César Leonardo Barbosa da Silva

Condições de Contorno em SPH.

Brasil

02 de março de 2017

César Leonardo Barbosa da Silva

Condições de Contorno em SPH.

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, do Departamento de Engenharia Mecânica, do Centro de Tecnologia e Geociências, da Universidade Federal de Pernambuco, como parte dos requisitos para obtenção do grau de Mestre na área de Projetos.

Universidade Federal de Pernambuco

Departamento de Engenharia Mecânica

Programa de Pós-Graduação

Orientador: Prof. Dr. José Maria Barbosa

Brasil

02 de março de 2017

Catalogação na fonte
Bibliotecária Maria Luiza de Moura Ferreira, CRB-4 / 1469

S586c

Silva, César Leonardo B. da.
Condições de Contorno em SPH./ César Leonardo Barbosa da Silva. – 2017
95 folhas, il.

Orientador: Prof. Dr. José Maria Barbosa
Dissertação(Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco. CTG
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, 2017. Inclui Referências.

1. Engenharia Mecânica. 2. Hidrodinâmica. 3. Equação de Euler. 4. Métodos numéricos. 5. Hidrodinâmica da partícula suavizada-SPH. 6. Simulação computacional. I. Barbosa, José Maria (Orientador) . II. Título. III. UFPE.

621 CDD (22. ed.) BCTG/2017-111

César Leonardo Barbosa da Silva

Condições de Contorno em SPH.

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, do Departamento de Engenharia Mecânica, do Centro de Tecnologia e Geociências, da Universidade Federal de Pernambuco, como parte dos requisitos para obtenção do grau de Mestre na área de Projetos.

Aprovada em: 02/03/2017

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. José Maria Barbosa(Orientador)
Universidade Federal de Pernambuco

Dr. José Carlos Charamba Dutra (Examinador Interno)
Universidade Federal de Pernambuco

Dr. Marcone Isidório de Sena Júnior (Examinador Externo)
Universidade de Pernambuco

Brasil
02 de março de 2017

À minha família .

Agradecimentos

Além de agradecer a todas as pessoas que contribuíram direta ou indiretamente para a realização deste trabalho, gostaria de agradecer, em especial:

- À minha família e, em especial, à minha esposa Fernanda pelo apoio e paciência;
- Agradeço aos meus amigos que contribuíram com a pesquisa, seja nos aspectos técnicos, seja com sugestões e críticas: Saulo Melo, Carlos Eduardo, José Augusto -Jamaj-, Clovis Correia, Marcone Sena, Carlos Fernandes;
- Agradeço ao Centro de Tecnologia e Geociências e, em particular, ao Departamento de Engenharia Mecânica;
- Agradeço também ao VOXAR Labs, no CIN-UFPE, em especial aos colegas Mozart William, Caio Brito, André bem como à Dr. Verônica Teichrieb;
- Aos professores do DEMEC-UFPE com os quais tive a oportunidade de fazer várias disciplinas, em especial ao professor Charamba e José Maria.
- A todos os funcionários do DEMEC-UFPE, em especial ao Jorge da secretaria;
- Ao meu orientador Prof. Dr. José Maria;
- A CAPES pelo suporte financeiro.

"Ainda, porém, com cada vez menos paciência,
observo os caracóis em suas corridas;
como sempre, de novo, perdem contra o tempo.:
Mas o tempo não ganha, ele apenas passa."
(Grass, Günter)

Resumo

Nesta dissertação será apresentado o método SPH - Smoothed Particle Hydrodynamics, - em português, Hidrodinâmica da Partícula Suavizada, um método sem malhas baseado em distribuições de partículas. O método foi inicialmente desenvolvido, em 1988, para simulações de sistemas astronômicos, onde as grandezas envolvidas sofrem variações bruscas e e grandes. Seus criadores desejavam um método que fosse fácil de se trabalhar e que, em contrapartida, fornecesse uma precisão coerente. O SPH é muito utilizado em aplicações em sistemas fluidos ou granulares, mas nada impede, e muito tem sido feito, de se aplicar a sistemas sólidos e de alta viscosidade. O SPH, em comparação com, por exemplo, Método do Elemento Finito, apresenta a grande vantagem de não sofrer com as grandes deformaç oes, em virtude de sua natureza particular. Neste trabalho estabeleceremos os fundamentos matemáticos que são a essência método. Serão exibidas algumas de suas aplicações e discutidas as principais condições de contorno utilizadas pelos pesquisadores da área, bem como proposta uma condição funcional que será simulada. Por fim, os resultados serão comparados com alguns outros trabalhos desenvolvidos por outros pesquisadores na área.

Palavras-chaves: Hidrodinâmica. Equação de Euler. Métodos numéricos. Hidrodinâmica da partícula suavizada- SPH. Simulação computacional.

Abstract

The SPH- Smoothed Particle Hydrodynamics-, in portuguese, Hidrodinâmica da Partícula Suavizada, will be presented. It is a meshless method based on particles distributions. The method was initially developed in 1988 for simulations of astronomical systems, where the quantities involved suffer abrupt and large variations. Its creators wanted a method that was easy to work with and, on the counterpart, would give a coherent precision. The SPH is mainly applied to fluid or granular systems but can be applied to solid or high viscous systems. The SPH method in comparison, for example, to Finite Element Method, shows a great advantage once do not have the problem when treating large deformations, in virtue of his particular nature. In this dissertation will be presented the mathematical foundations that are the essence of the method. It will be exhibited some of their applications and some of the major boundary conditions used by the researchers in the subject. It will be also proposed a functional condition to be simulated. Finely, the results will be compared to some other simulations developed by researchers in this area.

Key-words: Hydordynamics. Euler's Equation. Numerical methods. Smoothed particles hydrodynamics- SPH. Computer simulation.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Espaço de configuração de um sistema com dois parâmetros geométricos. Entre todas as trajetórias possíveis, somente uma corresponde, classicamente, à realidade física, para todo intervalo de tempo. 18

Figura 2 – (a) Elemento de volume fixo no espaço por onde o qual o fluido passa. (b) Elemento de volume fluindo ao longo do escoamento com velocidade **v** igual à velocidade do fluxo na vizinhança do ponto. Figura extraída de (NETO, 2007) 31

Figura 3 – Descrição de uma região arbitrária com o estabelecimento de uma malha. 34

Figura 4 – (a) Descrição de uma porção de fluido sem o estabelecimento de uma malha. (b) e (c) Evolução da porção de fluido, sem malha, para diferentes instantes de tempo 34

Figura 5 – O domínio do suporte da função suavizante W e o domínio do problema. O suporte do domínio está localizado dentro do domínio do problema. Assim, o integral de superfície do lado direito da equação (4.14) é nulo 40

Figura 6 – O domínio do suporte da função suavizante W e o domínio do problema. O suporte do domínio se intercepta com o domínio do problema. Assim, a função suavizante W é truncada pelo bordo e o integral de superfície no lado direito da equação (4.14) não se anula. 40

Figura 7 – As aproximações por partículas dentro do suporte do domínio da função suavizante W, para a partícula i. O suporte do domínio é circular de raio kh 41

Figura 8 – As função suavizante e sua primeira derivada usada por Lucy (1977). α_d é $5/4h$, $5/\pi h^2$ e $105/16\pi h^3$ em, uma, duas e três dimensões, respectivamente. 44

Figura 9 – As função suavizante e sua primeira derivada usada por Lucy (1977). α_d é $1/\sqrt{\pi}h$, $1/\pi h^2$ e $1/\pi^{3/2}h^3$ em, uma, duas e três dimensões, respectivamente. 45

Figura 10 – Núcleo spline cúbico e sua primeira derivada. α_d é $1/h$, $15/7\pi h^2$ e $3/2\pi h^3$ em, uma, duas e três dimensões, respectivamente. 46

Figura 11 – Representação da função suavizante $W(|| \mathbf{x} - \mathbf{x}' ||)$ spline cúbica, em que se considerou $\mathbf{x}' = (0, 0)$ 47

Figura 12 – Função Núcleo: partículas fora do raio de influência κh são descartadas. Destaca-se o gráfico do núcleo 1D e de suas derivadas de primeira e segunda ordens. Figura retirada de (NETO, 2007) 48

Figura 13 – Transporte de velocidade. Figura extraida de PYSPH 50

Figura 14 – Dinâmica da colisão de dois anéis elásticos via sph. Figura extraida de PYSPH 50
Figura 15 – Fenômeno da aquaplanagem. Figura retirada da HYDROCEAN SPH-FLOW. 51
Figura 16 – As partículas afastadas (em azul) são partículas de fluido, ao passo que as partículas dispostas ao longo da linha (em vermelho), são as partículas da fronteira (corpo sólido ou parede) 53
Figura 17 – Um variante deste é o Método da Multi-fronteira tangente descrito em M. Yildiz e Suleman (2008), & SPHysics. 55
Figura 18 – Escrever ainda 56
Figura 19 – Escrever ainda 57
Figura 20 – Note que, para um Δx na região de imagem não-nula, a variação da função é grande e as partículas estão distribuídas de forma a deixarem um gap, por onde as partículas de fluido atravessariam. 58
Figura 21 – Preenchimento das regiões com gap. Após o procedimento supracitado as partículas de fluido não atravessam mais a região de fronteira. . . . 59
Figura 22 – Instantâneo da evolução do sistema, $n = 4$. 61
Figura 23 – Instantâneo da evolução do sistema, $n = 4$. 61
Figura 24 – Instantâneo da evolução do sistema, $n = 4$. 62
Figura 25 – Instantâneo da evolução do sistema, $n = 4$. 62
Figura 26 – Instantâneo da evolução do sistema, $n = 4$. 63
Figura 27 – Instantâneo da evolução do sistema, $n = 4$. 63
Figura 28 – Instantâneo da evolução do sistema, $n = 4$. 64
Figura 29 – Instantâneo da evolução do sistema, $n = 4$. 64
Figura 30 – Instantâneo da evolução do sistema, $n = 36$, $n = 36$ com a coluna de fluido no meio e resultado da Voxar Labs com Lennard-Jones. 65
Figura 31 – Instantâneo da evolução do sistema, $n = 36$, $n = 36$ com a coluna de fluido no meio e resultado da Voxar Labs com Lennard-Jones. 66
Figura 32 – Instantâneo da evolução do sistema, $n = 36$, $n = 36$ com a coluna de fluido no meio e resultado da Voxar Labs com Lennard-Jones. 67
Figura 33 – Instantâneo da evolução do sistema, $n = 36$. 68
Figura 34 – Gráficos em Python da região funcional para $n = 4$ e da Região preenchida por partículas, para $n = 4$, em (5.6) 68
Figura 35 – Variação de energia e pressão no tempo, para $n = 36$ em (5.6). 68
Figura 36 – Distribuição de pressão e variação da velocidade com o tempo para $n = 36$ em (5.6). 69
Figura 37 – Posição x(t) e y(t) para $n = 36$ em (5.6). 69
Figura 38 – Posições, x(t), para soluções Voxar Labs, com a condição de contorno de Lennard-Jones e a condição funcional com $n = 36$. 69

Figura 39 – Pressões, P(t), para soluções Voxar Labs, com a condição de contorno de Lennard-Jones e a condição funcional com $n = 36$. 69
Figura 40 – Posições, y(t), para soluções Voxar Labs, com a condição de contorno de Lennard-Jones e a condição funcional com $n = 36$. 70
Figura 41 – Velocidades, v(t), para soluções Voxar Labs, com a condição de contorno de Lennard-Jones e a condição funcional com $n = 36$. 70
Figura 42 – Energias, E(t), para soluções Voxar Labs, com a condição de contorno de Lennard-Jones e a condição funcional com $n = 36$. 70

Figura 43 – Busca de partículas vizinhas utilizando uma malha bidimensional uniforme cujo espaçamento de cada célula coincide com o raio de influência κh. A região amarela é a região de busca quando a partícula considerada é a i-ésima. Figura extraída de (NETO, 2007) 89
Figura 44 – Representação de um esquema implícito. Figura extraída de (PEREIRA,) 91
Figura 45 – Representação de um esquema explícito. Figura extraída de (PEREIRA,) 91
Figura 46 – Paraview versão 4.0.1 ((C) SANDIA CORPORATION, 2005-2008) . . 93
Figura 47 – Paraview versão 4.0.1 ((C) SANDIA CORPORATION, 2005-2008) . . 94

Sumário

1 Introdução 14

1.1 Estrutura desta Dissertação 14

2 Dinâmica Lagrangiana e Hamiltoniana 16

2.1 Introdução 16

2.2 Princípio da Ação Mínima 16

2.2.1 Coordenadas Generalizadas. Lagrangiano de um Sistema 16

2.2.2 O Princípio da Ação Mínima 17

2.2.3 Equações de Euler-Lagrange 19

2.3 O Formalismo Canônico ou de Hamilton 20

2.3.1 Equações de Movimento de Hamilton 20

2.3.2 Significado Físico da Função de Hamilton 21

2.3.3 Equações SPH Derivadas do Lagrangiano 22

2.3.4 Gradiente da Densidade 23

2.3.5 Equações de Movimento 24

2.3.6 Leis de Conservação 25

3 Elementos de Hidrodinâmica 28

3.1 Introdução 28

3.2 Formulações Euleriana e Lagrangiana 28

3.2.1 Formulação Euleriana 28

3.2.2 Formulação Lagrangiana 30

3.3 Dinâmica Clássica Dos Fluidos 31

3.3.1 Formulação Euleriana 31

3.3.2 Formulaçao Lagrangiana 32

3.3.3 Hidrodinâmica Computacional 33

4 Hidrodinâmica da Partícula Suavizada 35

4.0.4 Formulação essencial do SPH 36

4.0.5 Exemplos Práticos 49

5 Condições de Contorno 52

5.1 Alguns Tipos de Condições de Contorno 52

5.1.1 Método Baseado na Força 52

5.1.2 Método das Partículas Fantasmas 54

5.1.3 Combinação do Método da Força com Partículas Fantasmas 55

5.1.4 Técnica de Partículas de Fronteira Dinâmicas . . . 56
5.1.5 Puramente Geométrica . . . 57
5.1.6 2nP-Catenária . . . 57

Referências . . . 71

Apêndices 75

APÊNDICE A Fundamentos Matemáticos . . . 76
A.1 Topologia do Espaço Euclidiano . . . 76
A.2 Álgebra e Análise Tensorial . . . 76
A.2.1 Introdução . . . 76
A.2.2 Álgebra Vetorial . . . 77
A.2.3 Tensores de Segunda Ordem . . . 78
A.2.4 A Transposição. Tensores Simétrico e Anti-Simétrico . . . 78
A.2.5 Produto Tensorial . . . 79
A.2.6 Componentes Cartesianas e Representação Matricial . . . 79
A.2.7 Traço e Produto Interno . . . 81
A.2.8 Diferenciação . . . 81
A.2.9 Linearização de Uma Função Não-Linear . . . 82
A.2.10 O Gradiente . . . 82
A.2.11 A Divergência . . . 83
A.2.12 O Teorema da Divergência . . . 83
A.2.13 Linearização de Problemas Não-lineares . . . 83
A.3 Funções e Distribuições . . . 84

APÊNDICE B Cálculo do Gradiente da Função Peso W . . . 86

APÊNDICE C Equação de Poisson Discreta e Formulação Matricial . . . 88

APÊNDICE D Método Numérico . . . 89
D.1 Introdução . . . 89
D.2 Busca por Partículas . . . 89
D.3 Métodos Numéricos . . . 90
D.3.1 Integração Numérica Temporal . . . 90
D.4 Integração . . . 91
D.5 Leitura e Exibição de Dados . . . 93
D.5.1 Figuras e Gráficos . . . 93

APÊNDICE E Equação de Momento . . . 95

1 Introdução

Provérbios “Todas as águas correm para o mar e o mar não se enche.”

A importância do estudo na Hidrodinâmica é indiscutível. Suas aplicações vão desde um simples transporte de água, de um ponto para outro, em uma rede de tratamento de rejeitos, por exemplo, até a compreensão dos movimentos de grandes massas de águas oceânicas e suas consequências para o clima do planeta, tratadas na dinâmica geofísica de fluidos. Nos transportes, a otimização da interação ar-veículos proporciona maior desempenho levando-se a uma economia de energia, fator de grande importância em qualquer projeto. Não podemos nos esquecer de que, o nosso próprio corpo é composto por mais de 70% de água, de forma que a boa compreensão desse estado da matéria é de grande importância. Na questão da energia para fins pacíficos, a compreensão da hidrodinâmica de reatores nucleares é de crucial importância, não só na questão da geração, em si, da energia, mas para a própria questão da segurança destes reatores. Um fluido, como uma entidade que não suporta tensões cisalhantes, deve ser estudado e, consequentemente, teorias físicas são propostas para explicar os fenômenos naturais de deslocamento, velocidade, acelerações, etc, bem como equações matemáticas para traduzir essas propriedades para linguagem operacional que, por sua vez, podem ser escritas em termos algorítmicos e de códigos computacionais, vindos então a ser simulados e posteriormente ter os benefícios e vantagens econômicas da simulação, como baixo custo comparado com a experimentação física, por exemplo. Não iremos nos preocupar com a cronologia histórica do desenvolvimento dos modelos matemáticos de forma que estabeleceremos apenas o modelo matemático que descreve o comportamento de um fluido como um conjunto de equações diferenciais parciais, conhecido como *Equações de Navier-Stokes*. Veremos adiante que existem duas formas de se abordar o fenômeno que representa o movimento de fluidos: o Euleriano e Lagrageano.

1.1 Estrutura desta Dissertação

O restante da dissertação está organizado da seguinte forma:

- No capítulo 2 é feita uma introdução ao formalismo utilizado na construção dos operadores que serão utilizados para discretizar as equações de governo. Será visto que, a partir da ação escolhida, as equações são derivadas obedecendo leis físicas fundamentais.

- No capítulo 3 serão estabelecidos os fundamentos teóricos básicos para o entendimento das grandezas físicas envolvidas neste trabalho. Apresenta-se as equações de governo para o sistema, bem como o significado físico, quando houver.

- No capítulo 4 apresenta-se o método numérico, o método da partícula suavizada SPH, desde o contexto histórico, até as aplicações mais atuais. Descreve-se a natureza do método e a relevância do mesmo comparada a outros métodos.

- No capítulo 5 apresentamos o tema principal do trabalho que estabelece as condições de contorno. É apresentada uma forma funcional para a condição de contorno com propriedades simétricas e de não penetrabilidade.

2 Dinâmica Lagrangiana e Hamiltoniana

2.1 Introdução

O objetivo deste capítulo consiste em definir, a partir de primeiros princípios, as leis mecânicas (MULLER-KIRSTEN, 2008) que governam os sistemas de partículas materiais, as quais podem ser consideradas, hipoteticamente, como uma coleção extensiva de entidades puntiformes. O propósito disto é preparar o terreno para o próximo capítulo, que será dedicado à mecânica dos sistemas de muitas partículas, que por sua vez, servirá de base para a construção dos operadores SPH e das equações de governo.

As leis da mecânica clássica, como são usualmente ensinadas, levam a crer que são arbitrárias ou extensivamente fundadas em resultados. Agora é comparativamente fácil preparar um arcabouço teórico baseado em um pequeno número de premissas intuitivas consistentes com a observação, onde essas leis (2ª Lei de Newton, leis de conservação) ocorrem naturalmente e exibem um significado físico claro. A pedra angular para a teoria que trataremos a seguir é o *princípio da ação mínima*, a única hipótese realmente restritiva, uma vez que ela aparenta ser injustificável à primeira vista.

Segue-se, no entanto, que este único princípio, acompanhado pelas hipóteses naturais e confirmação pelas experiências diárias, é suficiente para construir as fundações da Mecânica.

2.2 Princípio da Ação Mínima

Nesta secção estabelecemos a base da Mecânica Lagrangiana. Definimos coordenadas e velocidades generalizadas bem como a função de Lagrange para um sistema mecânico. Consequentemente estabelecemos o princípio da ação mínima, o qual é um conceito fundamental em física, apesar do princípio de extremização ser um advento matemático. Veja, por exemplo, o princípio de Hamilton. As equações de Euler-Lagrange são, então, deduzidas a partir dos conhecimentos estabelecidos.

2.2.1 Coordenadas Generalizadas. Lagrangiano de um Sistema

Da mecânica elementar sabe-se que a velocidade de um corpo não é uma quantidade com um significado físico absoluto (decorre do conceito de referenciais inerciais e do princípio de relatividade), ao passo que a aceleração, taxa de variação temporal da velocidade, é a mesma medida em diferentes sistemas de referência inerciais, ou seja é um invariante. Nesse sentido, estabelecemos as leis da mecânica em termos das acelerações. Assim, em consideração a essas coordenadas, vistas como funções do tempo, equações diferenciais de segunda ordem descreverão a variação do sistema mecânico. Consequentemente, a matemática nos diz que dois conjuntos de condições de contorno são necessários para se resolver essas equações. Em outras palavras, o futuro de um sistema pode ser perfeitamente definido somente a partir de uma configuração inicial estabelecida que dependa,não só das posições de seus constituintes, mas também de suas derivadas em relação ao tempo, em qualquer instante de tempo. De maneira geral, nós consideraremos um sistema cuja descrição geométrica seja dada por N parâmetros independentes conhecidos como as *coordenadas generalizadas* do sistema, as quais serão denotadas por $q_i(t)$. O número N é chamado de número de graus de liberdade geométricos do sistema. Para uma partícula, por exemplo $N = 3$, e os q_i coincidem com as componentes x, y e z do vetor posição $\mathbf{r}$, da partícula, em algum dado instante de tempo. Podemos então estabelecer, dos enunciados anteriores, que o estado de um sistema é completamente determinado, em qualquer instante de tempo, pelas informações das coordenadas generalizadas e suas derivadas em relação ao tempo, sendo estas, chamadas *velocidades generalizadas* e são denotadas por $\dot{q}_i = dq_i/dt$. Então, para uma partícula, temos:

$$\begin{pmatrix} q_1, & \dot{q_1} \\ q_2, & \dot{q_2} \\ q_3, & \dot{q_3} \end{pmatrix} = (\mathbf{r}, \mathbf{v}) \tag{2.1}$$

Se existir uma quantidade descrevendo o estado mecânico do sistema em um dado instante de tempo, então ela é uma função das coordenadas e velocidades generalizadas. Nós assumimos que tal função existe e nos referiremos a ela por Lagrangiano (ou função de Lagrange) do sistema:

$$L = L(q_i, \dot{q}_i; t) \tag{2.2}$$

entendo-se que o índice i varre todo o intervalo de valores, de 1 a N, sendo este o número de graus de liberdade do sistema.

2.2.2 O Princípio da Ação Mínima

Aqui nos referiremos, temporariamente, a um espaço Cartesiano abstrato N-dimensional no qual, o sistema de coordenadas generalizadas é transferido aos eixos coordenados. Esse

espaço é conhecido como *espaço de configurações*. Nós consideraremos dois estados geométricos do sistema correspondentes a um par de conjuntos de coordenadas, os quais denotaremos por $q_i^{(1)}$ e $q_i^{(2)}$. Assim, esses dois estados estão relacionados a dois pontos M_1 e M_2 no espaço de configurações (para o caso N=2, ver figura). As curvas geométricas conectando esses dois pontos são chamadas *possíveis trajetórias* do problema. Agora nós consideraremos como o sistema evolui do estado 1, no instante de tempo t_1, para o estado 2, no instante de tempo t_2. Em outras palavras, entre todas as trajetórias possíveis, qual a única trajetória em que o sistema evoluirá, de acordo com as leis da mecânica? Esse problema já é bem estabelecido em física, uma vez que temos $2N$ condições de contorno, digamos, os valores inicial e final dos q_i. A resposta para a questão é dada pelo princípio da ação mínima. Definimos, então, a ação $\tilde{S}$ do sistema:

$$\tilde{S} = \int_{t_1}^{t_2} dt L(q_i, \dot{q}_i; t) \tag{2.3}$$

O princípio é então expresso como: um valor mínimo da ação está relacionado a um movimento real. Mais precisamente, este princípio deveria ser formulado de uma forma ligeiramente diferente: existe uma função L, das coordenadas e velocidades, definida por $L = T$ - V, onde T e V são, respectivamente, energia cinética e potencial, cuja integral tem um valor mínimo durante um movimento.

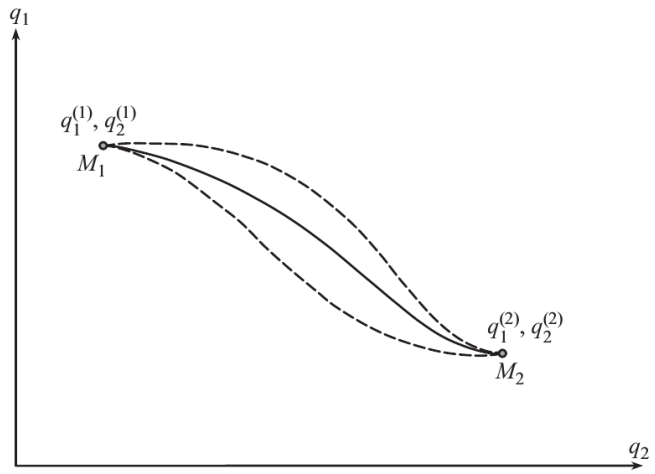


Figura 1 – Espaço de configuração de um sistema com dois parâmetros geométricos. Entre todas as trajetórias possíveis, somente uma corresponde, classicamente, à realidade física, para todo intervalo de tempo.

Este princípio pode parecer ousado mas, na verdade, ele corresponde bastante à intuição uma vez que a Natureza, com efeito, minimiza *(*em geral extremiza) as integrais de algumas quantidades físicas e a Lagrangiana é a única quantidade mecânica disponível, no momento, mesmo que tenhamos pouca informação a respeito desta. O princípio da

ação mínima, em si, nos proporcionará alguma informação a respeito de L. Algumas informações essenciais a respeito de L podem ser prontamente estabelecidas, quais sejam:

- L é uma função necessariamente real; do contrário, a noção de mínimo seria inconsistente, uma vez que o corpo dos números complexos não é ordenado;
- L é aditiva, ou seja, ela é extensiva.

2.2.3 Equações de Euler-Lagrange

No que se segue estabeleceremos uma condição necessária para que a função lagrangiana L induza uma ação mínima $\tilde{S}$. Por simplicidade, primeiro consideraremos o caso em que figura um único grau de liberdade: N=1, de forma que temos uma única coordenada q, a qual está associada às duas condições de contorno $q^{(1)}$ e $q^{(2)}$ (pontos final e inicial no tempo); Como foi exposto acima, o caminho real escolhido pelo sistema, como uma função do tema, é chamado de caminho clássico ou órbita clássica $q_i^{cl}(t)$. Ela tem a propriedade de extremizar a ação em comparação com todas as trajetórias vizinhas

$$q_i^{cl}(t) + \delta q_i(t) \tag{2.4}$$

Para exprimir essa propriedade formalmente, introduz-se o conceito de *variação* da ação, como a parte linear da expansão da série de Taylor de $\tilde{S}(q_i)$ em potências de $\delta q_i(t)$:

$$\delta\tilde{S}(q_i) \equiv [\tilde{S}(q_i + \delta q_i) - \tilde{S}(q_i)]_{lin} \tag{2.5}$$

O princípio extremal para a trajetória clássica é então:

$$\delta\tilde{S}(q_i) \mid_{q_i(t)=q_i^{cl}(t)} = 0 \tag{2.6}$$

para todas as variações da trajetória ao redor da trajetória clássica, $\delta q_i(t) \equiv q_i(t)$ - $q_i^{cl}(t)$, o qual se anula nos extremos, ou seja, que satisfaz

$$\delta q_i(t_a) = \delta q_i(t_b) = 0 \tag{2.7}$$

Desde que a ação é uma integral temporal de um Lagrangiano, a propriedade extremal pode ser estabelecida em termos de equações diferenciais. Calculemos a variação $\tilde{S}(q_i)$ explicitamente:

$$\begin{aligned}
\delta\tilde{S}(q_i) &\equiv \{\tilde{S}(q_i(t) + \delta q_i(t)) - \tilde{S}(q_i(t))\}_{lin} && (2.8)\\
&= \int_{t_1}^{t_2} dt\{L(q_i(t) + \delta q_i(t), \dot{q}_i(t) + \delta\dot{q}_i(t); t) - L(q_i(t), \dot{q}_i(t))\}_{lin} && (2.9)\\
&= \int_{t_1}^{t_2} dt\{\frac{\partial L}{\partial q_i}\delta q_i(t) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta\dot{q}_i(t)\} && (2.10)\\
&= \int_{t_1}^{t_2} dt\{\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta\dot{q}_i(t)\} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta q_i(t)|_{t_1}^{t_2} && (2.11)
\end{aligned}$$

Esta última expressão surge de uma integração parcial do termo $\delta\dot{q}_i$. Aqui, bem como ao longo desta secção, os índices repetidos seguem a convenção da soma de Einstein. Os ponto finais, *termos de superfície ou de contorno*, com os instantes de tempo iguais a t_a e t_b, podem ser negligenciados devido à expressão 2.7. Assim, chegamos à seguinte expressão para a órbita clássica, q_i^{cla}, as equações de Euler-Lagrange:

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = 0 \tag{2.12}$$

Daqui por diante, usaremos estas equações para estabelecer as expressões numéricas dos operadores SPH.

2.3 O Formalismo Canônico ou de Hamilton

Na secção anterior vimos que o formalismo Lagrangiano nos leva, através das equações de Euler-Lagrange, às mesmas equações estabelecidas por Newton, com a vantagem, no entanto, de ser mais fácil de estabelecermos vínculos. O próximo passo a frente, na indução das das bases da Mecânica, foi o reconhecimento de Hamilton do significado do momento linear p como uma entidade individual, por si só, e disjunta de sua definição ingênua, como produto da massa pela velocidade. Ao se perceber esse significado da grandeza momento, torna-se necessário descrever esse conceito em uma nova base de variáveis, digamos {p, q}, conhecidas como variáveis canônicas.

2.3.1 Equações de Movimento de Hamilton

Lembrando que a dinâmica de um sistema de n graus de liberdade, isto é, de n coordenadas generalizadas sem vínculos, é descrita por n equações de movimento de Euler-Lagrange, isto é, equações diferenciais de segunda ordem dadas por

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = 0, \qquad i = 1, 2, ..., n \tag{2.13}$$

A integração dessas equações requerem, no entanto, a determinação de 2n constantes de integração, a partir das *condições iniciais*, isto é, os valores iniciais, $t = 0$, de todos os $q_i, \dot{q}_i$, i=1, 2, ..., n. Na formulação de Hamilton em que nos tratamos agora, as variáveis independentes são as n coordenadas generalizadas q_i, juntamente com os n conjugados ou momentos generalizados, p_i, dados por

$$p_i = \frac{\partial L(q_j, \dot{q}_j, t)}{\partial \dot{q}_i} \tag{2.14}$$

Tendo em vista que queremos uma mudança de variáveis, do conjunto $(q_i, \dot{q}_i, t)$, para (q_i, p_i, t) vamos realizar uma transformação conhecida como *Transformada de Legendre*.

Veremos que, em vez de tratarmos com n equações diferenciais de segunda ordem, a dinâmica no espaço de fase - espaço das posições e momentos-, é descrita por $2n$ equações, porém, todas de primeira ordem. Primeiramente definimos a *função de Hamilton* pela equação:

$$H(q,p,t) \equiv \sum_i \dot{q}_i p_i - L(q,\dot{q},t) \tag{2.15}$$

Os argumentos da função $\{H$ são q_i, p_i e t, mas não $\dot{q}_i$, ou seja, H independe de $\dot{q}_i$, visto que:

$$\frac{\partial H}{\partial \dot{q}_i} = p_i - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = 0 \tag{2.16}$$

Visto que o lado direito de 2.15 é função de q_i, p_i, t obtemos, com 2.16:

$$\begin{aligned} dH &= \sum_i \dot{q}_i dp_i + \sum_i p_i d\dot{q}_i - \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} d\dot{q}_i - \sum_i \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \\ &= \sum_i q_i dp_i - \sum_i \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \end{aligned} \tag{2.17}$$

Da Eq (2.12), obtemos:

$$dH = \sum_i \dot{q}_i dp_i - \sum_i \dot{p}_i dq_i - \frac{\partial L}{\partial t dt} \tag{2.18}$$

$$= \sum_i \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt \tag{2.19}$$

Comparando os coeficientes de dp_i, dq_i e dt, temos:

$$\begin{aligned} \dot{q}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i}, \\ -\dot{p}_i &= \frac{\partial H}{\partial q_i}, \\ -\frac{\partial L}{\partial t} &= \frac{\partial H}{\partial t} \end{aligned} \tag{2.20}$$

Essas equações são conhecidas como *Equações de Hamilton ou Equações Canônicas de Hamilton.*

2.3.2 Significado Físico da Função de Hamilton

Dizemos que L é cíclico em determinada variável se esta não aparece explicitamente naquela. Sabe-se que, se L é cíclico em uma certa coordenada, então H também é cíclica nesta coordenada. Isto significa que, por exemplo, se um sistema exibe uma simetria em relação a um dado eixo, então H não pode conter o ângulo apropriado de rotação. Este ângulo é, então, uma coordenada cíclica de forma que o correspondente momento

angular é conservado. O significado físico da função Hamiltoniana H será estabelecido agora. Primeiramente, consideremos a derivada total de H:

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial H}{\partial p_i}\dot{p}_i \right) \tag{2.21}$$

$$= \frac{\partial H}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \tag{2.22}$$

$$= \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t} \tag{2.23}$$

Agora consideremos duas hipóteses adicionais, importantes, que nosso sistema possa vir a exibir:

- As formas funcionais que exprimem as transformações de coordenadas, ou seja, $\mathbf{r_m} = \mathbf{r_m}(q_1, ..., q_n, t)$, não dependem explicitamente do tempo;
- Os potenciais associados aos sistemas não dependem da velocidade.

Satisfeitas essas hipóteses, a *Energia Total* é dada pela Função de Hamilton, H. Com efeito, desde que satisfeitas as condições estabelecidas, $\frac{\partial L}{\partial t} = 0$, isto é, L independe explicitamente de t,

$$\frac{dL}{dt} = \sum_j \left(\frac{\partial L}{\partial q_j}\frac{dq_j}{dt} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\frac{d\dot{q}_j}{dt} \right) \tag{2.24}$$

$$= \sum_j \left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right)\dot{q}_j + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\frac{d\dot{q}_j}{dt} \right] \tag{2.25}$$

$$= \sum_j \left(\dot{q}_j \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right). \tag{2.26}$$

Segue-se que

$$\frac{d}{dt}\left(L - \sum_j \dot{q}_j \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right) = 0 \Longleftrightarrow L - \sum_j \dot{q}_j \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} = K, \tag{2.27}$$

onde K é uma constante. Temos ainda

$$L - \sum_j \dot{q}_j p_j = K \equiv -H. \tag{2.28}$$

Segue-se que H = K, constante, ou seja, sob as hipóteses acima elencadas, a energia total se conserva.

2.3.3 Equações SPH Derivadas do Lagrangiano

O Lagrangiano e as equações de governo. As equações de governo de nosso sistema podem ser deduzidas usando-se um lagrangiano particular, a primeira lei da termodinâmica e uma prescrição de como obter a densidade, uma vez que esta é crucial para o modelo, em termos de um somatório, ou seja, a aproximação SPH. Partiremos, sem mais detalhes, do lagrangiano para um fluido perfeito (ECKART, 1960):

$$\mathcal{L} = \int \rho \left[\frac{1}{2} v_j^2 - u(\rho, \mathcal{S}) \right] dV \tag{2.29}$$

onde $\mathcal{S}$ é a entropia específica. Essa equação integral pode ser discretizada, via SPH, diretamente como:

$$L = \sum_j m_j \left[\frac{1}{2} v_j^2 - u(\rho_j, \mathcal{S}_j) \right] \tag{2.30}$$

As equações discretizadas para o fluido podem ser encontradas aplicando-se as equações de Euler-Lagrange, $Eq(2.12)$

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_i} \right) = 0 \tag{2.31}$$

Note que o termo em parêntesis nos fornece o momento canônico conjugado da partícula de massa m_i.

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_\mathbf{i}} = \sum_i m_i \dot{\mathbf{r}}_i = \sum_i m_i \mathbf{v}_i \tag{2.32}$$

O segundo termo no lagrangiano fica

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}_\mathbf{i}} = -\sum_j m_j \frac{\partial u(\rho_j, \mathcal{S}_j)}{\partial \mathbf{r}_i} = -\sum_j m_j \frac{\partial u_j}{\partial \rho_j}\Big|_\mathcal{S} \cdot \frac{\partial \rho_j}{\partial \mathbf{r}_i} \tag{2.33}$$

Agora, usando-se a Primeira Lei da Termodinâmica,

$$du = -\frac{P}{\rho} d\rho \tag{2.34}$$

a primeira derivada da equação mais à direita fica:

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = -\sum_j \frac{P_j}{\rho_j} \frac{\partial \rho_j}{\partial \mathbf{r}_i} \tag{2.35}$$

2.3.4 Gradiente da Densidade

É de se notar que até este momento não fizemos referência explícita, neste parágrafo, à interpolação do núcleo. Esta surge quando estabelecemos a derivada espacial da

densidade. Considerando que estamos tomando o gradiente da densidade na partícula j, em relação às coordenadas da partícula i, a qual é dada por:

$$\frac{\partial \rho_j}{\partial \mathbf{r}_i} = \frac{1}{\Omega_j}\sum_k m_k \frac{\partial W_{jk}(h_j)}{\partial \mathbf{r}_i}(\delta_{ji} - \delta_{ki}) \tag{2.36}$$

onde $W_{jk}(h_j) \equiv W(\mathbf{r_j} - \mathbf{r}_k, h_j)$, δ_{ji} é a função delta de Kronecker, a qual se refere aos índices da partícula. Note que assumimos que o comprimento suavizante h é, em si, uma função da densidade, ou seja, $h = h(\rho)$; Temos então, um termo que leva em conta o gradiente do comprimento suavizante dado por:

$$\Omega_i \equiv \left[1 - \frac{\partial h_i}{\partial \rho_i}\sum_j m_j \frac{\partial W_{ij}(h_i)}{\partial h_i}\right] \tag{2.37}$$

Note que, como $h = h(\rho) = \left(\frac{m}{\rho}\right)$, teremos:

$$\frac{\partial h}{\partial \rho} = -\frac{h}{\rho} \tag{2.38}$$

onde d é o número de dimensões espaciais.

2.3.5 Equações de Movimento

Inserindo-se as Eq(2.20) e Eq(2.18) na Eq(2.13), teremos:

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_\mathbf{i}} = -\sum_j \frac{P_j}{\Omega_j \rho_j}\sum_k m_k \frac{\partial W_{jk}(h_j)}{\partial \mathbf{r}_i}(\delta_{ji} - \delta_{ki}) \tag{2.39}$$

que, após uma álgebra elementar, fornece as seguintes equações de movimento, a partir das equações de Euler-Lagrange:

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = -\sum_j m_j \left[\frac{P_i}{\Omega_i \rho_i}\frac{\partial W_{ij}(h_i)}{\partial \mathbf{r}_i} - \frac{P_j}{\Omega_j \rho_j}\frac{\partial W_{ij}(h_j)}{\partial \mathbf{r}_i}\right] \tag{2.40}$$

Para o nosso trabalho, onde fizemos um comprimento suavizante constante, teremos:

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = -\sum_j m_j \left(\frac{P_i}{\rho_i} - \frac{P_j}{\rho_j}\right)\nabla_i W_{ij} \tag{2.41}$$

Neste trabalho simularemos a dinâmica de fluidos governada pelo seguinte sistema de equações:

$$\begin{aligned}
\frac{d\rho}{dt} &= \sum_j m_j \mathbf{v_{ij}} \nabla W_{ij} \\
\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} &= -\sum_j m_j \left(\frac{P_i}{\rho_i} - \frac{P_j}{\rho_j} + \Pi_{ij}\right)\nabla_i W_{ij} \\
\frac{d\mathbf{x_i}}{dt} &= \mathbf{v_i}
\end{aligned} \tag{2.42}$$

Onde $\mathbf{v_{ij}}$ é dado por $\mathbf{v_i}$ - $\mathbf{v_j}$. Note que o sistema (2.42) difere ligeiramente na Eq (2.41) por Π_{ij}. Esse termo representa uma viscosidade artificial, uma vez que, nas equações de governo utilizadas, o termo viscoso que aparece em (3.23) não é levado em conta. Segue-se então, que a evolução do sistema sem a presença de Π_{ij} conduziria a instabilidades numéricas que por sua vez, levaria a resultados não-físicos. Por exemplo, conservação da massa, momento e energia quando uma porção do nosso fluido choca-se com a parede que o contem, durante a evolução do processo, conduziria a transformação de energias, por exemplo, a cinética, em calor que, pode ser visto como causado por dissipação viscosa. Este problema foi resolvido quando do desenvolvimento da viscosidade artificial por von Neumann-Richtmyer (NEUMANN; RICHTMYER, 1950), onde Π_i é dado por

$$\Pi_i = \begin{cases} a_i \Delta x^2 \rho (\nabla \cdot \mathbf{v})^2 & \nabla \cdot \mathbf{v} < 0 \\ 0, & \nabla \cdot \mathbf{v} \geq 0 \end{cases} \tag{2.43}$$

Posteriormente, uma viscosidade artificial foi desenvolvida, para o método SPH, por Monaghan e Gingold (MONAGHAN, 1992), a qual passou a ser amplamente usada, até então, em simulações com este método. Além de proporcionar todas as vantagens apresentadas por (2.43), a viscosidade artificial proposta por estes últimos, Π_{ij}, evita a interpenetração das partículas, o que seria um fenômeno não-físico. Teremos então Π_{ij} dado por:

$$\Pi_{ij} = \begin{cases} \frac{a_\Pi \bar{c}_{ij} \phi_{ij} + \beta_\Pi \phi_{ij}^2}{\bar{\rho}_{ij}} & \mathbf{v_{ij}} \cdot \mathbf{x_{ij}} < 0 \\ 0, & \mathbf{v_{ij}} \cdot \mathbf{x_{ij}} \geq 0 \end{cases} \tag{2.44}$$

onde :

$$\phi_{ij} = \frac{h_{ij} \mathbf{v_{ij}} \cdot \mathbf{x_{ij}}}{\mathbf{x_{ij}}^2 + \phi^2} \tag{2.45}$$

$$\bar{c}_{ij} = \frac{1}{2}(c_i + c_j) \tag{2.46}$$

$$\bar{\rho}_{ij} = \frac{1}{2}(\rho_i + \rho_j) \tag{2.47}$$

$$\bar{h}_{ij} = \frac{1}{2}(h_i + h_j) \tag{2.48}$$

$$\mathbf{v_{ij}} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j; \quad \mathbf{x_{ij}} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j \tag{2.49}$$

onde α_Π e β_Π são parâmetros que recebem valores típicos em torno de 1, (E., 1988). O significado físico dos termos ϕ, c e $\mathbf{v}$ são, respectivamente, função que previne divergência numérica quando as partículas se aproximam umas das outras, velocidade do som e vetor velocidade da partícula. A viscosidade associada a α_Π produz uma viscosidade total do sistema (bulk viscosity), ao passo que β_Π é proposta para suprimir a inter-penetração de partículas para números de Mach grandes e é similar, em significado físico, a Eq(2.43).

2.3.6 Leis de Conservação

Nesta secção trataremos da verificação dos princípios de conservação associados as equações até aqui derivadas. Na secção (2.3.2) já vimos que a energia total se conserva para as equações contínuas. Veremos que ela também se conserva para a aproximação SPH. Com efeito:

$$H = \sum_j \mathbf{v}_j \cdot \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}_j} - L \tag{2.50}$$

conforme (2.27), que representa a energia total conservada das partículas SPH, uma vez que o Lagrangiano não depende explicitamente do tempo. Usando (2.30) teremos

$$H = E = \sum_j \left(\frac{1}{2} v_j^2 + u_j\right) \tag{2.51}$$

Tomando a derivada temporal, temos

$$\frac{dE}{dt} = \sum_j \left[\mathbf{v}_j \cdot \frac{d\mathbf{v}_j}{dt} + \frac{du_j}{d\rho_j}\frac{d\rho_j}{dt}\right] \tag{2.52}$$

onde o primeiro termo é dado pela equação de momento, (2.41), por exemplo, o segundo termo pela 1ª Lei da Termodinâmica e Equação da Continuidade. Assim, usando-as e, após uma álgebra, teremos

$$\frac{dE}{dt} = \sum_k \sum_l \left[\left(\frac{S^{ij}}{\rho^2}\right)_k v_l^i + \left(\frac{S^{ij}}{\rho^2}\right)_l v_k^i\right] \nabla_k^j W_{kl} \tag{2.53}$$

onde

$$S^{ij} = -P\delta^{ij} \tag{2.54}$$

Onde P é a pressão. Para o objetivo deste trabalho resta-nos mostrar que o momento linear total também se conserva, levando então, como consequência, a conservação de (2.53). Com efeito, desde que

$$\frac{d}{dt}\sum_i m_i \mathbf{v}_i = \sum_i m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = -\sum_i \sum_j m_i m_j \left(\frac{P_i}{\rho_i^2} + \frac{P_j}{\rho_j^2}\right) \nabla_i W_{ij} \equiv 0, \tag{2.55}$$

onde a soma dupla é nula por causa da anti-simetria no gradiente do núcleo, o momento linear se conserva, pois

$$\frac{d}{dt}\sum_i m_i \mathbf{v}_i = \frac{d}{dt}\sum_i \mathbf{p}_i = \mathbf{0}, \tag{2.56}$$

ou seja,

$$\sum_i \mathbf{p}_i = constante \tag{2.57}$$

O momento angular total, analogamente, também é conservado, desde que

$$\frac{d}{dt}\sum_i \mathbf{r}_i \times m_i \mathbf{v}_i = \sum_i m_i \left(\mathbf{r}_i \times \frac{d\mathbf{v}_i}{dt}\right) = -\sum_i \sum_j m_i m_j \left(\frac{P_i}{\rho_i^2} + \frac{P_j}{\rho_j^2}\right) \mathbf{r}_i \times (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) F_{ij} \equiv 0, \tag{2.58}$$

onde, por conveniência, escrevemos o termo de gradiente como $\nabla_i W_{ij} = \mathbf{r}_{ij} F_{ij}$, com $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i$ - $\mathbf{r}_j$. Assim, vemos que a energia, momentos, linear e angular do sistema, são conservados evidenciando que as discretizações levadas a cabo na simulação são coerentes e precisas. Durante a simulação essas características são bastante evidenciadas, como podem ser vistas na secção (5.1.7).

3 Elementos de Hidrodinâmica

3.1 Introdução

No mundo real, todos os objetos físicos são compostos de moléculas as quais são formadas por partículas atômicas e subatômicas (BREHM, 1989). Nós usamos os métodos da mecânica do contínuo como uma ferramenta poderosa e efetiva para explicar, com sucesso, vários fenômenos físicos sem o conhecimento detalhado da complexidade de sua estrutura corpuscular interna. Por exemplo, pense na água como sendo constituida por uma grande quantidade de moléculas. Uma boa aproximação é tratá-la como um meio contínuo caracterizada por certas funções de campo que estão associadas com a estrutura interna, tais como, densidade, temperatura e velocidade.

Do ponto de vista físico, isto é uma aproximação na qual um número muito grande de partículas é substituido por algumas quantidades, de forma que podemos dizer tratar-se de um sistema macroscópico. Assim, nossa intenção precípua é tratar com valores médios sobre as dimensões quando estas forem pequenas o bastante para exigir gradientes superiores dos campos, devido aos efeitos de natureza corpuscular. De maneira geral, a mecânica do contínuo ((EDS.), 1981) trata dos seguintes tópicos:

- o estudo do movimento e deformação,
- o estudo da tensão em um contínuo (o conceito de tensão), e
- a descrição matemática das leis fundamentais da física governando o movimento de um contínuo (leis de conservação).

3.2 Formulações Euleriana e Lagrangiana

3.2.1 Formulação Euleriana

Existem duas maneiras, conhecidas, de se formular as equações da dinâmica dos fluidos (LANDAU; (AUTH.), 1959): os tratamentos *Euleriano* e *Lagrangiano*. Na formulação Euleriana, o vetor posição $\vec{r}$ e o tempo t são as *variáveis independentes*. Desta forma, qualquer escalar, a pressão, por exemplo, pode ser escrita como

$$p = p(\mathbf{r}, t) \tag{3.1}$$

ao passo que um vetor, por exemplo, a velocidade do fluido $\vec{v}$, torna-se

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \tag{3.2}$$

O tratamento Euleriano proporciona uma representação de campo em termos de $\vec{r}$ e t, para qualquer variável de interesse. Por exemplo, uma variação infinitesimal na pressão pode ser expressa por

$$dp = \left(\frac{\partial p}{\partial r}\right) dr + \left(\frac{\partial p}{\partial t}\right) dt \tag{3.3}$$

onde o o primeiro termo é a derivada direcional de p na direção de $d\vec{r}$. Introduzamos agora coordenadas Cartesianas x_i e suas correspondentes basis ortonormais $\hat{x}_i$, i= 1, 2 e 3. Nessas condições, r e $d\vec{r}$ são dados por

$$\vec{r} = x_i \hat{x} \tag{3.4}$$

$$d\vec{r} = dx_i \hat{x} \tag{3.5}$$

onde, nos índices repetidos são usados a convenção de soma de Einstein. A Equação (3.3) pode ser escrita como

$$dp = \left(\frac{\partial p}{\partial x_i}\right) dx_i + \left(\frac{\partial p}{\partial t}\right) dt \tag{3.6}$$

ou ainda por

$$\frac{dp}{dt} = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{dx_i}{dt}\frac{\partial p}{\partial x_i} \tag{3.7}$$

A velocidade é dada por

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{dx_i}{dt}\hat{x} = v_i \hat{x} \tag{3.8}$$

onde v_i são as componentes Cartesianas da velocidade. Uma vez que o gradiente de pressão é dado por

$$\nabla p = \frac{\partial p}{\partial x_i} \tag{3.9}$$

a Equação (3.7) reduz-se a

$$\frac{dp}{dt} = \frac{\partial p}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla p \tag{3.10}$$

Usando a notação de Stokes teremos o seguinte operador:

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \tag{3.11}$$

que é chamada derivada material. Note que esta definição independe do sistema de coordenadas adotado. Segue-se então que

$$\frac{D\mathbf{r}}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{r} \tag{3.12}$$

onde

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} = \mathbf{0} \tag{3.13}$$

uma vez que $\mathbf{r}$ e t são variáveis independentes. O gradiente de $\mathbf{r}$ é

$$\nabla \mathbf{r} = \mathbf{e_j} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x_j} = \mathbf{e_j e_i} \frac{\partial x_i}{\partial x_j} = \mathbf{e_j e_i} \delta_{ij} = \mathbf{e_i e_i} = \mathbf{I} \tag{3.14}$$

onde δ_{ij} é o Delta de Kronecker. Assim teremos

$$\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{r} = \mathbf{v} \cdot \mathbf{I} = \mathbf{v} \tag{3.15}$$

de forma que

$$\frac{D\mathbf{r}}{Dt} = \mathbf{v} \tag{3.16}$$

A derivada material tem um significado físico muito importante. Ela estabelece a taxa de variação de qualquer quantidade fluida, escalar ou vetor, acompanhando uma partícula de fluido. Este ponto de vista pode ser obviamente verificado na equação (3.16), onde a taxa de variação do vetor posição de uma partícula de fluido é igual à velocidade.

3.2.2 Formulação Lagrangiana

Como estabelecido acima, a formulação Euleriana proporciona uma descrição de campo do escoamento de um fluido. A formulação Lagrangiana proporciona uma descrição em termos de partículas. Suponha que uma partícula de fluido esteja na posição $\mathbf{r} = \mathbf{r_0}$ em $\mathbf{t} = \mathbf{t_0}$. No tratamento Lagrangiano as variáveis independentes são $\mathbf{r_0}$ e $\mathbf{t}$. Assim, a posição de uma partícula de fluido no instante t é dada por

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(\mathbf{r_0}, t) \tag{3.17}$$

onde $\mathbf{r_0}$ é a posição da partícula no instante t_0

$$\mathbf{r_0} = \mathbf{r_0}(t_0) \tag{3.18}$$

e $\mathbf{r_0}$ é um rótulo fixo na partícula enquanto ela se move. Neste tratamento, a velocidade e aceleração, são

$$\mathbf{u} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t}, \quad \mathbf{a} = \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial t^2} \tag{3.19}$$

enquanto $\mathbf{r_0}$ é mantido fixo em ambas as derivadas. As duas formulações podem ser relacionadas assumindo que nós conhecemos $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ na descrição Euleriana. Nós então integramos a Equação (3.16) sujeita às condições

$$\mathbf{r} = \mathbf{r_0} \quad \text{em} \quad t = t_0 \tag{3.20}$$

A solução estará, então, na descrição Lagrangiana, Equação (3.17).

3.3 Dinâmica Clássica Dos Fluidos

Para descrever a dinâmica de fluidos fazemos uso de ferramentas matemáticas que descrevem o comportamento do sistema, numa porção de fluido, em um dado instante de tempo. Calculamos, então, a evolução temporal deste através das equações de governo desenvolvidas. A taxa de variação da posição em relação ao tempo, a velocidade, é escolhida como grandeza física relevante uma vez que o movimento dos fluidos é de grande interesse e pode ser vista como causa das variações da densidade, por exemplo, e, consequentemente, pressões.

As equações de governo são descritas por equações diferenciais parciais conhecidas como Equações de Navier-Stokes (STORY, 2005). Abaixo seguem as equações nas respectivas abordagens, euleriana e lagrangiana (ver figura 3.1):

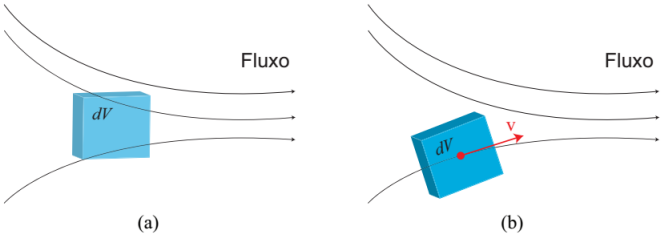


Figura 2 – (a) Elemento de volume fixo no espaço por onde o qual o fluido passa. (b) Elemento de volume fluindo ao longo do escoamento com velocidade $\mathbf{v}$ igual à velocidade do fluxo na vizinhança do ponto. Figura extraída de (NETO, 2007)

3.3.1 Formulação Euleriana

Em geral, as equações de governo para fluidos são descritas em termos da formulação Euleriana, dada pelo seguinte conjunto de equações:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \tag{3.21}$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \frac{1}{\rho}\nabla \cdot \mathbf{S} + \mathbf{g} \tag{3.22}$$

onde ρ, $\mathbf{v}$, p, $\mathbf{S}$ e $\mathbf{g}$ são, respectivamente, a densidade, a velocidade, o tensor de tensão e vetor aceleração da gravidade. O tensor $\mathbf{S}$ pode ser determinado a partir do tensor de deformação $\mathbf{E}$ e do coeficiente de viscosidade do fluido, μ, conforme as equações abaixo

$$\mathbf{S} = 2\mu(\mathbf{E} - \frac{1}{3}\tau(E)\mathbf{I}) \tag{3.23}$$

onde

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}[\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T] \tag{3.24}$$

e $\tau(E)$ representa o traço do tensor $\mathbf{E}$ e T denota transposição. É fácil ver que $\tau(E) = \nabla \cdot \mathbf{v}$. Em um curso de hidrodinâmica deduz-se as Equações de Navier-Stokes a partir de leis fundamentais de conservação, tais como conservação do momento e conservação da massa. Note que, se a densidade for constante ao longo do processo de fluência, teremos que $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$, o que implica que 3.21 se resumirá a

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \tag{3.25}$$

que é um vínculo. A dinâmica do fluido na qual a divergência é nula é dita incompressível.

O termo $\nabla \cdot S$, que estabelece a tensão inerente ao sistema é o termo viscoso que, em um caso particular pode ser escrito como $\mu \nabla^2 \mathbf{v}$, se o fluido em questão for incompressível e a viscosidade μ, em (3.20), for constante. Sob essas hipóteses, a equação (3.19) fica

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \frac{\mu}{\rho}\nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{g} \tag{3.26}$$

Pela própria definição do método, as equações diferenciais parciais que constituem a equação de governo em questão, são resolvidas numericamente, através da construção de uma rede espacial fixa

3.3.2 Formulaçao Lagrangiana

A formulação lagrangiana das equações de Navier-Stokes estabelece o estudo do movimento do fluido segundo um observador que acompanha o fluxo, ou seja, que se move junto com ele. Na teoria clássica, ou seja, na teoria não micro-polar, não se considera a rotação das partículas em si, mesmo havendo a rotação do sistema de partículas. Seja $f = f(x_1, ..., x_n, t)$, uma função suave de forma que

$$df = \left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right) dx_i + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) dt \tag{3.27}$$

onde os índices repetidos significam soma. Teremos então:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial x_i}\frac{dx_i}{dt} + \frac{\partial f}{\partial t} \tag{3.28}$$

que pode ser reescrita como

$$\frac{df}{dt} = \nabla f \cdot \mathbf{v} + \frac{\partial f}{\partial t} \tag{3.29}$$

Na equação (3.29), se a função f representar uma entidade física, tal como o fluxo de fluido ao longo de uma superfície, ou um campo vetorial descrito pelo campo de velocidades do mesmo fluido, então (3.29) é conhecida como derivada material e estabelece a taxa de variação temporal instantânea, da grandeza física associada, de um elemento do sistema que se move, no espaço, juntamente com o sistema em consideração. Tendo isso em mente, a equação (3.23) pode ser reescrita da seguinte forma

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \tag{3.30}$$

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \frac{\mu}{\rho}\nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{g} \tag{3.31}$$

que são as equações de governo no formalismo lagrangeano. O termo

$$\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \tag{3.32}$$

é chamado termo advectivo. Verifica-se, na equação (3.25), que cada índice i sugere uma advecção própria para cada partícula.

3.3.3 Hidrodinâmica Computacional

Como pode ser visto em (NETO, 2007), as discretizações das equações diferenciais são realizadas, em geral, de três maneiras: *métodos eulerianos*, *métodos lagrangeanos* e *métodos híbridos*. Mais informações sobre esses métodos, suas respectivas vantagens e desvantagens, são remetidas a [Afonso Paiva]. Neste trabalho usa-se o método lagrangiano, cuja discretização numérica das equações, se dividem em métodos com malha e métodos sem malha.

- Métodos com Malhas. Neste método a região a qual as discretizações são levadas a cabo e os algorítimos computacionais são desenvolvidos é constituída por elementos, regulares ou não, descrevendo uma topologia, a qual, ao evoluir dinamicamente com o fluido, sofre as distorções e deformações inerentes ao movimento. Um exemplo desse método é o *método dos elementos finitos* (BRENNER, 1994).

- Métodos sem Malhas (LIU, 2003). Neste método não há nenhuma malha a ser descrita, pelo menos como cobertura total da região onde a dinâmica se desenvolve. O que se tem é uma distribuição finita de partículas que são usadas para discretizar as equações de governo do sistema dinâmico ao qual se tem interesse em resolver. Abaixo O objetivo do método é apresentar soluções numéricas((AUTH.), 1984) estáveis e acuradas para equações integrais e diferenciais parciais com condições de contorno, sujeitas a grandes deformações ou não, através de um conjunto de nós ou partículas sem que haja a conexão que os una. Nas figuras (a), (b) e (c) representa-se uma configuração de partículas dispostas sem a introdução de uma malha.

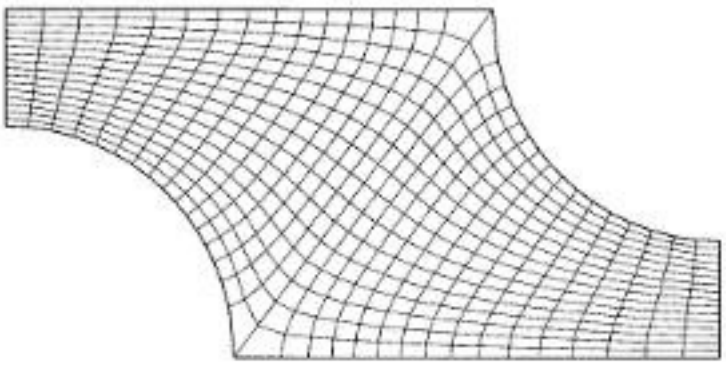


Figura 3 – Descrição de uma região arbitrária com o estabelecimento de uma malha.

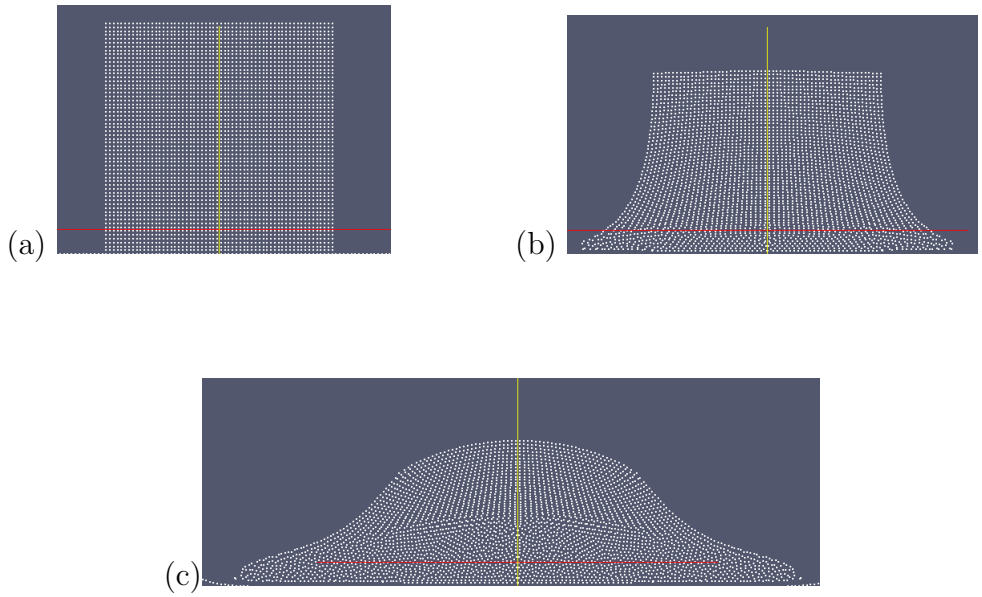


Figura 4 – (a) Descrição de uma porção de fluido sem o estabelecimento de uma malha. (b) e (c) Evolução da porção de fluido, sem malha, para diferentes instantes de tempo

4 Hidrodinâmica da Partícula Suavizada

Introdução

A hidrodinâmica da partícula suavizada (LIU, 2003), mais conhecido como SPH, é um método de aproximação para funções e operadores expressos em forma integral e posteriormente regularizados via inserção de um núcleo com certas propriedades matemáticas de forma a representar uma discretização por meio de um número finito de partículas indexadas.

A ideia por trás do SPH é substituir os elementos constituintes do seu objeto de estudo, no presente caso, uma dsitribuição de fluidos, por um conjunto de pontos que obedece às equações de governo e portam informações a respeito das propriedades do mesmo. Do ponto de vista matemático , esses pontos são simplesmente pontos de interpolação. Para o físico ou engenheiro, é natural vê-los como partículas materiais reais dotadas de informações, tais como, volume, densidade, pressão, temperatura, etc. Qualquer que seja o ponto de vista adotado, é necessário assinalar propriedades às partículas e derivar equações que descreverão como essas partículas se comportam representando fenômenos multifísicos quaisquer.

A vantagem do tratamento sem malhas é sua habilidade de resolver problemas que não podem ser efetivamente resolvidos usando-se outras técnicas numéricas. Ele não sofre do problema de distorção na malha, que limita o tratamento Lagrangeino baseado em malhas estruturadas, ao simular grandes deformações, como, por exemplo, explosões e impactos de alta velocidade.

Uma Breve História do Método O método SPH, foi inicialmente desenvolvido por Gingol e Lucy, em 1977 (GINGOLD R. A.; MONAGHAN, 1977), para a simulação de problemas astrofísicos, tais como formação e colisão de galáxias. Seu avanço foi um método para o cálculo de derivadas sem requerer uma malha computacional estruturada.

- Papers de revisão do Benz e Monaghan (BENZ, 1990) cobrem o desenvolvimento primordial do SPH.
- Libersky e Petchek (LIBERSKY, 2005) extendeu o método SPH a tratar o tensor de tensão em 2D.

Atualmente, o método SPH tem sido usado em muitas áreas, tais como as simulações de coalescência de buracos negros com estrêlas de nêutrons (LEE H. M. LEE, 1998), detonações únicas e múltiplas de anões brancas (GARCíA-SENZ; WOOSLEY, 1999) e até mesmo a evolução do universo. O método SPH tem sido, também, amplamente aplicado a uma vasta classe de problemas, desde a Mecânica dos Fluidos Computacional até à Mecânica dos Sólidos, por causa da habilidade relativamente forte de incorporar efeitos físicos complicados nas formulações SPH. Em algum sentido, o termo hidrodinâmica pode ser interpretado como mecânica, em geral.

Aplicações

As aplicações primordiais do SPH foram principalmente focalizadas na Dinâmica dos Fluidos e áreas correlatas. Estas incluem, por exemplo, escoamento elástico (SWEGLE J. W.; ATTAWAY, 1995) , magnetohidrodinâmica (MORRIS; FOX; ZHU, 1997), fluxos multi-fásicos (MONAGHAN; KOCHARYAN, 1995) e extensão SPH para a simulação da fratura de sólidos fragilizados (BENZ; ASPHAUG, 1995).

A aplicação do SPH a uma classe mais ampla de problemas tem levado a extensões e aprimoramentos significantes do método SPH original. Os aspéctos numéricos têm sido gradualmente aprimorado de forma que, algumas desvantagens inerentes do SPH foram identificadas e técnicas modificadas ou métodos corretivos foram também propostos. Identificaram o problema da instabilidade tensiva que pode ser importante para materiais sob tensão; Morris (1996) identificou o problema de inconsistência das partículas que pode levar a uma baixa acurácia na solução. Ao longo dos últimos anos, diferentes modificações ou correções têm sido propostas para restaurar a consistência e para melhorar a acurácia do método. Essas modificações levaram a várias versões do método SPH e correspondentes posteriores formulações.

4.0.4 Formulação essencial do SPH

Representação Integral de Uma Função

A formulação do método em questão é frequentemente dividido em dois passos-chave. O primeiro passo é a representação integral ou, a assim chamadas, aproximações de funções de campo por núcleos. A segunda, é a aproximação por partículas.

No primeiro passo, a integração da multiplicação de uma funçaõ arbitrária e uma função núcleo suavizante, fornece a núcleo-aproximação na forma de representação integral da função. Esta é então aproximada somando-se os valores das partículas vizinhas mais próximas, as quais fornecem a aproximação por partículas da função em um ponto ou partícula.

O conceito de representação integral de uma função $f(x)$, usada no método SPH, parte da seguinte identidade:

$$f(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}')\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')dx' \tag{4.1}$$

onde f é uma função do vetor posição tridimensional $\mathbf{x}$ e $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ é a função Delta de Dirac dada por

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \begin{cases} 1, & \mathbf{x} = \mathbf{x}' \\ 0, & \mathbf{x} \neq \mathbf{x}' \end{cases} \tag{4.2}$$

Na equação (4.1), Ω é o volume do integral que contém $\mathbf{x}$. Àquela implica que a função pode ser representada em uma forma integral. Desde que a função Delta de Dirac é usada, a representação integral na equação (4.1) é exata ou, rigorosamente falando, desde que $f(\mathbf{x})$ seja definida e contínua em Ω.

Se o núcleo $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ for substituido por uma função suavizante ou regularizante $W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)$, a representação integral de f será dada por

$$f(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)dx' \tag{4.3}$$

onde W é a chamada Função Núcleo Suavizante, Função Suavizante, ou ainda, Núcleo Suavizante. Neste trabalho, por brevidade, chamaremos simplesmente núcleo. Na função suavizante, h é o comprimento suavizante definindo a área de influência da função W. Note que, uma vez que W não é a função Delta de Dirac, a representação integral em (4.3) pode somente ser uma aproximação.

Na convenção SPH, o operador de aproximação por núcleo é denotado por $\langle . \rangle$ de forma que a equação (4.3) é reescrita como

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)dx' \tag{4.4}$$

Note que o sinal de igual é usado na eq. (4.4), que é a expressão padrão para a aproximação pelo núcleo de uma função.

A função suavizante W é usualmente escolhida como uma função par, por razões dadas posteriormente. Ela também deve satisfazer um certo número de condições. A primeira é a condição de normalização, a qual estabelece:

$$\int_{\Omega} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}')dx' = 1 \tag{4.5}$$

Esta condição é também conhecida, em análise harmônica, de resolução da identidade, desde que a integração da função suavizante produz a unidade. A segunda condição

é a propriedade da função delta que é observada quando o comprimento suavizante h tende para zero:

$$\lim_{h\to 0} W(\mathbf{x}-\mathbf{x}',h) = \delta(x-x') \tag{4.6}$$

A terceira condição é a de ter suporte compacto

$$W(\mathbf{x}-\mathbf{x}',h) = 0, \qquad |\mathbf{x}-\mathbf{x}'| > \kappa h \tag{4.7}$$

onde κ é uma constante relacionada à função suavizante para o ponto em $\mathbf{x}$ e define a área efetiva, não-nula, da função suavizante. Esta área efetiva é chamada de suporte do domínio para a função suavizante do ponto $\mathbf{x}$. Usando essa condição de compacidade, a integração sobre todo o domínio do problema é localizada como integração sobre o suporte do domínio da função suavizante. Assim, o domínio de integração Ω pode ser e, usualmente é, o suporte do domínio.

Nas literaturas SPH, a aproximaçção por núcleo frequentemente é dita possuir acurácia da ordem de h^2, ou acurácia de segunda ordem.

Note, da eq. (4.7), que o suporte do domínio da função suavizante é $|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|\ \ \kappa h$; os erros na representação integral SPH pode ser estimado, de maneira grosseira, usando-se a expansão em série de Taylor de $f(\mathbf{x}')$ em torno de $\mathbf{x}$, onde $f(\mathbf{x})$ é diferenciável. Usando-se a eq. (4.4) teremos

$$\begin{aligned}\langle f(\mathbf{x})\rangle = \int_\Omega [f(\mathbf{x}) + f'(\mathbf{x})(\mathbf{x}'-\mathbf{x}) + r((\mathbf{x}'-\mathbf{x})^2)]W(\mathbf{x}-\mathbf{x}',h)dx' = \\ f(\mathbf{x})\int_\Omega W(\mathbf{x}-\mathbf{x}',h)dx' + f'(\mathbf{x}\int_\Omega (\mathbf{x}'-\mathbf{x})W(\mathbf{x}-\mathbf{x}',h)dx' + \\ +r(h^2)\end{aligned} \tag{4.8}$$

onde r representa o resíduo. Note que W é uma função par em relação a $\mathbf{x}$, assim $(\mathbf{x}'-\mathbf{x})W(\mathbf{x}-\mathbf{x}',h)$ deve ser uma função ímpar, de forma que devemos ter

$$\int_\Omega (\mathbf{x}'-\mathbf{x})W(\mathbf{x}-\mathbf{x}',h)dx' = o \tag{4.9}$$

Usando-se (4.5) e (4.9), a eq. (4.8) torna-se

$$\langle f(\mathbf{x})\rangle = f(\mathbf{x}) + r(h^2) \tag{4.10}$$

No entanto, essa aproximação não será necessariamente de segunda ordem se a função suavizante não for uma função par, ou se a condição de normalização não for satisfeita.

Representação Integral da Derivada de uma Função

A aproximação para a derivada espacial $\nabla \cdot f(\mathbf{x})$ é obtida simplesmente substituindo-se $f(\mathbf{x})$ por $\nabla \cdot f(\mathbf{x})$ na *eq.*(4.4), que fornece

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} [\nabla \cdot f(\mathbf{x}')] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) dx' \tag{4.11}$$

onde a divergência no integral é operada em relação à coordenada 'linha'. Desde de que

$$[\nabla f(\mathbf{x}')] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) = [\nabla \cdot f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] - f(\mathbf{x}') \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) \tag{4.12}$$

Da *eq.*(4.11), a seguinte equação é obtida

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} [\nabla \cdot f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] dx' - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) dx' \tag{4.13}$$

O primeiro integral no lado direito da *eq.*(4.13) pode ser convertida, usando-se o Teorema da Divergência, em um integral na superfície $\partial\Omega$ do domínio de integração , Ω

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\partial} \Omega f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) \cdot \mathbf{n} dS - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) dx' \tag{4.14}$$

onde $\mathbf{n}$ é a normal exterior unitária à superfície S.

Desde que a função suavizante W é definida como tendo suporte compacto, quando o suporte do domínio está localizado dentro do domínio do problema (Figura 4.1), o integral de superfície do lado direito da *Eq.*(4.14) é nulo. Se o suporte do domínio intercepta-se com o domínio do problema (Figura 4.2), a função suavizante W é truncada pelo contorno de forma que o integral de superfície não se anula. Sobre tais circunstâncias, modificações deveriam ser consideradas para remediar os efeitos de bordo se a integração na superfície for considerada nula na *Eq.*(4.14).

Assim, para aqueles pontos cujo suporte do domínio está no interior do domínio do problema, (4.14) simplifíca-se a

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle = - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) dx' \tag{4.15}$$

Da equação acima, pode ser visto que a operação diferencial na função é transmitida a uma operação diferencial na função suavizante. Em outras palavras, a representação integral SPH da derivada de um campo de funções faz com que o gradiente espacial seja

determinado a partir dos valores da função e das derivadas da função suavizante W, ao contrário da derivada da função em si. Isso pode parecer irrelevante mas, como pode ser visto, calcular derivadas em W é, em princípio, trivial. Já para as classes de funções gerais, as dificuldades inerentes às funções, surgem. Veja-se, por exemplo, o operador laplaciano.

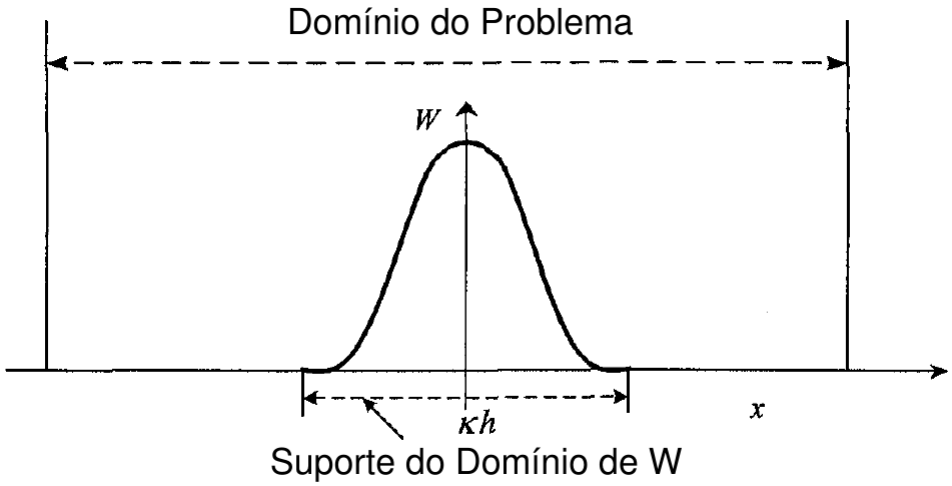


Figura 5 – O domínio do suporte da função suavizante W e o domínio do problema. O suporte do domínio está localizado dentro do domínio do problema. Assim, o integral de superfície do lado direito da equação (4.14) é nulo

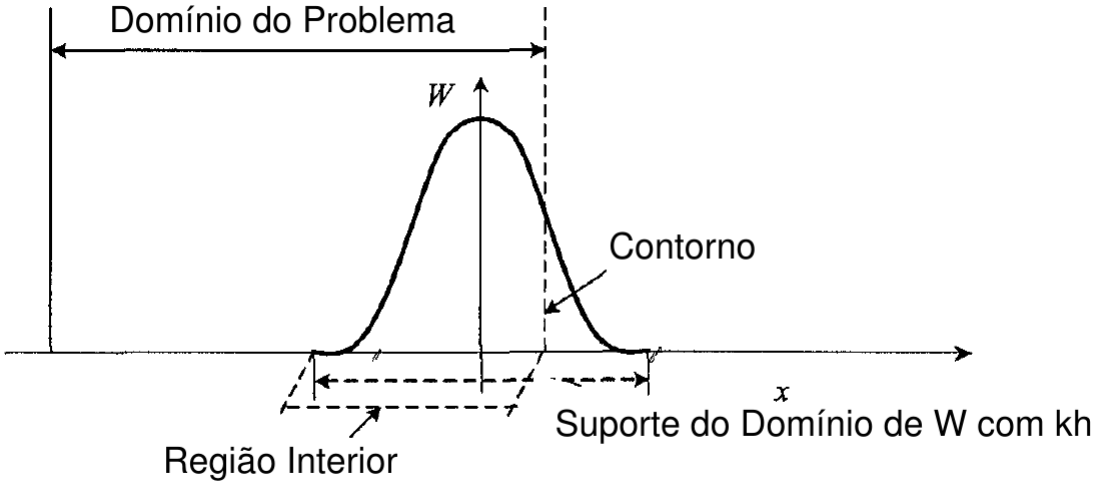


Figura 6 – O domínio do suporte da função suavizante W e o domínio do problema. O suporte do domínio se intercepta com o domínio do problema. Assim, a função suavizante W é truncada pelo bordo e o integral de superfície no lado direito da equação (4.14) não se anula.

Aproximação por Partículas

No método SPH, todo o sistema é representado por um número finito de partículas que portam massa individual e ocupam um espaço individual. Isto é levado a cabo pela seguinte aproximação por partículas, que é uma outra operação-chave no método SPH (D., 2012).

As representações integrais contínuas, concebendo a aproximação por núcleo SPH, de que tratam as equações (4.4) e (4.15), podem ser convertidas em suas formas discretas em termos de somas sobre todas as partículas no suporte do domínio mostrado na Figura (4.3). O correspondente processo de soma discretizada sobre as partículas é comumente conhecido como aproximação por partículas, na literatura SPH. Este processo é levado a cabo como segue.

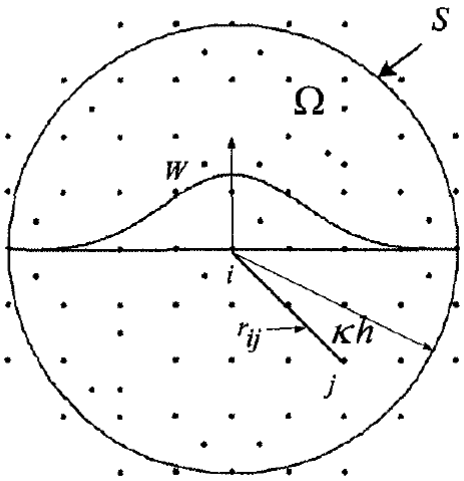


Figura 7 – As aproximações por partículas dentro do suporte do domínio da função suavizante W, para a partícula i. O suporte do domínio é circular de raio kh

Se o volume infinitesimal nas integrações acima, $d\mathbf{x}'$, na posição da partícula j, for substituída por um volume finito, ∇V_j, da partícula cuja massa é m_j, teremos

$$m_j = \nabla V_j \rho_j \tag{4.16}$$

onde ρ_j é a densidade da partícula j ($j = 1, 2, ..., n$), no qual n é o número de partículas dentro do suporte do domínio da partícula j.

A representação integral contínua SPH para $f(\mathbf{x})$ pode ser escrita na seguinte forma, discretizada, para aproximação por partículas

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &= \int_\Omega f(\mathbf{x}')W(\mathbf{x}-\mathbf{x}', h)dx' \\ &\cong \sum_{j=1}^{n} f(\mathbf{x_j})W(\mathbf{x}-\mathbf{x_j}, h)\nabla V_j \end{aligned} \tag{4.17}$$

$$= \sum_{j=1}^{n} f(\mathbf{x_j}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x_j}, h) \frac{1}{\rho_j} (\rho_j \nabla V_j)$$
$$= \sum_{j=1}^{n} f(\mathbf{x_j}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x_j}, h) \frac{1}{\rho_j} (m_j)$$

ou

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n} \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x_j}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x_j}, h) \tag{4.18}$$

Note que a aproximação por partículas é realizada no segundo passo na dedução acima e esta, para uma função na partícula i pode, finalmente, ser escrita como

$$\sum_{j=1}^{n} \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x_j}) W_{ij} \tag{4.19}$$

onde $W_{ij} = W(\mathbf{x_i} - \mathbf{x_j})$

A equação (4.19) estabelece que o valor de uma função na partícula i é aproximada usando-se a média daqueles valores da função em todas as partículas no suporte do domínio da partícula i com o peso da função suavizante W.

Seguindo o mesmo raciocínio, a aproximação por partículas para a derivada espacial da função será

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}) \rangle = -\sum_{j=1}^{n} \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x_j}) \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x_j}, h) \tag{4.20}$$

onde o ∇W, na equação acima, deve ser tomada em relação à partícula j. A aproximação por partículas para uma função na partícula i pode finalmente ser escrita como

$$\langle \nabla f(\mathbf{x_i}) \rangle = -\sum_{j=1}^{n} \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x_j}) \nabla W_{ij} \tag{4.21}$$

onde

$$\nabla_i W_{ij} = \frac{\mathbf{x_i} - \mathbf{x_j}}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} = \frac{\mathbf{x_{ij}}}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} \tag{4.22}$$

onde r_{ij} é a distância entre a partícula i e j. Deve-se notar que o $\nabla_i W_{ij}$ (ver apêndice 2) é tomado em relaçao à partícula i de forma que o sinal negativo na equação (4.21) é removido.

De um modo geral, para quaisquer duas funções arbitrárias nas variáveis de campo f_1 e f_2, as seguintes regras se verificam

$$\langle f_1 + f_2 \rangle = \langle f_1 \rangle + \langle f_2 \rangle \tag{4.23}$$

$$\langle f_1 \cdot f_2 \rangle = \langle f_1 \rangle \cdot \langle f_2 \rangle \tag{4.24}$$

Funções Suavizantes

Uma das ideias centrais para os métodos sem malhas é como realizar, efetivamente, uma aproximação da função baseada em um conjunto de nós, dispostos de uma maneira arbitrária, sem usar uma malha pré-definida que proporcione a conectividade entre esses nós. O método SPH emprega a representação integral usando-se uma função suavizante, também chamada função núcleo suavizante ou simplesmente núcleo. Este, por sua vez, é de grande importância uma vez que, não somente determina o padrão para a aproximação da função, mas define a dimensão do suporte do domínio das partículas, e também determina a consistência e, consequentemente, a acurácia de ambos: núcleo e aproximação por partículas. A seguir listamos as princípais propriedades que devem possuir essas funções ((AUTH.), 2010) de forma a se ter uma representação consistente para o uso em SPH.

1. A função suavizante deve ser normalizada (unitária) sobre o suporte do domínio, conforme discutido anteriormente.

$$\int_\Omega W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)dx' = 1 \tag{4.25}$$

2. A função suavizante deve ter suporte compacto, isto é,

$$W(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = 0, para \mid \mathbf{x} - \mathbf{x}' \mid > \kappa h \tag{4.26}$$

   A dimensão do suporte compacto é definido pelo comprimento suavizante h e o fator de escala κ o qual determina o espalhamento da função suavizante especificada.

3. $W(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \geq 0$ para qualquer ponto em $\mathbf{x}'$ dentro do suporte do domínio da partícula no ponto $\mathbf{x}$ (Positividade).

4. O valor da função suavizante para uma partícula deve ser monotonicamente decrescente com o aumento da distância a partir da partícula (Decaimento).

5. A função suavizante deve satisfazer a condição da função delta de Dirac quando o comprimento suavizante tende a zero (Propriedade da função Delta)

$$\lim_{h \to 0} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) = \delta(x - x') \tag{4.27}$$

6. A funçção suavizante de ve ser uma função par (Propriedade de Simetria).

7. A função suavizante deve ser suficientemente suave (Suavidade)

Uma função tendo as propriedades acima pode ser empregada como núcleos em SPH. Segue adiante algumas funções suavizantes mas utilizadas por cientistas da área.

No paper original em SPH (GINGOLD R. A.; MONAGHAN, 1977), usou a seguinte função sino, Figura (4.4), como função suavizante.

$$W(\mathbf{x}-\mathbf{x}',h) = W(R,h) = \alpha_d \begin{cases} (1+3R)(1-R)^3, & R \leq 1 \\ 0, & R > 1 \end{cases} \tag{4.28}$$

onde α_d é $5/4h$, $5/\pi h^2$ e $105/16\pi h^3$ em, uma, duas e três dimensões, respectivamente, de forma que a condição de unidade pode se satisfeita em todas as três dimensões.

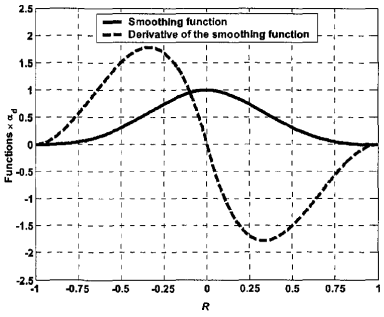


Figura 8 – As função suavizante e sua primeira derivada usada por Lucy (1977). α_d é $5/4h$, $5/\pi h^2$ e $105/16\pi h^3$ em, uma, duas e três dimensões, respectivamente.

Na equação (4.28), R é a distância relativa entre dois pontos (partículas) nos pontos $\mathbf{x}$ e $\mathbf{x}'$, R $= \frac{r}{h} = \frac{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}{h}$, onde r é a distância entre dois pontos.

Monaghan estabeleceu que, para se extrair significado físico de uma equação SPH, é sempre melhor assumir que a função suavizante seja uma gaussiana. Gingold e Monaghan (1977)(GINGOLD R. A.; MONAGHAN, 1977), em seu Paper original, selecionou o seguinte núcleo Gaussiano, Figura (4.5), para simular estrelas não esféricas.

$$W(R,h) = \alpha_d e^{-R^2} \tag{4.29}$$

Vantagem: Matematicamente elegante;

Vantagem: As derivadas existem em todas as ordens e são suaves;

Desvantagem: Todas as partículas contribuem para um local.

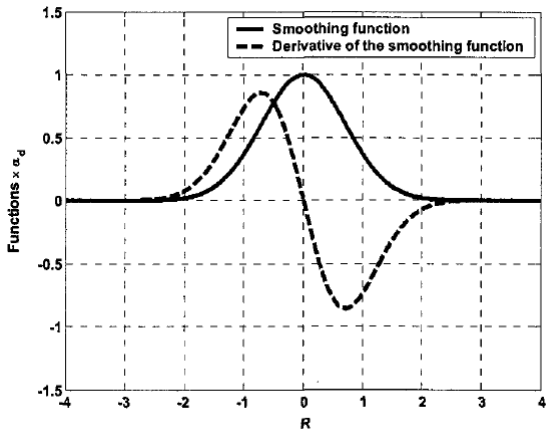


Figura 9 – As função suavizante e sua primeira derivada usada por Lucy (1977). α_d é $1/\sqrt{\pi}h$, $1/\pi h^2$ e $1/\pi^{3/2}h^3$ em, uma, duas e três dimensões, respectivamente.

Monaghan e Lattazio(Monaghan; Lattanzio, 1985), inventaram a seguinte função suavizante, Figura (4.6), baseada nas funções spline cúbica, conhecida como função B-spline.

$$W(R,h) = \alpha_d \begin{cases} \frac{2}{3} - R^2 + \frac{1}{2}R^3, & 0 \leq R < 1 \\ \frac{1}{6}(2-R)^3, & 1 \leq R < 2 \\ 0, & R \geq 2 \end{cases} \tag{4.30}$$

A função spline cúbica, até aqui, tem sido a mais amplamente usada como função suavizante nas literaturas SPH, desde que ela se assemelha a uma função gaussiana enquanto tiver um suporte compacto mais estreito. No entanto, a segunda derivada da spline cúbica são funções lineares por partes e, de acordo com isso, as propriedades de estabilidade podem ser inferiores àquelas de núcleos mais suaves.

Vantagem: Suporte compacto$\longrightarrow$ todas as interações são nulas para r $>2h$, logo, o número de partículas envolvidas, em média, permanece pequena (timpicamente entre 30 e 80);

Vantagem: Derivada segunda é contínua;

Vantagem: O termo de erro dominante é de segunda ordem em h.

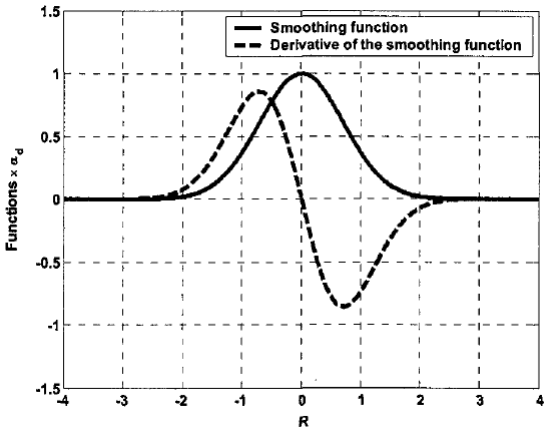


Figura 10 – Núcleo spline cúbico e sua primeira derivada. α_d é $1/h$, $15/7\pi h^2$ e $3/2\pi h^3$ em, uma, duas e três dimensões, respectivamente.

Funções Suavizantes em R^n

Sejam $\mathbf{x}$ e $\mathbf{x}' \in R^n$, em que $\mathbf{x}$= $(x_1, ..., x_n)$ e $\mathbf{x_I}$= $(x'_1, ..., x'_n)$. As funções suavizantes para o caso multidimensional podem ser definidas a partir do caso unidimensional $W(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$. Os dois processos mais frequentes são

$$W(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = W(|| \mathbf{x} - \mathbf{x}' ||) \tag{4.31}$$

$$W(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \prod_{j=1}^{n} W(| \mathbf{x_j} - \mathbf{x'_j} |) \tag{4.32}$$

O domínio de influência de um ponto $\mathbf{x}'$= (x', y') abrange uma área e a escolha da forma do domínio é arbitrária. No caso bidimensional, por exemplo, quando se opta pelo primeiro processo para definir a função suavizante, está-se a usar uma forma circular. No segundo processo, tem-se uma forma retangular, que neste caso é dada portam

$$W(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \equiv W(r_x) \cdot W(r_y) \tag{4.33}$$

onde

$$r_x = \frac{| \mathbf{x} - \mathbf{x}' |}{h_x}, \qquad h_x = d_{max} d_x. \tag{4.34}$$

$$r_y = \frac{| \mathbf{y} - \mathbf{y}' |}{h_y}, \qquad h_y = d_{max} d_y. \tag{4.35}$$

Fazemos aqui $h_y = h_x$ por motivos de consistências físicas relacionadas com a 3ªLei de Newton.

A figura (4.7) abaixo ilustra o caso da função suavizante spline cúbica, $W(|| \mathbf{x}-\mathbf{x}' ||)$, para o caso bidimensional em que se considerou $\mathbf{x}' = (0, 0)$.

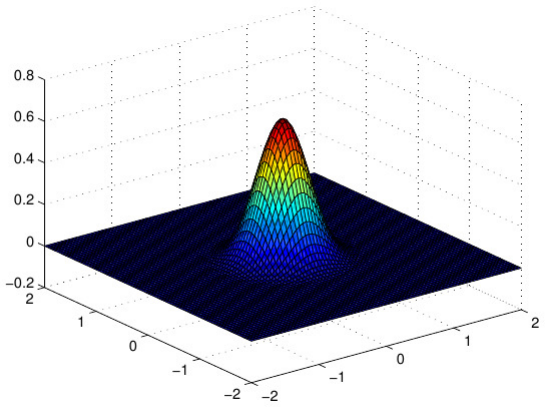


Figura 11 – Representação da função suavizante $W(|| \mathbf{x} - \mathbf{x}' ||)$ spline cúbica, em que se considerou $\mathbf{x}' = (0, 0)$

O método SPH é um procedimento puramente lagrangeano; logo, todo o sistema é representado por um conjunto finito de partículas que possuem atributos individuais. Consequentemente, a representação integral contínua da aproximação *SPH* pode ser discretizada através de um somatório sobre todas as partículas que estão no interior de uma região delimitada pelo comprimento suavizante, como vimos anteriormente.

Aproximação SPH das derivadas espaciais Uma vez que a abordagem em questão é utilizada para aproximar equações diferenciais parciais através de uma formulação integral, o principal procedimento para estabelecer a dinâmica de um sistema é saber como representar e discretizar os operadores diferenciais através do método SPH. A aproximação SPH do gradiente da função escalar $f(\mathbf{x})$ é inicialmente obtida substituindo-se $f(\mathbf{x})$ por $\nabla f(\mathbf{x})$ na equação (4.18) o que levará à equação (4.21). Para os outros operadores que iremos utilizar ao longo do modelo, o procedimento é, com pequenas diferenças, semelhante ao processo anterior. Teremos então a seguinte

Regra SPH para o divergente. Seja $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ um campo vetorial. Teremos:

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}) \rangle = \sum_{j \in N(x_i)} (\mathbf{A}(\mathbf{x_i}) - \mathbf{A}(\mathbf{x_j})) \cdot \nabla_i W_{ij} \frac{m_j}{\rho_j} \tag{4.36}$$

Aproximação SPH para o Laplaciano. A Equação (3.28), que governa a distribuição de velocidades e pressões de um fluido, apresenta um termo de segunda derivada: $\nabla^2\mathbf{v}$. Esse termo requer uma aproximação por partículas. As derivadas de segunda ordem podem ser aproximadas utilizando-se a convolução SPH usual, através do laplaciano do núcleo para cada partícula i:

$$\langle\nabla^2\mathbf{v}\rangle = \sum_{j\in N(x_i)} \frac{m_j}{\rho_j}\mathbf{v}\nabla_i^2 W_{ij} \tag{4.37}$$

Porém, a equação (4.35) possui algumas desvantagens. Primeiro, essa aproximação é muito sensível à desordem das partículas (NETO, 2007). Segundo, se estivéssemos tratando de um processo difusivo, de uma partícula i para uma partícula j, o sinal poderia ser positivo ou negativo devido à mudança de sinal da derivada de segunda ordem do núcleo, como pode ser visto na figura (4.8) Por outro lado, como o processo de difusão é

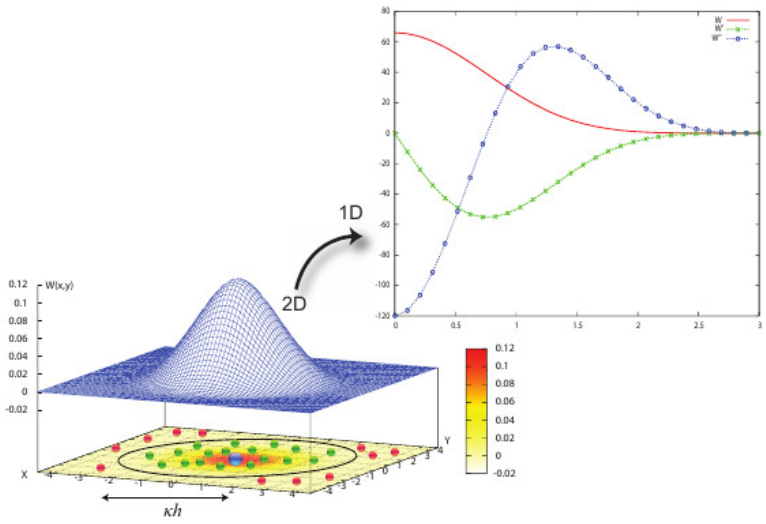


Figura 12 – Função Núcleo: partículas fora do raio de influência κh são descartadas. Destaca-se o gráfico do núcleo 1D e de suas derivadas de primeira e segunda ordens. Figura retirada de (NETO, 2007)

um caso paticular de processos de transporte, que são aqueles em que há transferências "direcionadas" de energia interna (como na condução interna), de massa (tal qual ocorre na difusão de uma gás), de momento linear (caso dos fluidos), etc., em meios supostamente contínuos (ou quase contínuos). Assim, se uma determinada região do espaço é ocupada, por exemplo, por um gás cuja concentração (ou densidade) não é uniforme, ocorrerá um processo de difusão (transferência de partículas do gás), dos pontos que apresentam maior concentração, para aqueles outros onde a concentração é menor. Este processo também se verifica em soluções líquidas, onde a concentração do soluto não é uniforme. Segue-se

então, que a equação (4.35) apresentaria inconsistências físicas. Para evitar essas inconsistências, utilizaremos uma aproximação do operador laplaciano proposta por (CLEARY; MONAGHAN, 1999) que envolve apenas derivadas de primeira ordem. Essa aproximação é deduzida a partir da integral

$$\mathbf{I} = \int (\mathbf{v}(\mathbf{x}) - \mathbf{v}(\mathbf{x}'))F(\mathbf{x} - \mathbf{x}')d\mathbf{x}' \tag{4.38}$$

tal que a função F é definida por

$$\mathbf{x}F(\mathbf{x}, h) = \nabla W(\mathbf{x}, h). \tag{4.39}$$

Expandindo o termo $\mathbf{v}(\mathbf{x}')$ no integrando de (4.36) em Série de Taylor (PISKUNOV, 1969) em torno de $\mathbf{x}$, até os termos de segunda ordem, temos

$$\mathbf{I} = \nabla^2\mathbf{v}(\mathbf{x}) + r(h^2) \tag{4.40}$$

Portanto, tomando a forma SPH da integral (4.36) para uma partícula i e escolhendo

$$F(\mathbf{x}, h) = \frac{\mathbf{x} \cdot \nabla W(\mathbf{x}, h)}{\|\mathbf{x}\|}, \tag{4.41}$$

finalmente teremos

$$\langle \nabla^2\mathbf{v}_i \rangle = \sum_{j \in N(x_i)} \frac{m_j}{\rho_j}\mathbf{v}_{ij}\frac{\mathbf{x}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij}}{|\mathbf{x}_{ij}|^2} \tag{4.42}$$

onde $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i$ - $\mathbf{v}_j$. Devido ao fato de $\mathbf{x}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij}$ 0, a equação (4.40) tem a propriedade de que, se $\mathbf{v}_i > \mathbf{v}_j$, então o fluxo de partículas será realizado da partícula i para partícula j e vice-versa.

4.0.5 Exemplos Práticos

No que se segue exibiremos alguns casos práticos em que a dinâmica de um fluido é simulado através do método corrente em uso.

- Transporte de Velocidades. Neste caso temos o problema da cavidade motora (Driven Cavity Problem) para o qual se usou a formulação de transporte de velocidade (ADAMI; HU; ADAMS, 2013). Um resultado da simulação com o método SPH pode ser visto na figura abaixo

- Colisão de dois anéis elásticos. A figura abaixo ilustra a simulação da colisão de dois anéis elásticos modelados por um número finito de partículas. As equações que governam a dinâmica dos objetos são discretizadas pelo método SPH (GRAY; SWIFT, 2001).

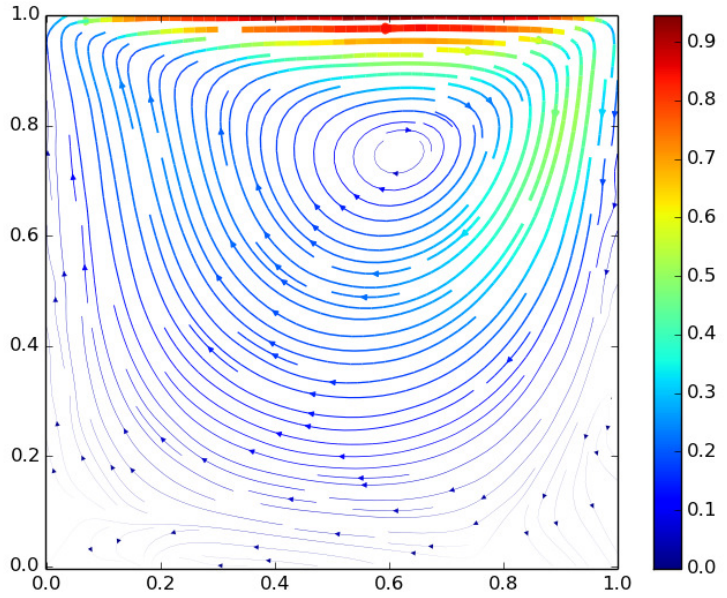


Figura 13 – Transporte de velocidade. Figura extraida de PYSPH

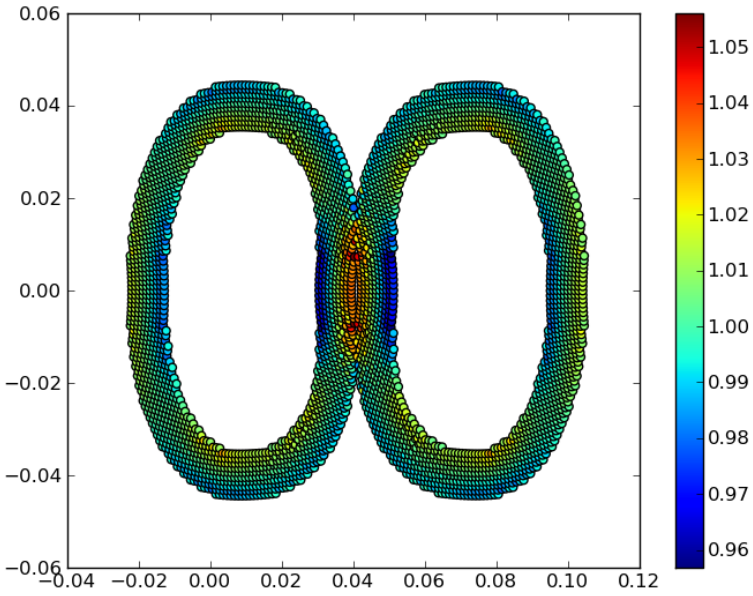


Figura 14 – Dinâmica da colisão de dois anéis elásticos via sph. Figura extraida de PYSPH

- Aquaplanagem.

A figura mostra a simulação feita com o método SPH para a interação sólido-fluido do fenômeno da aquaplanagem, através do método SPH.

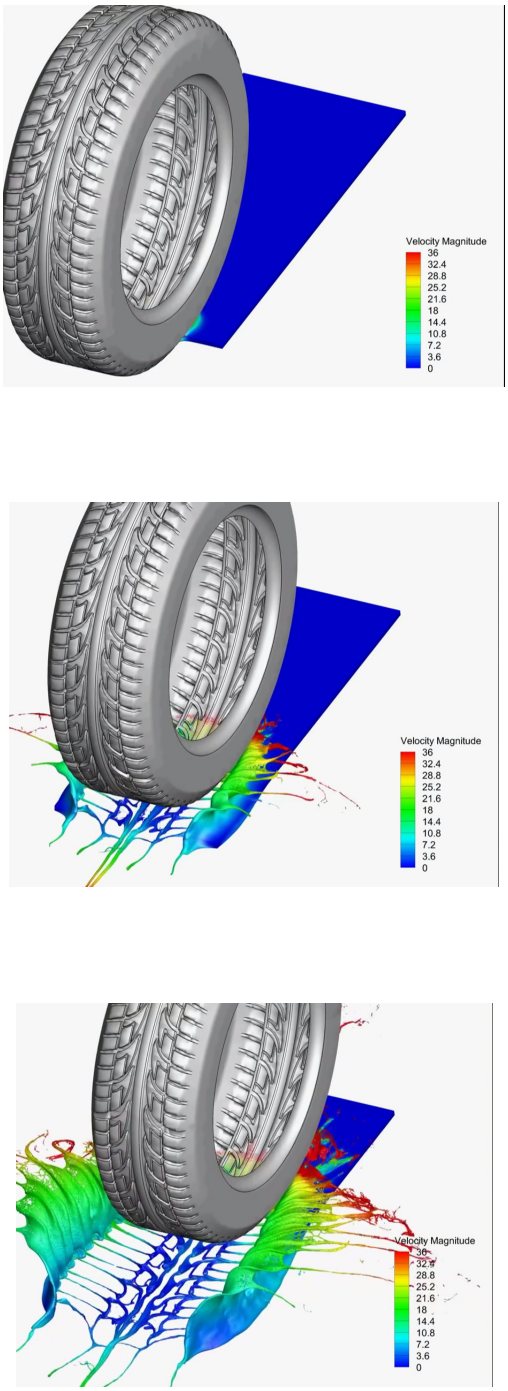


Figura 15 – Fenômeno da aquaplanagem. Figura retirada da HYDROCEAN SPH-FLOW.

5 Condições de Contorno

Uma equação diferencial definida em um domínio $\Omega \subset$ de R^n vem, em muitos exemplos de interesse, acompanhada de condições a serem satisfeitas pelas soluções e suas derivadas na fronteira de Ω (que eventualmente podem estar no infinito). Tais condições são genericamente denominadas condições de contorno, ou condições de fronteira, ou condições iniciais, dependendo da interpretação que possuam. Em aplicações, condições de contorno usualmente são ditadas ou por leis físicas (FEYNMAN, 2000) ou por restrições físicas ou geométricas que devem ser impostas à solução nos pontos da fronteira de Ω, (JR., 2016) . As formulações SPH, válidas para todas as partículas pertencentes ao domínio do fluido, ou seja, no interior do domínio, não são necessariamente válidas, no sentido de precisão, para as partículas na vizinhança da fronteira, uma vez que a função distribuição (núcleo) é truncada pelo contorno. Isso já é de se esperar uma vez que, no raio de atuação definido pelo comprimento suavizante no local -perto da parede-, o número de partículas de fluido cai muito em quantidade, fornecendo uma média baixa. Assim, a aplicação das condições de contorno é muito complicada na técnica SPH, uma vez que, essa aproximação, em geral, não apresenta acurácia de segunda ordem. Assim sendo, os tratamentos das condições de contorno têm sido uma preocupação constante para uma implementação precisa e de sucesso na técnica SPH para a solução dos problemas da física e engenharia, com domínios estabelecidos.

O tratamento impróprio das condições de fronteira leva a basicamente dois tipos de problemas. O primeiro origina-se da penetração das partículas de fluido nas fronteiras (paredes), nas quais deixam o domínio limitado, levando-se a inconsistências. O segundo, é que o truncamento do núcleo na fronteira produzirá erros na solução.

5.1 Alguns Tipos de Condições de Contorno

As condições de contorno mais usadas na técnica SPH são sumariamente descritas abaixo.

5.1.1 Método Baseado na Força

Esta técnica basicamente envolve a criação de partículas de contorno (parede feita de partículas) ao longo das fronteiras, de forma que essas partículas exercem uma força repulsiva nas partículas de fluido vizinhas a elas. A força exercida tem uma gama de variações, dependendo da forma funcional que descreve a força. Um número variado de funções tem sido usadas por vários cientistas e algumas destras são dadas a seguir:

- **Monagham e Cos**. Como descrito por Monagham e Cos (MONAGHAN; KOS, 2001), às partículas da fronteira são assinaladas posições ao longo da fronteira (linha de partículas). A força devido à partícula na fronteira é calculada baseada nas componentes normal e tangencial do vetor separação da partícula de fluido até ela. Sendo assim, é importante que tenhamos uma maneira de calcularmos as distâncias normal e tangencial entre duas partículas. Uma visualização disto é mostrada abaixo: A forma funcional da força, neste caso, é dado por:

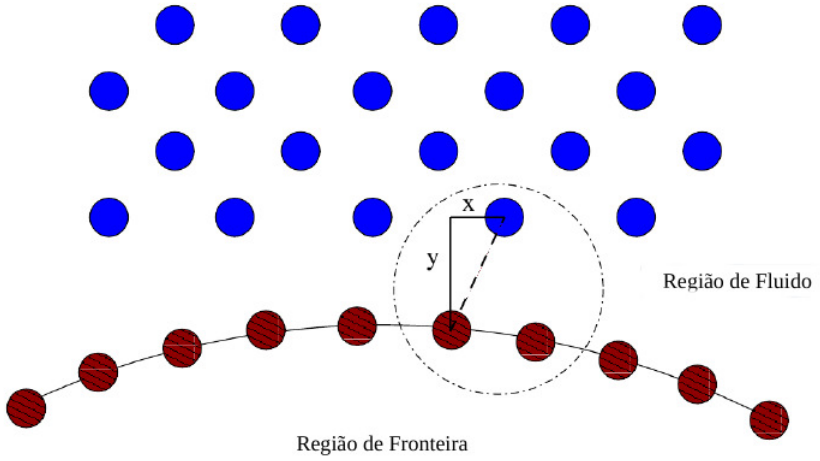


Figura 16 – As partículas afastadas (em azul) são partículas de fluido, ao passo que as partículas dispostas ao longo da linha (em vermelho), são as partículas da fronteira (corpo sólido ou parede)

$$f = nR(y)P(x) \tag{5.1}$$

onde

- f é a força;
- n é a normal à partícula da fronteira;
- x é a componente tangencial da distância;
- y é a componente normal da distância.

Explicitamente temos:

$$R(y) = \frac{A(1-q)}{\sqrt{q}}, \quad q = \frac{y}{2p_0} \tag{5.2}$$

onde p_0 é o espaçamento inicial entre as partículas. Com essas condições, a uma distância da ordem de algumas partículas da fronteira, a função $R(y)$ já tende a zero. O valor da constante A é dado por

$$A = \begin{cases} \frac{1}{h}(0,01c + \beta c\vec{v}_{ab} \cdot \vec{n}_b) & \text{se fluido se aproxima da fronteira} \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

onde $\beta = 1$.

$$P(x) = \begin{cases} 0,5[1 + \cos(\frac{\pi x}{p_0})], & \text{se } x < p_0 \\ 0, & \text{se } x \geq p_0 \end{cases}$$

- **SPH Modificado (Monaghan)**
  Esta técnica é apresentada em Monaghan (MONAGHAN, 2005). Ela é similar àquela apresentada anteriormente, a única diferença estando na maneira que a força é calculada. Nesse caso temos novas definições para as funções R e P:

$$R(y) = \nabla W(q)\beta, \quad \beta = 0,01c \tag{5.3}$$

  e

$$P(x) = \begin{cases} [1 - (\frac{x}{p_0})], & \text{se } 0 < x < p_0 \\ 0, & \text{outro} \end{cases}$$

- **Monaghan (MONAGHAN, 1994) - Escoamento em Superfície Livre (Força de Lennard-Jones)** Este também é um método baseado em força. No entanto, o cálculo da força é feito de maneira diferente dos dois casos anteriores.

$$\vec{f} = D[(\frac{r_0}{r})^{p_1} - (\frac{r_0}{r})^{p_2}]\frac{\vec{r}}{r} \tag{5.4}$$

  onde:

  - $\vec{r}$ é a distância entre a partícula de fluido e a partícula da fronteira;
  - $p_1 > p_2$, por exemplo, 4 e 2, ou mais comumente 12 e 6;
  - D é um parâmetro que depende do problema e tem dimensão de velocidade ao quadrado $(5ngH)$, $n \in N$;
  - r_0 é o espaçamento inicial.

  Se efeitos viscosos forem levados em consideração, então as partículas de fronteira devem ser incluídas no cálculo da tensão viscosa, em todos os métodos baseados em força. Ao inicializar-se a rotina, deve-se assegurar que nenhuma partícula esteja tão próxima à fronteira que contenha superfície curva -quinas, por exemplo-, uma vez que as forças nessa região são altíssimas. O estado de equilíbrio inicial é assegurado por um termo resistivo na equação de momento $-\tau u$, u sendo a velocidade.

5.1.2 Método das Partículas Fantasmas

Quando uma partícula está próxima a uma fronteira (ou seja, a uma distância menor do que o comprimento suavizante h), então uma partícula virtual, chamada de fantasma,(LIBERSKY, 2005) é criada na parte exterior da fronteira pelo método da imagem, ou seja, tomando a imagem de uma dada partícula em relação à fronteira. Ambas as classes de partícula, de fronteira e fantasma, possuem as mesmas propriedades, exceto,

obviamente, velocidades, as quais são em sentidos opostos. Isto previne as partículas de sofrerem penetração, uma vez que essa escolha estabelece a velocidade normal (perpendicular) muito bem. Uma outra técnica (Técnica Uni-fronteira Tangente) que pode ser implementada sugere que as partículas fantasmas sejam criadas durante a geração da partícula em si e, baseado na distância normal a partir da tangente à fronteira correspondente a esta partícula, sua velocidade seja calculada. Operacionalmente teremos:

$$\vec{u_g} = -\frac{d_g}{d_f}\vec{u_f} \tag{5.5}$$

Este método tem sido usado por um número considerável de pesquisadores da área. O único problema que surge é que ele é um pouco complicado para se implementar uma vez que ele envolve a geração de partículas como uma função de distância e ângulo. Assim, faz-se necessário calcular componentes normal e tangencial às partículas. Uma visualização do tratamento Única Fronteira Tangente é mostrado abaixo: Os seguintes

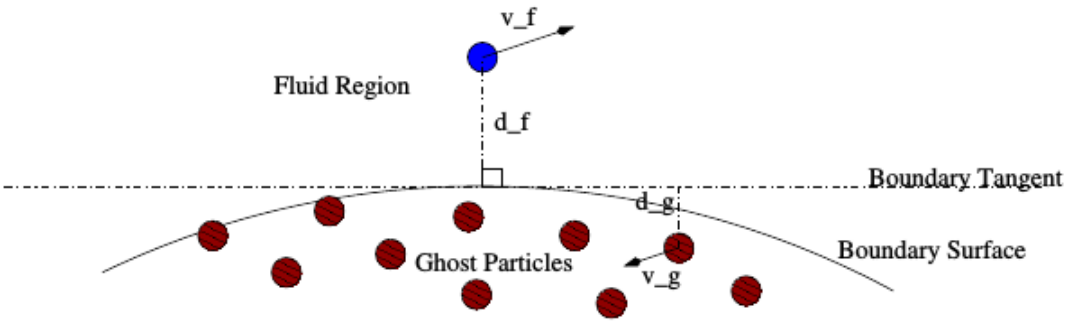


Figura 17 – Um variante deste é o Método da Multi-fronteira tangente descrito em M. Yildiz e Suleman (2008), & SPHysics.

passos são envolvidos no processo:

1. A cada passo de tempo, para todas as partículas do contorno, retas tangentes são calculadas;

2. Dado que cada partícula de fronteira tenha uma partícula de fluido em seu domínio de influência como vizinha, essas partículas de fluido são espelhadas em relação à reta tangente à partícula de fronteira correspondente.

3. Durante a implementação SPH sobre as partículas fantasmas, para uma partícula de fluido com um truncamento na fronteira, as massas das partículas fantasmas são divididas pelo número das correspondentes às partículas criadas em excesso.

5.1.3 Combinação do Método da Força com Partículas Fantasmas

Este método é descrito em Ferrari *at al.*(FERRARI, 2010). Ele utiliza partículas de fronteira como nos métodos de força mas sem a aplicação de força propriamente dita. Ao

invés disso, calcula-se um fluxo entre as partículas do fluido e cada uma das partículas da fronteira através da utilização do Núcleo, espelhando-se localmente a partícula de fluido com cada partícula de fronteira, imediatamente simétrica, ou seja, simétrica ponto-a-ponto. A contribuição da parede, no entanto, depende da posição e velocidade da partícula de fluido, mas não de suas vizinhas, obviamente. Na Técnica de Força desenvolvida por Monaghan, o passo de tempo devido a uma grande força gerada pela fronteira, a qual ocasionará, possivelmente, instabilidade nas soluções. Uma outra vantagem dessa nova abordagem, para condições de contorno, é que nenhum parâmetro precisa ser modificado.

5.1.4 Técnica de Partículas de Fronteira Dinâmicas

Esta técnica foi primeiramente usada por Dalrymple & Knio (CRESPO; DALRYMPLE, 2007), (DALRYMPLE; KNIO, 2000). O método de partículas de fronteira dinâmicas é, do ponto de vista computacional, bastante simples e de baixo custo, se comparado a outros métodos. Neste caso, as partículas de fronteira são incluídas em todos os cálculos envolvido no SPH, ao passo que suas posições são mantidas fixas. A vantagem é que nós não requeremos que novas partículas fantasmas sejam criadas e nem mesmo a avaliação da distância entre as partículas de fluido e fronteira, como é no caso em que forças repulsivas nas fronteiras são utilizadas. A imagem abaixo mostra o procedimento. Um dos

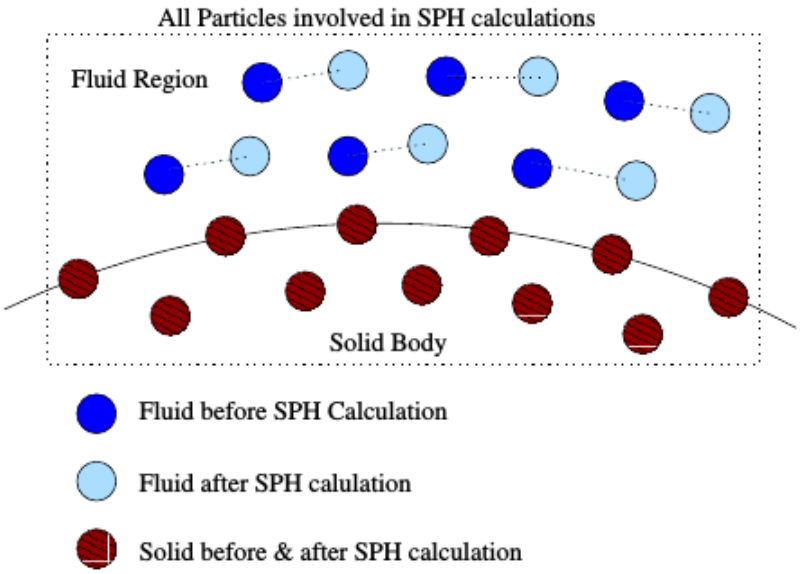


Figura 18 – Escrever ainda

problemas que podem surgir nesta técnica é a penetração de partículas de fluido através da fronteira em virtude de uma aproximação rápida por parte destas.

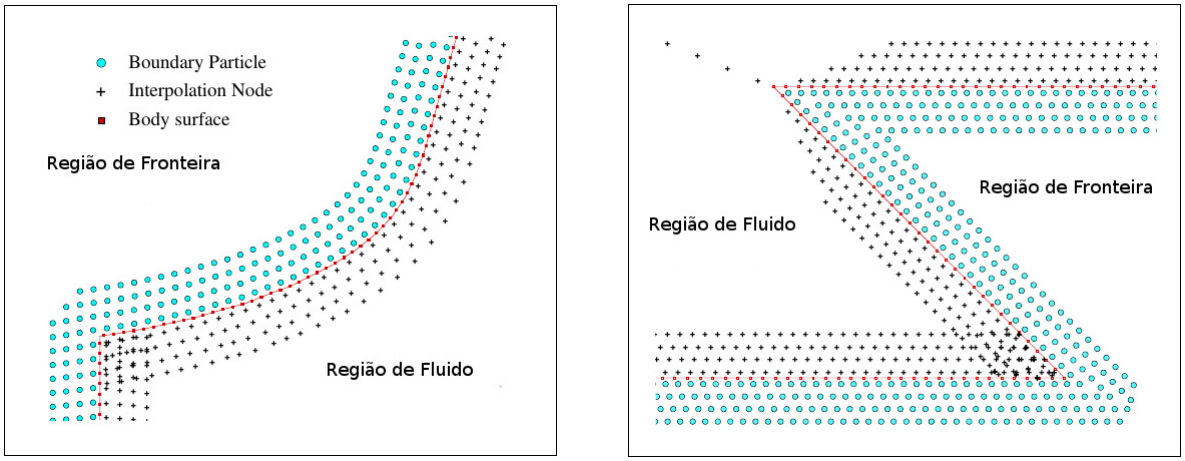


Figura 19 – Escrever ainda

5.1.5 Puramente Geométrica

Como vimos, o SPH foi desenvolvido inicialmente para simular grandezas astronômicas, motivo pelo qual, as fronteiras não constituíam um problema, como o que ocorre para sistemas confinados, por exemplo. Nesse sentido, ao tratarmos de um fluido imerso em uma região limitada do espaço, estabeleceremos uma condição puramente geométrica que confine o fluido dentro de uma região de interesse e observamos a solução.

5.1.6 2nP-Catenária

Nesta secção estabelecemos uma geometria dada por uma função suave em todos os pontos do domínio tratado (BARBOSA AT AL, 2017). A função descreve uma região de poço na qual um volume de fluido é inicialmente confinado e, a partir de um dado instante é levado a uma condição dinâmica descrita pelas equações de governo apresentadas anteriormente. Considere então a função

$$f(x) = \frac{1}{\alpha}\cosh[\beta x^{2n}] \tag{5.6}$$

onde α e β são parâmetros ajustáveis e n é um inteiro não nulo. Inicialmente quando a região for preenchida por partículas, dispostas conforme (5.6), a mesma apresentará um gap na região onde a imagem não-nula de f por Δx se concentra, em virtude da grande variação de f, como pode ser visto na figura (20) abaixo. Para contornar esse problema considera-se um elemento da curva descrita por f, da seguinte maneira: seja

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 \tag{5.7}$$

o elemento infinitesimal de arco da curva em apreço. Após uma álgebra teremos:

$$ds = \sqrt{1 + (\frac{dy}{dx})^2}dx \tag{5.8}$$

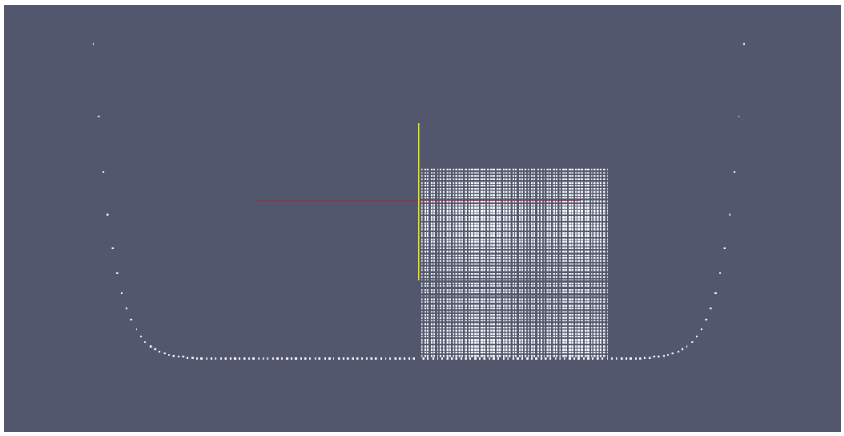


Figura 20 – Note que, para um Δx na região de imagem não-nula, a variação da função é grande e as partículas estão distribuídas de forma a deixarem um gap, por onde as partículas de fluido atravessariam.

e

$$dx = \frac{ds}{\sqrt{1 + f'^2}} \tag{5.9}$$

onde $\{f' = \frac{dy}{dx}$. Agora, para variações finitas considera-se $ds = \Delta$ e $dx = \delta x$, de forma que:

$$\delta x = \frac{\Delta}{\sqrt{1 + f'^2}} \tag{5.10}$$

onde, para $n = 4$,

$$f'(x) = \frac{8\beta}{\alpha} x^7 \sinh(\beta x^8) \tag{5.11}$$

Por fim, tem-se

$$\delta x = \frac{\Delta}{\sqrt{1 + \frac{64\beta^2}{\alpha^2} x^{14} \sinh(\beta x^8)}} \tag{5.12}$$

De posse dessa informação pode-se gerar uma distribuição de pontos que caiam dentro da curva e estejam espaçadas de acordo com o valor de Δ, escolhido como se queira. Para tanto, considere a relação de recorrência:

$$\xi(x+1) := \xi(x) + \delta x = \xi(x) + \frac{\Delta}{\sqrt{1 + \frac{64\beta^2}{\alpha^2} x^{14} \sinh(\beta x^8)}} \tag{5.13}$$

where $\xi(1) = -1.049$ and $\cosh(-1.049) - 1 = 1.28184$ Após essa correção a região descrita na figura (5.5) fica:

As componentes normal e tangencial ao longo da curva são dois elementos do triedro de Frenet(CARMO, 1976) e são dados por:

$$\tau(x) = \frac{1}{\sqrt{\frac{\alpha^2 + 64\beta^2 x^{14} \sinh^2(\beta x^8)}{\alpha^2}}} \hat{\mathbf{x}} + \frac{8\beta x^7 \sinh(\beta x^8)}{\alpha \sqrt{\frac{\alpha^2 + 64\beta^2 x^{14} \sinh^2(\beta x^8)}{\alpha^2}}} \hat{\mathbf{y}} \tag{5.14}$$

$$\eta(x) = -\frac{8\beta x^7 \sinh(\beta x^8)}{\alpha \sqrt{\frac{\alpha^2 + 64\beta^2 x^{14} \sinh^2(\beta x^8)}{\alpha^2}}} \hat{\mathbf{x}} + \frac{1}{\sqrt{\frac{\alpha^2 + 64\beta^2 x^{14} \sinh^2(\beta x^8)}{\alpha^2}}} \hat{\mathbf{y}} \tag{5.15}$$

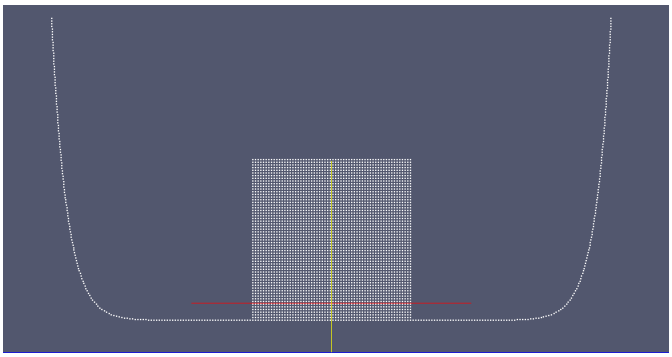


Figura 21 – Preenchimento das regiões com gap. Após o procedimento supracitado as partículas de fluido não atravessam mais a região de fronteira.

onde, τ e η são, respectivamente, os vetores tangente e normal. Note-se que $\tau = \eta = 1$.

- Condições de Contorno → Resumo → Vantagem → Desvantagem → Problemas
  - Lennard-Jones
    - Uma força característica é imposta ao sistema – Impede a penetração – As distribuições de forças nas orientações paralelas ao contorno oscilam causando distorções, instabilidades;
  - Partículas Fantasmas
    - Essas partículas são geradas, dinamicamente, a cada iteração – Impede penetração, eficiente para geometrias simples – Para geometrias complexas torna-se difícil de implementar, Distorções no fluxo na vizinhaça da fronteira – A maioria dos problemas podem ser resolvidos;
  - Fronteira Dinâmica
    - A dinâmica se estabelece com partículas normais ao contorno – Custo computacional baixo – Ocorre a penetração de partículas de alta velocidade – Condições periódicas (Ondas e Oscilações de fluidos);
  - Catenária 8P
    - O contorno é gerado por uma função f com certas propriedades – Custo computacional baixo, Impede a penetração – De acordo com o problema, a forma funcional pode ser complicada – Pode precisar de uma condição auxiliar para preencher gaps gerados por f;

No que se segue, apresenta-se os resultados da simulação do rompimento de uma coluna de fluido com forma regular, segundo as equações de governo (2.42). As equações em questão foram codificadas em C e compiladas usando-se o software VISUALSTUDIO

(MICROSOFT, 2015) e com cooperação técnico-científica com o Laboratório Voxar, CIN - UFPE.

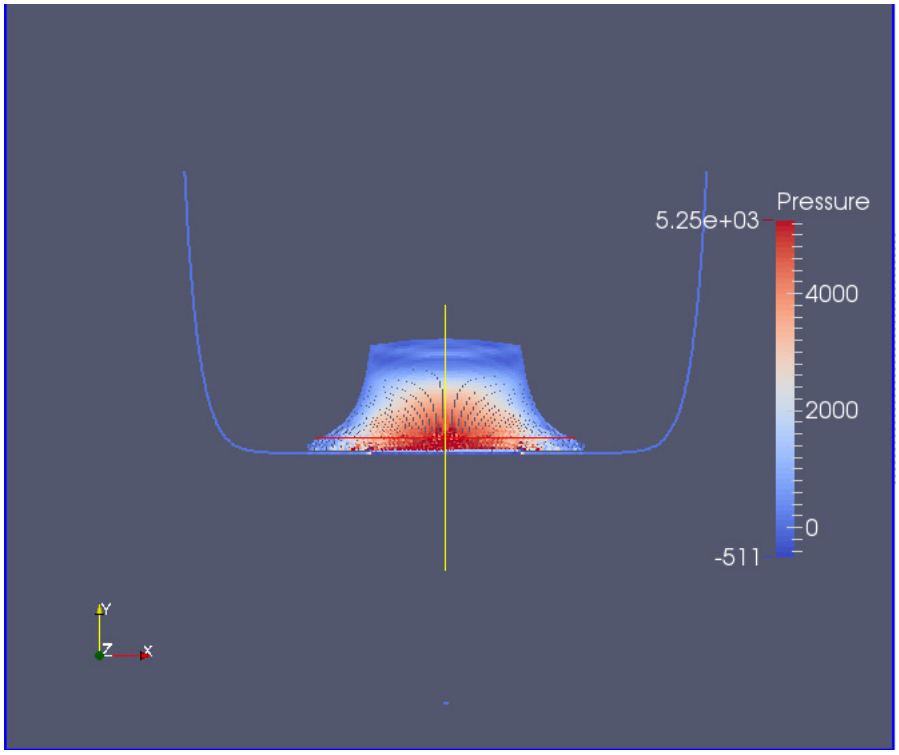


Figura 22 – Instantâneo da evolução do sistema, $n = 4$.

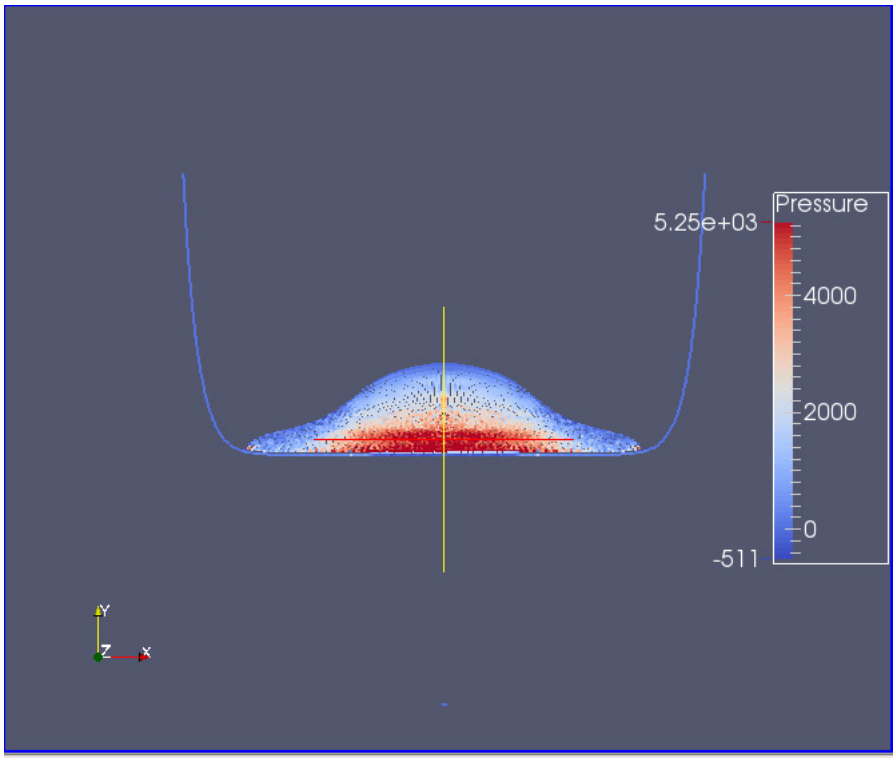


Figura 23 – Instantâneo da evolução do sistema, $n = 4$.

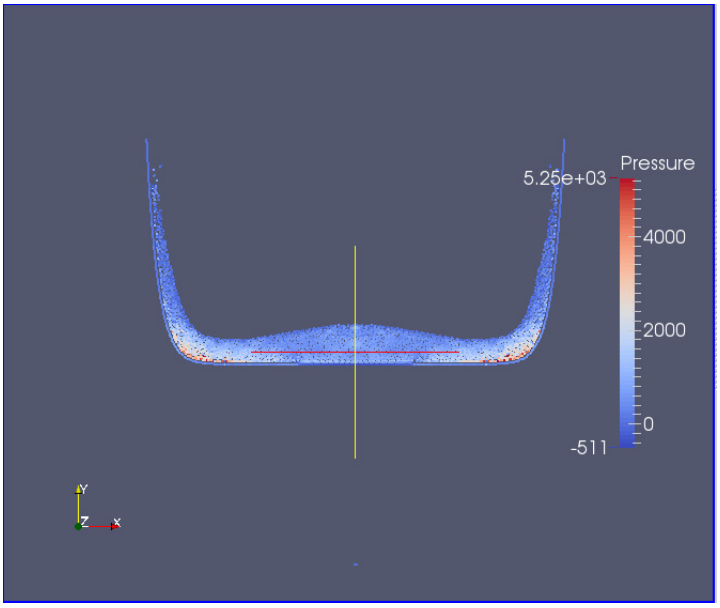


Figura 24 – Instantâneo da evolução do sistema, $n = 4$.

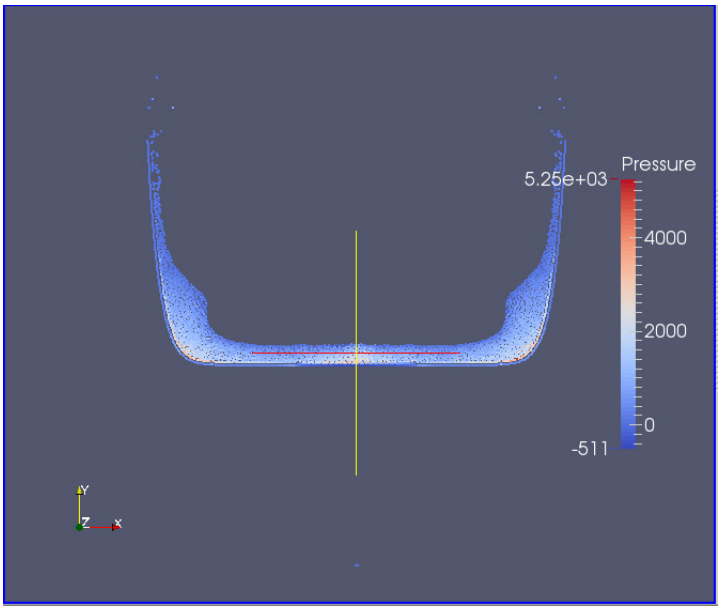


Figura 25 – Instantâneo da evolução do sistema, $n = 4$.

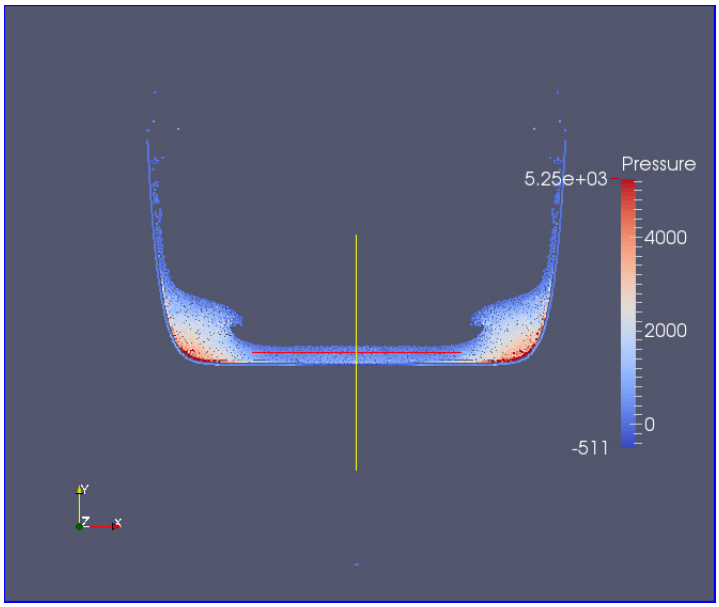


Figura 26 – Instantâneo da evolução do sistema, $n = 4$.

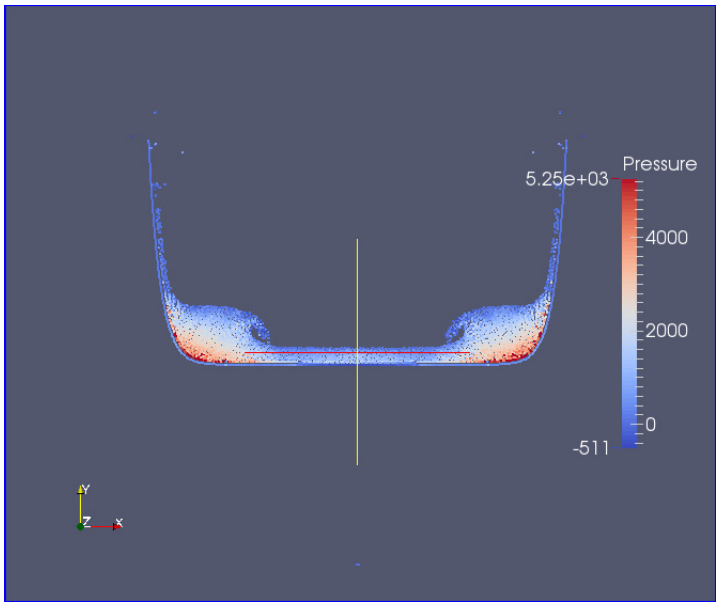


Figura 27 – Instantâneo da evolução do sistema, $n = 4$.

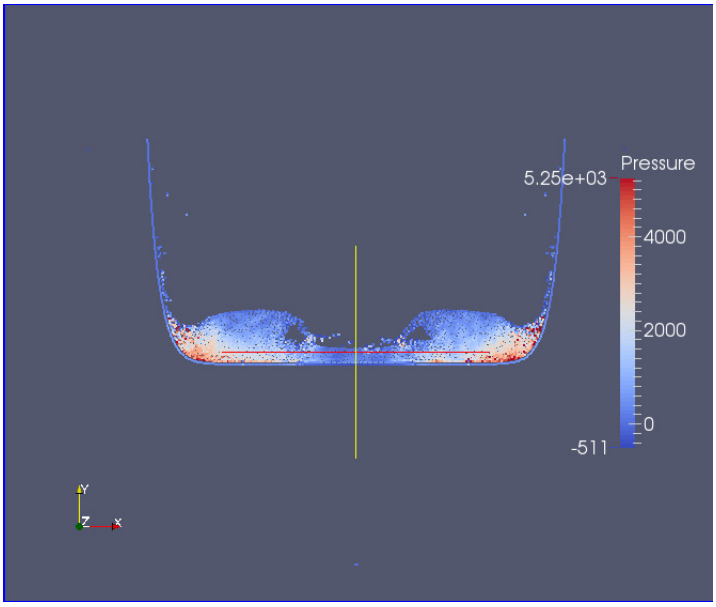


Figura 28 – Instantâneo da evolução do sistema, $n = 4$.

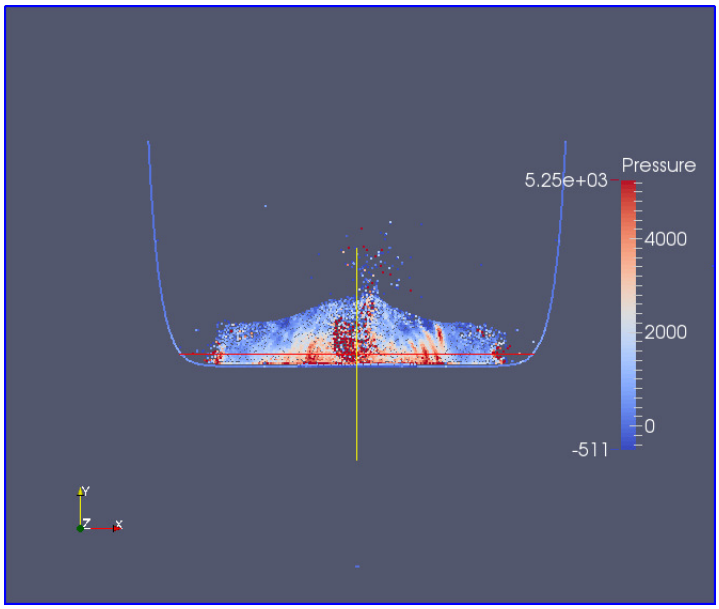


Figura 29 – Instantâneo da evolução do sistema, $n = 4$.

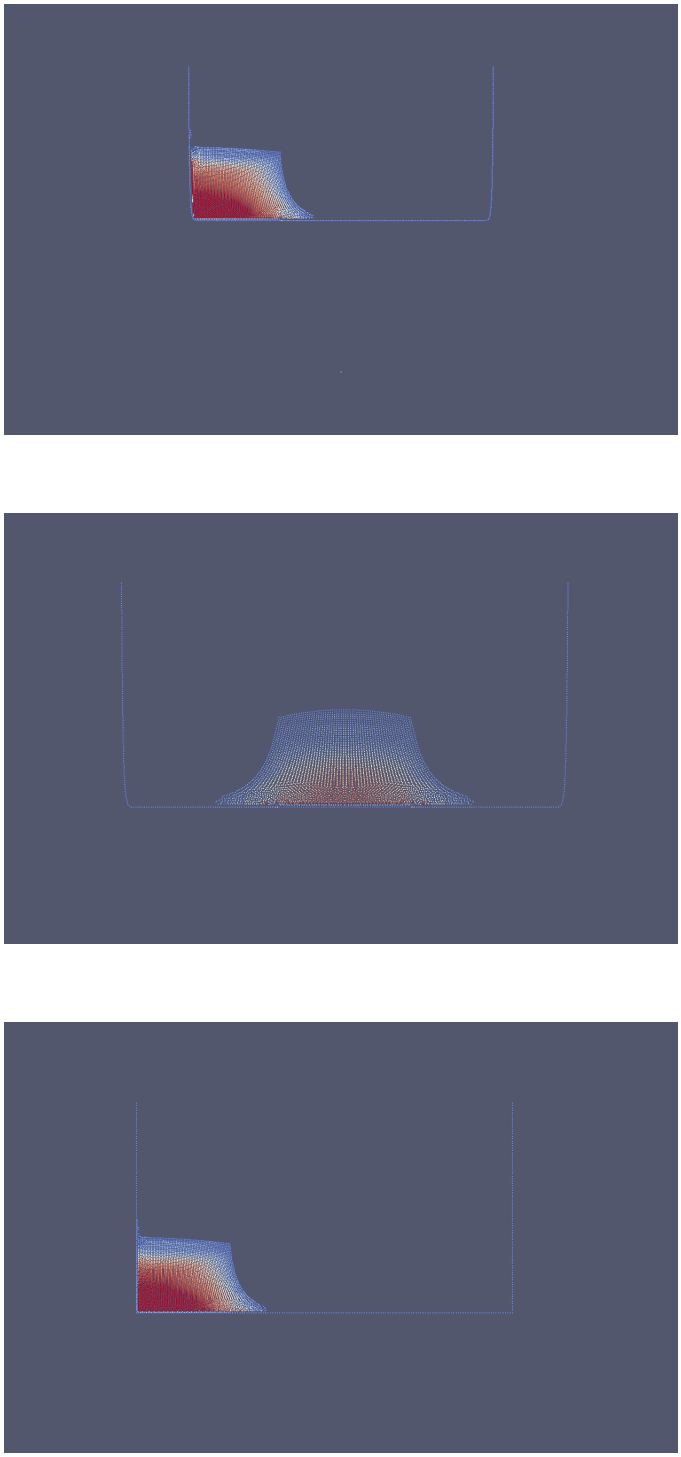


Figura 30 – Instantâneo da evolução do sistema, $n = 36$, $n = 36$ com a coluna de fluido no meio e resultado da Voxar Labs com Lennard-Jones.

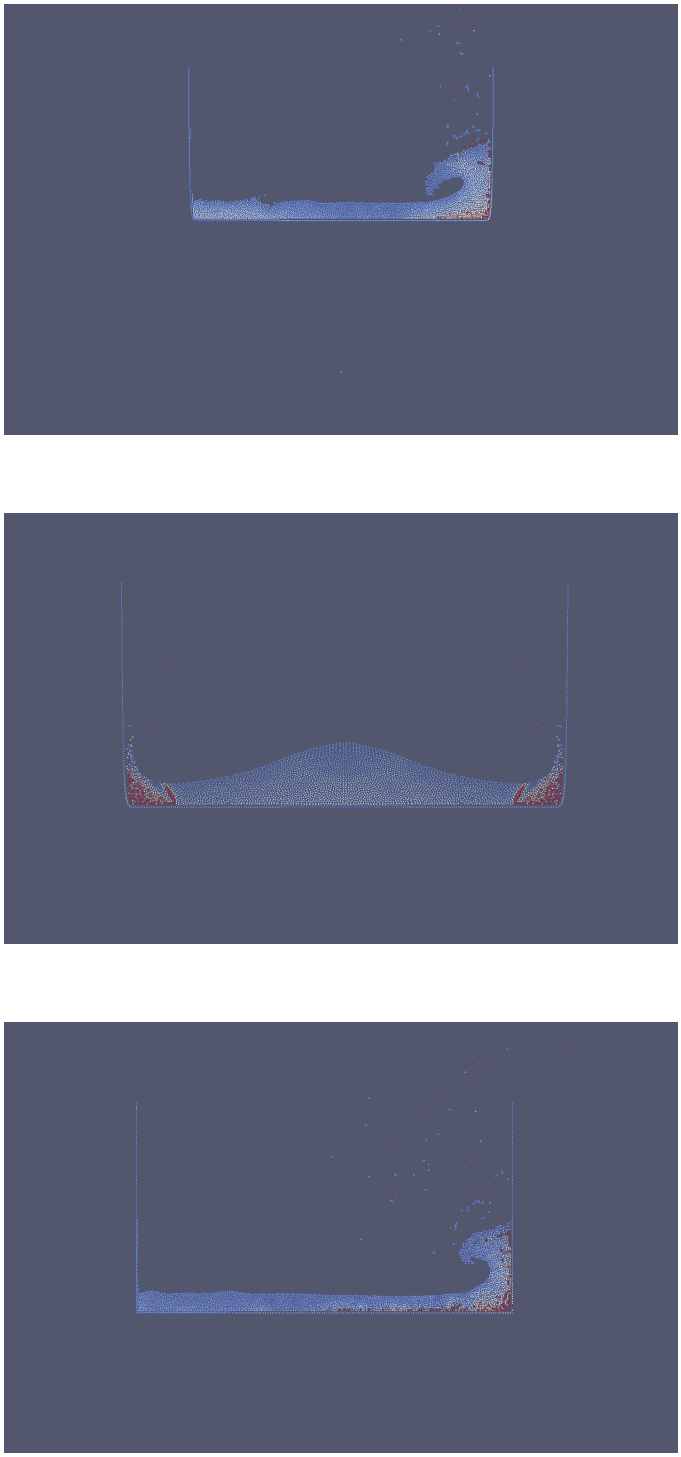


Figura 31 – Instantâneo da evolução do sistema, $n = 36$, $n = 36$ com a coluna de fluido no meio e resultado da Voxar Labs com Lennard-Jones.

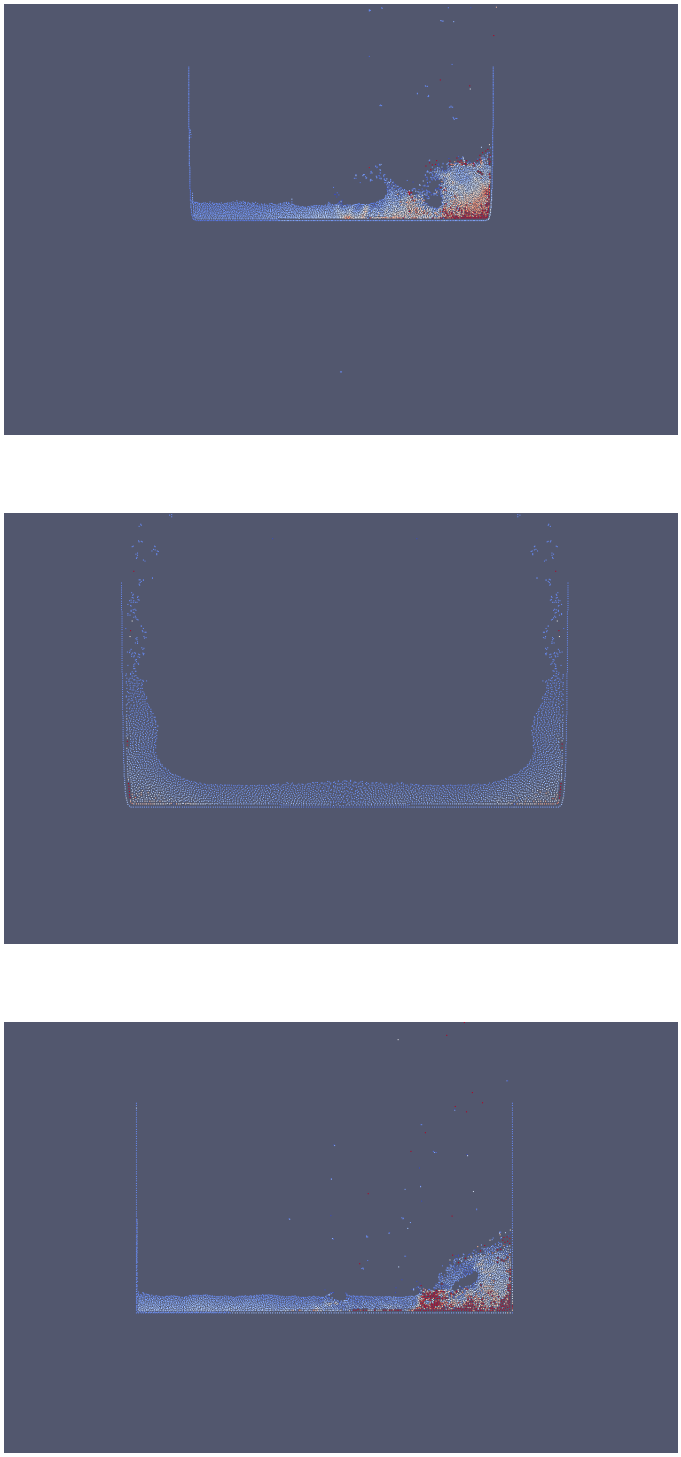


Figura 32 – Instantâneo da evolução do sistema, $n = 36$, $n = 36$ com a coluna de fluido no meio e resultado da Voxar Labs com Lennard-Jones.

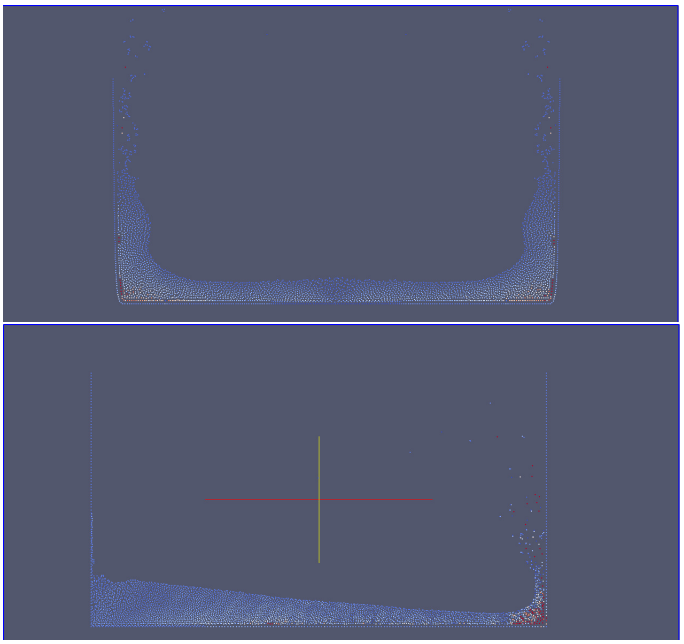


Figura 33 – Instantâneo da evolução do sistema, $n = 36$.

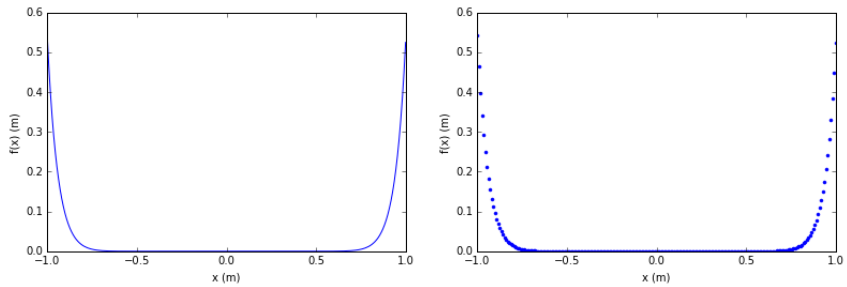


Figura 34 – Gráficos em Python da região funcional para $n = 4$ e da Região preenchida por partículas, para $n = 4$, em (5.6)

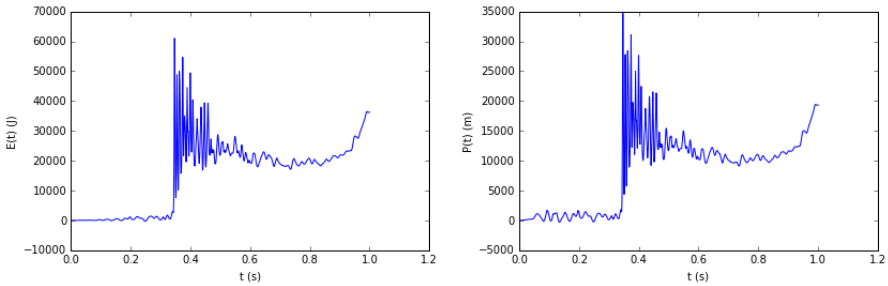


Figura 35 – Variação de energia e pressão no tempo, para $n = 36$ em (5.6).

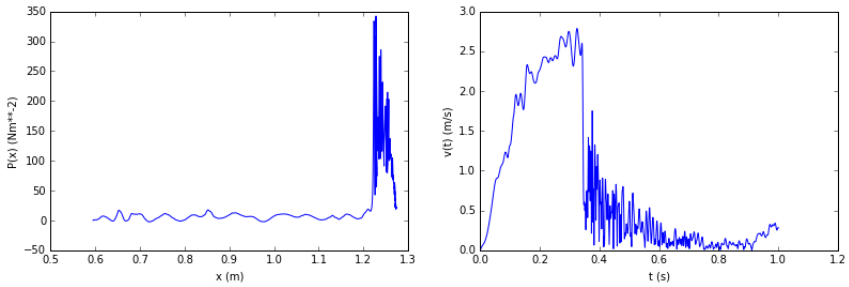


Figura 36 – Distribuição de pressão e variação da velocidade com o tempo para $n = 36$ em (5.6).

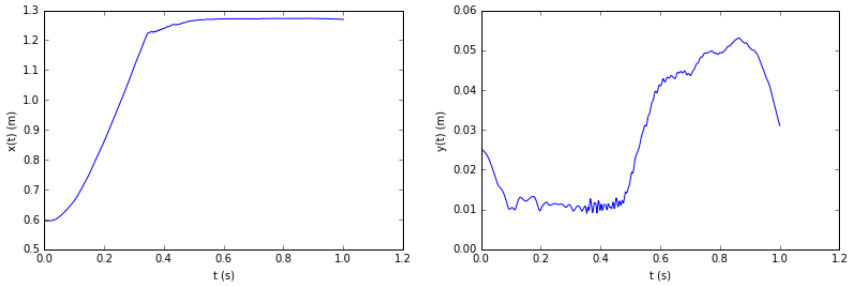


Figura 37 – Posição x(t) e y(t) para $n = 36$ em (5.6).

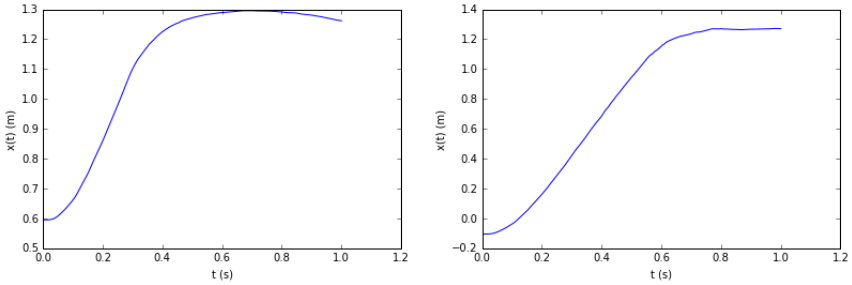


Figura 38 – Posições, x(t), para soluções Voxar Labs, com a condição de contorno de Lennard-Jones e a condição funcional com $n = 36$.

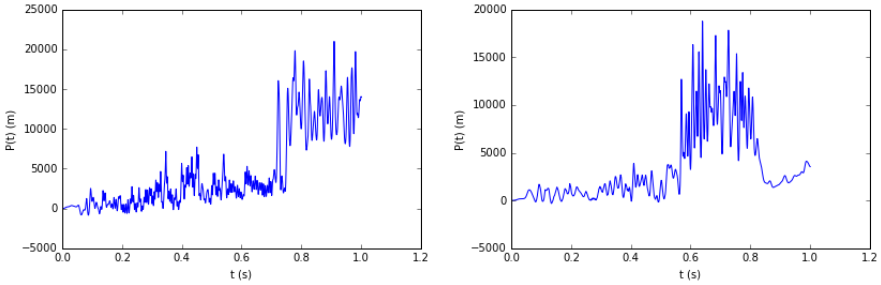


Figura 39 – Pressões, P(t), para soluções Voxar Labs, com a condição de contorno de Lennard-Jones e a condição funcional com $n = 36$.

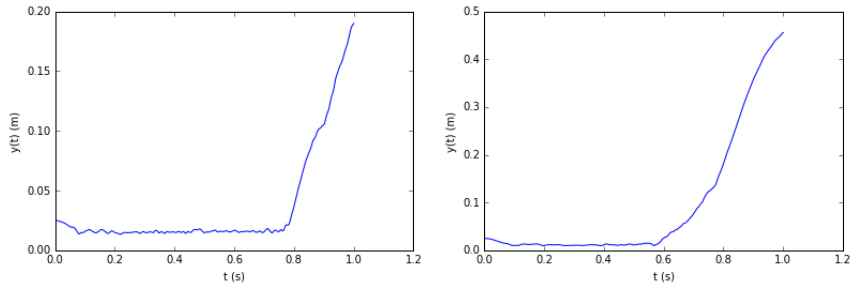


Figura 40 – Posições, y(t), para soluções Voxar Labs, com a condição de contorno de Lennard-Jones e a condição funcional com $n = 36$.

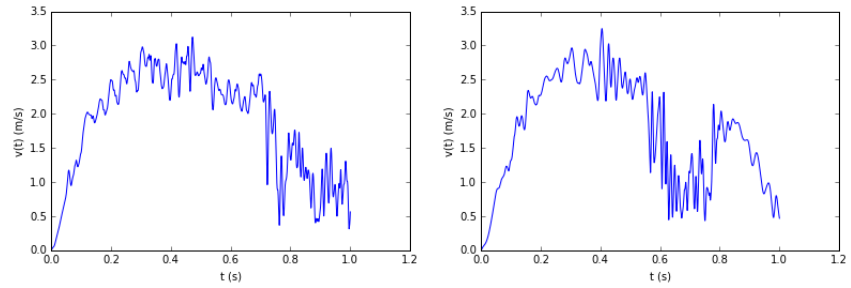


Figura 41 – Velocidades, v(t), para soluções Voxar Labs, com a condição de contorno de Lennard-Jones e a condição funcional com $n = 36$.

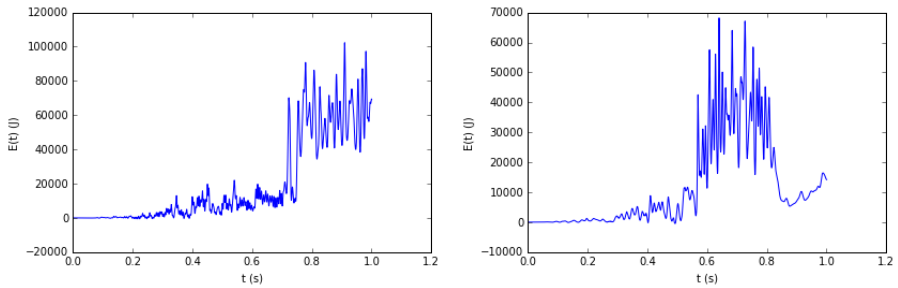


Figura 42 – Energias, E(t), para soluções Voxar Labs, com a condição de contorno de Lennard-Jones e a condição funcional com $n = 36$.

Referências

ADAMI, S.; HU, X.; ADAMS, N. A transport-velocity formulation for smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, v. 241, n. 1-2, p. 292 – 307, 2013. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii-/S002199911300096X86>. Citado na página 49.

(AUTH.), H. B. *Functional Analysis, Sobolev Spaces and Partial Differential Equations*. 1. ed. Springer-Verlag New York, 2010. (Universitext). ISBN 0387709134,978-0-387-70913-0. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index-.php?md5=D653C1E7BD9AC16EE08863D69517CAE7>. Citado na página 43.

(AUTH.), I. K. A. *Convergence and applications of Newton-type iterations*. 1. ed. Springer-Verlag New York, 2008. ISBN 0387727418,9780387727417,9780387727431. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec-/book/index.php?md5=7DBEC99645590AD26EB2C7136182ED14>. Citado na página 84.

(AUTH.), M. H. *Numerical Methods in Fluid Dynamics*. 2. ed. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1984. (Springer Series in Computational Physics). ISBN 978-3-540-12799-4,978-3-642-69341-0. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book-/index.php?md5=C1E54A680E3C5C7FEE79B81AEA130AFD>. Citado na página 33.

BARBOSA AT AL, C. S. a. J. *Dam Break in a 8p-Cathenary Region*. [S.l.]: Submetido, 2017. Citado na página 57.

BENZ, W. Smoothed particle hydrodynamics: a review. numerical modelling of nonlinear stellar pulsations: Problems and prospects,. *Kluwer Acad. Boston Publ.*, p. 269–288, 1990. Citado na página 35.

BENZ, W.; ASPHAUG, E. Simulations of brittle solids using smooth particle hydrodynamics. *Computer Physics Communication*, v. 87, n. 1-2, p. 253–265, 1995. Citado na página 36.

BREHM, J. J. Introduction to the structure of matter : a course in modern physics. *Wiley*, v. 1, n. 0, p. 0, 1989. Citado na página 28.

BRENNER, L. R. S. a. S. C. *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*. 3rd ed. ed. Springer New York, 1994. (Texts in Applied Mathematics 15). ISBN 9780387759333,0387759336. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index-.php?md5=AC335539B02E8E78207B7957F72BDB81>. Citado na página 33.

(C) SANDIA CORPORATION, K. I. S. N. L. opyright. ParaView. 2005–2008. Disponível em: <http://www.paraview.org/paraview-license/>. Citado 3 vezes nas páginas 11, 93 e 94.

CARMO, M. D. *Differential geometry of curves and surfaces*. First. Prentice-Hall, 1976. ISBN 0132125897,9780132125895. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book-/index.php?md5=D08C25257C719D3C5EA347D1E459A80F>. Citado na página 58.

CHORIN, J. E. M. a. A. J. *A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics*. 3. ed. Springer-Verlag New York, 1993. (Texts in Applied Mathematics 4). ISBN 9780387979182,0387979182,3540979182. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book-/index.php?md5=D5CEF4A9CD77BCEC8502DA83BA934E82>. Citado na página 83.

CLEARY, P. W.; MONAGHAN, J. J. Conduction modelling using smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, v. 148, n. 1-2, p. 227 – 264, 1999. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii-/S0021999198961186>. Citado na página 49.

CRESPO, A. J. C.; DALRYMPLE, R. A. Boundary conditions generated by dynamic particles in sph methods. *CMC*, v. 5, p. 173–184, 2007. Citado na página 56.

D., V. *Fluid Mechanics and the SPH Method: Theory and Applications*. Oxford University Press, 2012. ISBN 9780199655526. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec-/book/index.php?md5=C70FBF7CD29C5147858A8D780FD0E601>. Citado na página 41.

DALRYMPLE, R. A.; KNIO, O. Sph modelling of water waves. *Proc. Coastal Dynamics*, v. 2, p. 1082–1091, 2000. Citado na página 56.

DUISTERMAAT, J. K. J. *Distributions: Theory and Applicati-ons*. 1st edition.. ed. Birkhäuser Boston, 2010. (Cornerstones). ISBN 9780817646721,0817646728. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index-.php?md5=BA065C1B3619A792B1D6BA35945E4898>. Citado na página 84.

E., E. A. *MNRAS*, v. 235, p. 911, 1988. Disponível em: <http://aip.scitation.org/doi-/pdf/10.1063/1.1706053>. Citado na página 25.

ECKART, C. Variational principles of hydrodynamics. *The Physics of Fluids*, v. 3, n. 3, p. 421–427, 1960. Citado na página 23.

(EDS.), M. E. G. *An Introduction to Continuum Mechanics*. [S.l.]: Academic Press, 1981. (Mathematics in science and engineering 158). ISBN 0123097509,9780123097507,9780080918495. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 76.

FERRARI, A. Sph simulation of free surface flow over a sharp-crested weir. *Advances in Water Resources*, v. 33, n. 3, p. 270–276, 2010. Citado na página 55.

FEYNMAN, R. *El Carácter de la Ley Física*. [S.l.]: Tusquets Editores, 2000. (Metatemas: Libros para Pensar la Ciencia, 65.). ISBN 848310718X,9788483107188. Citado na página 52.

GARCíA-SENZ, E. B. D.; WOOSLEY, S. E. Single and multiple detonations in white dwarfs. *Astronomy and Astrophysics*, v. 349, p. 177–188, 1999. Citado na página 36.

GINGOLD R. A.; MONAGHAN, J. J. Smoothed particle hydrodynamics - theory and application to non-spherical stars. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 181, p. 375–389, 1977. Disponível em: <http://adsabs.harvard.edu/abs/1977MNRAS-.181..375G>. Citado 2 vezes nas páginas 35 e 44.

GRAY, J. M. J.; SWIFT, R. Sph elastic dynamics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 190, p. 45–50, 2001. Disponível em: <https://www-.researchgate.net/publication/222036645_SPH_elastic_dynamics>. Citado na página 49.

HUGHES, T. J. R.; PISTER, K. S. *Consistent linearization in mechanics of solids and structures*. [S.l.]: Compt. & Struct., 1978. v. 8. Citado na página 84.

JR., A. A. de C. *Iniciação à Física Matemática*. 2. ed. IMPA, 2016. v. 1. ISBN 9788524402876. Disponível em: <https://loja.sbm.org.br/index.php/impa/colecao-matematica-e-aplicacoes/iniciac-o-a-fisica-matematica.html>. Citado na página 52.

LANDAU, L. D.; (AUTH.), E. M. L. *Fluid Mechanics. Volume 6*. Pergamon, 1959. ISBN 978-0-08-029142-0,0-08-009104-0,0-08-029142-2. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec-/book/index.php?md5=7104B8A4E30C5FC94AB75EF04B0A3F9F>. Citado na página 28.

LEE H. M. LEE, H. A. K. K. C. W. Sph simulations of galactic gaseous disk with bar: Distribution and kinematic structure of molecular clouds toward the galactic center. *Astrophysical Journal*, p. 1–32, 1998. Citado na página 36.

LIBERSKY, A. G. P. L. D. Smooth particle hydrodynamics with strength of materials. *Lecture Notes in Physics*, v. 395, p. 248–257, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 35 e 54.

LIMA, E. L. *Análise no R^n*. [S.l.]: Impa, 2013. ISBN 9788524401893. Citado na página 76.

LIU, M. B. L. G. R. *Smoothed particle hydrodynamics: a mesh-free particle method*. World Scientific Publishing Company, 2003. ISBN 9789812384560,981-238-456-1. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index-.php?md5=FF1CBF3440B33E27308B1D2C889E3E35>. Citado 2 vezes nas páginas 33 e 35.

MICROSOFT. Visual Studio. 2015. Citado na página 60.

MONAGHAN, J. Simulating free surface flows with sph. *Journal of Computational Physics*, v. 110, n. 2, p. 399 – 406, 1994. ISSN 0021-9991. Disponível em: <http:/-/www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999184710345>. Citado na página 54.

MONAGHAN, J. J. Smoothed particle hydrodynamics. *Annu. Rev. Astrn. Astrophys.*, v. 30, p. 343–374, 1992. Disponível em: <http://aip.scitation.org/doi/pdf/10.1063/1-.1706053>. Citado na página 25.

MONAGHAN, J. J. Smoothed particle hydrodynamics. *Rep. Prog. Phys.*, v. 68, p. 1703–1759, 2005. Citado na página 54.

MONAGHAN, J. J.; KOCHARYAN. A sph simulation of multi-phase flow. *Computer Physics Communication*, v. 87, p. 225–235, 1995. Citado na página 36.

MONAGHAN, J. J.; KOS, A. Sph elastic dynamics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 190, p. 45–50, 2001. Disponível em: <https://www-.researchgate.net/publication/222036645_SPH_elastic_dynamics>. Citado na página 53.

Monaghan, J. J.; Lattanzio, J. C. A refined particle method for astrophysical problems. *aap*, v. 149, p. 135–143, 1985. Citado na página 45.

MORRIS, J. P.; FOX, P. J.; ZHU, Y. Modeling low reynolds number incompressible flows using sph. *J. Comput. Phys.*, Academic Press Professional, Inc., San Diego, CA, USA, v. 136, n. 1, p. 214–226, set. 1997. ISSN 0021-9991. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.1997.5776>. Citado na página 36.

MULLER-KIRSTEN, H. J. W. Classical mechanics and relativity. *Contemporary Physics*, 2008. Citado na página 16.

NETO, A. P. *Uma Abordagem Lagrangiana para Simulação de Escoamentos de Fluidos Viscoplásticos e Multifásicos*. 1. ed. [S.l.]: PUC-RJ, 2007. ISBN 0595339212. Citado 7 vezes nas páginas 9, 11, 31, 33, 48, 89 e 90.

NEUMANN, J. von; RICHTMYER, R. A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks. *Journal of Applied Physics*, v. 21, p. 232–237, 1950. Disponível em: <http://www.scirp.org/(S(351jmbntvnsjt1aadkposzje))/reference/ReferencesPapers-.aspx?ReferenceID=1171543>. Citado na página 25.

PEREIRA, R. S. *Métodos Numéricos para Solução da Equação de Transporte de massa*. 1. ed. [S.l.]: Instituto de Pesquisas Hidráulicas. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 91.

PISKUNOV, N. *Differential and Integral Calculus*. Mir, 1969. Disponível em: <http:-//gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=3B4EA91BCC482321628862A84C3C5E95>. Citado na página 49.

STORY, T. Introduction to differential geometry with applications to navier-stokes dynamics. *iUniverse*, 2005. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/book/index-.php?md5=1E83E3CFBC0999F0BE3D41D7F52E96AE>. Citado na página 31.

SWEGLE J. W., H. D. L.; ATTAWAY, S. W. Smoothed particle hydrodynamics stability analysis. *Jornal of Computational Physics*, v. 116, p. 123–134, 1995. Citado na página 36.

TRUESDELL WALTER NOLL, S. A. C. *The non-linear field theories of mechanics*. 3rd ed. ed. Springer, 2004. ISBN 3540027793,9783540027799. Disponível em: <http://gen-.lib.rus.ec/book/index.php?md5=02E592DD354A9C1F2BB62A2E8AC0DA02>. Citado na página 76.

Apêndices

APÊNDICE A – Fundamentos Matemáticos

Este capítulo preliminar proporciona uma rápida revisão dos fundamentos matemáticos usados no estabelecimento das ideias, modelagem e princípios físicos fundamentais. O tratamento é exclusivamente no Espaço Euclidiano R^3, usando-se Coordenadas Euclidianas Canônicas .

A.1 Topologia do Espaço Euclidiano

Espaço Euclidiano n-dimensional. Seja n um número natural. O espaço euclidiano n-dimensional R^n é o produto cartesiano de n fatores iguais a R: $R^n = RxR...xR$(LIMA, 2013). Seus elementos são, então, sequências ou n-uplas de termos reais $x = (x_1, ..., x_n)$. Para cada i, $i = 1, ..., n$, o termo x_i chama-se a i-ésima coordenada de x. Nesse sentido, então, quando $n = 1$, R^1 é a reta real. Quando n =2 e 3, respectivamente, temos o plano e o espaço euclidianos.

A.2 Álgebra e Análise Tensorial

A.2.1 Introdução

Nesta secção apresentamos algumas regras fundamentais e resultados canônicos da álgebra e cálculo tensoriais permanentemente usados na mecânica do contínuo linear e não linear. A maioria das proposições serão dadas sem demonstrações. Para uma exposição mais detalhada consultar os textos padrões, tais como (TRUESDELL WALTER NOLL, 2004), ((EDS.), 1981). Em Mecânica do Contínuo, as quantidades físicas podem ser:

- Escalares, como tempo energia e potênia,
- Vetores, como posição, velocidade e força,
- Tensores, como medidas de deformação e tensão.

Desde que podemos interpretar escalares como tensores de ordem zero e vetores como tensores de primeira ordem, todas as quantidades tratadas em mecânica do contínuo podem geralmente ser consideradas como tensores de diferentes ordens. Elas podem, então,

ser definidas para todo o corpo como uma **variável global** (tipo a força resultante atuando em um corpo) ou como local ou **variáveis de campo**, ou seja, definida em cada ponto do corpo, como, por exemplo, sua velocidade. Nossa curta introdução matemática tem o objetivo de nos tornar mais familiar com o conceito de tensor. Iniciaremos com a álgebra dos tensores. Posteriormente, consideraremos funções tensoriais ou campos tensoriais, nos quais realizaremos o cálculo ou análise tensorial. Finalmente, consideraremos integrais sob tais campos, as quais nos fornecerá tensores resultantes ou valores médios dos campos. **Notações**. A notação canônica para escalares será dada por letras do tipo α,..., β ou a,..., b. Para vetores usaremos letras latinas minúsculas ou maiúsculas em negrito, $\mathbf{a}$,... $\mathbf{b}$, $\mathbf{A}$,..., $\mathbf{B}$. Para tensores de segunda ordem usaremos letras maiúsculas identificadas $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$, ... Conjuntos e espaços são denotados por letras cursivas como:

- R, conjunto dos números reais,
- R^+,conjunto dos números reais positivos,
- R^n, conjunto das n-uplas reais ordenadas.

Se $\mathcal{V}$ e $\mathcal{W}$ são conjuntos, uma aplicação ou função

$$f : \mathcal{V} \to \mathcal{W} \tag{A.1}$$

assinala a cada elemento de seu **domínio** $\mathcal{V}$, um único elemento de sua imagem $\mathcal{W}$. se quisermos dar nomes às variáveis escrevemos:

$$f : \mathbf{v} \to \mathbf{w} \tag{A.2}$$

Claramente, o argumento é $\mathbf{v} \in \mathcal{V}$ e seu **valor** ou **imagem** sobre f é $\mathbf{w} = f(\mathbf{v})$.

A.2.2 Álgebra Vetorial

Os seguintes conceitos são familiares a qualquer estudante de graduação em ciências exatas e engenharia. Um **espaço vetorial** real $\mathcal{V}$ é um conjunto, cujos elementos são vetores e que são munidos com uma adição

$$" + " : \mathcal{V}x\mathcal{V} \to \mathcal{V}|(\mathbf{a}, \mathbf{b}) \to \mathbf{a} + \mathbf{b} \tag{A.3}$$

e uma multiplicação por escalar

$$"." : \mathcal{R}x\mathcal{V} \to \mathcal{V}|(\alpha, \mathbf{a}) \to \alpha \cdot \mathbf{a} \tag{A.4}$$

Sejam $\mathcal{V}$ e $\mathcal{W}$ espaços vetoriais e f uma aplicação

$$\mathrm{f} : \mathcal{V} \to \mathcal{W} \tag{A.5}$$

f é chamada **vetorial** se ela é compatível com as duas estruturas lineares, isto é,

$$\mathrm{f}(\mathbf{v}+\mathbf{w}) = \mathrm{f}(\mathbf{v}) + \mathrm{f}(\mathbf{w}) \ \forall \mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathcal{V} \tag{A.6}$$

$$\mathrm{f}(\alpha\mathbf{v}) = \alpha f(\mathbf{v}) \tag{A.7}$$

$\forall \mathbf{v}, \in \mathcal{V}, \alpha \in \mathcal{R}$

A.2.3 Tensores de Segunda Ordem

Tensores de segunda ordem são transformações lineares de $\mathcal{V}$ em $\mathcal{V}$, isto é,

$$\mathbf{T} : \mathcal{V} \longrightarrow \mathcal{V} \tag{A.8}$$

que aplica cada vetor $\mathbf{u}$ em um vetor

$$\mathbf{v} = \mathbf{T}(\mathbf{u}). \tag{A.9}$$

Qualquer função linear de argumento vetorial é um tensor. As operações de soma e multiplicação por escalar de tensores são definidos por

$$(\mathbf{S} + \mathbf{T})\mathbf{v} = \mathbf{S}\mathbf{v} + \mathbf{T}\mathbf{v} \tag{A.10}$$

$$(\alpha\mathbf{S})\mathbf{v} = \alpha(\mathbf{S}\mathbf{v}) \tag{A.11}$$

onde $\alpha \in \mathcal{R}$. Adicionalmente, o tensor nulo, 0, e o tensor identidade, $\mathbf{I}$, são, respectivamente, os tensores que satisfazem

$$\mathbf{0}\mathbf{v} = 0 \tag{A.12}$$

$$\mathbf{I}\mathbf{v} = \mathbf{v} \tag{A.13}$$

$\forall\ \mathbf{v} \in \mathcal{V}$ O produto de dois tensores $\mathbf{S}$ e $\mathbf{T}$ é o tensor $\mathbf{S}\ \mathbf{T}$ definido por

$$(\mathbf{S}\mathbf{T})\mathbf{u} = \mathbf{S}(\mathbf{T}\mathbf{u}) \tag{A.14}$$

Em geral,

$$\mathbf{S}\mathbf{T} \neq \mathbf{T}\mathbf{S} \tag{A.15}$$

se $\mathbf{ST}$=$\mathbf{TS}$, então $\mathbf{S}$ e $\mathbf{T}$ são ditos comutarem.

A.2.4 A Transposição. Tensores Simétrico e Anti-Simétrico

A transposta, $\mathbf{T^t}$, de um tensor $\mathbf{T}$ é um tensor único que satisfaz

$$\mathbf{T}\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{u} \cdot \mathbf{T}\mathbf{v} \tag{A.16}$$

$\forall\ \mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathcal{V}$ Se

$$\mathbf{T} = \mathbf{T^t} \tag{A.17}$$

então $\mathbf{T}$ é dito ser simétrico. Se

$$\mathbf{T} = -\mathbf{T^t} \tag{A.18}$$

$\mathbf{T}$ é dito ser anti-simétrico. Qualquer tensor $\mathbf{T}$ pode ser decomposto como a soma

$$\mathbf{T} = Sim(\mathbf{T}) + Anti(\mathbf{T}) \tag{A.19}$$

de sua parte simétrica

$$Sim(\mathbf{T}) \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{T} + \mathbf{T^t}) \tag{A.20}$$

e parte anti-simétrica

$$Anti(\mathbf{T}) \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{T} - \mathbf{T^t}) \tag{A.21}$$

A.2.5 Produto Tensorial

O produto tensorial de dois vetores $\mathbf{u}$ e $\mathbf{v}$, denotados por

$$\mathbf{u} \otimes \mathbf{v} \tag{A.22}$$

, é o tensor que aplica cada vetor $\mathbf{w}$ no vetor $(\mathbf{u} \cdot \mathbf{w})\mathbf{v}$:

$$(\mathbf{u} \otimes \mathbf{v})\mathbf{w} = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{w})\mathbf{v} \tag{A.23}$$

O produto tensorial é, às vezes, referido como produto diádico ou de Kronecker.Segue abaixo algumas propriedades que se verificam para quaisquer vetores $\mathbf{s}$, $\mathbf{t}$, $\mathbf{u}$, $\mathbf{v}$, $\mathbf{w}$ e tensor $\mathbf{S}$:

1. $\mathbf{u} \otimes (\mathbf{v}+\mathbf{w})=\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}+\mathbf{u} \otimes \mathbf{w}$.
2. $(\mathbf{u} \otimes \mathbf{v})^t=(\mathbf{v} \otimes \mathbf{u})$.
3. $(\mathbf{u} \otimes \mathbf{v})(\mathbf{s} \otimes \mathbf{t})=(\mathbf{v} \cdot \mathbf{s})\mathbf{u} \otimes \mathbf{t}$
4. $\mathbf{e_i} \otimes \mathbf{e_i} = \mathbf{I}$.
5. $\mathbf{S}(\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}) = (\mathbf{Su}) \otimes \mathbf{v}$.
6. $(\mathbf{u} \otimes \mathbf{v})\mathbf{S}=(\mathbf{u} \otimes \mathbf{S^t v})$.

A.2.6 Componentes Cartesianas e Representação Matricial

Qualquer tensor de segunda ordem $\overleftrightarrow{T}$ pode ser representado como

$$\overleftrightarrow{T} = T_{11}\mathbf{e_1} \otimes \mathbf{e_1} + T_{12}\mathbf{e_1} \otimes \mathbf{e_2} + ... + T_{nn}\mathbf{e_n} \otimes \mathbf{e_n} = T_{ij}\mathbf{e_i} \otimes \mathbf{e_j} \tag{A.24}$$

onde

$$T_{ij} = \mathbf{e_i} \cdot \mathbf{Te_j} \tag{A.25}$$

são as componentes cartesianas de **T**. Note que em (2.7), nenhuma soma estão implicada sobre o índice n. Qualquer tensor de segunda ordem é unicamente definido por suas componentes cartesianas. Assim, arranjando as componentes T_{ij} em uma matrix, podemos ter a seguinte representação matricial para **T**:

$$[\mathbf{T}] = \begin{vmatrix} T_{11} & T_{12} & ... & T_{T1n} \\ T_{21} & T_{22} & ... & T_{T2n} \\ .. & & & \\ .. & & & \\ .. & & & \\ T_{n1} & T_{n2} & ... & T_{Tnn} \end{vmatrix} \tag{A.26}$$

Com efeito, as componentes Cartesianas do tensor identidade, **I**, fica

$$I_{ij} = \delta_{ij} \tag{A.27}$$

de forma que sua representação matricial é dada por

$$[\mathbf{T}] = \begin{vmatrix} 1 & 0 & ... & 0 \\ 0 & 1 & ... & 0 \\ .. & & & \\ .. & & & \\ .. & & & \\ 0 & 0 & ... & 1 \end{vmatrix} \tag{A.28}$$

As componentes Cartesianas do vetor $\mathbf{v} = \mathbf{Tu}$ são dados por

$$v_i = [T_{jk}(\mathbf{e_j} \otimes \mathbf{e_k})u_l\mathbf{e_l}] \cdot \mathbf{e_i} = T_{ij}u_j. \tag{A.29}$$

Assim, a matriz [**v**] de componentes Cartesianas de **v** é obtida do produto das matrizes

$$[\mathbf{v}] \equiv [\mathbf{T}] = \begin{vmatrix} v_1 \\ v_2 \\ . \\ . \\ . \\ v_n \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} T_{11} & T_{12} & ... & T_{T1n} \\ T_{11} & T_{22} & ... & T_{T2n} \\ .. & & & \\ .. & & & \\ .. & & & \\ T_{n1} & T_{n2} & ... & T_{Tnn} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} u_1 \\ u_2 \\ . \\ . \\ . \\ u_n \end{vmatrix} \tag{A.30}$$

Pode-se facilmente provar que as componentes Cartesianas T^t_{ij} da transposta $\overleftarrow{T}^t$ de um tensor $\overleftarrow{T}$ são dadas por

$$T^t_{ij} = T_{ji} \tag{A.31}$$

de forma que T^t_{ij} tem a seguinte representação matricial Cartesiana

$$[\mathbf{T}^t] = \begin{vmatrix} T_{11} & T_{21} & ... & T_{Tn1} \\ T_{21} & T_{22} & ... & T_{Tn2} \\ .. & & & \\ .. & & & \\ .. & & & \\ T_{1n} & T_{2n} & ... & T_{Tnn} \end{vmatrix} \tag{A.32}$$

A.2.7 Traço e Produto Interno

Para quaisquer $\mathbf{u}$, $\mathbf{v} \in \mathcal{V}$, o traço do tensor $(\mathbf{u} \otimes \mathbf{v})$ é uma aplicação linear definida por

$$Tr(\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}) = \mathbf{u} \cdot \mathbf{v}. \tag{A.33}$$

Para um tensor genérico, $\mathbf{T} = T_{ij} = \mathbf{e_i} \cdot \mathbf{T}\mathbf{e_j}$, segue-se que

$$Tr(\mathbf{T}) = T_{ij} Tr(\mathbf{e_i} \otimes \mathbf{e_j}) = T_{ij}\delta_{ij} = T_{ii} \tag{A.34}$$

isto é, o traço de $\mathbf{T}$ é a soma dos termos diagonais da representação matricial cartesiana $[\mathbf{T}]$

Segue abaixo algumas propriedades básicas

1. $\mathbf{I}$:$\mathbf{T}$ = Tr($\mathbf{T}$).
2. $\mathbf{R}$:($\mathbf{S}$ $\mathbf{T}$) = ($\mathbf{S^t R}$) : $\mathbf{T}$ = ($\mathbf{R T^t}$) : $\mathbf{S}$.
3. $\mathbf{u} \cdot \mathbf{S}\mathbf{v} = \mathbf{S} : (\mathbf{u} \otimes \mathbf{v})$.
4. $(\mathbf{s} \otimes \mathbf{t}) : (\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}) = (\mathbf{s} \cdot \mathbf{u})\ (\mathbf{t} \cdot \mathbf{v})$
5. $T_{ij} = \mathbf{T} : (\mathbf{e_i} \otimes \mathbf{e_j})$
6. $(\mathbf{u} \otimes \mathbf{v})_{ij} = (\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}) : (\mathbf{e_i} \otimes \mathbf{e_j}) = u_i v_j$
7. Se $\mathbf{S}$ é simétrico, então $\mathbf{S} : \mathbf{T} = \mathbf{S} : \mathbf{T^t} = \mathbf{S} : Sim(\mathbf{T})$
8. Se $\mathbf{S}$ é anti-simétrico, então $\mathbf{S} : \mathbf{T} =$ - $\mathbf{S} : \mathbf{T^t} = \mathbf{S} : Anti(\mathbf{T})$
9. Se $\mathbf{S}$ é simétrico e $\mathbf{T}$ é anti-simétrico, então $\mathbf{S} : \mathbf{T} = 0$.

A.2.8 Diferenciação

Sejam $\mathcal{X}$ e $\mathcal{Y}$ espaços vetoriais normados de dimensão finita e seja uma função $\mathbf{Y}$ definida por $\mathbf{Y} : \mathcal{D} \subset \mathcal{X} \longrightarrow \mathcal{Y}$, onde o domínio $\mathcal{D}$ de $\mathbf{Y}$ é um subconjunto aberto de $\mathcal{X}$. A

função $\mathbf{Y}$ é dita ser diferenciável em um argumento $\mathbf{X_0} \in \mathcal{D}$ se existir uma transformação linear $\mathrm{D}\mathbf{Y}(\mathbf{X_0}) : \mathcal{X} \longrightarrow \mathcal{Y}$ tal que, quando $\mathcal{U} \in \mathcal{X}$ tende a zero, (o elemento 0 de $\mathcal{X}$),

$$\mathbf{Y}(\mathbf{X_0} + \mathcal{U}) = \mathbf{Y}(\mathbf{X_0}) + D\mathbf{Y}(\mathbf{X_0})[\mathcal{U}] + o(\mathbf{U}) \tag{A.35}$$

onde

$$D\mathbf{Y}(\mathbf{X_0})[\mathcal{U}] \tag{A.36}$$

denota a transformação linear em $\mathcal{U}$, representada, em notação abstrata, e

$$o(\mathcal{U}) \tag{A.37}$$

é um termo que tende a zero mais rápido do que $\mathcal{U}$, isto é,

$$\lim_{\mathcal{U}\to 0} \frac{o\|\mathcal{U}\|}{\mathcal{U}} \tag{A.38}$$

Se a aplicação linear $D\mathbf{Y}(\mathbf{X_0})$ existe, ela é única e é chamada derivada de $\mathbf{Y}$ em $\mathbf{X_0}$. A derivada satisfaz

$$D\mathbf{Y}(\mathbf{X_0})[\mathcal{U}] = \lim_{\varepsilon\to 0 \varepsilon\in\mathcal{X}} \frac{1}{\varepsilon}[\mathbf{Y}(\mathbf{X_0} + \varepsilon\mathcal{U}) - \mathbf{Y}(\mathbf{X_0})] = \frac{d}{d\varepsilon}\mathbf{Y}(\mathbf{X_0} + \varepsilon\mathcal{U})|_{\varepsilon=0} \tag{A.39}$$

para cada $\mathcal{U} \in \mathcal{X}$. Note que, para um dado $\mathcal{U}$, o termo $D\mathbf{Y}(\mathbf{X_0})[\mathcal{U}]$ é a derivada direcional de $\mathbf{Y}$ $(em\mathbf{X_0})$ na direção de $\mathcal{U}$.

A.2.9 Linearização de Uma Função Não-Linear

A função $\mathbf{L} : \mathcal{D} \subset \mathcal{X}$, definida por

$$\mathbf{L}(\mathcal{U}) \equiv \mathbf{Y}(\mathbf{X_0}) + D\mathbf{Y}(\mathbf{X_0})[\mathcal{U}] \tag{A.40}$$

é a chamada *linearização* de $\mathbf{Y}$ em relação a $\mathbf{X_0}$, isto é, ela é a aproximação linear a $\mathbf{Y}$ em $\mathbf{X_0}$. Note, observando (2.18) que a função definida em (2.20) corresponde, com efeito, à aproximação a $\mathbf{Y}$ que ignora todos os termos de ordem superior (não-lineares) em $\mathcal{U}$.

A.2.10 O Gradiente

Desde que a derivada é uma transformação linear entre espaço vetoriais de dimensão finita, ela pode ser representada como

$$D\mathbf{Y}(\mathbf{X_0})[\mathcal{U}] = \nabla\mathbf{Y}(\mathbf{X_0}) * \mathcal{U} \tag{A.41}$$

onde $\nabla\mathbf{Y}(\mathbf{X_0})$ é o *gradiente* de $\mathbf{Y}$ em $\mathbf{X_0}$ e o símbolo '*' denota uma operação de produto apropriada.

A.2.11 A Divergência

Seja $\mathbf{v} : \mathcal{D} \subset \mathcal{E} \longrightarrow \mathcal{U}$ um campo vetorial suave em $\mathcal{D}$. A *divergência* de $\mathbf{v}$ é o campo escalar, definido por

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = Tr(\nabla \mathbf{v}) = \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \tag{A.42}$$

Agora seja $\mathbf{T}$ um campo tensorial de segunda ordem suave em $\mathcal{D}$. A *divergência* de $\mathbf{T}$ é o campo vetorial, denotado por $\nabla \cdot \mathbf{T}$, que satisfaz

$$(\nabla \cdot \mathbf{T}) \cdot \mathbf{u} = \nabla \cdot (\mathbf{T^t u}), \tag{A.43}$$

$\forall\ \mathbf{u} \in \mathcal{U}$. Em componentes Cartesianas temos

$$(\nabla \cdot \mathbf{T})_i = \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} \tag{A.44}$$

A.2.12 O Teorema da Divergência

Seja $\mathcal{B} \subset \mathcal{E}$ uma região fechada com fronteira suave por partes $\partial\mathcal{B}$ e seja α, $\mathbf{v}$ e $\mathbf{T}$ um campo, escalar, vetorial, e tensorial, em $\mathcal{B}$, respectivamente. Então,

$$\begin{aligned} \int_{\partial\mathcal{B}} \alpha \mathbf{n} da &= \int_{\mathcal{B}} \nabla \alpha dv \\ \int_{\partial\mathcal{B}} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} da &= \int_{\mathcal{B}} \nabla \cdot \mathbf{v} dv \\ \int_{\partial\mathcal{B}} \mathbf{T}\mathbf{n} da &= \int_{\mathcal{B}} \nabla \cdot \overleftarrow{T}\, dv \end{aligned} \tag{A.45}$$

Consideremos, agora, algumas relações úteis envolvendo gradientes e divergentes. Sejam então, α e $\mathbf{T}$, respectivamente, campos escalar e tensorial, suaves em $\mathcal{D} \subset \mathcal{E}$ e sejam $\mathbf{u}$ e $\mathbf{v}$ campos vetoriais suaves em $\mathcal{D}$. As seguintes relações úteis se verificam:

1. $\nabla(\alpha \mathbf{u}) = \alpha \nabla \mathbf{u} + \mathbf{u} \otimes \nabla \alpha$.
2. $\nabla \cdot (\alpha \mathbf{u}) = \alpha\ \nabla \cdot \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \alpha$.
3. $\nabla(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}) = (\nabla \mathbf{v})^t \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^t \mathbf{v}$
4. $\nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}) = \mathbf{u} \nabla \cdot \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{u}) \mathbf{v}$.
5. $\nabla \cdot (\mathbf{T}\mathbf{u}) = \mathbf{T^t} : \nabla \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \cdot (\mathbf{T^t})$.
6. $\nabla \cdot (\alpha \mathbf{T}) = \alpha \nabla \cdot \mathbf{T} + \mathbf{T} \nabla \alpha$.

A.2.13 Linearização de Problemas Não-lineares

A linearização de problemas não-lineares desempenham um papel crucial na mecânica teórica e computacional. Uma apresentação interessante da teoria da linearização é dada por Marsden e Hugues (CHORIN, 1993) dentro de um tratamento matemático mais

geral e por Hugues e Pister (HUGHES; PISTER, 1978), em um contexto da mecânica dos sólidos. Na mecânica do contínuo teórica, o conceito de linearização é essencial na construção das aproximações lineares para teorias não-lineares gerais. Na mecânica computacional, por outro lado, o interesse em linearização deriva geralmente do fato de que soluções numéricas de problemas não-lineares são usualmente obtidos por algorítimos que requerem a solução de uma sequência de problemas linearizados (ou aproximadamente linearizados). Um exemplo típico é o conhecido esquema iterativo de Newton-Raphson ((AUTH.), 2008),muito empregado nos cursos de cálculo numérico.

Consideremos agora o problema linear e sua foram linearizada. Seja $\mathbf{Y} : \mathcal{D} \subset \mathcal{X} \longrightarrow \mathcal{Y}$ uma função não linear genérica. Nosso problema não-linear genérico consiste em encontrar $\mathbf{X} \in \mathcal{D}$ tal que

$$\mathbf{L}(\mathcal{U}) \equiv \mathbf{Y}(\mathbf{X_0}) + D\mathbf{Y}(\mathbf{X_0})[\mathcal{U}] = 0 \tag{A.46}$$

onde, $\mathbf{L}(\mathcal{U})$ é a linearização de $\mathbf{Y}$ em $\mathbf{X_0}$

A.3 Funções e Distribuições

Em uma aula na graduação em física, o professor será tentado, em certas ocasiões, a dizer: "seja $\delta(x)$ uma função na reta que é igual a 0 distante do 0 e é infinita em 0 de tal maneira que sua integral total é 1. A propriedade mais importante de $\delta(x)$ é exemplificada pela identidade

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi(x)\delta(x)dx = \phi(0) \tag{A.47}$$

onde ϕ é qualquer função contínua de x." Tal função é um objeto que se gostaria de usar com frequência; mas é claro, não existe tal função, pois uma função que é nula em toda parte exceto em um ponto, tem integral nula. No geral, o importante é perceber o que o professor está tentando estabelecer: **descrever um objeto em termos da maneira que ele se comporta quando integrado contra uma função**. É para tal propósito que a teoria das distribuições (DUISTERMAAT, 2010) ou *funções generalizadas* foi criada. Ela pode ser formulada em todas as dimensões, seu escopo matemático é vasto e ela tem revolucionado a análise moderna. Uma maneira de elaborar, do ponto de vista distribucional, é notar que, uma definição pontual de funções não é muito relevante em muitas situações que surgem na engenharia ou física. Isto é devido ao fato que as observações físicas frequentemente não representam cálculos afiados em um único ponto no espaço-tempo, mas, invés disso, médias de flutuações em regiões pequenas, mas finitas do espaço-tempo.

Este é um ponto essencial na teoria dos sinais, onde existem limitações na determinação dos comprimentos dos pulsos e na teoria quântica, onde os campos eletromagnéticos de partículas elementares não podem ser medidos a menos que se use um corpo

teste macroscópico. Do ponto de vista matemático, pode-se dizer que uma medição de uma quantidade física, por meio de um corpo-teste fornece uma média de valores desta quantidade em uma região muito pequena, a última sendo representada por uma função suave que é zero fora de um pequeno domínio. Substitui-se o corpo-teste por essas funções, as quais são naturalmente chamadas *funções testes*. O valor assim medido é uma função no espaço das funções teste e a interpretação da medição como uma média torna claro que esta função deve ser linear. Assim, se T é o espaço das funções-teste (não especificado nesse trabalho), quantidades físicas assinalam valores reais ou complexos às funções em T. Concentrando-se na nossa ideia de que medições são médias, reconhecemos que, às vezes, as coisas não são tão ruins assim e que, na verdade, medições pontuais são possíveis. Assim, funções ordinárias são também passíveis de serem vistas como funcionais em T. Se f é uma tal função ordinária, ela representa o seguinte funcional em T:

$$\phi \longmapsto \int f(x)\phi(x)dx \in \mathcal{C} \tag{A.48}$$

APÊNDICE B – Cálculo do Gradiente da Função Peso W

Queremos calcular $\vec{\nabla}_i W_{ij}$. Para tanto, sejam

$$\vec{x_i} = x_i\hat{x} + y_i\hat{y} + z_i\hat{z} \tag{B.1}$$

onde $\hat{x}$, $\hat{y}$ e $\hat{z}$ saõ versores na direção de $\vec{x_i}$, i = 1, 2, ..., n, o número de partículas e

$$\vec{x_j} = x_j\hat{x} + y_j\hat{y} + z_j\hat{z} \tag{B.2}$$

j = 1, 2, ..., n-1, é o número de partículas vizinhas às partículas i. de forma que

$$\vec{x_i} - \vec{x_j} = (x_i - x_j)\hat{x} + (y_i - y_j)\hat{y} + (z_i - z_j)\hat{z} \tag{B.3}$$

Seja então:

$$r_{ij}^2 = \vec{x_i} - \vec{x_j}^2 = (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 \tag{B.4}$$

$$r_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2} \tag{B.5}$$

Consideremos então a expressão para W_{ij}:

$$\mathrm{W}_{ij} = \begin{cases} (3-q)^5 - 6(2-q)^5 + 15(1-q)^5 & \text{se } 0 \le q \le 1 \\ (3-q)^5 - 6(2-q)^5 & \text{se } 1 < q \le 2 \\ (3-q)^5 & \text{se } 2 < q \le 3 \\ 0 & \text{se } outro \end{cases}$$

Como $W_{ij} = W_{ij}[r_{ij}(x, y)]$, então:

$$\frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^k} = \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} \frac{\partial r_{ij}}{\partial x_i^k} \tag{B.6}$$

k = x, y e z. Teremos então, para $\vec{\nabla}_i W_{ij}$:

$$\vec{\nabla}_i W_{ij} = \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} \frac{\partial r_{ij}}{\partial x_i}\hat{x} + \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} \frac{\partial r_{ij}}{\partial y_i}\hat{y} + \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} \frac{\partial r_{ij}}{\partial z_i}\hat{z} = \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} [\frac{\partial r_{ij}}{\partial x_i}\hat{x} + \frac{\partial r_{ij}}{\partial y_i}\hat{y} + \frac{\partial r_{ij}}{\partial z_i}\hat{z}] \tag{B.7}$$

Por outro lado:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial r_{ij}}{\partial x_i} = \dfrac{(x_i - x_j)}{\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}} \\ \dfrac{\partial r_{ij}}{\partial y_i} = \dfrac{(y_i - y_j)}{\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}} \\ \dfrac{\partial r_{ij}}{\partial z_i} = \dfrac{(z_i - z_j)}{\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}} \end{cases}$$

Assim:

$$\begin{aligned}\vec{\nabla}_i W_{ij} &= \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}}\left[\frac{(x_i - x_j)}{\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}}\hat{x} + \frac{(y_i - y_j)}{\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}}\hat{y}\right. \\ &+ \left.\frac{(z_i - z_j)}{\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}}\hat{z}\right] \qquad \text{(B.8)}\end{aligned}$$

Usando (B.3) e o lado direito de (B.4) teremos

$$\vec{\nabla}_i W_{ij} = \frac{\vec{x_i} - \vec{x_j}}{r_{ij}}\frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} \qquad \vec{\nabla}_i W_{ij} = \frac{\vec{x_i}}{r_{ij}}\frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} \qquad \text{(B.9)}$$

APÊNDICE C – Equação de Poisson Discreta e Formulação Matricial

Consideremos equação:

$$\sum_j \frac{2V_j}{\rho_j} \frac{(P_i - P_j)\,\mathbf{r}_{ij} \cdot \nabla\omega_{ij}}{r_{ij}^2 + \eta^2} = \frac{1}{\Delta t} \sum_j V_j\,\mathbf{u}_{ij} \cdot \nabla\omega_{ij} \tag{C.1}$$

A equação acima pode ser reescrita como

$$\sum_j (P_i - P_j)\,A_{ij} = \sum_j B_{ij} \tag{C.2}$$

onde $\mathrm{A}_{ij} \equiv \frac{2V_j}{\rho_j} \frac{\mathbf{r}_{ij}\cdot\nabla\omega_{ij}}{r_{ij}^2+\eta^2} B_{ij} \equiv \frac{1}{\Delta t} V_j\,\mathbf{u}_{ij} \cdot \nabla\omega_{ij}$ Podemos desenvolver as parcelas do primeiro membro da Eq.(2) como $\sum_j P_i\,A_{ij} = \sum_{k,j} \delta_{ik}\,P_k\,A_{ij} = \sum_k \left(\sum_j \delta_{ik}\,A_{i,j}\right) P_k \equiv \sum_k \bar{A}_{ik}\,P_k$ $\sum_j P_j\,A_{ij} = \sum_k A_{ik}\,P_k$, assim podemos reescrever a Eq.(2) como

$$\sum_k \mathcal{M}_{ik}\,P_k = b_i \qquad ou de forma simbólica \qquad \hat{\mathcal{M}} \cdot \vec{P} = \vec{b}, \tag{C.3}$$

onde $\mathrm{M}_{ik} \equiv A_{ik} - \bar{A}_{ik} e b_i \equiv \sum_j B_{ij}$,

$$\bar{A}_{ik} \equiv \sum_j \delta_{ik}\,A_{ij} = \{\, \sum_j A_{ij} \equiv a_i, \;\; para\; i = k\, 0, \qquad\qquad para\; i \neq k = (\,a\,)_1 \;\; 0 \;\cdots\; 00\; a_2 \;\cdots\; 0 \vdots \vdots \tag{C.4}$$

APÊNDICE D – Método Numérico

D.1 Introdução

Neste trabalho, seguimos um procedimento numérico elementar para a integração da equação de governo. Primeiramente foi escrito um código para busca de partículas e posteriormente, um esquema numérico foi estabelecido para a solução das equações.

D.2 Busca por Partículas

Nesta secção usamos um algoritmo de busca. No método SPH, as aproximações são feitas através de um produto por convolução com o núcleo W, que possui as propriedades enunciadas anteriormente. Apesar de usarmos um número finito de partículas, a priori, um algoritmo elementar varreria o conjunto de todas as partículas do sistema fazendo com que houvesse um trabalho árduo por parte da máquina. No entanto, as partículas vizinhas a uma dada partícula de interesse, ou seja, partículas dentro do raio de atuação de uma partícula com índice fixo em uma dada iteração, reduz consideravelmente a busca, mas que, ainda, dependendo do número de partículas do sistema, pode ser muito dispendioso. Métodos de buscas sofisticados, então, tornam-se necessários. De qualquer

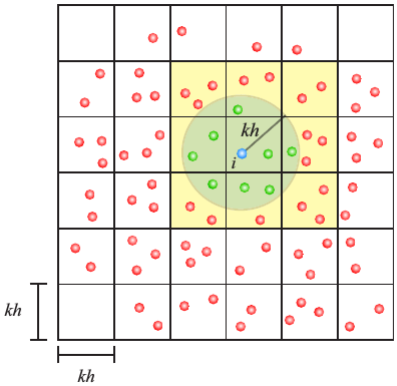
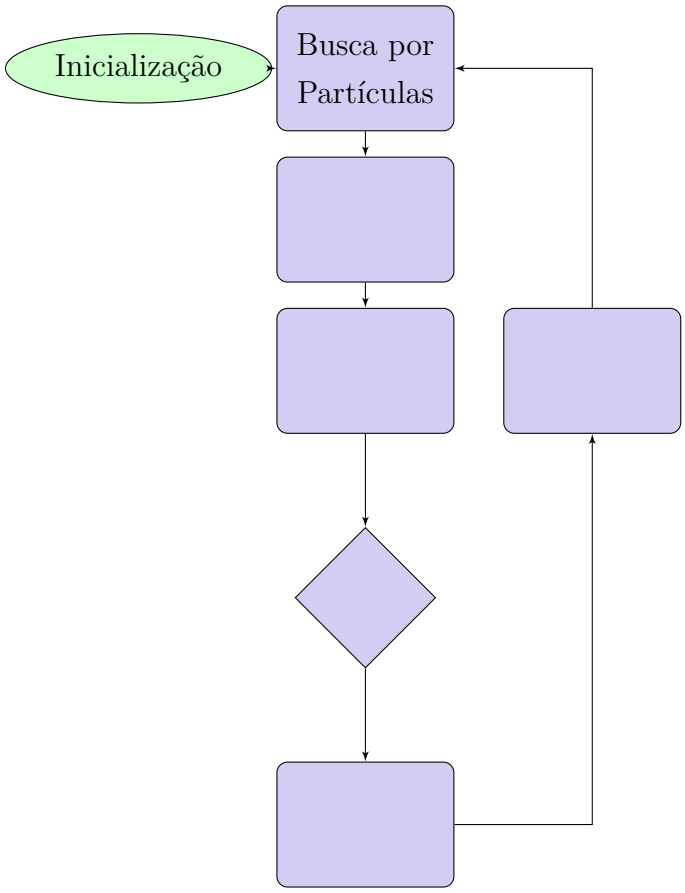


Figura 43 – Busca de partículas vizinhas utilizando uma malha bidimensional uniforme cujo espaçamento de cada célula coincide com o raio de influência κh. A região amarela é a região de busca quando a partícula considerada é a i-ésima. Figura extraída de (NETO, 2007)

forma, um algoritmo para a solução do problema deve ser desenvolvido com um método

de busca eficiente. Um tal método pode ser encontrado com mais detalhes em (NETO, 2007), por exemplo.



D.3 Métodos Numéricos

D.3.1 Integração Numérica Temporal

Após cada ciclo de cálculo do sistema SPH para o nosso sistema [Ref], a fim de atualizar as grandezas envolvidas (ou seja, posição, velocidade, densidade e pressão), num dado instante de tempo do ciclo, é necessário integrar a equação de momento [Ref] em relação à variável temporal. No cálculo numérico existem vários métodos para a integração de equações diferenciais (**??**). Dependendo da maneira que se calcula as variáveis incógnitas para o sistema, os métodos de integração dividem-se, basicamente, em dois tipos: *métodos implícitos e métodos explícitos*.

- Métodos Implícitos. As variáveis desconhecidas são dadas implicitamente como a silução de um sistema de equações envolvendo o estado atual e o desconhecido do sistema.

- *casos estáticos e quase-estáticos*
  Por exemplo, em problemas estruturais, para o caso estático, e estampagem de

metais, para sistemas quase-estáticos.

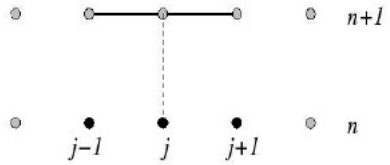


Figura 44 – Representação de um esquema implícito. Figura extraída de (PEREIRA,)

- Métodos Explícitos As variáveis são calculadas considerando-se apenas o estado atual do sistema

  – *Casos dinâmicos*
  Fenômenos dinâmicos são naturalmente mais instáveis do que os estáticos, onde as propriedades dos materiais podem variar com a taxa, que pode ser abrúpta ou não. Enfim, uma série de fatores que afetam os resultados. Por exemplo, em sistemas dinâmicos, tais como dinâmica de fluidos, problemas de colisões, etc.

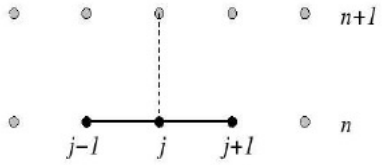


Figura 45 – Representação de um esquema explícito. Figura extraída de (PEREIRA,)

D.4 Integração

O problema se resolve com os passos:

- Equações:

$$\mathbf{r}_i^* = \mathbf{r}_i^n + \mathbf{v}_i^n * dt \tag{D.1}$$

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \sum_{j=1}^{N} m_j \left(\frac{P_i}{\rho_i^2} + \frac{P_j}{\rho_j^2} \right) \nabla_i W_{ij}(\mathbf{r}_{ij}, h) \tag{D.2}$$

$$\mathbf{v}_i = \frac{d\mathbf{x}_i}{dt} \tag{D.3}$$

- Integração numérica:

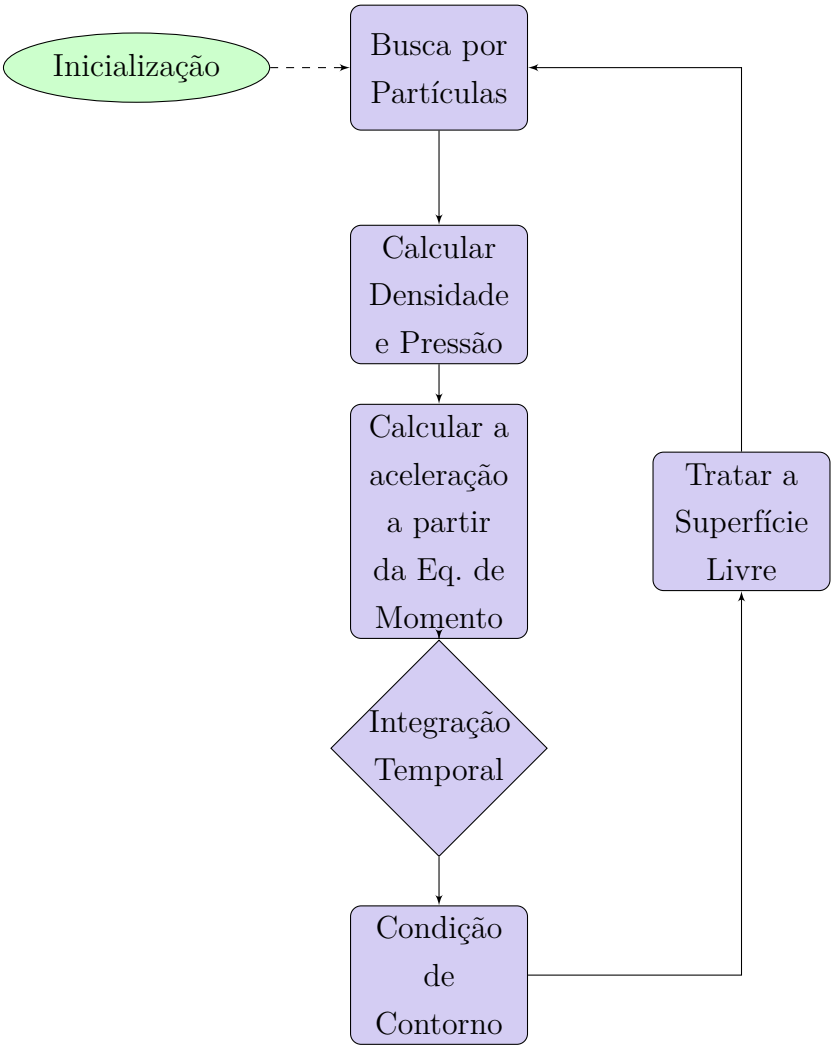
$$\mathbf{r}_i^* = \mathbf{r}_i^n + \Delta t * \mathbf{v}_i^n \tag{D.4}$$

$$\mathbf{v}_i^* = \mathbf{v}_i^n + \Delta t \left[\sum_{j=1}^{N} m_j \left(\frac{P_i}{\rho_i^2} + \frac{P_j}{\rho_j^2} \right) \nabla_i W_{ij}(\mathbf{r}_{ij}, h) \right] \tag{D.5}$$

$$\mathbf{v}_i = \frac{\Delta \mathbf{x}_i}{\Delta t} \tag{D.6}$$

onde $\mathbf{v}_i$ é a velocidade e $\nabla_i W_{ij}(\mathbf{r}_{ij}, h)$ é dado no apêndice [Ref]

Enfim, tem-se o seguinte fluxograma:



D.5 Leitura e Exibição de Dados

Após esses procedimentos, uma série de arquivos de dados foram gerados e posteriormente lidos no software Paraview ((C) SANDIA CORPORATION, 2005-2008)

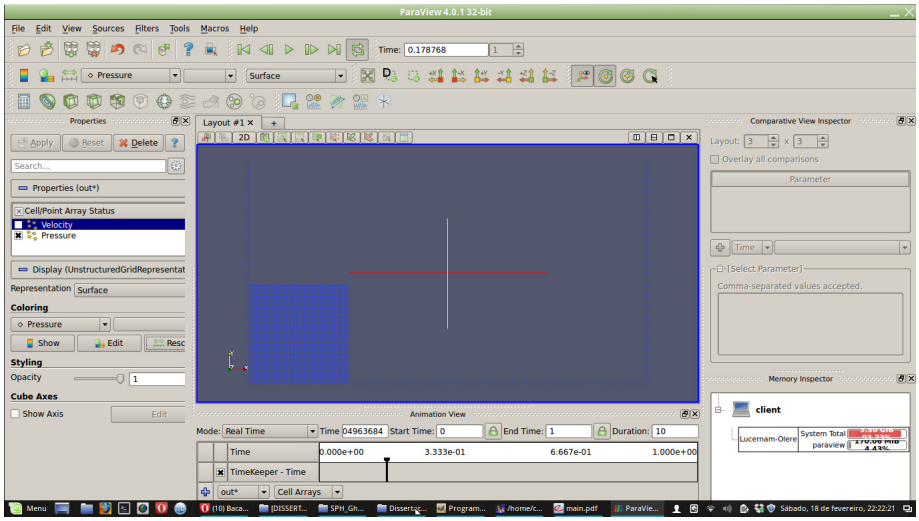


Figura 46 – Paraview versão 4.0.1 ((C) SANDIA CORPORATION, 2005-2008)

D.5.1 Figuras e Gráficos

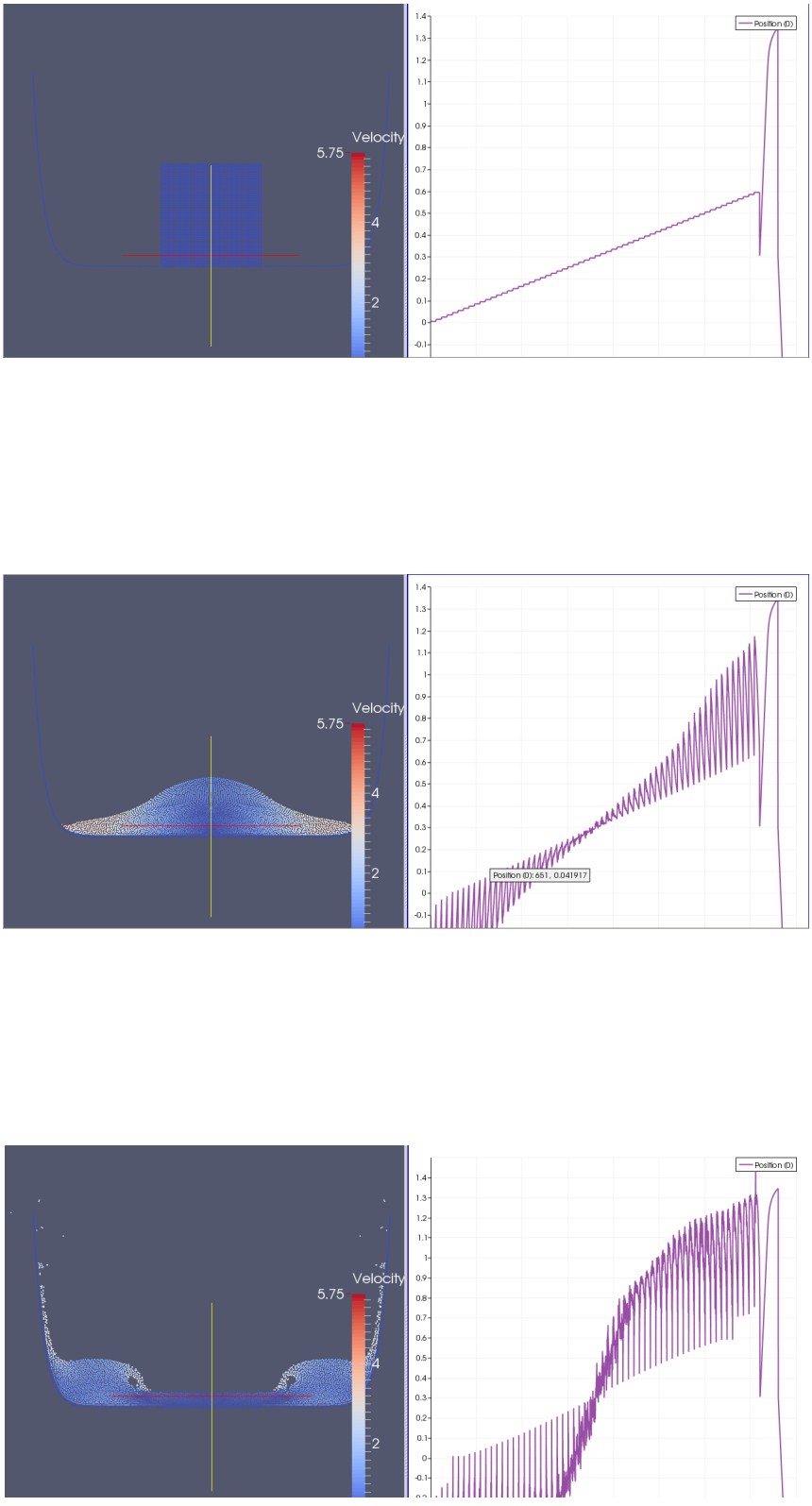


Figura 47 – Paraview versão 4.0.1 ((C) SANDIA CORPORATION, 2005-2008)

APÊNDICE E – Equação de Momento

Considere a equação de momento contínua:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla P \tag{E.1}$$

cuja discretização por partículas é dada por

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{1}{\rho}\sum_{j=1}^{N}\frac{m_j}{\rho_j}P_j\nabla_i W_{ij} \tag{E.2}$$

onde, P_j é uma notação para $P(x_j)$. No entanto, a expressão [Ref] é escrita da seguinte forma:

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{1}{\rho}\sum_{j=1}^{N}\frac{m_j}{\rho_j}\left(\frac{P_i}{\rho_i^2}+\frac{P_j}{\rho_j^2}\right)\nabla_i W_{ij} \tag{E.3}$$

Essa equação foi usanda na simulação como um artifício numérico básico na área (melhorar ess afirmacao).

Afirmação: essas expressões são equivalentes. Com efeito, seja $\phi = \frac{f}{\rho}$. Então:

$$\nabla\phi = \nabla\left(\frac{f}{\rho}\right) = \frac{1}{\rho}\nabla f - \frac{f}{\rho^2}\nabla\rho \tag{E.4}$$

Logo:

$$\nabla f = \rho\left[\nabla\left(\frac{f}{\rho}\right) + \frac{f}{\rho^2}\nabla\rho\right] \tag{E.5}$$

Assim, para a equação indicial, teremos:

$$\nabla f_i = \rho_i\left[\nabla\left(\frac{f_i}{\rho_i}\right) + \frac{f_i}{\rho_i^2}\nabla\rho_i\right] \tag{E.6}$$

Aplicando agora a definição de gradiente SPH para $\frac{f}{\rho}$, teremos:

$$\nabla f_i = \rho_i\left[\sum_{j=1}^{N}\frac{m_j}{\rho_j}\left(\frac{f_i}{\rho_i}\right)\nabla_i W_{ij} + \frac{f_i}{\rho_i^2}\sum_{j=1}^{N}m_j\nabla_i W_{ij}\right] \tag{E.7}$$

$$\nabla f_i = \rho_i\left[\sum_{j=1}^{N}m_j\left(\frac{f_j}{\rho_j^2}\nabla_i W_{ij} + \frac{f_i}{\rho_i^2}\nabla_i W_{ij}\right)\right] \tag{E.8}$$

$$\nabla f_i = \rho_i\left[\sum_{j=1}^{N}m_j\left(\frac{f_i}{\rho_i^2}+\frac{f_j}{\rho_j^2}\right)\nabla_i W_{ij}\right] \tag{E.9}$$