema de Gauss:

$$\iiint_{\Omega} (\nabla f) \cdot (\nabla g) \, d^3\mathbf{x} = \oiint_{\partial\Omega} f (\nabla g) \cdot \mathbf{n} \, dS - \iiint_{\Omega} f (\nabla^2 g) \, d^3\mathbf{x}.$$

Aplicação à equação de Poisson

Uma aplicação simples do teorema de Gauss é provar a unicidade (não a existência) da solução da equação de Poisson, usada na parte do método da projecção:

$$\nabla^2 f = g \quad \text{em } \Omega.$$

Veremos rapidamente a idéia da demonstração no caso que a condição de fronteira $f|_{\partial\Omega}$ é dada, mas a demonstração se estende diretamente para condições tipo von Neumann onde $\nabla f \cdot \mathbf{n}$ é especificado na fronteira.

Supondo que tenha duas soluções f_1 e f_2 para este enunciado. Por linearidade dos operadores, temos que a função

$$\tilde{f} = f_1 - f_2$$

é solução da equação de Laplace com fronteira nula:

$$\nabla^2 \tilde{f} = 0 \quad \text{com} \quad \tilde{f}|_{\partial\Omega} = 0$$

Agora considere a energia definida pela integral

$$E = \iiint_{\Omega} \|\nabla \tilde{f}\|^2 \, d^3\mathbf{x}.$$

Usando a identidade de Green:

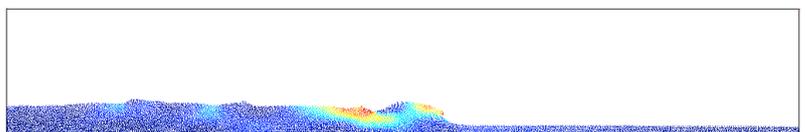
$$E = \iiint_{\Omega} \nabla \tilde{f} \cdot \nabla \tilde{f} \, d^3\mathbf{x} = \oiint_{\partial\Omega} \tilde{f} \nabla \tilde{f} \cdot \mathbf{n} \, dS - \iiint_{\Omega} \tilde{f} \nabla^2 \tilde{f} \, d^3\mathbf{x}.$$

O segundo termo é nulo, pois \tilde{f} satisfaz a equação de Laplace. O primeiro termo também é nulo, pois a condição de fronteira de \tilde{f} é nula.

Obtemos então:

$$E = \iiint_{\Omega} \|\nabla \tilde{f}\|^2 \, d^3\mathbf{x} = 0 \quad \text{e então} \quad \nabla \tilde{f} = 0.$$

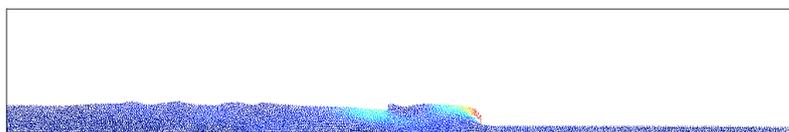
O campo \tilde{f} é então constante e, pela condição de fronteira, esta constante tem que ser nula. Assim $f_1 = f_2$, mostrando que, se a solução existe, é única.



Referências

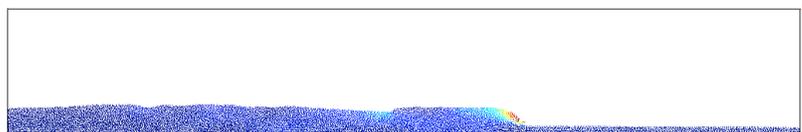
- [1] C. Aguiar, T. Kodama, T. Osada and Y. Hama. Smoothed particle hydrodynamics for relativistic heavy-ion collisions. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 27(1):75–94, 2001.
- [2] J. Anderson. *Computational Fluid Dynamics: The Basics with Applications*. McGraw-Hill, 1995.
- [3] S. Armfield and R. Street. The fractional-step method for the Navier–Stokes equations on staggered grids: the accuracy of three variations. *Journal of Computational Physics*, 153(2):660–665, 1999.
- [4] P. Artymowicz and S. Lubow. Dynamics of binary-disk interaction. 1: Resonances and disk gap sizes. *Astrophysical Journal*, 421(2):651–667, 1994.
- [5] P. Balbuena and J. Seminario. *Molecular Dynamics*. Elsevier Science, 1999.
- [6] R. Barrett, M. Berry, T. Chan, J. Demmel, J. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine and H. der Vorst. *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods*. SIAM, 1994.
- [7] R. Bartle. *The Elements of Integration and Lebesgue Measure*. Wiley, 1995.
- [8] G. Batchelor. *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, 2000.
- [9] J. Bell and D. Marcus. A second-order projection method for variable-density flows. *Journal of Computational Physics*, 101(2):334–348, 1992.
- [10] T. Belytschko, Y. Krongauz, D. Organ, M. Fleming and P. Krysl. Meshless methods: an overview and recent developments. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 139(1–4):3–47, 1996.
- [11] T. Belytschko, W. Liu and B. Moran. *Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures*. Wiley, 2000.
- [12] W. Benz. Smooth particle hydrodynamics - a review. In *Numerical Modelling of Nonlinear Stellar Pulsations Problems and Prospects*, 1990.
- [13] J.-D. Boissonnat and M. Yvinec. *Algorithmic geometry*. Cambridge University Press, 1998.
- [14] S. Borgani, K. Dolag, G. Murante, L. Cheng, V. Springel, A. Diaferio, L. Moscardini, G. Tormen and L. T. P. Tozzi. Hot and cooled baryons in SPH simulations of galaxy clusters: physics and numerics. *Arxiv preprint astro-ph/0512506*, 2005.
- [15] R. Bridson and M. Müller. *Fluid Simulation*. Course Notes of SIGGRAPH, 2007.
- [16] Z. Cai and S. Kim. A finite element method using singular functions for the Poisson equation: Corner singularities. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 39(1):286–299, 2001.
- [17] I. Malta, S. Pesco and H. Lopes. *Cálculo a uma Variável*. Editora PUC-Rio, 2003.
- [18] H. J. Bortolossi. *Cálculo Diferencial a Várias Variáveis*. Editora PUC-Rio, 2003.
- [19] G. Tavares and M. Craizer. *Cálculo Integral a Várias Variáveis*. Editora PUC-Rio, 2003.
- [20] R. Castro, T. Lewiner, H. Lopes, G. Tavares and A. Bordignon. Statistical optimization of octree searches. *Computer Graphics Forum*, 27(6):1557–1566, 2008.
- [21] J. Chen, J. Beraun and T. Carney. A corrective smoothed particle method for boundary value problems in heat conduction. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 46(2):231–252, 1999.
- [22] G. Chen, K. Mischaikow, R. S. Laramée and E. Zhang. Efficient Morse decompositions of vector fields. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, 14(4):848–862, 2008.
- [23] A. Chorin. Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Mathematics of Computation*, 22(104):745–762, 1968.
- [24] A. J. Chorin and J. E. Marsden. *A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics*. Springer, 2000.
- [25] S. Clavet, P. Beaudoin and P. Poulin. Particle-based viscoelastic simulation. *Symposium on Computer Animation*, pages 219–228, 2005.
- [26] P. Cleary and J. Monaghan. Conduction modelling using smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 148(1):227–264, 1999.
- [27] A. Colagrossi and M. Landrini. Numerical simulation of interfacial flows by smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 191(2):448–475, 2003.
- [28] F. Colin, R. Egli and F. Lin. Computing a null divergence velocity field using smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 217(2):680–692, 2006.

- [29] S. Cummins and M. Rudman. An SPH projection method. *Journal of Computational Physics*, 152(2):584–607, 1999.
- [30] A. Cuzol, P. Hellier and E. Mémin. A low dimensional fluid motion estimator. *International Journal of Computer Vision*, 75(3):329–349, 2007.
- [31] O. Darrigol. *Worlds of Flow*. Oxford University Press, 2005.
- [32] M. Desbrun and M.-P. Gascuel. Animating soft substances with implicit surfaces. In *Proceedings of SIGGRAPH 95*, pages 287–290, Aug. 1995.
- [33] M. Desbrun and M. P. Gascuel. Smoothed particles: a new paradigm for animating highly deformable bodies. In *Proceedings of EGCS '96*, 1996.
- [34] G. Dilts. Moving Least-Squares particle hydrodynamics. I: Consistency and stability. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 44(8):1115–1155, 1999.
- [35] G. Dilts. Moving least-squares particle hydrodynamics II: conservation and boundaries. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 48(10):1503–1524, 2000.
- [36] J. Dongarra, A. Lumsdaine, R. Pozo and K. Remington. IML++ v.1.2 - Iterative Methods Library: Reference guide. NASA, 1996.
- [37] D. Dunbar and G. Humphreys. A spatial data structure for fast Poisson-disk sample generation. *ACM Transactions on Graphics*, 25(3):503–508, July 2006.
- [38] D. H. Eberly. *Game Physics*. Morgan Kaufmann, 2004.
- [39] H. Edelsbrunner. Weighted alpha-shapes. Technical Report 1760, University of Illinois, 1992.
- [40] S. Elcott, Y. Tong, E. Kanso, P. Schröder and M. Desbrun. Stable, circulation-preserving, simplicial fluids. *ACM Transactions on Graphics*, 26(1):4:1–4:12, Jan. 2007.
- [41] M. Evans, F. Harlow and E. Bromberg. The particle-in-cell method for hydrodynamic calculations. Technical report, Los Alamos National Laboratory, 1957.
- [42] R. Fedkiw, J. Stam and H. W. Jensen. Visual simulation of smoke. In *Proceedings of ACM SIGGRAPH '01*, pages 15–22, 2001.
- [43] C. Fefferman. Existence and smoothness of the Navier-Stokes equation. Technical report, Clay Mathematics Institute, 2000.
- [44] D. Figueiredo. *Análise de Fourier e Equações Diferenciais Parciais. Projeto Euclides*. IMPA, 1977.
- [45] C. Fletcher. *Computational Techniques for Fluid Flows*. Springer, 1992.
- [46] C. Foias, O. Manley, R. Rosa and R. Temam. *Navier-Stokes Equations and Turbulence*. Cambridge University Press, 2008.
- [47] A. Fortuna. *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações*. Editora da Universidade de São Paulo, 2000.
- [48] R. Freund and M. Nachtigal. QMR: a quasi-minimal residual method for non-Hermitian linear systems. *Numerische Mathematik*, 60(1):315–339, 1991.
- [49] D. Fulk and D. Quinn. An analysis of 1-D smoothed particle hydrodynamics kernels. *Journal of Computational Physics*, 126(1):165–180, 1996.
- [50] R. Gentry, R. Martin and B. Daly. An Eulerian differencing method for unsteady compressible flow problems. *Journal of Computational Physics*, pages 87–118, 1966.
- [51] F. Gibou, R. Fedkiw, L.-T. Cheng and M. Kang. A second-order-accurate symmetric discretization of the Poisson equation on irregular domains. *Journal of Computational Physics*, 176(1):205–227, 2002.
- [52] R. Gingold and J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics - theory and application to non-spherical stars. *Monthly Notices of Royal Astronomical Society*, 181:375–389, 1977.
- [53] C. Diaz-Goano, P. D. Minev and K. Nandakumar. A fictitious domain/finite element method for particulate flows. *Journal of Computational Physics*, 192(1):105 – 123, 2003.
- [54] J. Gois, A. Nakano, L. Nonato and G. Buscaglia. Front tracking with moving-least-squares surfaces. *Journal of Computational Physics*, 227(22):9643–9669, 2008.
- [55] G. Golub and C. V. Loan. *Matrix Computations*. The Johns Hopkins University Press, 1989.
- [56] J.-L. Guermond and L. Quartapelle. A projection FEM for variable density incompressible flows. *Journal of Computational Physics*, 165(1):167–188, 2000.
- [57] E. Guyon, J.-P. Hulin, L. Petit and C. D. Mitescu. *Physical Hydrodynamics*. Oxford University Press, 2001.
- [58] S. Hadap and N. Magnenat-Thalmann. Modeling dynamic hair as a continuum. *Computer Graphics Forum*, 20(3):329–338, 2001.



- [59] L. Hageman and D. Young. *Applied Iterative Methods*. Dover, 2004.
- [60] T. Harada, S. Koshizuka and Y. Kawaguchi. Sliced data structure for particle-based simulations on gpus. In *Proceedings of GRAPHITE '07*, pages 55–62, 2007.
- [61] C. Hayhurst and R. Clegg. Cylindrically symmetric SPH simulations of hypervelocity impacts on thin plates. *International Journal of Impact Engineering*, 20(1-5):337–348, 1997.
- [62] J. Helman and L. Hesselink. Representation and display of vector field topology in fluid flow data sets. *Computer*, 22(8):27–36, 1989.
- [63] A. Hertzmann and D. Zorin. Illustrating smooth surfaces. In *Proceedings of SIGGRAPH '00*, pages 517–526, 2000.
- [64] C. Hirt and B. Nichols. Volume of fluid/vof/ method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, 39(1):201–225, 1981.
- [65] M. H. Holmes. *Introduction to Numerical Methods in Differential Equations*. Springer, 2000.
- [66] J.-M. Hong, H.-Y. Lee, J.-C. Yoon and C.-H. Kim. Bubbles alive. *ACM Transactions on Graphics*, 27(3):48:1–48:4, 2008.
- [67] R. Iório and V. Iório. *Equações Diferenciais Parciais: uma Introdução. Projeto Euclides*. IMPA, 1988.
- [68] C. Isnard. *Introdução à Medida e Integração. Projeto Euclides*. IMPA, 2007.
- [69] G. Johnson, R. Stryk and S. Beissel. SPH for high velocity impact computations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 139(1-4):347–373, 1996.
- [70] Z. Jomaa and C. Macaskill. The embedded finite difference method for the Poisson equation in a domain with an irregular boundary and Dirichlet boundary conditions. *Journal of Computational Physics*, 202(2):488–506, 2005.
- [71] G. Karniadakis, S. Orszag and M. Israeli. High-order splitting methods for the incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 97:414–443, 1991.
- [72] R. Keiser, B. Adams, D. Gasser, P. Bazzi, P. Dutré and M. Gross. A unified lagrangian approach to solid-fluid animation. In *Symposium on Point-Based Graphics*, pages 125–134, 2005.
- [73] P. Kristof, B. Benes, J. Krivánek and O. Stava. Hydraulic erosion using smoothed particle hydrodynamics. *Computer Graphics Forum*, 28(2), 2009.
- [74] P. Kristof, B. Benes, J. Krivánek and O. Stava. Hydraulic erosion using smoothed particle hydrodynamics. *Computer Graphics Forum*, 28(2), 2009.
- [75] M. Lage, F. Petronetto, A. Paiva, H. Lopes, T. Lewiner and G. Tavares. Vector field reconstruction from sparse samples with applications. *Proceedings of Sibgrapi 2006*, pages 297–306, 2006.
- [76] P. Lax, R. Richtmyer and A. THEOREM. Survey of the stability of linear finite difference equations. *Selected Papers*, 9(2):125, 2005.
- [77] W. Lee and W. Kluzniak. Newtonian hydrodynamics of the coalescence of black holes with neutron stars i: Tidally locked binaries with a stiff equation of state. *Arxiv preprint astro-ph/9808185*, 1998.
- [78] T. Lenaerts, B. Adams and P. Dutré. Porous flow in particle-based fluid simulations. *ACM Transactions on Graphics*, 27(3):49:1–49:8, 2008.
- [79] T. Lewiner, H. Lopes, A. W. Vieira and G. Tavares. Efficient implementation of marching cubes with topological guarantees. *Journal of Graphics Tools*, 8(2):234–241, 2003.
- [80] S. Li and W. Liu. *Meshfree Particle Methods*. Springer, 2004.
- [81] L. Libersky, A. Petschek, T. Carney, J. Hipp and F. Alahdadi. High strain Lagrangian hydrodynamics: a three-dimensional SPH code for dynamic material response. *Journal of Computational Physics*, 109(1):67–75, 1993.
- [82] W. Liu, S. Jun and F. Z. Y. Reproducing kernel particle methods. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 20(8-9):1081–1106, 1995.
- [83] W. Liu, S. Jun, S. Li, J. Adee and T. Belytschko. Reproducing kernel particle methods for structural dynamics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 38(10), 1995.
- [84] G. Liu and M. Liu. *Smoothed Particle Hydrodynamics: a meshfree particle method*. World Scientific Publishing, 2003.
- [85] M. Liu and G. L. Z. Z. K. Lam. Computer simulation of high explosive explosion using smoothed particle hydrodynamics methodology. *Computers and Fluids*, 32(3):305–322, 2003.

- [86] M. Liu, G. Liu and K. Lam. Constructing smoothing functions in smoothed particle hydrodynamics with applications. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 155(2):263–284, 2003.
- [87] G. Liu and S. Quek. *Finite Element Method: A Practical Course*. Butterworth-Heinemann, 2003.
- [88] W. Liu and Y. Chen. Wavelet and multiple scale reproducing kernel methods. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 21(10):901–931, 2005.
- [89] J. Liu, S. Koshizuka and Y. Oka. A hybrid particle-mesh method for viscous, incompressible, multiphase flows. *Journal of Computational Physics*, 202(1):65–93, 2005.
- [90] M. Liu and G. Liu. Restoring particle consistency in smoothed particle hydrodynamics. *Applied Numerical Mathematics*, 56(1):19–36, 2006.
- [91] K. Liu and R. Pletcher. A fractional step method for solving the compressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 226(2):1930–1951, 2007.
- [92] W. E. Lorensen and H. E. Cline. Marching cubes: A high resolution 3d surface construction algorithm. In *Proceedings of SIGGRAPH 87*, pages 163–169, 1987.
- [93] L. Lucy. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *Astronomical Journal*, 82:1013–1024, 1977.
- [94] S. Maddison, J. Murray and J. Monaghan. SPH simulations of accretion disks and narrow rings. *Publications of the Astronomical Society of Australia*, 13(2):66–70, 1996.
- [95] E. Medeiros, L. Velho and H. Lopes. Restricted BPA: applying ball-pivoting on the plane. In *Proceedings of Sibgrapi 2004*, pages 372–379, 2004.
- [96] P. R. S. Mendes, E. S. S. Dutra, J. R. R. Siffert and M. F. Naccache. Gas displacement of viscoplastic liquids in capillary tubes. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 145(1):1–11, 2007.
- [97] J. Monaghan and J. Latanzio. A refined particle method for astrophysical problems. *Astronomy and Astrophysics*, 149(1):135–143, 1985.
- [98] J. J. Monaghan. On the problem of penetration in particle methods. *Journal of Computational Physics*, 82(1):1–15, 1989.
- [99] J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 30:543–574, 1992.
- [100] J. Monaghan. Simulating free surface flows with SPH. *Journal of Computational Physics*, 110(2):399–406, 1994.
- [101] J. Monaghan. Heat conduction with discontinuous conductivity. *Applied Mathematics Reports and Preprints*, 95:18, 1995.
- [102] J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics. *Reports of Progress in Physics*, 68(8):1703–1759, 2005.
- [103] J. Morris. Analysis of smoothed particle hydrodynamics with applications. PhD thesis, *Monash University*, 1996.
- [104] J. Morris. A study of the stability properties of SPH. *Publications of the Astronomical Society of Australia*, 13:97–102, 1996.
- [105] J. Morris, P. Fox and Y. Zhu. Modeling low Reynolds number incompressible flows using SPH. *Journal of Computational Physics*, 136(1):214–226, 1997.
- [106] J. Morris and J. Monaghan. A switch to reduce SPH viscosity. *Journal of Computational Physics*, 136(1):41–50, 1997.
- [107] J. P. Morris. Simulating surface tension with smoothed particle hydrodynamics. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 33(3):333–353, 2000.
- [108] M. Müller, B. Solenthaler, R. Keiser and M. Gross. Particle-based fluid-fluid interaction. In *2005 ACM SIGGRAPH / Eurographics Symposium on Computer Animation*, pages 237–244, 2005.
- [109] M. Müller, D. Charypard and M. Gross. Particle-based fluid simulation for interactive applications. In *ACM SIGGRAPH Symposium on Computer Animation*, pages 154–159, 2003.
- [110] M. Müller, R. Keisser, A. Nealen, M. Pauly, M. Gross and M. Alexa. Point based animation of elastic, plastic and melting. *Symposium on Computer Animation*, pages 141–151, 2004.
- [111] M. Tome and S. McKee. Gensmac: a computational marker and cell method for free surface flows in general domains. *Journal of Computational Physics*, 110(1):171–186, 1994.
- [112] C. M. Oishi, M. F. Tomé, J. A. Cuminato and S. McKee. An implicit technique for solving 3D low Reynolds number moving free surface flows. *Journal of Computational Physics*, 227(16):7446–7468, 2008.
- [113] R. G. Owens and T. N. Phillips. *Computational Rheology*. Imperial College Press, 2002.



- [114] A. Paiva, F. Petronetto, T. Lewiner and G. Tavares. Particle-based non-Newtonian fluid animation for melting objects. In *Proceedings of Sibgrapi 2006*, pages 78–85, 2006.
- [115] A. Paiva, H. Lopes, T. Lewiner and L. H. de Figueiredo. Robust adaptive meshes for implicit surfaces. In *Proceedings of Sibgrapi 2006*, pages 205–212, 2006.
- [116] A. Paiva, F. Petronetto, T. Lewiner and G. Tavares. Simulating viscoplastic fluid using smoothed particle hydrodynamic. In *III Brazilian Conference on Rheology*, pages 93–94, 2006.
- [117] A. Paiva. Uma abordagem lagrangeana para simulação de fluidos viscoplásticos e multifásicos. PhD thesis, *PUC-Rio*, 2007.
- [118] A. Paiva, F. Petronetto, T. Lewiner and G. Tavares. Particle-based viscoplastic fluid/solid simulation. *Computer-Aided Design*, 41(4):306–314, 2009.
- [119] A. Paiva, E. V. Brazil, F. Petronetto and M. C. Sousa. Fluid-based hatching for tone mapping in line illustrations. *The Visual Computer*, 25(5–7):519–527, 2009.
- [120] P. Patsis and E. Athanassoula. SPH simulations of gas flow in barred galaxies. effect of hydrodynamical and numerical parameters. *Astronomy and Astrophysics*, 358:45–56, 2000.
- [121] F. Petronetto. A equação de Poisson e a decomposição de Helmholtz-Hodge com operadores SPH. PhD thesis, *PUC-Rio*, 2008.
- [122] K. Polthier and E. Preuss. Identifying vector fields singularities using a discrete Hodge decomposition. In *Visualization and Mathematics III*. Springer, 2003.
- [123] H. Posch, W. Hoover and O. Kum. Steady-state shear flows via nonequilibrium molecular dynamics and smooth-particle applied mechanics. *Physical Review E*, 52(2):1711–1720, 1995.
- [124] R. Pozo and K. Remington. SparseLib++ v.1.5 Sparse Matrix Class Library. reference guide. *NASA*, 1996.
- [125] E. Praun, H. Hoppe, M. Webb and A. Finkelstein. Real-time hatching. In *Proceedings of SIGGRAPH '01*, pages 579–584, 2001.
- [126] Y. Saad. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. SIAM, 2003.
- [127] L. Sigalotti and H. López. Adaptive kernel estimation and SPH tensile instability. *Computers & Mathematics with Applications*, 55(1):23–50, 2008.
- [128] S. Smale. Mathematical problems for the next century. *Mathematical Intelligencer*, 20(2):7–15, 1998.
- [129] J. Stam and E. L. Fiume. Depicting fire and other gaseous phenomena using diffusion processes. In *Proceedings of SIGGRAPH 95*, pages 129–136, 1995.
- [130] J. Stam. Stable fluids. In *Proceedings of SIGGRAPH 99*, pages 121–128, 1999.
- [131] R. Stellingwerf and C. Wingate. Impact modeling with smooth particle hydrodynamics. *NASA STI/Recon Technical Report N*, 94, 1993.
- [132] M. Steinmetz and E. Mueller. On the capabilities and limits of smoothed particle hydrodynamics. *Astrophysical Journal Supplement Series*, 268:391–410, 1993.
- [133] J. Sweple and S. Attaway. On the feasibility of using smoothed particle hydrodynamics for underwater explosion calculations. *Computational Mechanics*, 17(3):151–168, 1995.
- [134] J. Sweple, D. Hicks and S. Attaway. Smoothed particle hydrodynamics stability analysis. *Journal of Computational Physics*, 116(1):123–134, 1995.
- [135] H. Takeda, S. Miyama and M. Sekiya. Numerical simulation of viscous flow by smoothed particle hydrodynamics. *Progress of Theoretical Physics*, 92(5):939–960, 1994.
- [136] A. Tartakovsky and P. Meakin. A smoothed particle hydrodynamics model for miscible flow in three-dimensional fractures and the two-dimensional Rayleigh-Taylor instability. *Journal of Computational Physics*, 207(2):610–624, 2005.
- [137] Y. Tong, S. Lombeyda, A. Hirani and M. Desbrun. Discrete multiscale vector field decomposition. *ACM Transactions on Graphics*, 22(3):445–452, 2003.
- [138] T. Lenaerts and P. Dutré. Mixing fluids and granular materials. *Computer Graphics Forum*, 28(2):213–218, 2009.
- [139] S. T. Melo and F. M. Neto. *Mecânica dos Fluidos e Equações Diferenciais*. 18° Colóquio Brasileiro de Matemática. IMPA, 1991.
- [140] L. N. Trefethen and D. B. III. *Numerical Linear Algebra*. SIAM, 1997.
- [141] X. Tricoche, G. Scheuermann and H. Hagen. Continuous topology simplification of planar vector fields. In *VIS '01: Proceedings of the conference on Visualization '01*, pages 159–166, 2001.

- [142] S. Watkins, A. Bhattal, N. Francis, J. Turner and A. Whitworth. A new prescription for viscosity in smoothed particle hydrodynamics. *Astronomy and Astrophysics Supplement*, 119:177–187, 1996.
- [143] E. Weinan and J.-G. Liu. Projection method I: Convergence and numerical boundary layers. *Journal Numerical Analysis*, 32(4):1017–1057, 1995.
- [144] Y. Zhang, B. Solenthaler and R. Pajarola. GPU accelerated SPH particle simulation and rendering. In *ACM SIGGRAPH 2007 Posters*, page 9, 2007.
- [145] Y. Zhang, B. Solenthaler and R. Pajarola. Adaptive sampling and rendering of fluids on the gpu. In *Volume and Point-Based Graphics 2008*, pages 137–146, 2008.
- [146] Y. Zhu and P. Fox. Simulation of pore-scale dispersion in periodic porous media using smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 182(2):622–645, 2002.
- [147] O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor and P. Nithiarasu. *The Finite Element Method for Fluid Dynamics*. Butterworth-Heinemann, 2000.
- [148] O. Zienkiewicz and R. Taylor. *The Finite Element Method*. Butterworth Herinemann, 2000.
- [149] S. Atluri and T. Zhu. A new meshless local Petrov-Galerkin (MLPG) approach in computational mechanics. *Computational Mechanics*, 22(2):117–127, 1998.
- [150] S. Atluri and S. Shen. The meshless local Petrov-Galerkin (MLPG) method: a simple & less-costly alternative to the finite element and boundary element methods. *Computer Modeling in Engineering and Sciences*, 3(1):11–52, 2002.
- [151] A. Chorin. On the convergence of discrete approximations to the Navier-Stokes equations. *Mathematics of Computation*, 23(106):341–353, 1969.
- [152] S. Cummins and J. Brackbill. An implicit particle-in-cell method for granular materials. *Journal of Computational Physics*, 180(2):506–548, 2002.
- [153] B. de Foy and W. Dawes. Unstructured pressure-correction solver based on a consistent discretization of the Poisson equation. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 34(6), 2000.
- [154] C. Duarte and J. Oden. H-p clouds - an h-p meshless method. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 12(6), 1996.
- [155] K. Kim, S. Baek and H. Sung. An implicit velocity decoupling procedure for the incompressible Navier-Stokes equations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 38:125–138, 2002.
- [156] S. Koshizuka and Y. Oka. Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid. *Nuclear science and engineering*, 123(3):421–434, 1996.
- [157] S. Koshizuka, A. Nobe and Y. Oka. Numerical analysis of breaking waves using the moving particle semi-implicit method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 26(7):751–769, 1998.
- [158] O. Kum, W. Hoover. and H. Posch. Viscous conducting flows with smooth-particle applied mechanics. *Physical Review E*, 52(5):4899–4908, 1995.
- [159] J. Shen. On error estimates of projection methods for Navier-Stokes equations: first-order schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, pages 57–77, 1992.
- [160] J. Shen. On error estimates of some higher order projection and penalty-projection methods for Navier-Stokes equations. *Numerische Mathematik*, 62(1):49–73, 1992.
- [161] R. Temam. Une méthode d’approximation de la solution des équations de Navier-Stokes. *Bulletin de la Société Mathématique de France*, 98:115–152, 1968.

