

IMPLEMENTAÇÃO DO MÉTODO SMOOTHED PARTICLE HYDRODYNAMICS PARA MODELAGEM DE ESCOAMENTO DE FLUIDO INTERAGINDO COM ESTRUTURA

E.A. Patino-Narino^{1*} and L.O.S Ferreira²

Department of Computational Mechanics
Faculty of Mechanics Engineering
University of Campinas (Unicamp)
Rua Mendeleev 200, 13083-860, Campinas-SP, Brazil
1: e-mail: eapatino@fem.unicamp.br
2: e-mail: lotavio@fem.unicamp.br
web: <http://www.fem.unicamp.br/lotavio/>

Palavras chave: Smoothed Particle Hydrodynamics, Meshfree Methods, Fluid-Structure Modeling.

Resumo. *Apesar de seu êxito, os métodos baseados em malha apresentam dificuldades que limitam sua aplicação em vários tipos de problemas complexos tais como os de superfícies livres, fronteiras deformáveis, interfaces móveis e deformações extremamente grandes. Além disso, há dificuldade em tempo e custo computacional para fazer uma malha de qualidade para geometrias complexas.*

Atualmente, tem-se desenvolvido novas implementações numéricas, sendo uma das mais promissoras a baseada em métodos de partículas sem malha, em particular o método Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH), que é amplamente aplicado em mecânica dos sólidos e fluidos, em problemas nos quais os métodos baseados em malha apresentam problemas. Desta forma, o principal objetivo deste trabalho é o aprimoramento da implementação e desenvolvimento da SPH na parte de formulação, modelagem fluido-estrutura e condições de fronteira. Foi desenvolvido um código próprio em SPH na linguagem C/C++. Resultados promissórios, em exemplos referenciados comumente na literatura como "Shear Driven Cavity" e "Dam Break".

Neste trabalho, apresentam-se aplicações para a solução de um fluido sob uma geometria definida, em condições de temperatura, velocidade e deslocamento variável usando uma formulação acoplada que emprega as equações conservativas de momento, massa, e energia, e uma equação constitutiva. Realiza-se a comparação com a literatura de problemas experimentais e de outros modelos, com bom resultados de nosso modelo proposto.

1 Introdução

A simulação computacional tornou-se uma importante ferramenta para solucionar problemas em engenharia e ciências [1]. Testando e examinando as teorias, proporcionando uma complexidade física significativa, e ajudando na interpretação e até mesmo na descoberta de novos fenômenos.

Apesar de seu êxito, os métodos basados em malha apresentam dificuldades que limitam sua aplicação em vários tipos de problemas complexos tais como os de superfícies livres, fronteiras deformáveis, interfaces móveis e deformações extremamente grandes. Além disso, há dificuldade em tempo e custo computacional para fazer uma malha de qualidade para geometrias complexas. Durante os últimos 15 anos, vários novos métodos de simulação sem malha, baseados em partículas, foram objeto de grande atenção [2–4], pois podem fornecer soluções para os problemas de fluxo acima mencionados. Entre eles estão principalmente os recentes desenvolvimentos em *Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)* [1], os *Lattice gas methods (LGM)* [5], *Dissipative Particle Dynamics (DPD)* [6], *Moving Least Square (MLS)* [7], *Moving Least Square Reproducing Kernel Interpolant (MLSRK)* [2, 8] e *Discrete Element Method (DEM)* [9].

Um método sem malha baseado em partículas, que é bem-sucedido nas simulações de problemas com fluidos, é o *(SPH)* [10]. Este foi usado em suas origens em problemas de Astrofísica [11], sendo a metodologia básica do método *SPH* proposta inicialmente por Lucy [12] e, Gingold e Monaghan em 1982 [13]. Atualmente, além dos problemas de astrofísica, é aplicada com êxito em problemas variados de *CFD* [14, 15] e mecânica de sólidos [16, 17]. No *SPH* o fluido é representado por um grupo de partículas que interagem entre elas. As equações de Navier-Stokes são discretizadas e resolvidas nas posições de tais partículas usando um polinômio de interpolação conhecido como *kernel*. Além de ser um modelo lagrangeano e não ser preciso definir uma malha entre suas partículas, é possível aplicar de forma natural as condições de fronteira, como superfícies livres [18], interface entre fluidos [19] e paredes deformáveis [20].

Portanto, as características que tornam ao *SPH* um tema de pesquisa de interesse em mecânica computacional, e vantajoso sobre os métodos tradicionais de malha são [4]:

- É mais adequado para solucionar problemas com superfícies livres, fronteiras deformáveis, interfaces móveis e altas deformações que os métodos tradicionais de malha.
- Por ser o método de partículas sem malha mais antigo, seu desenvolvimento está mais maduro. Devido ao contínuo aprimoramento e desenvolvimento, a precisão, estabilidade e adaptabilidade tem atingido níveis aceitáveis para uso em um grande número de problemas práticos, desde micro-escala a macro-escala, e de sistemas discretos a sistemas contínuos.

- Computacionalmente por ser um método sem malha, o armazenamento das propriedades do modelo é menor. Isto ocorre porque armazena nas posições das partículas em vez de armazenar cada ponto do espaço como acontece com os métodos com malha. Assim, faz os cálculos somente quando são necessários e facilita o uso das técnicas de programação massivamente paralela [15].

O principal objetivo deste trabalho é apresentar as implementações de métodos sem malha de partículas para a simulação de problemas de fluido. Usou-se a aproximação *SPH* na parte de formulação, modelagem fluido-estrutura, condições de fronteira e aplicação de estratégias de programação. Dessa forma, desenvolveu um código próprio em *SPH* no linguagem *C/C++* na perspectiva de ser acrescentado com a aplicação dos recursos de *CUDA C/C++* para uso de *GPGPU*. Utilizou-se o código *SPH* em exemplos referenciados comumente na literatura como *shear Driven Cavity*, *Vortex spin-down* e *Dam Break*.

2 Implementação de simulador

Usou-se a aproximação *SPH* na parte de formulação e programação do simulador para a modelagem fluido-estrutura e condições de fronteira. Dessa forma, desenvolveu um código próprio em *SPH* em linguagem *C/C++*, para a simulação de fluidos em iteração com estrutura.

2.1 Método de *SPH*

O método *SPH* foi desenvolvido originalmente para problemas de hidrodinâmica em que as equações diferenciais parciais estão em uma *formulação forte* para as variáveis como densidade, velocidade e energia [21]. Basicamente se tem dois passos para a obtenção de uma formulação *SPH*. O primeiro passo é representar uma função ou sua derivada de forma contínua como a representação de uma integral, chamando esta etapa como *Aproximação de função por Kernel* [1]. Esta aproximação baseia-se na avaliação da função de peso e sua derivada, função conhecida em *SPH* como *Função de Suave do Kernel* [22]. O segundo passo refere-se geralmente como *Aproximação por Partículas*. Neste passo o domínio computacional é discretizado empregando a representação de um conjunto de partículas distribuídas que representam a configuração inicial do problema [1, 21]. Depois desta discretização, as variáveis em uma partícula são aproximadas pela soma dos valores sobre as partículas vizinhas mais próximas.

2.2 Aproximação de função por Kernel

A aproximação por Kernel implica na representação de uma função e suas derivadas através de uma função suave (*FS*) (conhecida também como Kernel, Kernel suavizada ou função de peso [3, 10]). Para a aproximação utiliza-se a identidade da Equação 1, sendo f a função do vetor posição \mathbf{x} , Ω o domínio ou volume da integral que contem \mathbf{x} , \mathbf{x}' a posição vetorial de qualquer outro ponto definido dentro de Ω e $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ a função delta

de *Dirac* definida na Equação 2.

$$f(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}' \quad (1)$$

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \begin{cases} 1 & \mathbf{x} = \mathbf{x}' \\ 0 & \mathbf{x} \neq \mathbf{x}' \end{cases} \quad (2)$$

A Equação 1 indica que uma função pode ser representada de uma forma integral [11]. Considerando que a função de delta *Dirac* é usada, a representação da integral 2 é exata, se e somente se f for definida e contínua em Ω [3].

Porém, o delta de *Dirac* é uma função generalizada que carece de propriedades de continuidade e diferenciabilidade [1], e não pode ser empregada para modelos discretizados numericamente [21]. Portanto, para conservar as propriedades desejadas da função de *Dirac*, o a delta $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ é substituído por uma *FS* $W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)$ dependente da distância entre o elemento localizado em \mathbf{x} e qualquer outro elemento localizado em \mathbf{x} , imitando as características fundamentais da função delta *Dirac*. Assim, a *Aproximação por Kernel* de $f(\mathbf{x})$ se torna a Equação 3.

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \quad (3)$$

Na Equação 3, h é o comprimento suavizado que define a área efetiva da *FS* $W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)$, e os colchetes $\langle \rangle$ indicam a *aproximação por Kernel* [23]. Desta forma, embora $W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)$ não seja a função de *Dirac*, a representação da integral em 3, excetuando casos especiais será uma aproximação [1, 21].

2.3 Aproximação das derivadas por Kernel

Através do uso da equação 4, pode-se achar uma aproximação para a divergência da função $f(\mathbf{x})$ inserindo a Equação 3 no operador $\nabla \cdot f(\mathbf{x})$.

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} \nabla \cdot f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \quad (4)$$

Desta forma, a divergência na integral 4 é modificada com respeito ao primeiro termo como na Equação 5.

$$\nabla \cdot f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) = \nabla \cdot (f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)) - f(\mathbf{x}') \nabla \cdot W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) \quad (5)$$

Usando a Equação 5 em 4, obtém-se a Equação 6.

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} [\nabla \cdot (f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)) - f(\mathbf{x}') \nabla \cdot W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] d\mathbf{x}' \quad (6)$$

Na primeira integral no lado direito da Equação 6 emprega-se o *Teorema da Divergência* [1] para transformá-la em uma integral sobre a superfície S do domínio de integração Ω , como na Equação 7, sendo \mathbf{n} o vetor normal unitário sobre S .

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle = \int_S f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) \cdot \mathbf{n} dS - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \nabla \cdot W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \quad (7)$$

Por FS ser definida pela propriedade de *Supporte Compacto*, a integral na superfície de $W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)$ na Equação 7 do lado direito deverá tender a zero. Portanto, a *aproximação de Kernel* pode ser formulada como a Equação 8 [24].

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle = - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \nabla \cdot W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \quad (8)$$

2.4 Aproximação por partícula

No método *SPH* o sistema inteiro é representado por um número finito de partículas que transformam a massa e ocupam um espaço individual [21]. A representação *SPH* das integrais na *aproximação por kernel* (nas Equações 3 e 8) torna-se, na forma discreta, em um somatória sobre todas as partículas no *domínio de suporte*. Assim, o processo de discretização de somatória de partículas é conhecido comumente na literatura de *SPH* como *aproximação por partículas* [1, 23].

O volume infinitesimal $d\mathbf{x}'$ nas integrais das Equações 3 e 8 é substituído pelo volume finito da partícula j^{th} que identificaremos como ΔV_j , este se relaciona com a massa (m_j) como a Equação 9.

$$\Delta V_j = \frac{m_j}{\rho_j} \quad (9)$$

Para a Equação 9 ρ_j é a densidade da partícula j (para $j = 1, 2, 3 \dots N$, onde N é igual ao número de partículas dentro do *domínio de suporte* da partícula i).

A *Aproximação de Kernel* representada na Equação 3 pode ser formulada usando uma discretização por *Aproximação por Partícula* como na Equação 10 [21].

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) \quad (10)$$

Deste modo, a *Aproximação por Partícula* para uma função na partícula i pode finalmente ser formulada como na Equação 11.

$$\langle f(\mathbf{x}_i) \rangle = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) W_{ij} \quad (11)$$

Sendo,

$$W_{ij} = W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) \quad (12)$$

A Equação 11 indica que o valor de uma função na partícula i é a aproximação média dos valores das funções em todas as partículas no *domínio de suporte* de i ponderada pela *FS*. Mantendo os mesmos princípios para aproximação da função derivada na Equação 8, obtemos a discretização como na Equação 13.

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle = - \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) \cdot \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) \quad (13)$$

Sendo o gradiente ∇W da Equação 13 calculado com respeito à partícula j . Assim, a *Aproximação por Partícula* para uma função na partícula i pode finalmente formular-se como na Equação 14.

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle = - \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) \cdot \nabla_j W_{ij} \quad (14)$$

Para a Equação 14 o gradiente ∇_j em coordenadas cartesianas é igual ao da Equação 15.

$$\nabla_j = \frac{\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|} \quad (15)$$

A Equação 14 indica que os valores da divergência de uma função na partícula i é a aproximação média dos valores da divergência das funções em todas as partículas no *domínio de suporte* de i ponderada pela *FS*.

Além disso, para a aproximação da derivada de uma função, nos casos que se define em um sistema cartesiano, pode-se transformar o gradiente na partícula j (∇_j) em função do gradiente na partícula i (∇_i) como na Equação 16. Assim, substituindo a Equação 16 na Equação 13, mudando o gradiente ∇_j , obtém-se a Equação 17, onde o sinal negativo é descartado.

$$\nabla_j = \frac{\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|} = - \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|} = -\nabla_i \quad (16)$$

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}_i) \rangle = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) \cdot \nabla_i W_{ij} \quad (17)$$

2.5 Algumas técnicas de derivação para a formulação *SPH*

A primeira aproximação do método *SPH* sem nenhum tratamento especial seria usando diretamente a Equação 17, mas esta aproximação geralmente não é exata e reduz com frequência a propriedade de conservação do sistema [2, 25]. Entretanto, usando esta aproximação e utilizando a identidade do operador divergencia se obtém a Equação 18.

$$\nabla \cdot f(\mathbf{x})\mathbf{1} = \nabla \cdot (f(\mathbf{x})\mathbf{1}) - f(\mathbf{x}) \cdot \nabla \mathbf{1} \quad (18)$$

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}_i) \rangle = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) \cdot \nabla_i W_{ij} - f(\mathbf{x}_i) \cdot \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} \nabla_i W_{ij}$$

Além disso, empregando a condição de *normalização* da *FS* [2, 25], o lado direita da Equação 18 será nulo, como é mostrado na Equação 19.

$$\sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} \nabla_i W_{ij} = \nabla_i \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} W_{ij} = \nabla_i(\mathbf{1}) = 0 \quad (19)$$

Contudo, a aproximação através da identidade da Equação 18 apresenta bons resultados em comparação com a forma usada na Equação 17 [10, 21, 21]. Desta maneira, a *aproximação por partícula* da Equação 18 fica como a Equação 20.

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}_i) \rangle = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} [f(\mathbf{x}_j) - f(\mathbf{x}_i)] \cdot \nabla_i W_{ij} \quad (20)$$

O melhor comportamento da Equação 20 acontece quando alguma partícula está com seu *domínio de suporte* parcialmente cheio de partículas vizinhas, tornando a parte nula $-f(\mathbf{x}_i) \cdot \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} \nabla_i W_{ij}$ um complemento para a integração do domínio total da função discreta.

Outra forma de discretizar as *EDP* é usando as identidades definidas nas Equações 21 e 22, o que permite uma transformação mais adequada de derivadas para vários casos [10, 24] em comparação com as aproximações das Equações 17 e 20.

$$\nabla \cdot f(\mathbf{x}) = \frac{1}{\rho} [\nabla \cdot (\rho f(\mathbf{x})) - f(\mathbf{x}) \cdot \nabla \rho] \quad (21)$$

$$\nabla \cdot f(\mathbf{x}) = \rho \left[\nabla \cdot \left(\frac{f(\mathbf{x})}{\rho} \right) - \frac{f(\mathbf{x})}{\rho} \cdot \nabla \rho \right] \quad (22)$$

As equações 21 e 22 são discretizadas usando a Equação 17, e empregando uma metodologia similar à realizada para a *Aproximação por Partículas*, obtém-se as equações 23 e 24. Estas formulações são as mais usadas para discretizar as equações de continuidade em fluidos e sólidos [10, 26].

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}_i) \rangle = \frac{1}{\rho_i} \sum_{j=1}^N m_j [f(\mathbf{x}_j) - f(\mathbf{x}_i)] \cdot \nabla_i W_{ij} \quad (23)$$

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}_i) \rangle = \rho_i \sum_{j=1}^N m_j \left[\frac{f(\mathbf{x}_j)}{\rho_j^2} - \frac{f(\mathbf{x}_i)}{\rho_i^2} \right] \cdot \nabla_i W_{ij} \quad (24)$$

2.6 Equações de conservação usando *SPH*

O método *SPH* não é somente um sistema de interpolação, mas também proporciona um conjunto de formas de aproximação por meio de sua discretização para equações da mecânica de meios contínuos [10].

Conservação de massa

Para a conservação da massa usa-se a Equação 25, que discretiza-se usando o critério de aproximação da Equação 20. Desta forma, a densidade é discretizada pelo método *SPH* como a Equação 26.

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho(\nabla \cdot \mathbf{v}) \quad (25)$$

$$\left\langle \frac{d\rho_i}{dt} \right\rangle = \rho_i \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \cdot \nabla W_{ij} \quad (26)$$

Para as Equações 25 e 26, ρ a densidade, \mathbf{v} o vetor de velocidades (onde define-se $\mathbf{v} = d\mathbf{x}/dt$) e t é o tempo. A Equação 26 é sem duvida a mais usada para a continuidade de massa de problemas em mecânica de sólidos e fluidos [14, 27].

No entanto, a variável densidade pode ser discretizada como uma função, utilizando a Equação 10, assim a função densidade ficará como a Equação 27. Esse tipo de discretização para a massa é realizada quando os problemas não apresentam mudanças consideráveis na densidade e o material é considerado quase-incompressível [11, 26].

$$\langle \rho_i \rangle = \sum_{j=1}^N m_j W_{ij} \quad (27)$$

Equação de conservação de momento

A equação de conservação de momento nos meios contínuos é a Equação 28, sendo a Equação 29 uma alternativa, que é a formulação mais usada nas aplicações em *SPH* [14, 28].

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{1}{\rho} (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) \quad (28)$$

$$\left\langle \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} \right\rangle = \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{\boldsymbol{\sigma}_j}{\rho_j^2} + \frac{\boldsymbol{\sigma}_i}{\rho_i^2} \right) \cdot \nabla W_{ij} + \mathbf{F} \quad (29)$$

Assim, para as Equações 28 e 29, $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor de esforços e \mathbf{F} é o campo de forças externas.

Equação de conservação de energia

A energia relacionada a cada partícula é calculada usando a Equação 30, utilizando a *Aproximação por Partícula* para a Equação 24. Conseguir-se a discretização da energia usando *SPH* como na Equação 31, sendo uma formulação que reúne as discretizações mais usadas nas aplicações em *SPH* [2, 3].

$$\frac{dE}{dt} = \frac{1}{\rho} \boldsymbol{\sigma} : \nabla^s \mathbf{v} - \dot{Q} = \frac{1}{\rho} \boldsymbol{\sigma} : \left[\frac{1}{2} (\mathbf{v} \otimes \nabla + \nabla \otimes \mathbf{v}) \right] - \dot{Q} \quad (30)$$

$$\left\langle \frac{dE_i}{dt} \right\rangle = \frac{1}{4} \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{\sigma_j}{\rho_j^2} + \frac{\sigma_i}{\rho_i^2} \right) : [(\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) \otimes \nabla W_{ij} + \nabla W_{ij} \otimes (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i)] + \dot{Q}_{ij} \quad (31)$$

Para as equações 30 e 31, E é a energia, \dot{Q} é o fluxo de calor e o operador ∇^s é o gradiente simétrico (estabelecido como $\nabla^s(\bullet) = \frac{1}{2}[(\bullet) \otimes \nabla + \nabla \otimes (\bullet)]$).

Para o termo de fluxo de calor entre as partículas, utiliza-se a forma convectiva para a equação de condutividade de calor dada como a Equação 32 [10]. Desta maneira, a discretização que se emprega neste trabalho é a proposta por P.W. Cleary e J.J Monaghan no ano de 1999 [29], que se apresenta na Equação 33. Esta formulação mostra bons resultados em diferentes aplicações e é frequentemente usada [10, 11].

$$\dot{Q} = \frac{1}{\rho} \nabla (K \nabla T) \quad (32)$$

$$\langle \dot{Q}_{ij} \rangle = \sum_{j=1}^N 4 \frac{m_j}{\rho_i \rho_j} \left(\frac{K_i K_j}{K_i + K_j} \right) \left(\frac{T_i - T_j}{\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij}} \right) (\mathbf{r}_{ij} \cdot \nabla W_{ij}) \quad (33)$$

$$\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j \quad (34)$$

Portanto, nas Equações 32 e 33, K é a condutividade térmica do material, \mathbf{r}_{ij} é o vetor distancia entre partículas (Equação 34) e T é a temperatura.

Tensor de esforços em fluidos

O tensor esforços σ é uma variável muito importante nas equações de continuidade. Assim, σ é determinado por seu componente esférico (τ) e deviatórico (P) como na equação 35 [3, 10].

$$\sigma = -P\mathbf{1} + \tau \quad (35)$$

Desta maneira, para a Equação 35 o tensor σ , está definido pelo tensor de esforços viscosos τ (componente deviatórico) e P a pressão (componente esférica). Portanto, o tensor τ está em função da velocidade de deformação deviatórica $\dot{\tilde{\epsilon}}$ e a viscosidade dinâmica μ_f como mostra-se na Equação 36.

$$\tau = \mu_f \dot{\tilde{\epsilon}} \quad (36)$$

Equação de estado

O tensor σ da Equação 35 é usado nas Equações de continuidade 29 e 31. Este esforço é composto por um termo de esforço esférico definido pela pressão. Foram utilizadas as equações para fluidos com baixo Reynolds usadas por Morris [30,31] mostrada na Equação 37 e a equação de *Tait* [18] para aplicação de fluxo livre mostrada na Equação 38.

$$P = c^2 \rho \quad (37)$$

$$P = B_f \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right] \quad (38)$$

Portanto, para as Equações 37 e 38, c é a velocidade do som, $B_f = \frac{c^2 \rho_0}{\gamma}$, γ é uma constante geralmente com valor igual a 7 e ρ_0 é a densidade inicial de referência do fluido.

2.7 Correções para o método *SPH*

As correções do método *SPH* são usadas para melhorar primordialmente erros de aproximação no comportamento da *FS* (W_{ij}), quando alguma das condições de *SPH* não são completamente satisfeitas [11], principalmente devido à natureza do Kernel [22], quando o *domínio de suporte* não está completamente cheio de partículas, ou não se atingem as condições de *Normalização* e de *Domínio compacto* [4].

As correções mais frequentes são as correções no movimento da partícula no tempo [32], re-inicialização da densidade [4, 33] e re-inicialização da função gradiente no Kernel [34] e tratamento das tensões desestabilizadoras [16, 28].

Correção de pressão usando Viscosidade Artificial

A correção por viscosidade artificial é usada para compensar as oscilações não físicas nas respostas numéricas da pressão, aprimorando a difusão nos fluidos e a dissipação de energia [4, 21, 28]. É muito utilizada por sua facilidade em problemas com fluidos [21, 35] e sólidos [26]. Pode-se considerar a primeira aproximação para as tensões desestabilizadoras, mas que é usada para outros fins [10, 36].

Correção do movimento nas partículas

Para a correção do movimento nas partículas usa-se a correção proposta por Monaghan, chamada de *XSPH* (1989). O *XSPH* recalcula a velocidade da partícula fazendo uma média entre todas as partículas vizinhas no *domínio de suporte* [4, 35]. Assim, para a Equação 39 e é uma constante entre 0, 25 e 0, 5.

$$\tilde{\mathbf{v}} = \mathbf{v} + e \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) W_{ij} \quad (39)$$

A velocidade recalculada $\tilde{\mathbf{v}}$ utilizando *XSPH* é empregada para problemas que apresentam altas velocidades de deformação tanto para fluidos [37] como para sólidos [27, 38].

Re-inicialização da densidade

No método *SPH* o comportamento da variável densidade apresenta grandes oscilações [4]. Portanto, utiliza-se correções para re-inicialização da *FS* para a densidade porque esta é uma parte fundamental da formulação do método como se apresentam acima, e além disso, faz parte das variáveis que compõem o fluido ou solido que será simulado [4]. Para este trabalho se usam dois métodos, *Shepard* [2, 4] e *Moving Least Square (MLS)* [33].

Re-inicialização da função gradiente do kernel

A correção de gradiente do kernel é usada periodicamente para melhorar os gradientes nas equações de continuidade como momento e energia [2]. Neste trabalho a correção é feita a cada 40 passos de tempo. A correção utilizada e talvez a mais conhecida é a proposta por Randles e Libersky (1996) [26], que é muito empregada em problemas com altas deformações [2].

2.8 Condições de fronteira

Para implementar a condição de fronteira de parede sólida, neste trabalho se utiliza o método de partículas "repulsão" [1, 10]. Consiste em colocar na fronteira uma parede de partículas virtuais com as propriedades da condição de fronteira, com uma separação entre elas igual à metade da separação entre partículas reais ($\frac{\Delta x}{2}$). A condição de fronteira de *partículas repulsivas* é usada para evitar que as partículas reais penetrem na fronteira [1, 10]. As duas formas mais populares deste tipo de condição de fronteira são:

A primeira é exercendo uma força de penetração sobre as partículas reais semelhante ao cálculo de forças moleculares como na equação de Lennard-Jones [1, 18]. Na segunda condição de fronteira usando partículas repulsivas é utilizado o método proposto por Monaghan [10, 11], que foi usado neste trabalho. Esta condição de fronteira propõe a função de força $B(r_{ij}^T, r_{ij}^N)$ da Equação 40.

$$B(r_{ij}^N, r_{ij}^T) = \Gamma(r_{ij}^N) \chi(r_{ij}^T) \quad (40)$$

Assim, define-se a componente $\chi(r_{ij}^T)$ da Equação 40 como a Equação 41, onde Δp é o espaçamento entre partículas na fronteira, neste trabalho a metade do espaçamento entre partículas reais ($\Delta p = \frac{\Delta x}{2}$), e r_{ij}^T é a distância tangencial entre a partícula e a fronteira.

$$\chi(r_{ij}^T) = \begin{cases} \left(1 - \frac{r_{ij}^T}{\Delta p}\right) & \text{Se } < \frac{r_0}{r_{ij}} < \Delta x \\ 0 & \text{Caso contrário} \end{cases} \quad (41)$$

O parâmetro $\Gamma(r_{ij}^N)$ da Equação 40 é definido pela Equação 42 que é baseada no gradiente kernel da função *B-Spline*, sendo r_{ij}^N a distância normal, $q_N = \frac{r_{ij}^N}{h}$ e c a velocidade do som. Assim, Γ é a parte na direção normal da força repulsiva.

$$\Gamma(r_{ij}^N) = \frac{0,02c}{r_{ij}^N} \begin{cases} \frac{2}{3} & 0 \leq q_N < \frac{2}{3} \\ -2q_N + \frac{3}{2}q_N^2 & \frac{2}{3} \leq q_N < 1 \\ \frac{1}{2}(2 - q_N)^2 & 1 \leq q_N < 2 \\ 0 & 2 \leq q \end{cases} \quad (42)$$

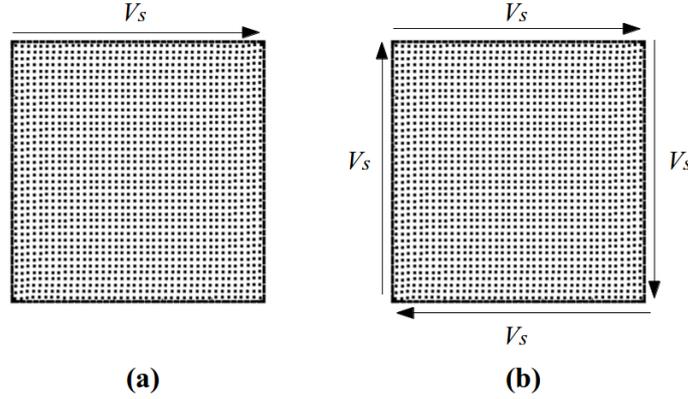


Figura 1: Condições inicial para os problemas *Shear Driven Cavity* e *Vortex spin-down*. (a) *Shear Driven Cavity*, problema com velocidade de corte (V_s) na parede superior de 10^{-3} m/s. (b) *Vortex spin-down*, exemplo para as quatro paredes da fronteira para uma V_s de 10^{-3} m/s.

3 Validação do simulador

Esta parte do trabalho foi desenvolvida para validação do simulador *SPH* usando as equações de continuidade em problemas de mecânica de fluidos, e correções no movimento *XSPH* [32], re-inicialização da densidade *MLS* [4,33] e re-inicialização da função gradiente no Kernel [34]. Assim, apresenta-se os resultados de problemas amplamente referenciados em problemas *CFD* tais como *Shear Driven Cavity* [3,39], *Vortex spin-down* [1,40] e *Dam Break* [3,14,15].

3.1 *Shear Driven Cavity* e *Vortex spin-down*

Para o problema de *Shear Driven Cavity* se empregam os parâmetros que aproximam o comportamento das partículas de um fluido, representado por 1600 partículas em um quadrado de 1x1 mm.

Utiliza-se a Equação de estado de Morris 37, as equações de conservação de densidade (Equação 26), o momento (Equação 29) e a energia (Equação 31). As propriedades iniciais do fluido são: $\rho_0 = 10^3$ kg/m³, $c = 0,01$ m/s, $\mu_f = 0,001$ Pa · s, calor específico $C_v = 4181,3$ J/kg · °C, e $K = 0,58$ W/m · °C.

Os problemas *Shear Driven Cavity* e *Vortex spin-down* foram simulados com base na Fig.1. Na Fig. 1 (a) o *Shear Driven Cavity* e Fig. 1 (b) o *Vortex spin-down*, se apresentam os exemplos onde os casos tem uma velocidade cortante (V_s) nas fronteiras de 10^{-3} m/s. Pretende-se que o fluido atinja um estado estável no fluxo. Na Fig. 2 se mostra o estado estável do problema *Shear Driven Cavity* (Fig. 1 (a)) usando a ferramenta de Paraview de linhas de fluxo, que permite seguir o caminho das partículas no passar do tempo, neste caso de 0,21 s. É evidente a formação do vórtice gerado pelas condição de fronteira, que coincide com as distribuições de outros modelos realizados com

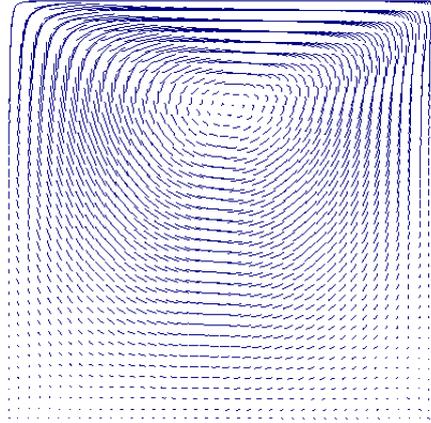


Figura 2: Linhas de fluxo para o problema de *Shear Driven Cavity* (Fig. 1 (a)), para um tempo de 0,21 s.

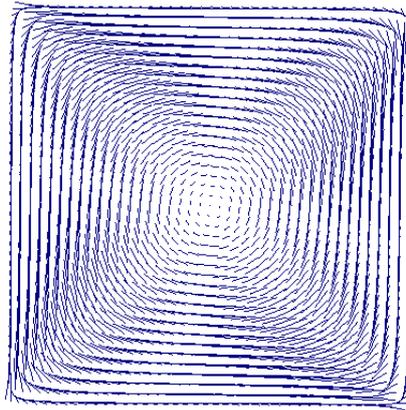


Figura 3: Linhas de fluxo para o problema de *Vortex spin-down* (Fig. 1 (b)), para um tempo de 0,12 s.

SPH [1, 14, 39, 40]. Desta forma, se conseguem resultados acordes com a literatura.

Na Fig. 3 se apresenta a distribuição das linhas de fluxo para um tempo de 0,21 s, para o problema *Vortex spin-down* (Fig. 1 (b)), em que é evidente que um vórtice é formado no meio do quadrado, o que é um comportamento clássico para este tipo de exemplos [23, 40].

Problemas com condução de calor: Usando a mesma geometria e distribuição das partículas usada no problema de *Shear Driven Cavity*, realiza-se a verificação da Equação de condução 32. Assim, dois exemplos com condução de calor foram simulados, segundo as condições da Fig. 4. A Fig. 5 mostra os dois casos para problemas com condução de calor com as condições da Fig. 4, onde se pode perceber a evolução no tempo da condução de calor, sendo coerente com o que se aguarda deste tipo de problema [10].

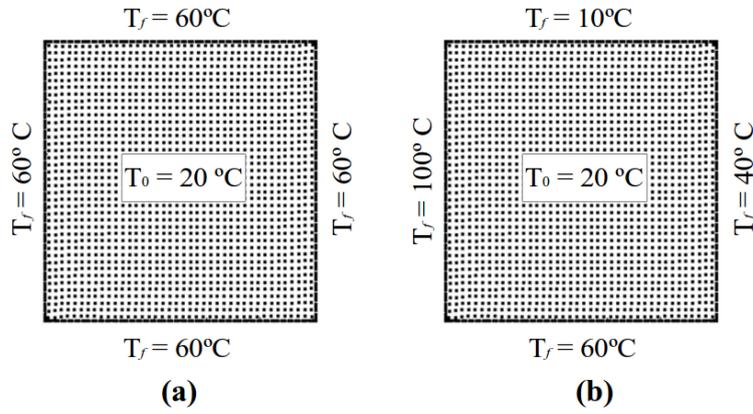


Figura 4: Condições iniciais de temperatura para os problemas com condução. **(a)** Problema onde as paredes das fronteiras tem uma temperatura constante de 60 °C. **(b)** Exemplo onde as fronteiras tem uma temperatura variável.

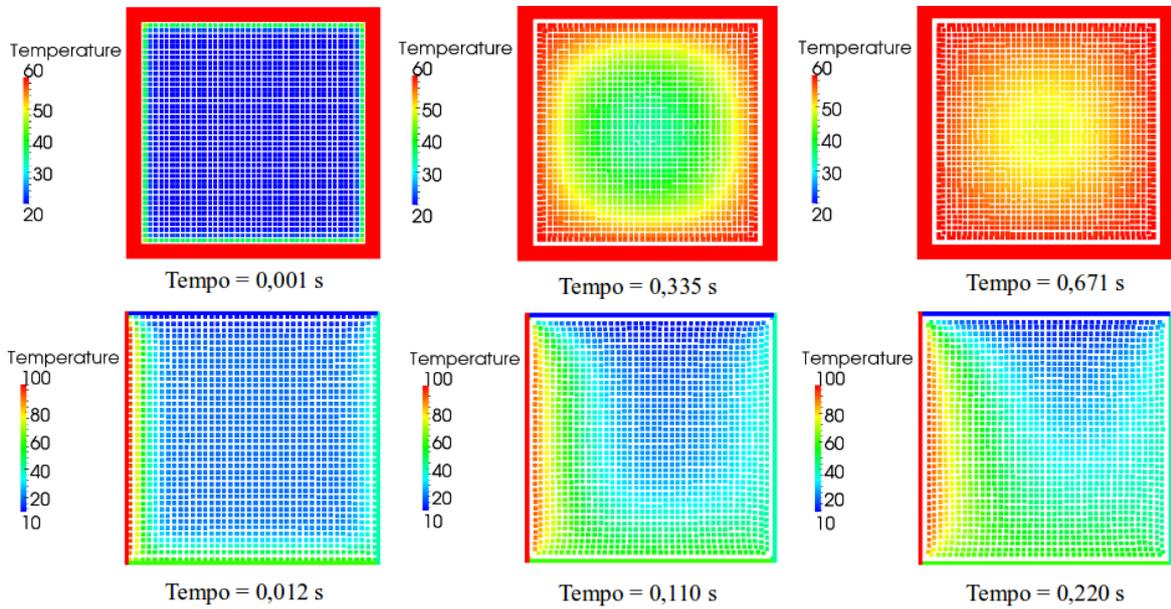


Figura 5: Evolução no temperatura para os problemas com condução de calor.

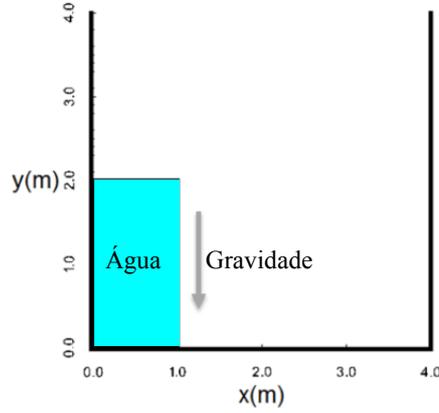


Figura 6: Condições iniciais problema de *Dam Break*.

3.2 *Dam Break*

Para o problema de *Dam Break* se emprega as condições iniciais de uma coluna de 1 x 2 m² para 1700 partículas com propriedades de água em um cubo de 4 x 4 m² como na Fig. 6, onde a gravidade está na direção negativa de y ($g = 9,81 \text{ m/s}^2$), sendo aplicada de forma constante sobre todas as partículas da coluna de água. Usam-se as equações de continuidade e a Equação de estado 38. A densidade inicial dos fluidos é definida pela Equação 43 para adicionar os efeitos iniciais do fluxo de gravidade ao problema.

$$\rho_i = \rho_0 \left(\frac{g(H - y_i)\gamma}{c^2} \right) \quad (43)$$

Para a Equação 43, H é a altura máxima da coluna de água (2 m), $\rho_0 = 10^3 \text{ kg/m}^3$ e y_i é a distância iniciar no eixo y da partícula i^{th} .

Na Fig.7 se observa o valor da velocidade em x das partículas em vários passos de tempo, para um tempo total de 6,2 s. Na Fig.8 se mostra a variável de pressão nas partículas em vários passos de tempo, para um total de 6,2 s. Pode-se notar que as distribuições das variáveis de velocidade e pressão são similares ao encontrado na bibliografia para esses tipos de problemas de *CFD* nos instantes iniciais de simulação [3, 21, 37].

3.3 Conclusões

- Neste trabalho, apresentam-se aplicações para a solução de um fluido sob uma geometria definida, em condições de temperatura, velocidade e deslocamento variável usando uma formulação acoplada que emprega as equações conservativas de momento, massa, e energia, e uma equação constitutiva. Realiza-se a comparação com

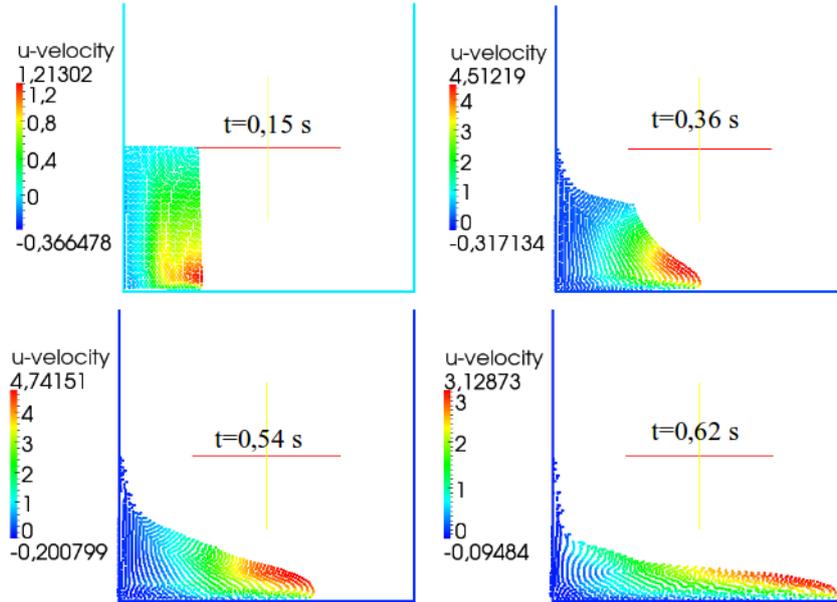


Figura 7: Problema de *Dam Break* para distribuição de velocidade no eixo x nas partículas.

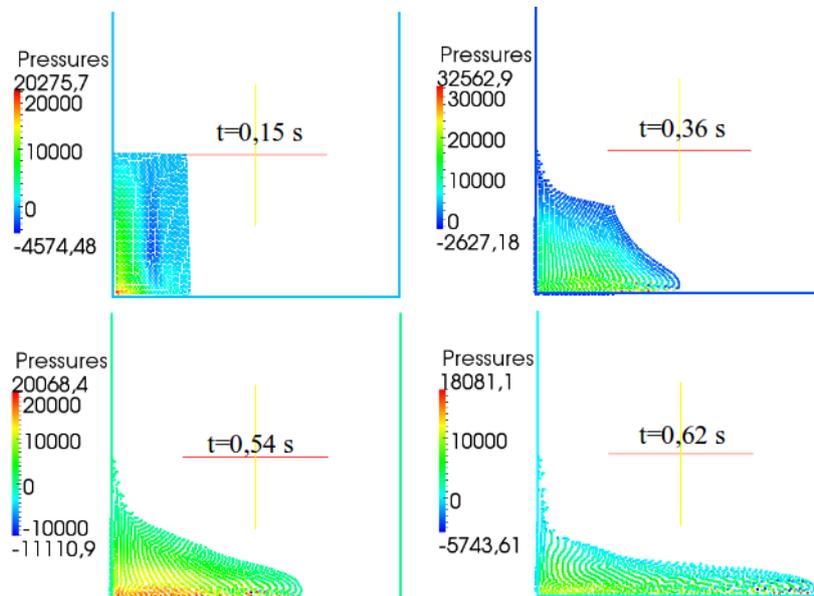


Figura 8: Problema de *Dam Break* para distribuição de pressão nas partículas.

a literatura de problemas experimentais e de outros modelos, com bom resultados de nosso modelo proposto para os exemplos de *Shear Driven Cavity* e *Dam Break*.

- Usou-se a aproximação *SPH* na parte de formulação para as equação de continuidade, condições de fronteira, equação de estado e aplicação de estratégias de programação usadas nos métodos de partículas e se desenvolveu um código próprio de *SPH* no linguagem C/C++.
- Pretende-se aprimorar o código *SPH* para utilizar os recursos de CUDA C/C++ para uso de *GPGPU*, visando melhorar os tempos de processamento.

REFERÊNCIAS

- [1] GGR Liu and MB Liu. *Smoothed particle hydrodynamics: a meshfree particle method*. World Scientific Publishing Co., Singapore, 2003.
- [2] S Li and WK Liu. Meshfree Particle Methods. chapter 2, pages 25–67. Springer, New York, 2007.
- [3] GR Liu. *Mesh free methods: moving beyond the finite element method*. CRC Press, Boca Raton, 2009.
- [4] GR Liu and YT Gu. *An introduction to meshfree methods and their programming*. 2005.
- [5] U Frisch, B Hasslacher, and Y Pomeau. Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation. *Physical review letters*, 423:11–12, 1986.
- [6] PJ Hoogerbrugge, J Koelman, Home Search, Collections Journals, About Contact, My Iopscience, and I P Address. Simulating microscopic hydrodynamic phenomena with dissipative particle dynamics. *EPL (Europhysics Letters)*, 155, 2007.
- [7] P Lancaster and K Salkauskas. Surfaces generated by moving least squares methods. *Mathematics of computation*, 37(155):141–158, 1981.
- [8] WK Liu, S Li, and T Belytschko. Moving least-square reproducing kernel method Part II: Fourier analysis. *Computer Methods in Applied Mechanics and . . .*, 7825(96), 1996.
- [9] P.A. Cundall and O.D.L. Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 1(29):47–65, 1979.
- [10] J.J. Monaghan. Smoothed Particle Hydrodynamics and Its Diverse Applications. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 44(1):323–346, January 2012.

- [11] J J Monaghan, Daniel Price, and J J Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics. *Reports on Progress in Physics*, 68(8):1703–1759, August 2005.
- [12] L. B. Lucy. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *The Astronomical Journal*, 82:1013, December 1977.
- [13] R.A Gingold and J.J Monaghan. Kernel estimates as a basis for general particle methods in hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 46(3):429–453, June 1982.
- [14] Moncho Gomez-Gesteira, Benedict D. Rogers, Robert a. Dalrymple, and Alex J.C. Crespo. State-of-the-art of classical SPH for free-surface flows. *Journal of Hydraulic Research*, 48(sup1):6–27, January 2010.
- [15] Alejandro C Crespo, Jose M Dominguez, Anxo Barreiro, Moncho Gómez-Gesteira, and Benedict D Rogers. GPUs, a new tool of acceleration in CFD: efficiency and reliability on smoothed particle hydrodynamics methods. *PloS one*, 6(6):e20685, January 2011.
- [16] JP Gray and JJ Monaghan. Caldera collapse and the generation of waves. *Geochemistry Geophysics Geosystems*, 2003.
- [17] Songwon Seo and Oakkey Min. Axisymmetric SPH simulation of elasto-plastic contact in the low velocity impact. *Computer Physics Communications*, 175(9):583–603, November 2006.
- [18] J.J. Monaghan. Simulating Free Surface Flows with SPH. *Journal of Computational Physics*, 110(2):399–406, February 1994.
- [19] Leonardo Di G. Sigalotti and Hender López. Adaptive kernel estimation and SPH tensile instability. *Computers & Mathematics with Applications*, 55(1):23–50, January 2008.
- [20] Matthias Müller, Simon Schirm, Matthias Teschner, Bruno Heidelberger, and Markus Gross. Interaction of fluids with deformable solids. *Computer Animation and Virtual Worlds*, 15(34):159–171, July 2004.
- [21] M. B. Liu and G. R. Liu. Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH): an Overview and Recent Developments. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 17(1):25–76, February 2010.
- [22] Jin Hongbin and Ding Xin. On criterions for smoothed particle hydrodynamics kernels in stable field. *Journal of Computational Physics*, 202(2):699–709, January 2005.

- [23] David A. Fulk. *A numerical analysis of smoothed particle hydrodynamics*. PhD thesis, Air University, September 1994.
- [24] R. Vignjevic, J. Campbell, J. Jaric, and S. Powell. Derivation of SPH equations in a moving referential coordinate system. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198(30-32):2403–2411, June 2009.
- [25] J. Monaghan. Smoothed Particle Hydrodynamics. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 30(1):543–574, January 1992.
- [26] P.W. Randles and L.D. Libersky. Smoothed Particle Hydrodynamics: Some recent improvements and applications. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 139(1-4):375–408, December 1996.
- [27] W. Benz and E. Asphaug. Simulations of brittle solids using smooth particle hydrodynamics. *Computer Physics Communications*, 87(1-2):253–265, May 1995.
- [28] J.J. Monaghan. SPH without a Tensile Instability. *Journal of Computational Physics*, 159(2):290–311, April 2000.
- [29] Paul W Cleary and Joseph J Monaghan. Conduction Modelling Using Smoothed Particle Hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 148(1):227–264, January 1999.
- [30] Joseph P. Morris, Patrick J. Fox, and Yi Zhu. Modeling Low Reynolds Number Incompressible Flows Using SPH. *Journal of Computational Physics*, 136(1):214–226, September 1997.
- [31] Shaofan Li and Wing Kam Liu. Meshfree and particle methods and their applications. *Applied Mechanics Reviews*, 55(1):1, 2002.
- [32] J.J. Monaghan. On the problem of penetration in particle methods. *Journal of Computational Physics*, 82(1):1–15, May 1989.
- [33] Gary A. Dilts. Moving-least-squares-particle hydrodynamics I. Consistency and stability. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 44(8):1115–1155, March 1999.
- [34] Gordon R. Johnson, Robert A. Stryk, and Stephen R. Beissel. SPH for high velocity impact computations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 139(1-4):347–373, December 1996.
- [35] J. J. Monaghan and A. Kos. Scott Russell’s wave generator. *Physics of Fluids*, 12(3):622, March 2000.

- [36] Gordon R. Johnson. Artificial viscosity effects for SPH impact computations. *International Journal of Impact Engineering*, 18(5):477–488, July 1996.
- [37] J. J. Monaghan and A. Kos. Solitary Waves on a Cretan Beach. *Journal of Waterway, Port, Coastal, and Ocean Engineering*, 125(3):145–155, May 1999.
- [38] J.P. Gray, J.J. Monaghan, and R.P. Swift. SPH elastic dynamics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190(49-50):6641–6662, October 2001.
- [39] Shahab Khorasanizade and Joao M M Sousa. A detailed study of lid-driven cavity flow at moderate Reynolds numbers using Incompressible SPH. (August):653–668, 2014.
- [40] Rui Xu, Peter Stansby, and Dominique Laurence. Accuracy and stability in incompressible SPH (ISPH) based on the projection method and a new approach. *Journal of Computational Physics*, 228(18):6703–6725, October 2009.