

Tássio Knop de Castro

Simulação de fluidos utilizando a abordagem lagrangiana

Orientador:
Marcelo Bernardes Vieira

UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
DEPARTAMENTO DE CIÊNCIA DA COMPUTAÇÃO

Juiz de Fora

2009

Monografia submetida ao corpo docente do Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Juiz de Fora como parte integrante dos requisitos necessários para obtenção do grau de bacharel em Ciência da Computação

Prof. Marcelo Bernardes Vieira, D. Sc.
Orientador

Prof. Carlos Cristiano Hasenclever Borges,
D. Sc.

Prof. Raul Fonseca Neto, D. Sc.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente à minha mãe, Lúcia Helena, por me apoiar incondicionalmente.

À Laís, por aturar um namorado nerd.

Aos amigos que fiz na faculdade e que trouxeram a esses anos muitos bons momentos, em especial Eder, Thales, Scoralick e Peçanha.

Aos amigos do Grupo de Computação Gráfica, Imagem e Visão da UFJF, que trabalharam duro para construir um ambiente de excelência em termos de pesquisas e publicações, com uma ótima convivência.

Aos professores da UFJF, que tanto contribuíram para minha formação, especialmente ao professor Marcelo Bernardes Vieira, por todos esses anos de orientações e trabalhos, e por ser um exemplo de profissional dedicado.

Notações

A seguir, são listadas as principais notações utilizadas neste trabalho:

- x : escalar;
- \mathbf{T} : tensor;
- \mathbf{v} : vetor;
- f : função;
- $f(\mathbf{x}) \doteq y$: a função f pode ser aproximada por y .
- $\langle f \rangle$: operador de aproximação de uma função f conforme a convenção SPH;
- C : conjunto;
- P_i : partícula de índice i ;
- ∇f : gradiente de uma função escalar f ;
- $\nabla \cdot f$: divergente de uma função f ;
- δx : grandeza x de um elemento de fluido infinitesimal (Seção 2.3.2). O δ é utilizado quando se quer destacar que tal grandeza é relacionada a um elemento cujo volume tende a zero;
- $\frac{Dq}{Dt}$: derivada material (Seção A.1);
- $\frac{\partial x}{\partial y}$: derivada parcial de x em relação a y ;
- $W(\mathbf{x}, h)$: núcleo W (Seção 3.4) cujo comprimento suave (Seção 4.2.1) é h aplicado à posição \mathbf{x} .

Algumas das variáveis mais utilizadas no texto são:

- ρ : densidade (Seção 2.1.1);
- μ : viscosidade (Seção 2.1.2);
- p : pressão (Seção 2.1.3);
- $\mathbf{x}_i, \mathbf{v}_i$: posição e velocidade da partícula i , respectivamente;
- m, \mathbf{a} : massa e aceleração, respectivamente;
- Δt : passo de tempo da simulação.

Sumário

Lista de Figuras

Resumo

1	Introdução	p. 11
1.1	Definição do problema	p. 11
1.2	Objetivos	p. 12
1.3	Organização dos capítulos	p. 12
2	Dinâmica de Fluidos	p. 13
2.1	Propriedades relevantes	p. 14
2.1.1	Densidade	p. 14
2.1.2	Viscosidade	p. 14
2.1.3	Pressão	p. 15
2.2	Leis de conservação	p. 15
2.2.1	Conservação da massa	p. 16
2.2.2	Conservação do momento	p. 16
2.2.3	Conservação da energia	p. 16
2.3	Modelos de escoamento	p. 16
2.3.1	Volume de controle finito	p. 16
2.3.2	Elemento de fluido infinitesimal	p. 17
2.4	Abordagens de Euler e Lagrange	p. 18
2.4.1	Abordagem euleriana	p. 18

2.4.2	Abordagem lagrangiana	p. 19
2.5	As equações de Navier-Stokes	p. 20
2.5.1	Equação da continuidade	p. 20
2.5.2	Equação do momento	p. 21
2.6	Incompressibilidade	p. 21
3	Smoothed Particle Hydrodynamics	p. 23
3.1	Representação integral	p. 24
3.1.1	Representação integral de uma função	p. 24
3.1.2	Representação integral da derivada de uma função	p. 25
3.2	Representação por partículas	p. 26
3.3	Aproximação SPH das equações de Navier-Stokes	p. 27
3.3.1	Aproximação da equação da continuidade	p. 27
3.3.2	Aproximação da equação do momento	p. 28
3.4	Núcleos	p. 29
4	Modelo Computacional	p. 32
4.1	Visão Geral	p. 32
4.2	Inicialização	p. 33
4.2.1	Comprimento suave	p. 33
4.2.2	Velocidade do som	p. 34
4.3	Busca de partículas vizinhas	p. 34
4.3.1	Busca em força bruta	p. 35
4.3.2	Busca em grade	p. 36
4.4	Integração temporal	p. 37
4.4.1	Euler	p. 38
4.4.2	Leap-Frog	p. 38

4.5	Condições de contorno	p. 39
4.5.1	Partículas fantasma	p. 39
4.5.2	Reflexão geométrica	p. 40
4.6	Discussão	p. 41
5	Resultados	p. 43
5.1	A aplicação	p. 43
5.1.1	gcgBasicSPH	p. 43
5.1.2	gcgParticleSPH	p. 44
5.1.3	gcgOptimizedGridSPH	p. 44
5.2	Experimentos	p. 45
5.2.1	Experimento 1: descarga de água	p. 45
5.2.1.1	Tempo real	p. 46
5.2.1.2	Alto nível de detalhe	p. 46
5.2.2	Experimento 2: forças de controle	p. 47
5.2.3	Experimento 3: incompressibilidade	p. 48
5.2.4	Experimento 4: condições de contorno	p. 49
5.3	Desempenho	p. 50
6	Conclusão	p. 52
	Apêndice A – Alguns conceitos	p. 54
A.1	Derivada material	p. 54
A.2	Divergente da velocidade	p. 55
	Referências	p. 57

Lista de Figuras

1	Em um fluido em repouso, dados dois pontos x, y tais que a profundidade $\mathbf{P}_x < \mathbf{P}_y$, a pressão $p_x < p_y$. Ou seja, quanto maior a profundidade, maior é a pressão.	p. 15
2	Volume de Controle Finito.	p. 17
3	Elemento de fluido infinitesimal.	p. 18
4	a) Cenário de simulação do fluido. b) Abordagem euleriana: modelo em grade fixa. O cálculo das propriedades do fluido se dá nos pontos em destaque.	p. 18
5	a) Cenário de simulação do fluido. b) Abordagem lagrangiana: modelo em partículas. O cálculo das propriedades do fluido se dá nos pontos em destaque.	p. 19
6	No SPH, o domínio é discretizado através de partículas e as diversas propriedades são interpoladas.	p. 24
7	O suporte compacto possui raio kh e são consideradas para a interpolação somente as partículas dentro desse raio.	p. 26
8	Comportamento do núcleo W para $R \in [-2, 2]$	p. 31
9	Busca em grade. Cada célula possui lados kh . Só é necessário buscar vizinhos nas células adjacentes à célula de P_i	p. 36
10	As partículas fantasma podem ser distribuídas uniformemente ao longo da fronteira. Suas propriedades devem ser calculadas de forma a impedir que as partículas reais ultrapassem a fronteira.	p. 39
11	As partículas fantasma podem ser uma reflexão das partículas reais em relação à fronteira. Essa técnica pode ser difícil de manter para geometrias mais complexas.	p. 40

12	A partícula do fluido, ao colidir com a fronteira, tem sua velocidade refletida em relação à normal da superfície.	p. 41
13	Aplicação: 1000 partículas.	p. 46
14	Aplicação: 40000 partículas.	p. 47
15	Aplicação: forças de controle mantendo as partículas sobre uma parábola.	p. 48
16	Início da simulação: caixa envolvente em rotação constante, sentido horário.	p. 48
17	Fim da simulação: 45 segundos depois (tempo no domínio da simulação), é evidente a compressão do fluido	p. 49
18	Condição de contorno geométrica para geometria esférica	p. 49
19	Recipiente em rotação constante (sentido horário)	p. 50
20	Gráfico: Número de partículas × Tempo	p. 50
21	Derivada material: descreve como uma grandeza varia no tempo e no espaço.	p. 55

Resumo

Este trabalho trata da simulação computacional de Dinâmica de Fluidos. Apresenta os fundamentos físicos e matemáticos necessários para a compreensão do problema, além de modelos utilizados para aproximar discretamente as equações de Navier-Stokes. São apresentadas as vantagens e desvantagens de métodos sem malha de aproximação de equações diferenciais parciais, focando-se na abordagem lagrangiana. Nesse contexto, é apresentado o método Smoothed Particle Hydrodynamics, um método sem malha que aproxima as equações de movimento dos fluidos através de um conjunto de equações diferenciais ordinárias. Um modelo computacional é explicitado, de forma a trabalhar com essas equações em relação ao tempo e possibilitar tanto uma simulação em tempo real quanto uma aplicação com alto nível de detalhe. São discutidos experimentos e testes de desempenho realizados com a aplicação desenvolvida, juntamente com os resultados e dificuldades encontrados.

1 *Introdução*

Desde o século XVII são realizados experimentos com Dinâmica de Fluidos, com o intuito de modelar e prever de forma precisa o escoamento de um fluido. Na categoria de fluidos encontram-se os líquidos, gases, plasmas e até sólidos plásticos. Essa área de pesquisa evoluiu basicamente em duas vertentes principais: desenvolvimentos teóricos e experimentos em laboratório. A pesquisa experimental demandava grandes áreas e complexos aparatos para lidar com o fluido de estudo e realizar o sensoriamento das propriedades desejadas. Por isso, tornou-se muito limitada e não era possível realizar todos os experimentos desejáveis (VILLAGGIO; PIERO, 2007).

Com o advento de computadores, em 1940, muitos experimentos puderam finalmente ser validados, por simulações feitas através de métodos numéricos. Desde então houve uma evolução significativa na pesquisa experimental, e diversos modelos computacionais foram criados para abordar o problema sob diferentes pontos de vista.

Hoje, a Dinâmica de Fluidos possui aplicações diversas. É aplicada desde áreas como aerodinâmica e modelagem de fluidos multifásicos (HU; ADAMS, 2006) até síntese de imagens (PAIVA et al., 2009b) e aplicações em entretenimento.

1.1 *Definição do problema*

O problema tratado nesta monografia é o da representação, simulação e visualização 3D do escoamento de fluidos utilizando o método *Hidrodinâmica de Partícula Suavizada* (*Smoothed Particle Hydrodynamics*). Neste texto, faremos referência a esse método a partir da sigla *SPH*.

1.2 Objetivos

O objetivo primário desta monografia é apresentar e estudar os fundamentos matemáticos e físicos necessários para entender a Dinâmica de Fluidos, juntamente com a implementação do método numérico SPH para realizar a simulação computacional.

Os objetivos secundários decorrentes do objetivo primário são:

- adaptar o método para lidar com condições de contorno arbitrárias;
- explicitar e implementar formas robustas de detecção de vizinhos;
- desenvolver uma aplicação capaz de simular o movimento de um fluido em tempo real;
- a aplicação desenvolvida deve ser capaz de gerar simulações com maior nível de detalhe caso não haja restrição de tempo.

1.3 Organização dos capítulos

No Capítulo 2 são apresentados fundamentos de Dinâmica de Fluidos e como esses fundamentos acarretaram nas formulações e equações hoje utilizadas.

O método numérico SPH é introduzido no Capítulo 3. Sua forma de aproximar equações diferenciais parciais, as características principais do método e como ele é usado para representar o movimento de fluidos são explicitados.

Existem diferentes maneiras de modelar computacionalmente o método SPH para a simulação de fluidos. No Capítulo 4 são apresentadas distintas maneiras de resolver computacionalmente problemas como as condições de contorno e a busca de vizinhos, com suas vantagens e desvantagens. Os principais parâmetros também são discutidos.

No Capítulo 5 são expostos alguns detalhes da aplicação desenvolvida, como suas classes e a estruturação do laço principal. Também são exibidos e analisados os testes realizados e resultados obtidos.

A conclusão deste trabalho, bem como as principais dificuldades encontradas e um estabelecimento de possíveis trabalhos futuros se dá no Capítulo 6.

2 *Dinâmica de Fluidos*

Fluidos são substâncias que não apresentam resistência a deformações causadas por forças externas. Isso significa que toda força aplicada em uma região de fluido causa um cisalhamento, não importa o quão pequena seja essa força.

Embora existam diferenças entre líquidos e gases, ambos são considerados fluidos e, portanto, podem ser descritos através das mesmas equações de movimento. Na maioria dos casos, adota-se a Hipótese do Contínuo para tratar esse tipo de substância. Dessa forma, pode-se considerar que fluidos são substâncias contínuas (FERZIGER; PERIC, 1999), ou seja: qualquer região de fluido, mesmo uma muito pequena, está repleta da mesma substância.

Considerando as escalas tradicionais de estudos em Dinâmica de Fluidos é viável aceitar a Hipótese do Contínuo: como um fluido é composto por moléculas, uma interpretação para essa hipótese é que mesmo um pequeno volume de fluido contém uma grande quantidade de moléculas. De acordo com a Hipótese de Avogadro, 1cm^3 de ar contém 2.687×10^{19} moléculas, em condições normais de temperatura e pressão (PETRILA; TRIF, 2004).

Um escoamento tem como causa a atuação de forças externas, que podem surgir de diversas maneiras: diferenças de pressão, gravidade, tensão superficial, rotações, cisalhamentos, entre outros. Tais forças geralmente são classificadas entre forças de superfície (por exemplo, um navio flutuando sobre o oceano) e forças de corpo (por exemplo, gravidade ou uma força centrípeta, causada por uma rotação). Apesar de serem regidos pelas mesmas leis, os diferentes tipos de fluido podem se comportar macroscopicamente de maneiras diferentes, e essas características são descritas através de algumas propriedades.

As propriedades mais relevantes em condições normais são a *densidade* e a *viscosidade*, mas em condições variadas de temperatura e pressão existem outros parâmetros a serem considerados.

2.1 Propriedades relevantes

2.1.1 Densidade

A densidade ρ de um fluido é definida como a relação entre a massa m e o volume V :

$$\rho = \frac{m}{V} \quad (2.1)$$

As diferenças de densidade ocasionam interessantes fenômenos. Por exemplo, uma canoa boiando em um lago só consegue flutuar porque o seu volume submerso possui menos massa do que o volume deslocado de água. Esse fenômeno também está intimamente relacionado à pressão, e gera a chamada *força de empuxo*.

Outro fenômeno interessante ocorre quando duas substâncias imiscíveis de densidades distintas são colocadas no mesmo recipiente. A substância de maior densidade tende a se deslocar para o fundo da superfície, formando um sistema de fluidos multifásicos. Nas regiões geladas do planeta, ocorre um sistema imprescindível para preservar a vida nessas regiões. O gelo é menos denso que a água, logo bóia sobre ela. À medida que um lago ou oceano congela, a camada de gelo entre o ar e a água serve como isolamento térmico, fazendo com que a água abaixo dessa camada não congele. Dessa forma, a vida aquática é preservada, pois somente a superfície se congela.

2.1.2 Viscosidade

Em um escoamento de fluido, existem diferentes camadas se movendo a diferentes velocidades, e a viscosidade surge do atrito entre camadas adjacentes. Pela Lei de Newton da viscosidade, tem-se:

$$\boldsymbol{\tau} = \mu \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y}, \quad (2.2)$$

onde \mathbf{u} é a velocidade relativa entre as camadas, e y representa a distância perpendicular entre elas.

Essa equação define que o tensor de cisalhamento, $\boldsymbol{\tau}$, é proporcional ao gradiente da velocidade na direção perpendicular às camadas adjacentes do fluido. O coeficiente de viscosidade μ é específico para o material estudado.

A equação acima nos diz que a tensão em um fluido é diretamente proporcional à taxa de deformação nele aplicada. Os fluidos que se adequam a essa definição são chamados *Fluidos Newtonianos*. Nessa categoria encontram-se a água, o ar, óleos etc. Fluidos

que não possuem uma relação linear da tensão com a deformação são chamados Não-Newtonianos, e não podem ser definidos por um coeficiente de viscosidade constante. Ketchup, tinta e xampu são exemplos de *Fluidos Não-Newtonianos*.

2.1.3 Pressão

A pressão p representa uma força f sendo exercida sobre uma superfície de área a :

$$p = \frac{f}{a} \quad (2.3)$$

Em um fluido em repouso, quanto maior a profundidade, maior é a pressão. A pressão em uma profundidade y pode ser entendida como a força exercida pelas camadas de fluido de profundidade x sobre a camada de y , tal que y é mais profundo que x .

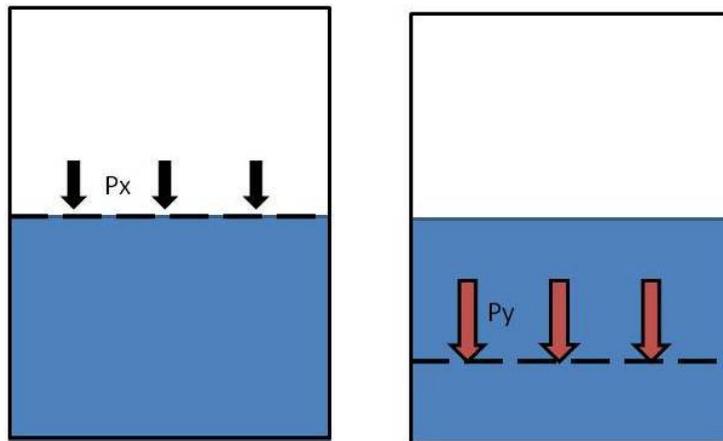


Figura 1: Em um fluido em repouso, dados dois pontos x, y tais que a profundidade $P_x < P_y$, a pressão $p_x < p_y$. Ou seja, quanto maior a profundidade, maior é a pressão.

Diferenças de pressão geram forças que se movem na direção do gradiente da pressão. As moléculas do fluido tendem a se movimentar para regiões de menor pressão.

2.2 Leis de conservação

Existem diversas maneiras de se modelar o escoamento de um fluido para obter as equações do movimento. Primeiramente, faz-se necessário determinar as leis físicas básicas às quais o modelo deverá se restringir. A Dinâmica de Fluidos é fundamentada em três leis físicas básicas, às quais se assume que todo fluido deve obedecer.

2.2.1 Conservação da massa

Esta lei expressa basicamente que a massa em um sistema fechado se mantém constante, independentemente dos processos ocorridos dentro deste. É também conhecida como Lei de Lomonosov-Lavoisier.

2.2.2 Conservação do momento

Esta lei, mais conhecida como a Segunda Lei de Newton, expressa que uma força \mathbf{f} aplicada em um corpo é igual à variação de seu momento linear \mathbf{p} , ou seja:

$$\mathbf{f} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{d}{dt}(m\mathbf{v}) = m\frac{d\mathbf{v}}{dt} = m\mathbf{a} \quad (2.4)$$

2.2.3 Conservação da energia

Esta lei corresponde à Primeira Lei da Termodinâmica. Ela diz que, em um corpo, a taxa de variação da energia é igual ao acréscimo de calor neste somado ao trabalho realizado sobre esse corpo.

2.3 Modelos de escoamento

A partir das leis descritas na seção anterior, é possível derivar um conjunto de equações diferenciais parciais que descrevem o movimento do fluido, as conhecidas equações de Navier-Stokes. Existem várias formas de derivar tais equações, e cada uma é estritamente relacionada com o modelo de fluxo utilizado.

Existem dois modelos de escoamento, que podem ser relacionados a duas diferentes abordagens, o que nos dá quatro modelos possíveis. Os modelos e as abordagens são descritos a seguir.

2.3.1 Volume de controle finito

Consideremos a Figura 2, onde o escoamento do fluido é representado pelas setas em azul. É possível discretizar o escoamento em um conjunto de células, que, portanto, formam regiões fechadas envolvendo porções determinadas do fluido. Cada célula é denominada um *volume de controle finito* V . A superfície que o envolve é a *superfície de controle finito*.

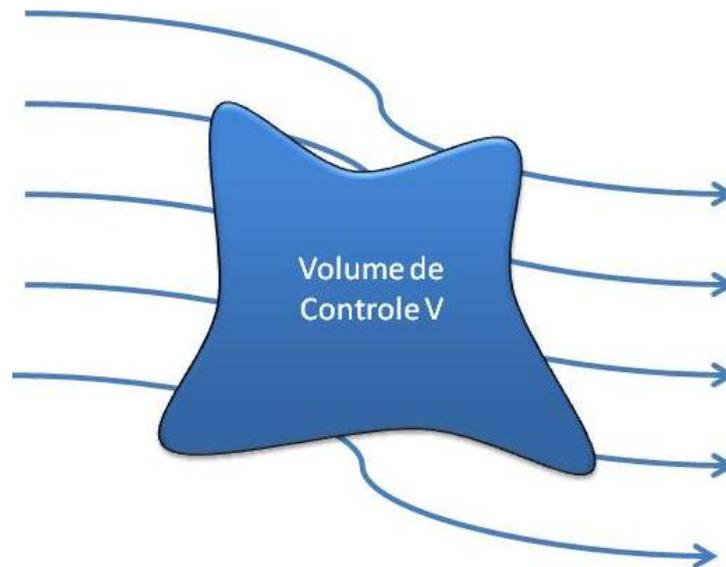


Figura 2: *Volume de Controle Finito.*

Dessa forma, o volume de controle finito consiste numa célula razoavelmente grande (com dimensões não desprezíveis) e os princípios físicos adotados são aplicados ao fluido contido nesse volume e no fluxo que atravessa a superfície de controle. Utilizando esse modelo, é possível obter diretamente a forma integral das equações de movimento. É possível estabelecer esse modelo de duas diferentes maneiras:

1. Considerar que o volume está fixo no espaço (abordagem euleriana)
2. Considerar que o volume se move conforme o escoamento (abordagem lagrangiana)

Essas abordagens são explicitadas na Seção 2.4.

2.3.2 Elemento de fluido infinitesimal

Consideremos um escoamento análogo ao anterior mas, desta vez, as células possuem um volume infinitesimal. Esse volume dV pode ser considerado diferencial, com o mesmo significado do cálculo diferencial, mas ainda assim contendo grande quantidade de moléculas, podendo dessa forma ser considerado um meio contínuo.

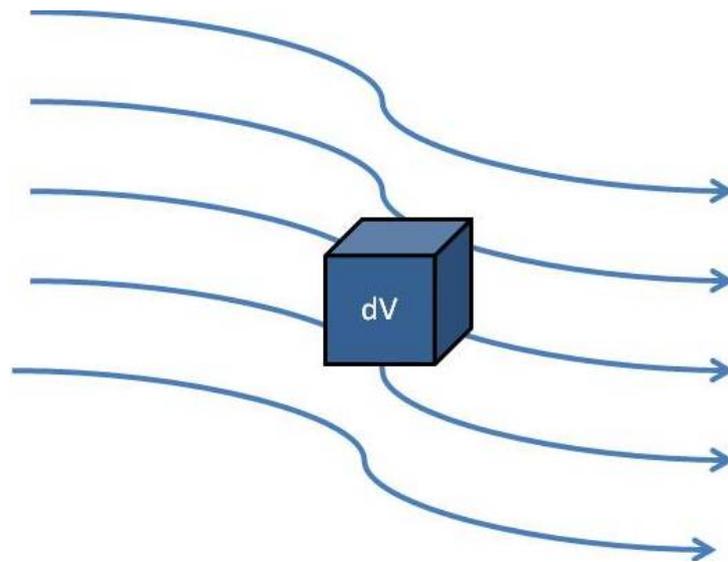


Figura 3: *Elemento de fluido infinitesimal.*

Esse é o modelo adotado nesse trabalho. As leis físicas adotadas são aplicadas diretamente no elemento infinitesimal, resultando diretamente nas equações de movimento em sua forma de equações diferenciais parciais. Mais uma vez, é possível utilizar tanto a abordagem euleriana quanto a lagrangiana.

2.4 Abordagens de Euler e Lagrange

2.4.1 Abordagem euleriana

Nesta abordagem, o modelo consiste em fixar pontos no domínio do problema e avaliar como ocorre a variação das grandezas do fluido (como densidade, velocidade, temperatura e pressão) à medida que este escoar através dos pontos.

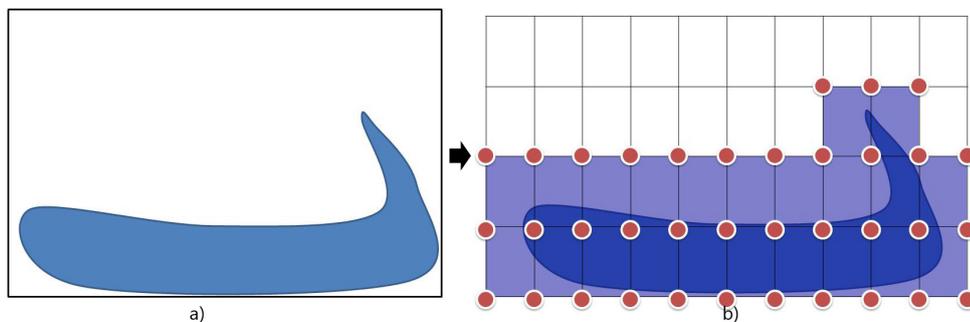


Figura 4: *a) Cenário de simulação do fluido. b) Abordagem euleriana: modelo em grade fixa. O cálculo das propriedades do fluido se dá nos pontos em destaque.*

A restrição de serem usados pontos fixos facilita o cálculo das derivadas parciais. Contudo, a variação das grandezas físicas nos pontos não necessariamente significa que houve alguma alteração no fluido. Como este se move através dos pontos, um possível cenário seria, por exemplo, uma região Ω mais quente do fluido escoando através de um conjunto de pontos X , e em seguida outra região ψ , mais fria, escoando pelo mesmo conjunto de pontos. Não se pode afirmar, através da análise das informações colhidas, que o fluido sofreu uma queda de temperatura. Afinal, pode ser que existam pelo menos duas regiões de diferentes temperaturas no experimento em questão.

Uma possível analogia dessa abordagem com um experimento é a coleta de informações climáticas de uma região. No caso da abordagem euleriana, à medida que correntes de ar escoam através de uma determinada região, teríamos um conjunto de torres (portanto, pontos fixos) coletando as diversas grandezas físicas do fluido em questão. As equações de movimento obtidas com essa abordagem são consideradas em sua *forma conservativa*.

2.4.2 Abordagem lagrangiana

A abordagem lagrangiana modela o fluido como um sistema de partículas. Cada partícula tem suas próprias grandezas físicas, que variam no tempo e no espaço. Nesse caso, são avaliadas as variações físicas em pontos móveis, que acompanham o escoamento da substância.

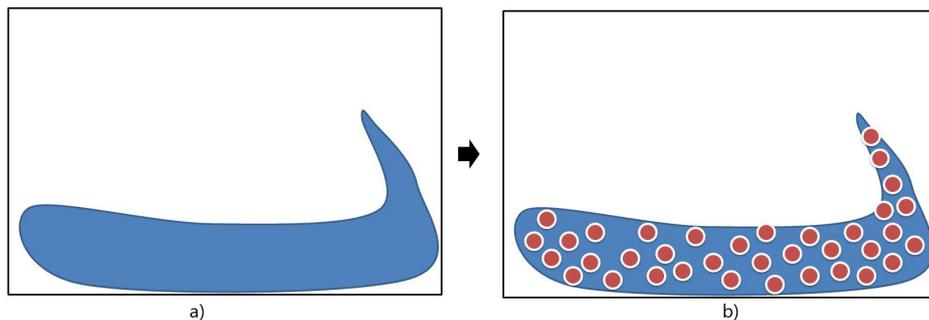


Figura 5: a) Cenário de simulação do fluido. b) Abordagem lagrangiana: modelo em partículas. O cálculo das propriedades do fluido se dá nos pontos em destaque.

Esse modelo representa bem as características de um fluido, não importando sua variação espacial. Entretanto, requer cuidados em sua formulação, pois deve-se considerar a variação de grandezas físicas na posição e no tempo (derivada material - Apêndice A.1). Utilizando o exemplo das avaliações climáticas teríamos, na abordagem lagrangiana, um conjunto de balões meteorológicos coletando informações das correntes de ar, viajando

conforme seu escoamento. As equações de movimento obtidas com essa abordagem são consideradas em sua *forma não-conservativa*.

2.5 As equações de Navier-Stokes

As equações de Navier-Stokes são utilizadas para descrever o movimento dos fluidos e são expressas matematicamente através de um conjunto de equações diferenciais parciais. São derivadas a partir das Leis de Conservação explicitadas na Seção 2.2.

2.5.1 Equação da continuidade

A equação da continuidade é obtida a partir da lei de conservação da massa. Recorrendo à definição de densidade na Equação 2.1 temos que, em um elemento de fluido de volume δV , a massa é:

$$\delta m = \rho \delta V, \quad (2.5)$$

onde ρ é a densidade do fluido. Devido à lei de conservação da massa, temos que esta não varia. Podemos recorrer ao conceito de derivada material, que é explicado no Apêndice A.1. Dessa forma, temos:

$$\frac{D(\delta m)}{Dt} = \frac{D(\rho \delta V)}{Dt} = \delta V \frac{D\rho}{Dt} + \rho \frac{D(\delta V)}{Dt} = 0, \quad (2.6)$$

dividindo os termos por δV e rearranjando temos a seguinte equação:

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \frac{1}{\delta V} \frac{D(\delta V)}{Dt} \quad (2.7)$$

Utilizando o significado do divergente da velocidade (ver Apêndice A.2) e substituindo a Equação 2.7 do lado direito obtemos a equação da continuidade:

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v}, \quad (2.8)$$

onde \mathbf{v} é a velocidade do fluido.

2.5.2 Equação do momento

Esta equação é uma consequência da Segunda Lei de Newton (Eq. 2.4). Sendo assim, é possível reescrevê-la utilizando a derivada material:

$$\mathbf{f} = m \frac{D\mathbf{v}}{Dt} \quad (2.9)$$

Um pequeno reajuste dos termos nos leva ao seguinte:

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \frac{\mathbf{f}}{m} \quad (2.10)$$

Para obter a equação do momento, basta explicitar as forças atuantes no elemento infinitesimal de fluido. Basicamente, as forças que atuam no elemento são decorrentes das tensões viscosas, da pressão e de forças externas. Para uma dedução mais detalhada, sugerimos ao leitor (PAIVA et al., 2009a). A equação do momento na forma lagrangiana tem a seguinte forma:

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{T}, \quad (2.11)$$

onde \mathbf{T} é um tensor simétrico 3x3, chamado de *tensor de tensões*, que representa as tensões viscosas que atuam no elemento. Ele contém 3 tensões normais e 6 tensões de cisalhamento.

2.6 Incompressibilidade

Uma das diferenças mais importantes entre gases e líquidos está em sua *compressibilidade* β . Essa propriedade captura a variação do volume V do fluido quando submetido a uma pressão p :

$$\beta = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial p} \quad (2.12)$$

Em geral, gases são muito mais compressíveis que líquidos. Em aplicações como em previsão do tempo, onde a pressão atmosférica exerce forte influência, ou em aplicações que envolvem altas velocidades, como em estudos de balística, a compressibilidade do fluido em questão deve ser levada em conta.

Um *fluido incompressível*, portanto, pode ser entendido como um fluido cujo volume não sofre alteração devido à alteração da pressão. Como a massa também não varia, devido

ao princípio de conservação da massa, temos que a densidade se mantém constante:

$$\frac{D\rho}{Dt} = 0 \quad (2.13)$$

Aliando isso ao fato de que a densidade é um valor escalar positivo, podemos simplificar a equação da continuidade (Eq. 2.8) e assim concluímos que o fato de um fluido ser incompressível implica que

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (2.14)$$

ou seja, que seu campo de velocidades possui divergência nula. Esta é a chamada *condição de incompressibilidade*. Um fluido incompressível atende a essa restrição.

Nenhum fluido real é totalmente incompressível. Entretanto, muitas vezes é conveniente fazer uma simplificação para, por exemplo, simulação de líquidos. Tal simplificação costuma ser utilizada também para estudar fluidos viscosos sujeitos a baixas velocidades, como pode ser visto em (BATCHELOR, 2000).

A equação do momento (Eq. 2.11) trata do escoamento de fluidos de forma geral. Se assumirmos que o escoamento é incompressível, é possível simplificar o tensor \mathbf{T} , e o termo $\nabla \cdot \mathbf{T}$ pode ser substituído por $\mu \nabla^2 \mathbf{v}$. Sendo assim, obtemos a equação do momento para fluidos incompressíveis:

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{f}, \quad (2.15)$$

onde \mathbf{f} é o vetor que representa o total de forças externas atuantes na partícula. Nele podemos incluir a gravidade, forças de colisão do fluido com obstáculos e outras forças que a aplicação demandar. Alguns trabalhos incluem uma força de tensão superficial sobre a superfície do fluido (KELAGER, 2006), o que produz interessantes resultados.

3 *Smoothed Particle Hydrodynamics*

O método *Hidrodinâmica de Partícula Suavizada*, conhecido como SPH, foi desenvolvido na década de 70 por Lucy (LUCY, 1977) e Gingold e Monaghan (GINGOLD; MONAGHAN, 1977). Sua aplicação inicial era a simulação de fenômenos astrofísicos. Contudo, este pôde ser facilmente generalizado para se adaptar a outros problemas e logo foi percebido que, em muitas situações onde os métodos eulerianos não se adequam facilmente, a utilização de um método como esse é mais conveniente e de mais fácil implementação. Isso decorre do fato de que o SPH não utiliza malhas e, portanto, é uma solução interessante para problemas que lidam com deformações. Como exemplo de situações mais adequadas para esse tipo de método temos: simulação de ondas do mar, quebra de represas, explosões (LIU et al., 2003), objetos deformáveis, e fluidos em superfície livre de maneira geral.

Muitos problemas hoje estudados, principalmente em Física e Engenharias, são modelados matematicamente através equações diferenciais parciais (EDP's). Isso dificulta a simulação computacional, pois a solução de tais equações muitas vezes não é trivial. O SPH atua aproximando EDP's através de um conjunto de equações diferenciais ordinárias (EDO's), e a partir daí é possível solucionar as EDO's através de métodos numéricos conhecidos.

No SPH, o ambiente de simulação é discretizado completamente através de partículas, o que se adequa perfeitamente à abordagem lagrangiana, descrita na Seção 2.4.2, e à discretização do domínio através de elementos de fluido infinitesimais, descritos na Seção 2.3.2. Existem outros métodos sem malha, mas a vantagem do SPH em relação a tais métodos é justamente o fato de que, no SPH, os pontos de interpolação são partículas, que carregam consigo propriedades físicas; nos demais métodos não existem partículas com função de pontos de aproximação e que ao mesmo tempo carreguem propriedades materiais (LIU; LIU, 2003). O fato de o sistema ser representado por esse conjunto de partículas faz com que a massa seja naturalmente conservada, o que é uma vantagem

em relação aos métodos eulerianos, pois estes muitas vezes apresentam problemas de dissipação da massa devido a erros numéricos. O método foi adaptado para a simulação de escoamento de fluidos por Muller (MÜLLER; CHARYPAR; GROSS, 2003).

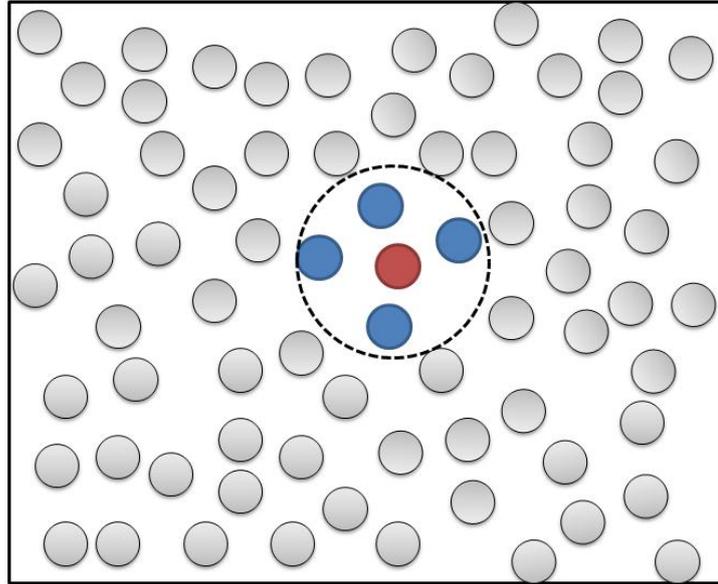


Figura 6: No SPH, o domínio é discretizado através de partículas e as diversas propriedades são interpoladas.

3.1 Representação integral

O SPH é um método de interpolação. Através de uma convolução, quantidades físicas conhecidas somente nas partículas podem ser determinadas em qualquer ponto do domínio. Essa convolução se dá entre uma função arbitrária f , responsável por carregar a informação da propriedade que se deseja avaliar, e uma função suave W conhecida como *núcleo*.

3.1.1 Representação integral de uma função

Tomando um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ e definindo a função $f: \Omega \rightarrow \mathbb{R}^m$ e o núcleo $W: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, temos que a convolução de f por W é:

$$f(\mathbf{x}) \doteq \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \quad (3.1)$$

Essa integral simplesmente realiza uma aproximação do valor de $f(\mathbf{x})$, utilizando para isso os valores de f dos elementos $\mathbf{x}' \in \Omega$ ponderados através da função W . O parâmetro

h é o *comprimento suave* do núcleo, muito importante para a robustez e estabilidade do método, que é melhor discutido na Seção 4.2.1.

Conforme a convenção SPH (LIU; LIU, 2003), o *operador de aproximação* do núcleo é escrito entre os símbolos \langle e \rangle , e portanto é reescrito da seguinte forma:

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \quad (3.2)$$

O núcleo W e suas propriedades são expostos na Seção 3.4.

3.1.2 Representação integral da derivada de uma função

Muitas vezes é necessário aproximar não uma função, mas sim sua derivada. Para uma função vetorial, é necessário adaptar a Equação 3.2 para calcular o divergente de $f(\mathbf{x})$, ou seja: substituindo $f(\mathbf{x})$ por $\nabla \cdot f(\mathbf{x})$, obtém-se:

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} \nabla \cdot f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \quad (3.3)$$

Através de algumas manipulações (PAIVA et al., 2009a) e considerando que o núcleo possui suporte compacto pode-se simplificar a Equação 3.3 para a seguinte forma:

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle = - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \cdot \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \quad (3.4)$$

Caso a função $f(\mathbf{x})$ considerada seja uma função escalar, é possível realizar um procedimento análogo para obter o gradiente de $f(\mathbf{x})$

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}) \rangle = - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \quad (3.5)$$

Um problema ocorre justamente quando uma partícula está próxima à fronteira do domínio: o suporte compacto do núcleo não está inteiramente no domínio, e a simplificação para a Equação 3.4 não poderia ser feita. Contudo, tal aproximação é mantida e soluções numéricas são apresentadas no Capítulo 4.

3.2 Representação por partículas

Como foi dito, o método SPH discretiza inteiramente o domínio através de um número finito de partículas, que carregam consigo todas as propriedades físicas avaliadas e ocupam um espaço finito. Através destas, como passamos para um domínio discreto, podemos substituir as integrais da seção anterior por somatórios sobre o domínio das partículas.

O fato de o núcleo possuir suporte compacto pode facilitar o desenvolvimento computacional. O volume infinitesimal $d\mathbf{x}'$ de cada partícula utilizado na seção anterior deve ser substituído pelo volume ΔV finito de cada partícula. Traduzindo a representação integral da Equação 3.2 para um somatório discreto, temos:

$$f(\mathbf{x}_i) = \sum_{j \in V_i} f(\mathbf{x}_j) W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h) \Delta V_j, \quad (3.6)$$

onde \mathbf{x}_i é a posição e V_i é a vizinhança da partícula i , definida pelo suporte compacto kh . As partículas $j \in V_i$ utilizadas no somatório são tais que $|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i| < kh$. O parâmetro h é o comprimento suave do núcleo, e o parâmetro k é uma constante que é multiplicada por h para garantir que um número adequado de partículas estará na vizinhança V_i . A quantidade adequada de vizinhos é discutida na Seção 4.2.1.

Aproximando a ilustração do início do capítulo, a figura a seguir mostra as partículas e o suporte compacto do núcleo, o que nos indica como é feita a abordagem discreta:

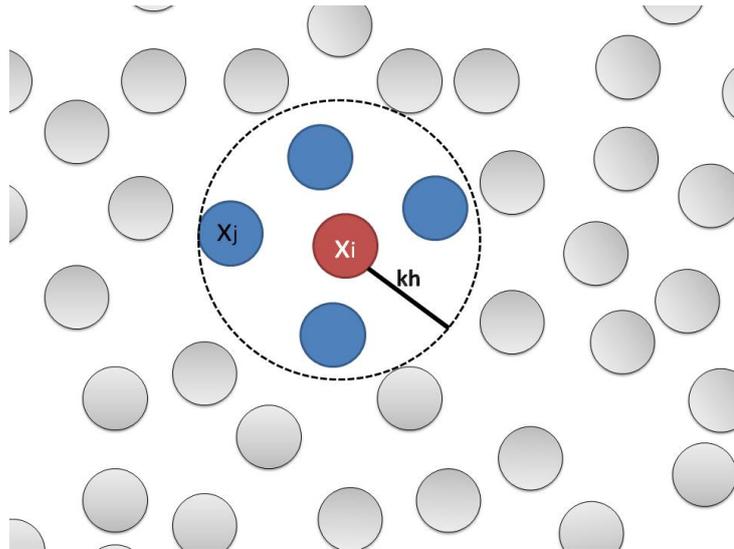


Figura 7: O suporte compacto possui raio kh e são consideradas para a interpolação somente as partículas dentro desse raio.

Utilizando a definição de densidade (Eq. 2.1), podemos substituir ΔV_j por $\frac{m_j}{\rho_j}$. Essa substituição é conveniente pois massa e densidade são variáveis com as quais lidamos diretamente, e além disso a massa se mantém constante. Logo, a aproximação discreta por partículas é a seguinte:

$$\langle f(\mathbf{x}_i) \rangle = \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) W_{ij}, \quad (3.7)$$

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

Partindo do mesmo raciocínio, é possível discretizar o divergente de uma função vetorial a partir da Equação 3.4:

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}_i) \rangle = \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) \cdot \nabla W_{ij}, \quad (3.8)$$

onde o gradiente ∇W_{ij} é tomado em relação à posição da partícula i . Isso permite que o sinal negativo das equações 3.4 e 3.5 seja removido. Dessa forma, definimos esse gradiente como:

$$\nabla W_{ij} = \frac{\mathbf{x}_{ij}}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}}, \quad (3.9)$$

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

Finalmente, tomamos a Equação 3.5 e obtemos a representação discreta do gradiente de uma função escalar:

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}_i) \rangle = \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) \nabla W_{ij} \quad (3.10)$$

Munidos desses operadores, podemos obter aproximações SPH para EDP's. Vale ressaltar que existem diversas formas de realizar tais aproximações. Agora é possível aproximar as equações que governam o movimento dos fluidos.

3.3 Aproximação SPH das equações de Navier-Stokes

3.3.1 Aproximação da equação da continuidade

A aproximação mais simples e direta de ser feita é o cálculo da densidade. Analisando a densidade a partir da Equação 3.7 é imediato que, sabendo o valor da densidade ρ da

partícula P_i e de seus vizinhos P_j , é possível atualizar ρ_i da seguinte forma:

$$\rho_i = \sum_{j \in V_i} \rho_j W_{ij} \frac{m_j}{\rho_j} = \sum_{j \in V_i} m_j W_{ij} \quad (3.11)$$

Nem sempre essa formulação é utilizada, pois existem outras mais estáveis. Existem alguns critérios para avaliar que tipo de aproximação é mais estável, um deles é a simetria. Em geral, uma aproximação que analisa de forma simétrica uma partícula P_i e sua vizinha P_j possui melhor comportamento, como é o caso apresentado a seguir. Uma opção que geralmente é melhor que a anterior é a de se aplicar a aproximação do divergente à equação da continuidade (Eq. 2.8), o que nos dá, após algumas pequenas manipulações algébricas:

$$\frac{D\rho_i}{Dt} = -\rho_i \sum_{j \in V_i} (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) \cdot \nabla W_{ij} \frac{m_j}{\rho_j} \quad (3.12)$$

A partir da Equação 3.12, basta integrarmos $\frac{D\rho_i}{Dt}$ em relação ao tempo para obtermos uma aproximação da densidade. Sua simetria pode ser notada pelo termo $\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i$, ou seja, essa aproximação avalia a velocidade de P_i e de todas P_j em sua vizinhança.

3.3.2 Aproximação da equação do momento

Aproximar a equação do momento para fluidos incompressíveis (Eq. 2.15) envolve a utilização dos operadores já descritos para o gradiente e a aproximação do laplaciano, que pode ser visto como o divergente do gradiente de uma função. Como é comum entre os operadores SPH, o laplaciano também pode ser obtido de diversas formas. Portanto, a partir da Equação 2.15

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{f} \quad (2.15)$$

Aproximando cada um dos termos da equação acima através dos operadores SPH definidos, resultamos na equação do momento SPH para fluidos incompressíveis:

$$\mathbf{a}_i = \frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} = - \sum_{j \in V_i} m_j \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} \right) \nabla W_{ij} + \frac{2\mu}{\rho_i} \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} \mathbf{v}_{ij} \frac{x_{ij} \cdot \nabla W_{ij}}{r_{ij}^2} + \mathbf{f}, \quad (3.13)$$

onde $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$.

É importante destacar que, em simulações tradicionais de dinâmica de fluidos com o

método SPH, a pressão é calculada através de uma *equação de estado*. Ela é computada em função da densidade local das partículas no suporte compacto. Existem algumas formas propostas na literatura, e a proposta por Batchelor (BATCHELOR, 2000) é a seguinte:

$$p_i = \frac{c^2 \rho_0}{7} \left[\left(\frac{\rho_i}{\rho_0} \right)^7 - 1 \right], \quad (3.14)$$

onde c é a velocidade do som, um importante parâmetro que é descrito na Seção 4.2.2.

Geralmente, em outros métodos de simulação de fluidos, a pressão é obtida através da solução de uma equação de Poisson (STAM, 1999). A utilização de equações de estado para o cálculo da pressão dificulta a manutenção da incompressibilidade do fluido. Embora seja uma maneira rápida de aproximar a pressão localmente, perde-se em precisão devido a uma falta de controle global da densidade. Dessa forma, diz-se que o fluido incompressível é aproximado por um fluido *quase-incompressível*. Uma maneira de garantir a compressibilidade solucionando-se uma equação de Poisson no SPH pode ser vista em (PAIVA et al., 2009a).

3.4 Núcleos

O núcleo W é escolhido de forma a possuir diversas propriedades desejáveis. Destacaremos aqui as mais importantes para a obtenção dessas aproximações:

1. W deve ser normalizado:

$$\int_{\Omega} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 1 \quad (3.15)$$

É desejável que ele não acrescente nem retire energia do sistema.

2. W deve ter suporte compacto:

$$W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) = 0 \text{ quando } |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| > kh \quad (3.16)$$

Essa condição define que o núcleo W deve possuir uma área finita de ponderação, onde k é uma constante que escala o raio de influência do núcleo, permitindo que mais ou menos partículas sejam incluídas nessa área.

No trabalho original de Gingold e Monaghan (GINGOLD; MONAGHAN, 1977) é ressaltado que o núcleo escolhido deve respeitar a condição de normalização (Eq. 3.15) e que deve-

se esperar que, à medida que o número de partículas aumenta e, conseqüentemente, o comprimento suave h diminui, a função aproximada se aproxime da original. Ou seja:

$$\lim_{h \rightarrow 0} \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = f(\mathbf{x}) \quad (3.17)$$

Essa é a chamada *aproximação da identidade*. O núcleo adotado deve contribuir para que a aproximação acima seja verdadeira. Existem várias outras propriedades discutidas na literatura (PAIVA et al., 2009a), mas nem sempre elas são fundamentais. Existem trabalhos que propositalmente não respeitam todas as propriedades (LIU; CHEN, 1995).

O núcleo utilizado no presente trabalho é o proposto por Liu e Liu (LIU; LIU; LAM, 2003):

$$W^h(R) = \alpha_d \begin{cases} \frac{2}{3} - \frac{9}{8}R^2 + \frac{19}{24}R^3 - \frac{5}{32}R^4 & , 0 \leq R < 2 \\ 0 & , R \geq 2 \end{cases} \quad (3.18)$$

onde

$$R = \frac{|x|}{h} \quad (3.19)$$

e α_d depende da dimensão d do problema, sendo definido por:

$$\alpha_d = \begin{cases} \frac{1}{h} & , d = 1 \\ \frac{15}{7\pi h^2} & , d = 2 \\ \frac{315}{208\pi h^3} & , d = 3 \end{cases} \quad (3.20)$$

A função W para $d = 3$ se comporta conforme ilustra a Figura 8 a seguir:

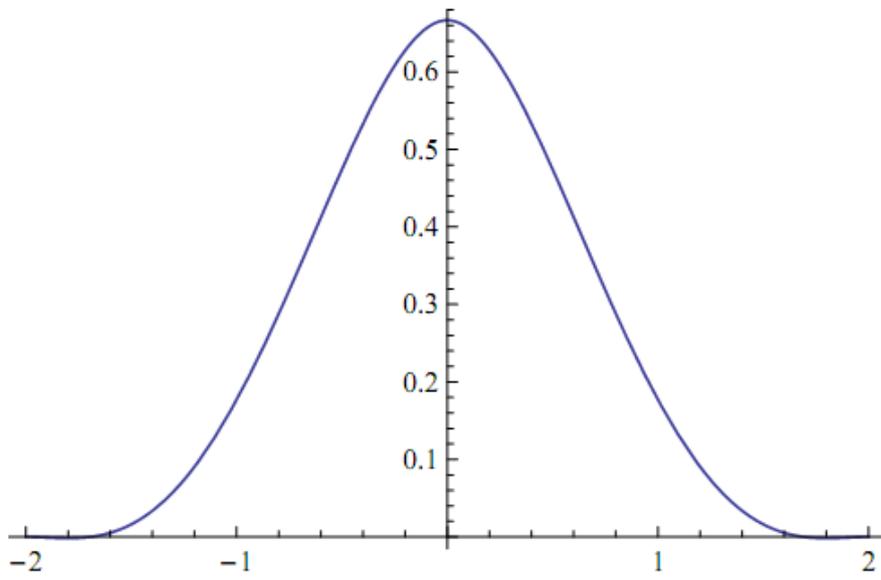


Figura 8: *Comportamento do núcleo W para $R \in [-2, 2]$*

4 *Modelo Computacional*

Tendo obtido a aproximação por partículas no capítulo 3, podemos implementá-la computacionalmente. As aproximações discretas devem ser organizadas de uma maneira sequencial e coerente. O funcionamento geral do programa é ilustrado na Seção 4.1.

O método SPH possui muitas variáveis importantes e sua devida inicialização é um aspecto delicado para o bom funcionamento e estabilidade da simulação. A Seção 4.2 trata desse assunto.

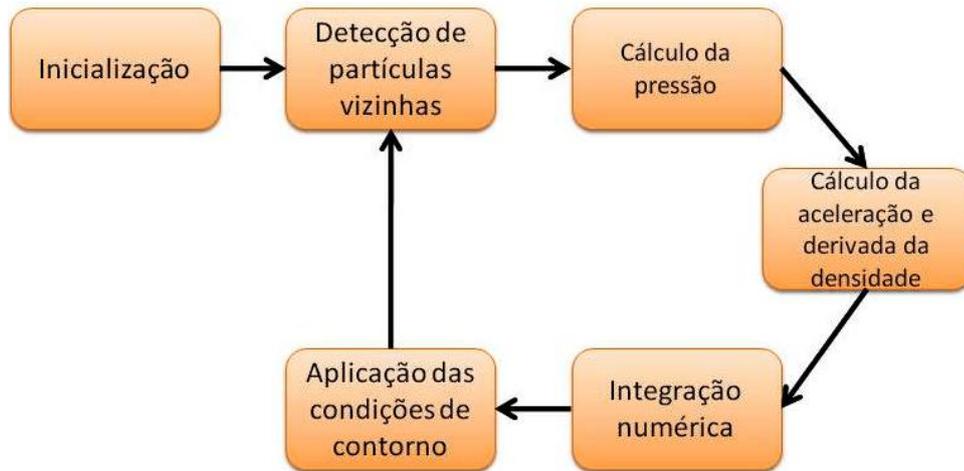
Como a cada passo de tempo cada partícula precisa interagir com seus vizinhos, um grande gargalo da simulação consiste justamente nas estruturas de dados e algoritmos responsáveis pela busca de partículas vizinhas, conforme é abordado na Seção 4.3.

As EDO's obtidas pelas aproximações SPH estão todas em função do tempo. Existem vários métodos de integração numérica que podemos utilizar, e que são explicitados na Seção 4.4.

Um dos aspectos cruciais para a estabilidade da simulação é justamente como lidar com as áreas limites do ambiente de simulação, onde o suporte compacto das partículas não está inteiramente contido no domínio. Algumas maneiras de contornar esse problema são tratadas na Seção 4.5.

4.1 **Visão Geral**

O modelo computacional pode ser esquematizado como a seguir:



O algoritmo desenvolvido é sequencial, e pode ocorrer indefinidamente e a taxas iterativas com um número razoável de partículas. Como pode ser notado, o cálculo da pressão ocorre antes do cálculo das equações de Navier-Stokes, pois estas necessitam do valor da pressão para realizar suas computações. Isso não trouxe à simulação problemas de convergência; o cálculo da pressão, de maneira geral, se comportou muito bem, exceto quando submetido a condições como as descritas na Seção 5.2.3.

4.2 Inicialização

O primeiro passo da simulação consiste em configurar adequadamente os parâmetros de entrada. A discussão sobre como obter alguns parâmetros e valores específicos está fora do escopo deste trabalho, e um estudo detalhado sobre parâmetros e testes pode ser encontrada em (LIU; LIU, 2003). Muitos atributos das partículas são inicializados com valores iniciais, como a massa, densidade, posição e aceleração.

4.2.1 Comprimento suave

O parâmetro h , conhecido como o *comprimento suave*, está diretamente relacionado ao núcleo. Juntamente com a constante k , define o raio kh do suporte compacto utilizado. Quanto maior esse raio, maior o número de partículas dentro do suporte. Para que a simulação seja efetuada eficientemente, é necessário que haja um número suficiente de partículas dentro desse suporte; logo, h não pode ser muito pequeno.

Contudo, se h for muito grande, propriedades locais serão suavizadas pelo núcleo,

sendo transferidas para partículas mais distantes. Liu e Liu (LIU; LIU, 2003) sugerem que o número de partículas dentro do suporte compacto deve ser aproximadamente 5, 21 e 57 para uma, duas ou três dimensões, respectivamente. Para isso, adota-se como $h = 1.3\Delta x$, onde Δx é a distância inicial entre as partículas em uma distribuição uniforme, e $k = 2$.

No presente trabalho, o raio kh utilizado é constante e igual para todas as partículas. Pode ser visto em (LIU; LIU, 2003) que existem estratégias que fazem com que o comprimento suave h seja atualizado dinamicamente, de forma que todas as partículas sempre possuam uma quantidade adequada de vizinhos. Também é possível trabalhar de forma que diferentes partículas possuam diferentes valores para kh , estratégia particularmente útil para a simulação de fluidos multifásicos.

4.2.2 Velocidade do som

A *velocidade do som* c é uma constante que indica a velocidade com a qual uma ligeira perturbação se propaga no meio em questão. Devemos configurá-la em função da maior velocidade do fluido. Mais precisamente, a velocidade do som é configurada como $c = 10\mathbf{v}$, onde \mathbf{v} é a maior velocidade esperada do escoamento (MONAGHAN, 1994).

Considerando a conservação da energia mecânica no sistema, temos que a energia potencial se transforma em cinética à medida que a simulação progride. Supondo a única força externa como a gravidade \mathbf{g} temos:

$$mgH = \frac{mv^2}{2}, \quad (4.1)$$

onde H é a altura da coluna de água. Dessa forma temos que a velocidade esperada é

$$\mathbf{v} = \sqrt{2gH}, \quad (4.2)$$

e assim a velocidade do som é

$$c = 10\sqrt{2gH}, \quad (4.3)$$

para um escoamento sob a atuação da força da gravidade.

4.3 Busca de partículas vizinhas

Em simulações SPH, todas as aproximações realizadas dependem da interação de cada partícula com seus vizinhos. Contudo, devido ao fato de estas serem independentes e não

estarem fixas no espaço, nem sempre uma partícula P_i terá os mesmos vizinhos. Fluidos em movimento estão sujeitos a grandes deformações, e é por isso que frequentemente a estrutura de partículas vizinhas deve ser atualizada. A forma de atacar esse problema depende de alguns fatores, como:

- **Passo de tempo e viscosidade**

Se o passo de tempo Δt for pequeno ou a viscosidade μ da simulação for elevada, não ocorrerão muitas mudanças na lista de vizinhos, o que torna possível que o algoritmo de busca de vizinhos não seja executado em todas as iterações;

- **Esparsidade**

Se o fluido estiver contido em um espaço com grandes áreas vazias, a estratégia ideal não é a mesma que a utilizada em um ambiente repleto de partículas. Pode ser mais interessante usar uma *tabela hash* e uma estrutura de dados adaptativa ou uma grade fixa sobreposta ao domínio da simulação.

4.3.1 Busca em força bruta

A forma de busca mais trivial de se realizar é a *busca em força bruta*. Nesse tipo de busca, simplesmente avaliamos, para cada duas partículas P_1, P_2 distintas, se a distância entre P_1 e P_2 é inferior a kh . Em caso positivo, estas são vizinhas.

Esse método é bastante intuitivo, mas como pode-se perceber, é bastante custoso. À medida que o número n de partículas cresce, o tempo de computação apresenta um crescimento $O(n^2)$. Logo, é evidente que essa estratégia é completamente inviável para um grande número de partículas, principalmente se desejarmos resultados em tempo real.

```

Algoritmo: Busca em força bruta
para cada partícula  $P_i$  faça
  esvaziaListaDeVizinhos( $P_i$ );
  para cada partícula  $P_j \neq P_i$  faça
    se  $\text{distância}(P_i, P_j) < kh$  então
      | adicionaVizinho( $P_i, P_j$ );
    fim
  fim
fim

```

Algoritmo 1: Busca em força bruta

4.3.2 Busca em grade

Para domínios densos e compactos, com poucas áreas vazias, existe um método capaz de calcular a lista de vizinhos de uma partícula P_i em tempo constante, ou seja, com uma complexidade $O(1)$. Esse método não depende do número de partículas.

Seu funcionamento é baseado no fato de que os vizinhos de P_i situam-se a uma distância menor ou igual a kh . Dessa forma, é criada uma grade regular sobreposta ao domínio. Cada célula dessa grade é um quadrado de lado kh . Com a grade configurada de tal forma, percebemos que não é necessário procurar os vizinhos de $p \in C_p$ em todas as células, somente na própria célula C_p e nas 26 células adjacentes (no caso de três dimensões). A seguir, são apresentados a ilustração da disposição da grade e o pseudocódigo do algoritmo de busca em grade:

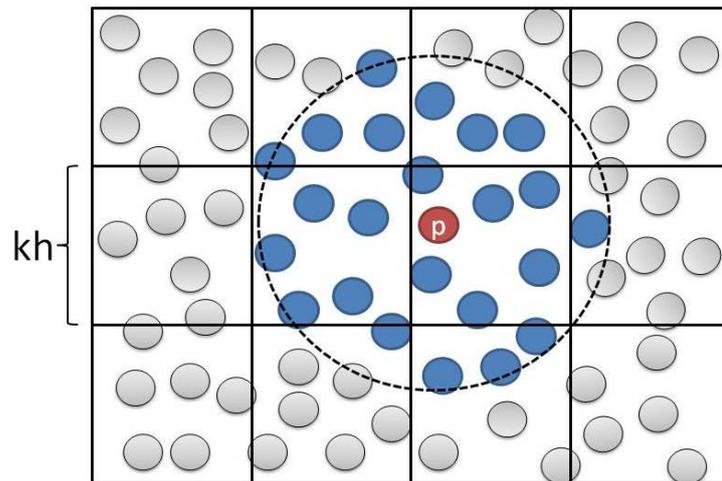


Figura 9: Busca em grade. Cada célula possui lados kh . Só é necessário buscar vizinhos nas células adjacentes à célula de P_i

```

Algoritmo: Busca em grade

para cada célula  $C_i$  faça
  |
  para cada partícula  $P_i \in C_i$  faça
  |   esvaziaListaDeVizinhos( $P_i$ );
  |   para cada partícula  $P_j \in C_i, P_j \neq P_i$  faça
  |     | se  $\text{distância}(P_i, P_j) < kh$  então
  |     |   | adicionaVizinho( $P_i, P_j$ );
  |     |   fim
  |     fim
  |   fim
  |   para cada célula  $C_a$  adjacente a  $C_i$  faça
  |     | para cada partícula  $P_a \in C_a$  faça
  |     |   | se  $\text{distância}(P_i, P_a) < kh$  então
  |     |   |   | adicionaVizinho( $P_i, P_a$ );
  |     |   |   fim
  |     |   fim
  |     fim
  |   fim
fim

```

Algoritmo 2: Busca em grade

4.4 Integração temporal

Para resolver as EDO's obtidas pela aproximação SPH, é necessário utilizar um método numérico capaz de integrá-las em relação ao tempo. Para uma simulação estável, existem limites superiores os quais Δt não deve extrapolar. O passo de tempo Δt utilizado pode ser constante ou variar conforme alguma condição adaptativa, respeitando a condição de estabilidade de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL). Essa condição requer que o domínio físico esteja contido no domínio da simulação, ou seja, a velocidade da propagação numérica do método deve exceder a maior velocidade esperada do escoamento (LIU; LIU, 2003). No presente trabalho, Δt foi mantido constante durante toda simulação. Atendendo à condição CFL, Δt deve ser inicializado de modo que:

$$\frac{kh}{\Delta t} > c \Rightarrow \Delta t < \frac{kh}{c}. \quad (4.4)$$

4.4.1 Euler

O método de Euler é um método explícito de integração numérica de EDO's. Dado um valor inicial e o passo de tempo que queremos tomar, ele é capaz de aproximar a primeira derivada de uma variável, através do que chamamos de *diferença para frente*:

Para uma variável x , temos:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{x(t + \Delta t) - x(t)}{\Delta t} \quad (4.5)$$

No método SPH, a aceleração é calculada diretamente através da equação do momento para fluidos incompressíveis (Eq. 3.13), e a partir dela podemos calcular a velocidade e, conseqüentemente, a posição:

$$\mathbf{a} = \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{\mathbf{v}(t + \Delta t) - \mathbf{v}(t)}{\Delta t} \Rightarrow \mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}(t) + \Delta t \cdot \mathbf{a} \quad (4.6)$$

Para o cálculo da nova posição $\mathbf{x}(t + \Delta t)$, basta tomarmos a velocidade que $\mathbf{v}(t + \Delta t)$ acabamos de calcular:

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{\mathbf{x}(t + \Delta t) - \mathbf{x}(t)}{\Delta t} \Rightarrow \mathbf{x}(t + \Delta t) = \mathbf{x}(t) + \Delta t \cdot \mathbf{v}(t + \Delta t) \quad (4.7)$$

O método de Euler é considerado um método de primeira ordem, o que significa que ele pode se tornar instável onde houver grandes descontinuidades, e que, portanto, é recomendável a utilização de um Δt pequeno para suprir essa instabilidade.

4.4.2 Leap-Frog

O integrador Leap-Frog é classificado como de segunda ordem, portanto possui uma precisão maior que o método de Euler. Ele realiza a aproximação da derivada através da denominada *diferença central*. Para uma variável x , temos:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{x(t + \frac{\Delta t}{2}) - x(t - \frac{\Delta t}{2})}{\Delta t} \quad (4.8)$$

O método atua, dessa forma, em intervalos de tempo intermediários, e a velocidade e a posição são calculadas para instantes intercalados:

$$\mathbf{v}(t + \frac{\Delta t}{2}) = \mathbf{v}(t - \frac{\Delta t}{2}) + \Delta t \cdot \mathbf{a} \quad (4.9)$$

$$\mathbf{x}(t + \Delta t) = \mathbf{x}(t) + \Delta t \cdot \mathbf{v}(t + \frac{\Delta t}{2}) \quad (4.10)$$

4.5 Condições de contorno

Em simulações de dinâmica de fluidos, geralmente a substância em estudo está contida em um recipiente, como a água de um aquário ou o gás dentro de um balão, ou o escoamento se dá de forma a interagir com estruturas externas ao fluido, como as asas de um avião ou uma bóia sobre uma piscina. Dessa forma, é preciso definir como modelar numérica e computacionalmente tais interações.

4.5.1 Partículas fantasma

Esta proposta visa gerar partículas além da fronteira, conhecidas como *partículas fantasma*, que são responsáveis por gerar uma força de repulsão capaz de manter todas as partículas da simulação dentro do domínio estabelecido. As partículas fantasma podem ser distribuídas uniformemente ao longo da fronteira (Fig. 10) ou serem dispostas de forma a espelhar as partículas do domínio em relação à fronteira (Fig. 11). Uma partícula P_i , quando se aproxima de uma partícula fantasma P_g , sofre a aplicação de uma força similar ao potencial de Lennard-Jones, conforme pode ser visto em (MONAGHAN, 1994).

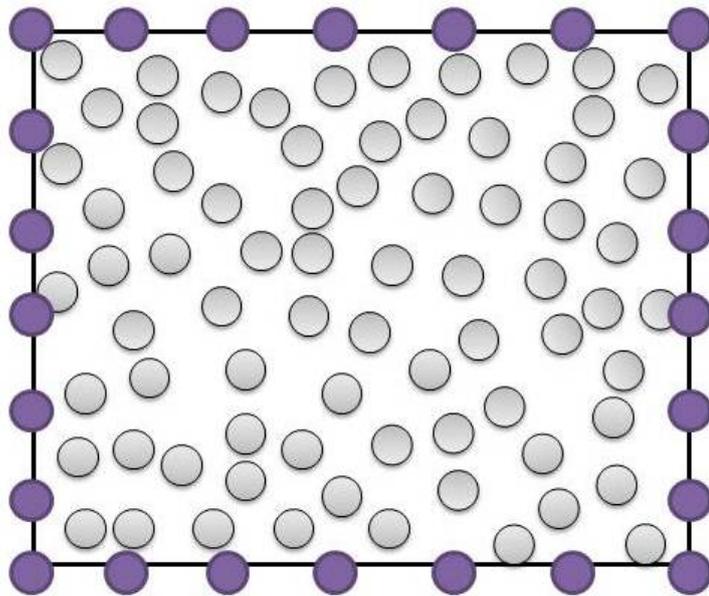


Figura 10: As partículas fantasma podem ser distribuídas uniformemente ao longo da fronteira. Suas propriedades devem ser calculadas de forma a impedir que as partículas reais ultrapassem a fronteira.

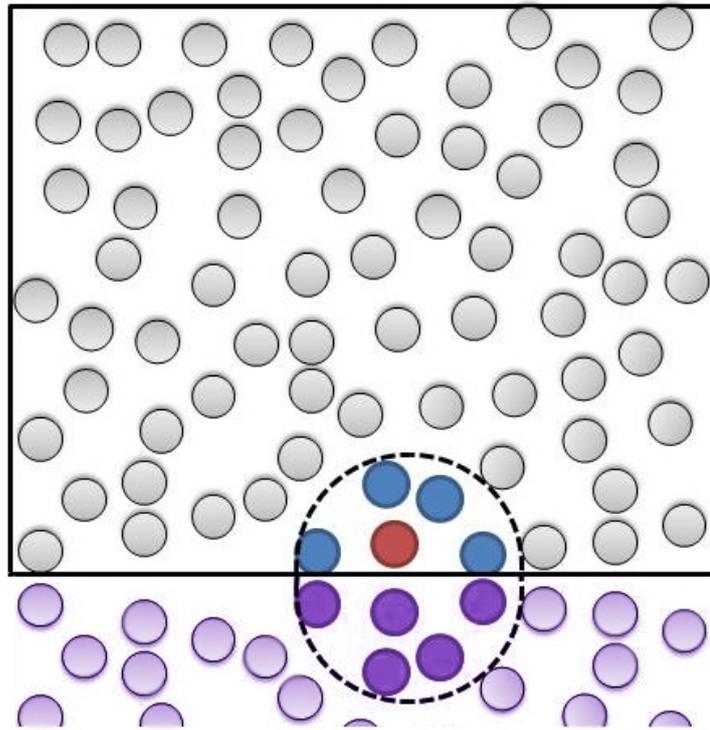


Figura 11: *As partículas fantasma podem ser uma reflexão das partículas reais em relação à fronteira. Essa técnica pode ser difícil de manter para geometrias mais complexas.*

4.5.2 Reflexão geométrica

A *reflexão geométrica*, proposta por (PAIVA, 2007), é similar a algumas técnicas abordadas em simulação de corpos rígidos. Ela pode ser facilmente aplicada a condições de contorno complexas, com o custo de se necessitar de um adequado teste de colisão.

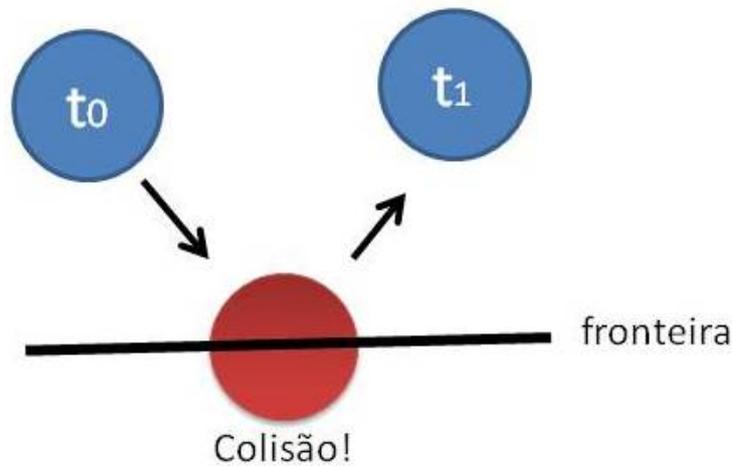


Figura 12: A partícula do fluido, ao colidir com a fronteira, tem sua velocidade refletida em relação à normal da superfície.

A reflexão se dá da seguinte forma: um algoritmo de detecção de colisão (um amplo material sobre esse assunto pode ser encontrado em (ERICSON, 2005)) deve detectar se uma partícula P_i ultrapassou a fronteira, obtendo a normal \mathbf{n} a essa superfície e o ponto \mathbf{cp} onde ocorreu a colisão. A partícula P_i é posicionada de volta nesse ponto, e sua velocidade \mathbf{v}_i é refletida em relação à normal. Portanto, a velocidade \mathbf{v}_i e a posição \mathbf{x}_i são atualizadas da seguinte forma:

$$\mathbf{v}_i = \mathbf{v}_i - 2(\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} \quad (4.11)$$

$$\mathbf{x}_i = \mathbf{cp} \quad (4.12)$$

4.6 Discussão

Nesse capítulo foram exibidos diversos métodos e atributos relevantes na elaboração da aplicação, e o acoplamento entre eles requer atenção. Para a configuração do comprimento suave do núcleo, visando corresponder ao número adequado de vizinhos explicitado na Seção 4.2.1, devem ser tomados alguns cuidados. Se h é configurado como $1.3\Delta x$ e $k = 2$, muitas partículas terão uma quantidade de vizinhos bastante inferior ao ideal, em especial aquelas próximas à fronteira. Uma possível solução seria ajustar k ou h para que mais partículas pertençam à vizinhança de uma dada partícula P_i . Isso ajudaria a resolver a questão da escassez de vizinhos na fronteira, mas outro problema persistiria: o suporte compacto do núcleo na posição de P_i não estaria inteiramente contido no domínio, logo

as interações não se dariam de forma simétrica.

Uma abordagem muito interessante para resolver as deficiências do suporte compacto do núcleo na fronteira é a utilização de partículas fantasma como condição de contorno. Em especial a disposição simétrica das partículas em relação à fronteira é uma forma de evitar grandes descontinuidades e ao mesmo tempo manter um número razoável e bem distribuído de vizinhos no suporte compacto do núcleo perto da fronteira. Nos experimentos realizados, contudo, notou-se que é difícil estabelecer uma configuração com a garantia de que as partículas reais respeitem os limites da fronteira, que mantenha o sistema estável, e que não acrescente a ele energia. O caso das partículas fantasma fixas na fronteira pode ser utilizado concomitantemente com a disposição simétrica, mas a quantidade de partículas fixas que devem ser criadas, assim como suas propriedades físicas, é um assunto delicado e não se sabe ao certo na literatura qual a melhor solução. De maneira geral, a condição de contorno através de partículas fantasma, apesar de interessante, se mostra mais custosa e de difícil manipulação para geometrias complexas, se comparada com a reflexão geométrica. Essa é uma forma rápida e eficiente de manter as partículas dentro do domínio, o que é ideal para aplicações interativas, mas com a desvantagem de inserir descontinuidades, podendo aumentar a energia do sistema, além de não tratar as deficiências do suporte compacto do núcleo na fronteira.

A velocidade do som é um dos fatores mais importantes na velocidade da simulação. Como o passo de tempo da integração temporal está sujeito a obedecer a restrição $\Delta t < \frac{kh}{c}$, quando menor o valor de c , mais rápida a simulação será. Ou seja, quanto menor for a maior velocidade esperada, mais rapidamente o sistema converge para um estado de repouso.

5 *Resultados*

A aplicação foi desenvolvida em C++ e as partículas são representadas como esferas através da biblioteca OpenGL. Os testes aqui descritos foram realizados em uma máquina Intel Core 2 Quad Q9550 2.83GHz com 4GB de memória RAM, utilizando o sistema operacional Windows Vista Business 64 bits.

5.1 A aplicação

A aplicação desenvolvida consiste basicamente em três classes:

5.1.1 *gcgBasicSPH*

A classe *gcgBasicSPH* é responsável pela manutenção do experimento como um todo. Ela gerencia as partículas, a busca de vizinhos e contém todos os parâmetros globais do sistema. Essa classe possui a implementação dos integradores de Euler (Seção 4.4.1) e Leap-Frog (Seção 4.4.2).

O algoritmo de busca utilizado é o de busca em grade (Seção 4.3.2), e as condições de contorno aplicadas são as geométricas (Seção 4.5.2).

O principal método dessa classe é o método `iterate()`, que realiza um passo de tempo da simulação e é organizado da seguinte forma:

```

Algoritmo: iterate(): O laço principal
detectaVizinhos(); //ajusta a grade e calcula todos os vizinhos;
para cada partícula  $P_i$  faça
|   calculaPressão( $P_i$ );
fim
para cada partícula  $P_i$  faça
|   calculaDerivadaDensidade( $P_i$ );
|   calculaAceleração( $P_i$ );
fim
para cada partícula  $P_i$  faça
|   integracaoNumerica( $P_i$ );
|   aplicaCondicoesContorno( $P_i$ ); //aplica condições e corrige a posição;
fim

```

Algoritmo 3: iterate(): O laço principal

5.1.2 gcgParticleSPH

A classe *gcgParticleSPH* corresponde a uma partícula do sistema. Portanto, carrega consigo todos os atributos individuais:

- Posição
- Massa
- Densidade
- Derivada da densidade
- Velocidade
- Aceleração
- Pressão

5.1.3 gcgOptimizedGridSPH

A classe *gcgOptimizedGridSPH* implementa a busca em grade (Seção 4.3.2). Como lista de vizinhos, é utilizada uma matriz pré-alocada, o que faz com que o consumo de memória seja maior do que o tradicional, mas a velocidade do programa é aumentada

pois não é necessário trabalhar com alocação dinâmica. Um parâmetro interessante que ela possui é o *nloops*, que define por quantas iterações a busca de vizinhos pode aguardar antes que seja necessário um novo cálculo da lista. Na prática, observamos que para um valor de *nloops* > 3 já se pode observar um comprometimento nos resultados.

É importante ressaltar que, além do poder de processamento, a memória da máquina faz grande diferença nesse momento: um consumo excessivo de memória em um computador com pouca disponibilidade implica em um intenso uso de memória virtual. Como o acesso à memória secundária é mais lento, a velocidade do programa pode ficar comprometida.

5.2 Experimentos

Para os experimentos a seguir, foram utilizados o algoritmo de busca em grade (Alg. 2), o integrador de Euler (Seção 4.4.1) e as condições de contorno geométricas, conforme a Seção 4.5.2. A coloração termal indica a densidade: quanto mais próximo de vermelho for a cor de uma partícula, maior sua densidade. Quanto mais próximo de azul, menor.

5.2.1 Experimento 1: descarga de água

Um experimento típico em dinâmica dos fluidos é o da *descarga de água*. Um fluido é confinado na metade de uma caixa retangular, que contém uma parede vertical separando esse fluido da parte vazia. Subitamente, uma porção inferior dessa parede é retirada e o escoamento decorrente é analisado sob a força da gravidade. Foram realizados dois testes: um em tempo real e um com grande quantidade de partículas. No teste a seguir descrito, foi retirado $\frac{1}{3}$ da parede vertical. O volume envolvente possui 25 cm de comprimento, 19 cm de altura e 5 cm de profundidade. Acima de cada quadro do programa, está relatado o tempo gasto pelo computador até o momento em questão (em vermelho) e o tempo passado no universo da simulação (em preto).

Vale destacar que, no teste aqui descrito, as partículas foram posicionadas no ambiente com aceleração e velocidade nulas, e a partir do momento em que a gravidade começou a agir, as figuras e o tempo começaram a ser gravados. Sendo assim, as partículas colidem com o limite inferior da caixa e, à medida que as partículas que estão em uma altura maior colidem com aquelas que se situam em uma altura menor, verifica-se uma variação da densidade que se propaga do solo até o topo da coluna de água. Isso justifica o segundo quadro das Figuras 13 e 14, que mostra altos valores para a densidade em regiões próximas

ao topo da coluna de água.

5.2.1.1 Tempo real

Este experimento foi realizado com o intuito de permitir visualização em tempo real, e foram utilizadas 1000 partículas. O raio de alcance do núcleo foi configurado como $k \cdot h = 2 \cdot 1,420447$. O passo de tempo utilizado foi $\Delta t = 0,007361$. A figura a seguir mostra a aplicação em execução:

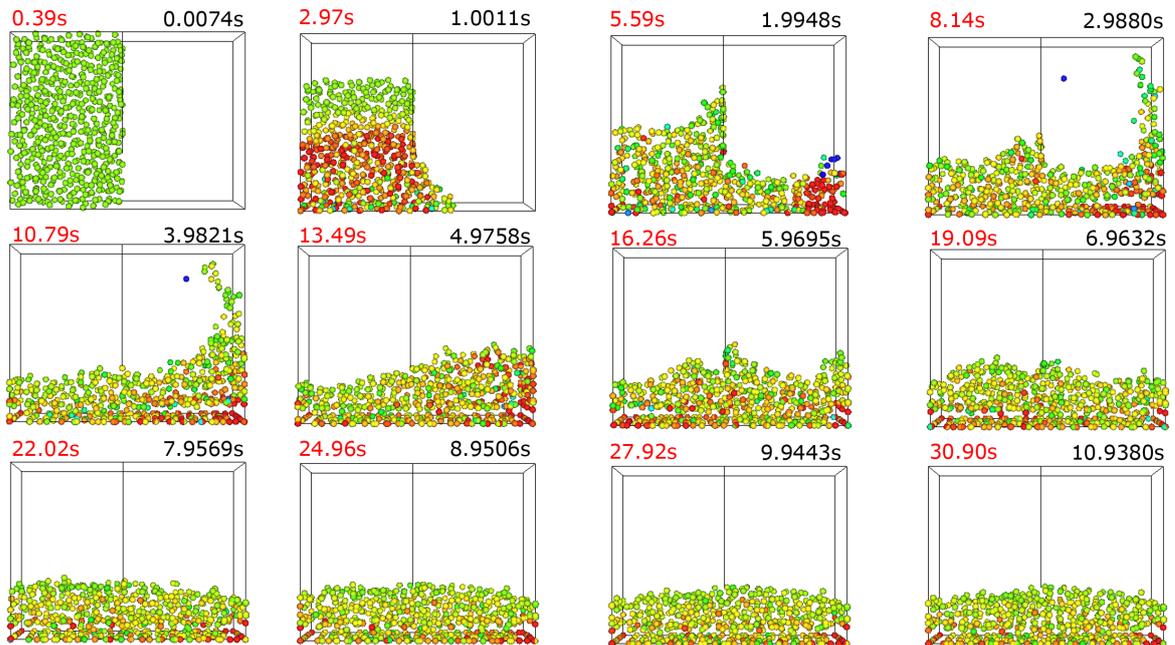


Figura 13: Aplicação: 1000 partículas.

Essa simulação gerou em média 48,07 quadros por segundo.

5.2.1.2 Alto nível de detalhe

Este experimento foi realizado com o intuito de permitir maior nível de detalhe, e foram utilizadas 40000 partículas. O raio de alcance do núcleo foi configurado como $k \cdot h = 2 \cdot 0,415341$. O passo de tempo utilizado foi $\Delta t = 0,002152$. A figura a seguir mostra a aplicação em execução:

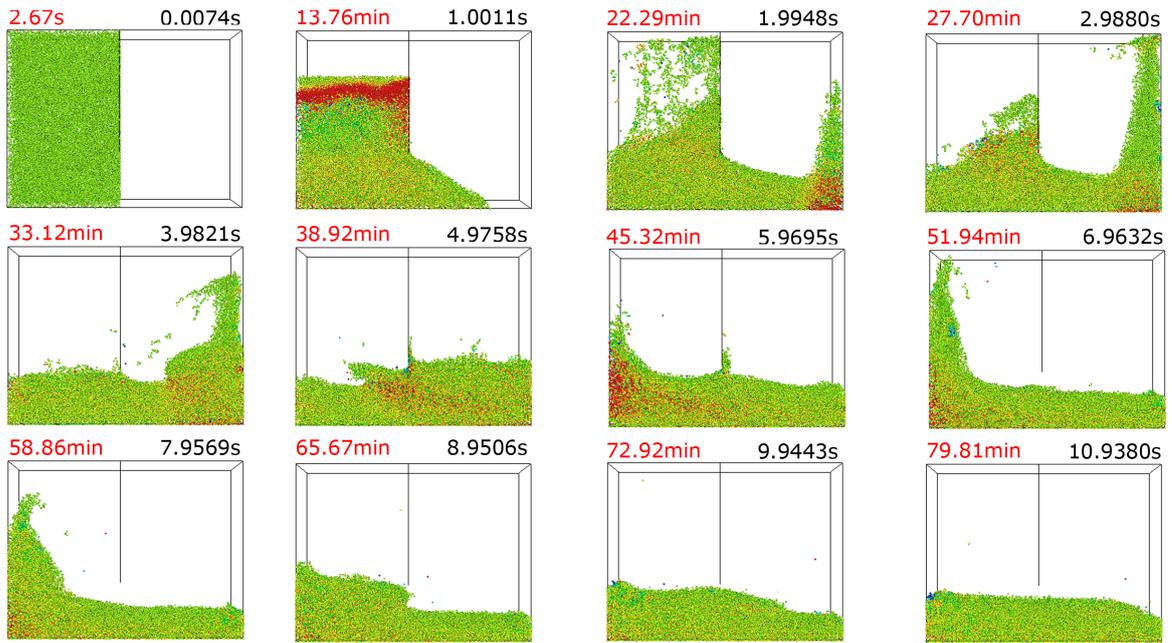


Figura 14: Aplicação: 40000 partículas.

Essa simulação gerou em média 1,06 quadros por segundo.

5.2.2 Experimento 2: forças de controle

Foi realizado um experimento com o objetivo de controlar o movimento das partículas, de forma que elas possam seguir uma trajetória pré-determinada da forma mais coerente possível. Esse tipo de aplicação pode ser útil para visualização de curvas, em especial pode contribuir significativamente para a visualização de campos tensoriais. Também é um objetivo importante na indústria de animação, que busca sempre um balanço entre o realismo físico e o controle do movimento dos elementos da cena. Neste teste não foi utilizada a coloração termal.

Dada uma curva, calcula-se a tangente de seus pontos e a distância das partículas do fluido a essa curva. A gravidade foi removida, e em vez dela foram adicionadas duas forças:

1. \mathbf{f}_1 , que é perpendicular em relação à curva, agindo para aproximar a partícula ao eixo central da trajetória;
2. \mathbf{f}_2 , que é tangencial à curva, agindo para manter o fluxo de partículas em movimento.

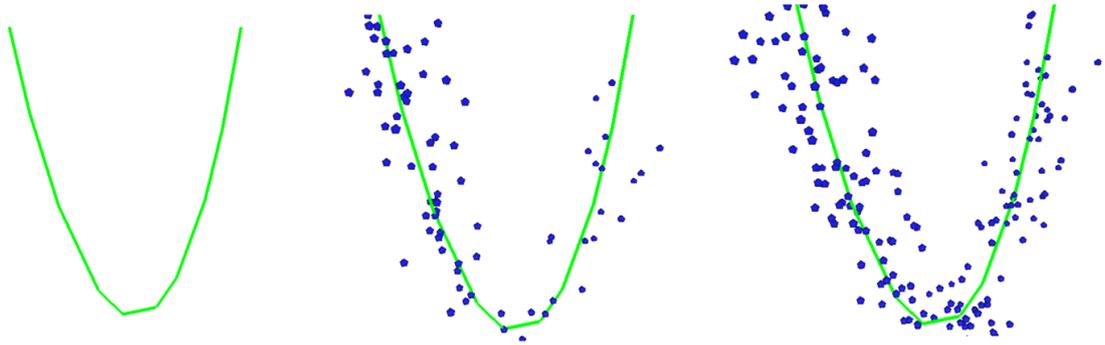


Figura 15: *Aplicação: forças de controle mantendo as partículas sobre uma parábola.*

As forças f_1 e f_2 são escaladas por constantes k_1 e k_2 , controladas interativamente pelo usuário. Essa estratégia ainda requer ajustes, pois como as forças são definidas interativamente, nem sempre elas são capazes manter as partículas à trajetória pré-definida. Contudo, a idéia de utilizar forças externas para controlar o movimento das partículas é uma idéia a ser explorada, que já produziu bons resultados para a abordagem euleriana (FATTAL; LISCHINSKI, 2004).

5.2.3 Experimento 3: incompressibilidade

Foi realizado um experimento com o objetivo de testar a compressibilidade do fluido. Para que seja analisada a influência das condições de contorno sobre as compressibilidade do fluido, foi realizado um experimento de descarga de água, mas desta vez com a caixa envolvente em constante rotação. Isso faz com que as partículas entrem constantemente em choque com as paredes do sólido envolvente, acrescentando continuamente descontinuidades no sistema. Foram utilizadas 4000 partículas, e as dimensões da caixa 25 cm x 1 cm x 5 cm. O raio de alcance do núcleo foi configurado como $k \cdot h = 2 \cdot 1,420447$. O passo de tempo utilizado foi $\Delta t = 0,007361$.

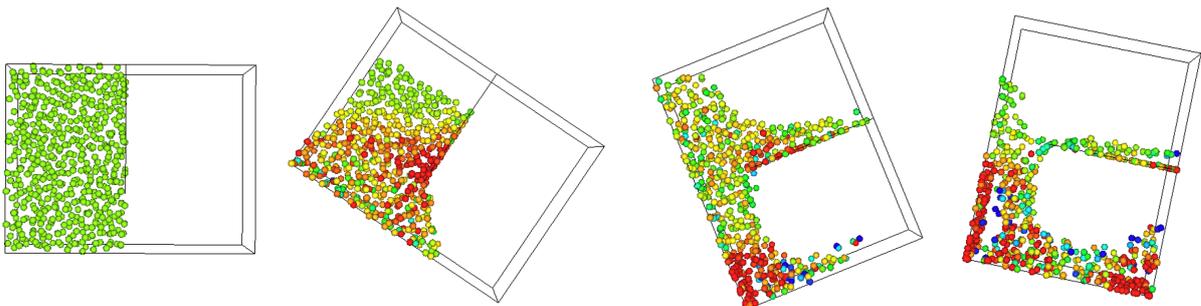


Figura 16: *Início da simulação: caixa envolvente em rotação constante, sentido horário.*

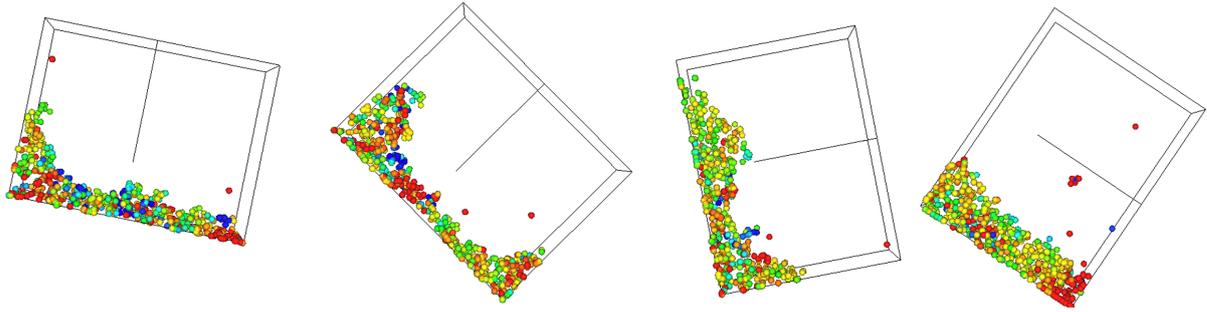


Figura 17: *Fim da simulação: 45 segundos depois (tempo no domínio da simulação), é evidente a compressão do fluido*

Após muitos choques com as paredes, percebe-se que o volume do fluido diminui. No Experimento 1, quando o fluido entrou em repouso seu volume se manteve invariável. Logo, percebe-se que as discontinuidades introduzidas pelas condições de contorno geométricas aliadas ao uso de uma equação de estado para a pressão atrapalham a incompressibilidade do fluido.

5.2.4 Experimento 4: condições de contorno

As condições de contorno geométricas podem ser aplicadas facilmente a qualquer tipo de superfície. O fluido foi simulado dentro de uma esfera. Foram utilizadas 4000 partículas. raio de alcance do núcleo foi configurado como $k \cdot h = 2 \cdot 0,445252$ e o passo de tempo utilizado foi $\Delta t = 0,003801$.

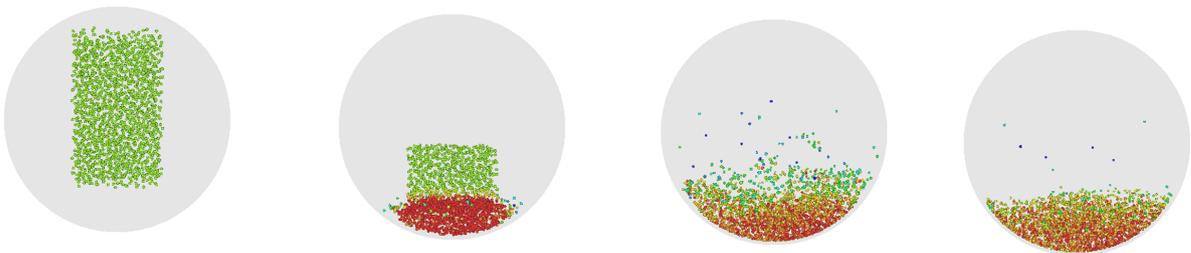


Figura 18: *Condição de contorno geométrica para geometria esférica*

Aplicando as mesmas condições para uma esfera em rotação constante, análoga ao experimento 3, temos:

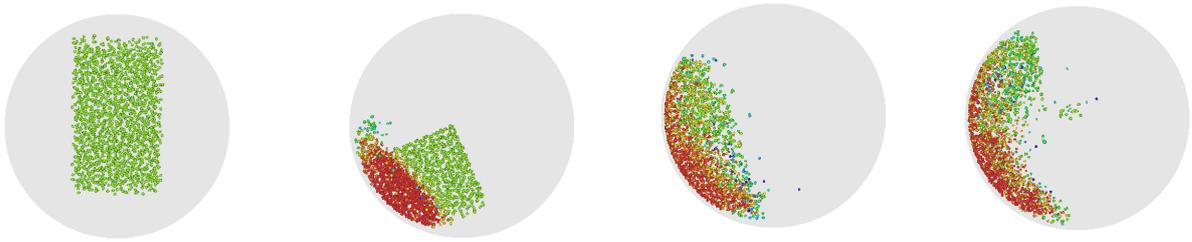


Figura 19: *Recipiente em rotação constante (sentido horário)*

5.3 Desempenho

Para avaliar o tempo que o método demora para realizar todos os cálculos necessários, foram realizadas medições utilizando as mesmas condições iniciais do experimento 1, descrito na seção anterior. Foram utilizadas 8 quantidades diferentes de partículas, de 500 a 4000 partículas, e o tempo gasto por cada uma dessas configurações para calcular 10000 iterações foi armazenado. Foram realizadas 5 execuções de cada configuração, e o gráfico a seguir representa as médias obtidas:

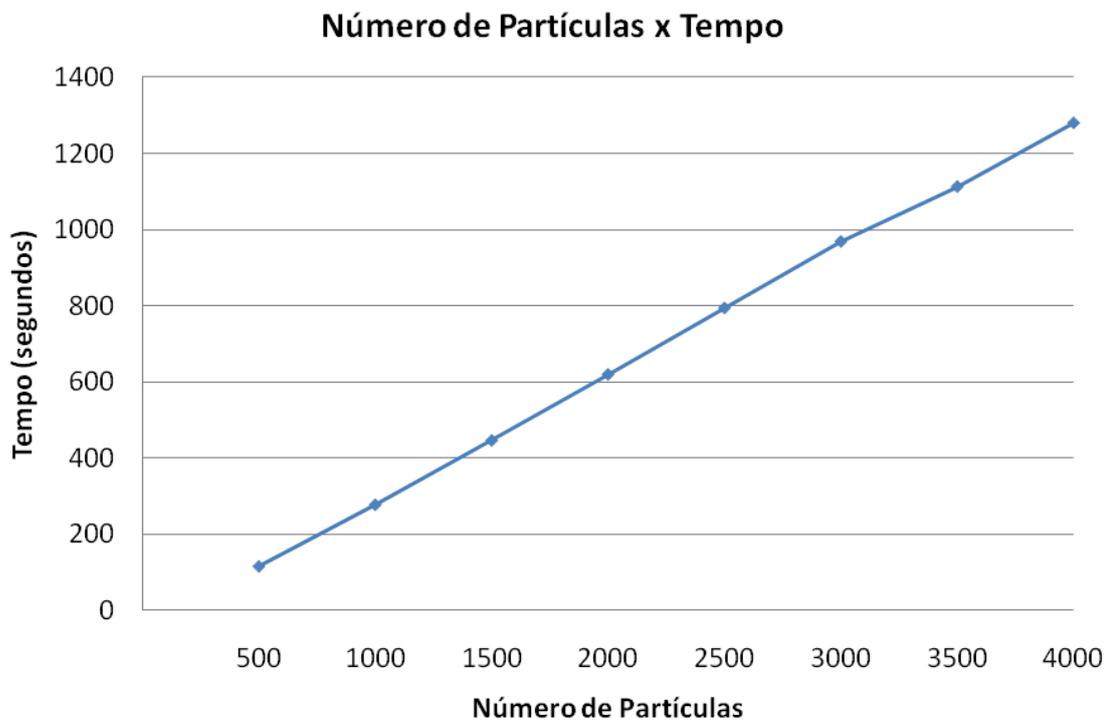


Figura 20: *Gráfico: Número de partículas × Tempo*

O gráfico acima corresponde à complexidade do método descrito pelo Algoritmo 3. Como pode ser visto, o método SPH possui uma complexidade linear em relação ao número de partículas utilizadas na simulação. A busca de vizinhos em grade possui complexidade $O(1)$, e a maioria das funções do método realiza cálculos percorrendo a lista de vizinhos obtida. Como procura-se manter um valor constante para a quantidade de vizinhos por partícula (Seção 4.2.1), temos que, à medida que o número de partículas aumenta, o número de vizinhos de cada partícula, que é um valor limitado, exerce pouca influência sobre a complexidade.

O desempenho do método representa uma de suas grandes vantagens: a possibilidade de realizar simulações em tempo real, devido à sua baixa complexidade.

6 Conclusão

Nesse trabalho foram apresentados fundamentos de Dinâmica dos Fluidos, ilustrando desde os princípios físicos básicos de conservação e como esses princípios acarretaram na elaboração das equações de Navier-Stokes. Foi apresentado o método *Smoothed Particle Hydrodynamics*, um método numérico que aproxima equações diferenciais parciais a partir de um conjunto de equações diferenciais ordinárias. Esse método foi aplicado para aproximar as equações de Navier-Stokes, e, portanto, foi apresentada uma forma aproximada de descrever o escoamento de um fluido. As aproximações obtidas foram então discretizadas e adaptadas a um modelo computacional.

Foram discutidas algumas das principais estratégias computacionais da literatura e uma aplicação foi desenvolvida a partir do modelo computacional. Observou-se que o método SPH simula com bons resultados fluidos em superfície livre. Contudo, a incompressibilidade não é naturalmente garantida, pois o cálculo da pressão não permite tamanho controle. As condições de contorno são um ponto delicado que introduz discontinuidades no sistema. Para que este se mantenha estável perante tais condições, o passo de tempo Δt deve assumir valores pequenos.

Um dos aspectos mais sutis no desenvolvimento desse trabalho foi o ajuste de parâmetros: existem muitos parâmetros envolvidos na simulação, e muitas vezes o sistema todo pode se tornar instável devido a um parâmetro inadequado. A velocidade do som (Seção 4.2.2) e o comprimento suave (Seção 4.2.1) foram os parâmetros que mais necessitaram de cuidado. O primeiro exerce forte influência sobre o passo de tempo utilizado, então a utilização de colunas de água muito altas acabava por aumentar demasiadamente a velocidade do som e, como consequência, o passo de tempo se tornava proibitivamente pequeno. O segundo define quantas partículas são analisadas a cada passo de tempo e, conseqüentemente, influencia diretamente o tempo consumido pela simulação.

Como trabalhos futuros, um caminho natural é a paralelização do SPH utilizando GPGPU's. Além disso, é interessante investigar formas de garantir a incompressibilidade,

como o método da projeção (PAIVA et al., 2009a). Forças interessantes que podem ser incluídas no sistema atual são forças de tensão superficial, que mantêm a superfície do fluido com um aspecto mais contínuo, e forças de flutuação, utilizadas para simulação de gases (KELAGER, 2006).

APÊNDICE A – Alguns conceitos

A.1 Derivada material

Seja \boldsymbol{x} a posição do elemento de fluido, t um instante de tempo, e q uma quantidade física qualquer (pressão, temperatura etc). A função $q(\boldsymbol{x}, t)$ retorna o valor de q em um elemento de fluido na posição \boldsymbol{x} no instante t .

A *Derivada Material* é uma forma de descrever a variação de q ao longo do tempo e ao longo do espaço em um elemento de fluido.

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

Essa derivada é muito utilizada em formulações lagrangianas, por se adequar perfeitamente às partículas, que variam no tempo e no espaço. O primeiro termo, $\frac{\partial q}{\partial t}$, é responsável por avaliar o quão rápido a função q está variando em um ponto fixo do espaço.

Já o segundo termo, $\boldsymbol{v} \cdot \nabla q$, avalia o comportamento dessa função q em relação à posição, por considerar a variação de posição do elemento $\frac{d\boldsymbol{x}}{dt} = \boldsymbol{v}$ e o gradiente da função q no espaço.

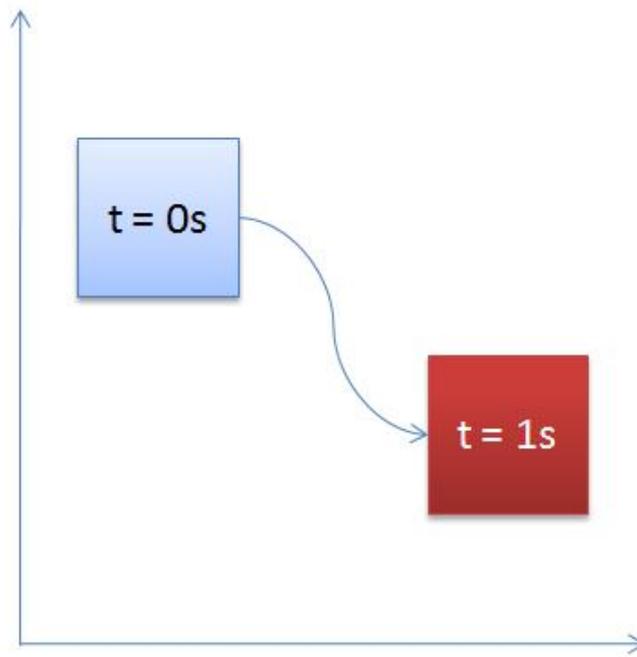


Figura 21: *Derivada material: descreve como uma grandeza varia no tempo e no espaço.*

A.2 Divergente da velocidade

O divergente da velocidade $\nabla \cdot \mathbf{v}$ pode ser formulado a partir de um volume de controle finito V (Seção 2.3.1). Ele está relacionado à variação de V . É possível mostrar que

$$\frac{DV}{Dt} = \int_V \nabla \cdot \mathbf{v} dV \quad (\text{A.2})$$

É possível diminuirmos o volume V a tal ponto que o volume de controle se torne um elemento de fluido infinitesimal (Seção 2.3.2). Dessa forma, dado seu novo volume δV :

$$\frac{D\delta V}{Dt} = \int_{\delta V} \nabla \cdot \mathbf{v} dV \quad (\text{A.3})$$

No limite $\delta V \rightarrow 0$, temos que:

$$\frac{D\delta V}{Dt} = (\nabla \cdot \mathbf{v})\delta V, \quad (\text{A.4})$$

ou seja, rearranjando os termos:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{1}{\delta V} \frac{D\delta V}{Dt}, \quad (\text{A.5})$$

Isso nos mostra que o divergente da velocidade representa a variação do volume do elemento de fluido no tempo e no espaço por unidade de volume.

Referências

- BATCHELOR, G. K. *An Introduction to Fluid Dynamics*. [S.l.: s.n.], 2000.
- ERICSON, C. *Real-Time Collision Detection (The Morgan Kaufmann Series in Interactive 3-D Technology)*. [S.l.]: Morgan Kaufmann, 2005. Hardcover. ISBN 1558607323.
- FATTAL, R.; LISCHINSKI, D. Target-driven smoke animation. In: *SIGGRAPH '04: ACM SIGGRAPH 2004 Papers*. New York, NY, USA: ACM, 2004. p. 441–448.
- FERZIGER, J. H.; PERIC, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. 2nd. ed. [S.l.]: Springer, 1999.
- GINGOLD, R. A.; MONAGHAN, J. J. Smoothed particle hydrodynamics - theory and application to non-spherical stars. *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.*, v. 181, p. 375–389, November 1977.
- HU, X. Y.; ADAMS, N. A. A multi-phase sph method for macroscopic and mesoscopic flows. *J. Comput. Phys.*, Academic Press Professional, Inc., San Diego, CA, USA, v. 213, n. 2, p. 844–861, 2006.
- KELAGER, M. Lagrangian fluid dynamics using smoothed particle hydrodynamics. 2006.
- LIU, G. R.; LIU, M. B. *Smoothed particle hydrodynamics: a meshfree particle method*. [S.l.]: World Scientific Publishing, 2003. ISBN 9812384561.
- LIU, M. B.; LIU, G. R.; LAM, K. Y. Constructing smoothing functions in smoothed particle hydrodynamics with applications. *J. Comput. Appl. Math.*, Elsevier Science Publishers B. V., Amsterdam, The Netherlands, The Netherlands, v. 155, n. 2, p. 263–284, 2003.
- LIU, M. B. et al. Computer simulation of the high explosive explosion using smoothed particle hydrodynamics methodology. *Computers & Fluids*, v. 32, n. 2, p. 305–322, 2003.
- LIU, W.; CHEN, Y. Reproducing kernel particle methods. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 20, p. 1081–1106, 1995.
- LUCY, L. B. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *Astron. J.*, v. 82, p. 1013–1024, December 1977.
- MONAGHAN, J. J. Simulating free surface flows with sph. *J. Comput. Phys.*, Academic Press Professional, Inc., San Diego, CA, USA, v. 110, n. 2, p. 399–406, 1994.

- MÜLLER, M.; CHARYPAR, D.; GROSS, M. Particle-based fluid simulation for interactive applications. In: *SCA '03: Proceedings of the 2003 ACM SIGGRAPH/Eurographics symposium on Computer animation*. Aire-la-Ville, Switzerland, Switzerland: Eurographics Association, 2003. p. 154–159.
- PAIVA, A. *Uma abordagem lagrangeana para simulação de escoamentos de fluidos viscoplásticos e multifásicos*. Tese (Doutorado) — PUC-Rio, 2007.
- PAIVA, A. et al. *Meshless Fluid Simulation: introduction to SPH methods*. Rio de Janeiro: IMPA, 2009.
- PAIVA, A. et al. Fluid-based hatching for tone mapping in line illustrations. *Vis. Comput.*, Springer-Verlag New York, Inc., Secaucus, NJ, USA, v. 25, n. 5-7, p. 519–527, 2009.
- PETRILA, T.; TRIF, D. *Basics of Fluid Mechanics and Introduction to Computational Fluid Dynamics*. [S.l.]: Springer, 2004.
- STAM, J. Stable fluids. In: ROCKWOOD, A. (Ed.). *Siggraph 1999, Computer Graphics Proceedings*. Los Angeles: Addison Wesley Longman, 1999. p. 121–128.
- VILLAGGIO; PIERO. Darrigol, olivier-worlds of flow. a history of hydrodynamics from the bernoullis to prandtl: Oxford university press, oxford, 2005 xiv, 356 p. 35.00;. *Meccanica*, Springer, v. 42, n. 1, p. 107–108, February 2007.