Simulação numérica de escoamentos bifásicos com o método ISPH

Douglas Farias Cordeiro

SERVIÇO DE PÓS-GRADUAÇÃO DO ICMC-USP

Data de Depósito:

Assinatura:

Simulação numérica de escoamentos bifásicos com o método ISPH

Douglas Farias Cordeiro

Orientadores: Prof. Dr. Fabrício Simeoni de Sousa Prof. Dr. João Miguel Nóbrega

> Tese apresentada ao Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - ICMC-USP, como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Ciências - Ciências de Computação e Matemática Computacional. *EXEMPLAR DE DEFESA*.

USP – São Carlos Outubro de 2013

Ficha catalográfica preparada pela Seção de Tratamento da Informação da Biblioteca Prof. Achille Bassi – ICMC/USP

Cordeiro, Douglas Farias C794s Simulação numérica de escoamentos bifásicos com ISPH / Douglas Farias Cordeiro; orientadores Fabrício Simeoni de Sousa e João Miguel Nóbrega. -- São Carlos, 2013. 155 p. Tese (Doutorado Duplo - Programa de Pós-Graduação em Ciências de Computação e Matemática Computacional e Programa Doutoral em Ciência e Engenharia de Polímeros e Compósitos) - Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo; Departamento de Engenharia de Polímeros, Universidade do Minho, 2013. 1. ISPH. 2. Simulações numéricas. 3. Escoamentos bifásicos. 4. Tratamento de interface. I. Sousa, Fabrício Simeoni de, orient. II. Nóbrega, João Miguel, orient. III. Título.

Depois destas coisas, olhei, e eis que estava uma porta aberta no céu; e a primeira voz, que como de trombeta ouvira falar comigo, disse: Sobe aqui, e mostrar-te-ei as coisas que depois destas devem acontecer. (Apocalipse 4:1)

Para minha esposa, Jisele, com amor.

Suporte financeiro

O doutorado ao qual resultou a presente tese foi suportado financeiramente pela Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (Fapesp) sob o processo nº. 2009/11670-1, pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), e pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES).

Resumo

O método ISPH (do inglês, *Incompressible Smoothed Particle Hydrodynamics*) é um método de aproximação livre de malha que, através de um conjunto finito de partículas e uma formulação completamente Lagrangeana, permite a solução de diversos tipos de escoamentos. Entretanto, sua aplicação para escoamentos bifásicos ainda é um desafio, principalmente no que refere-se à manutenabilidade da interface entre fluidos. Diante disso, nesta tese é apresentado o desenvolvimento de um código numérico baseado no método ISPH, sendo propostas duas técnicas de tratamento de interface. Para tanto é realizado um estudo a cerca do método, considerando diferentes metodologias, e analisando pontos específicos, tais como a solução do campo de pressões. São apresentados resultados que mostram a eficácia do método, tanto em escoamentos monofásicos, quanto em escoamentos multifásicos, onde, neste caso, são destacadas as melhorias obtidas através das técnicas de tratamento de interface propostas. Por fim, é realizado um estudo do comportamento de misturas bifásicas, com referência ao fenômeno da inversão de fase.

Palavras-chave: ISPH; simulações numéricas; escoamentos bifásicos; tratamento de interface;

Abstract

Incompressible Smoothed Particle Hydrodynamics (ISPH) method is a meshless approximation that has been used to simulate several types of fluid flows, through a finite particle set and fully lagrangian formulation. The application of ISPH method in two-fluid flow simulations however, has presented many challenges, specially related to the presence of the interface between different fluids. Thus, we present in this study the development of a numerical code based on ISPH, introducing novel interface treatment techniques. A thorough study about this method is provided, considering different methodologies and analysing specific points such as the position of the interface and the obtained pressure field. Results have been presented to show the methods developed in this thesis efficiently simulate two-fluid flows, illustrating the improvements achieved by the proposed interface treatment techniques. Finally, a study of biphasic mixture behavior is carried out with reference to phase inversion phenomena.

Keywords: ISPH; numerical simulation; two-fluid flow; interface treatment;

Sumário

1	Intr	odução	27
	1.1	O método SPH	28
	1.2	O fenômeno da inversão de fase	29
	1.3	Objetivo do trabalho	29
	1.4	Organização da tese	30
2	Equ	ações conservativas em escoamentos multifásicos	33
	2.1	Introdução	33
	2.2	Equações de Navier-Stokes	34
	2.3	Compressibilidade e Incompressibilidade dos Fluidos	35
	2.4	Classificação Reológica dos Fluidos	36
		2.4.1 Fluidos newtonianos	36
		2.4.2 Fluidos não-newtonianos	37
	2.5	Tensão superficial	39
	2.6	Considerações parciais	40
3	O m	étodo de aproximação Smoothed Particle Hydrodynamics	43
	3.1	Uma visão geral sobre o SPH	44
	3.2	Formulação do SPH	46
		3.2.1 Representação Integral	46
		3.2.2 Representação Integral da Derivada de uma Função	47
	3.3	Discretização Através de Partículas	48
	3.4	Função núcleo	51
	3.5	Considerações parciais	53
4	Asp	ectos numéricos e computacionais em dinâmica dos fluidos usando SPH	55
	4.1	Introdução	55
	4.2	A escolha do comprimento suave	55

	4.3	Distribuição inicial das partículas	56
	4.4	Busca de partículas vizinhas	56
		4.4.1 Visão geral	56
		4.4.2 Busca de partículas vizinhas por força bruta	57
		4.4.3 Busca de partículas vizinhas através de malha uniforme	57
		4.4.4 Busca de partículas vizinhas através de árvore	59
	4.5	Integração temporal no SPH	60
	4.6	Tratamento de Fronteiras	62
		4.6.1 Visão Geral	62
		4.6.2 Tratamento de fronteira utilizando partículas	62
		4.6.3 Tratamento de fronteira puramente geométrico	65
	4.7	Considerações parciais	65
5	SPH	l quase-incompressível	67
	5.1	Introdução	67
	5.2	Formulação WCSPH	68
		5.2.1 Aplicação do SPH para aproximação da densidade	68
		5.2.2 Aproximação da equação de conservação da quantidade de movimento atra-	60
	5 2		09
	5.5 5 4		72
	5.4		13
6	SPH	I Incompressível	75
	6.1	Introdução	75
	6.2	Formulações ISPH baseadas no método da projeção	76
		6.2.1 ISPH com campo de velocidade livre de divergência (ISPH-DF)	76
		6.2.2 ISPH com densidade invariante (ISPH-DI)	80
		6.2.3 ISPH com controle de densidade e velocidade (ISPH-DFDI)	81
	6.3	Solução do sistema linear	83
	6.4	Correção de posição no ISPH	86
	6.5	Considerações parciais	89
7	Apli	cação do ISPH em escoamentos newtonianos monofásicos	91
	7.1	Introdução	91
	7.2	Vórtices de Taylor-Green	91
	7.3	Amortecimento de vórtice	92
	7.4	Escoamento de Hagen-Poiseuille	96
	7.5	Cavidade impulsionada	102
	7.6	Considerações parciais	102

8	Novo	os métodos para escoamentos multifásicos com ISPH	105
	8.1	Introdução	105
	8.2	Tratamento de interface no ISPH	106
		8.2.1 Visão geral	106
		8.2.2 Tratamento de interface através de série de Taylor	107
		8.2.3 Tratamento de interface através de front-tracking	111
		8.2.4 Verificação das técnicas de tratamento de interface	115
	8.3	Cálculo da tensão superficial no ISPH	117
	8.4	Considerações parciais	120
9	Apli	cação do ISPH em escoamentos newtonianos multifásicos	123
	9.1	Introdução	123
	9.2	Bolha estática	124
	9.3	Bolha quadrada	124
	9.4	Bolha oscilante	126
	9.5	Instabilidade de Rayleigh-Taylor	128
	9.6	Bolha ascendente	130
	9.7	Considerações parciais	133
10	O fe	nômeno da inversão de fase na produção de termoplásticos vulcanizados	139
	10.1	Introdução	139
	10.2	Termoplásticos vulcanizados	140
	10.3	Estudo do comportamento da viscosidade em misturas	141
	10.4	Considerações Parciais	142
11	Cons	siderações finais	145
Re	Referências Bibliográficas 14		

Lista de Figuras

2.1	Classificação reológica dos fluidos com base em suas propriedades físicas	36
2.2	Gráfico ilustrativo da relação entre a taxa de deformação e a tensão de cisalhamente em diferentes tipos de fluidos.	38
2.3	Imagem ilustrativa do efeito da interação entre diferentes moléculas de fluido com	
	diferencia a tensão superficial \mathbf{F}_{ts} , onde as cores azul e vermeina representam dois diferentes fluidos, sendo suas partículas destacadas com a mesma cor	40
3.1	Região de influência sobre uma partícula obtida através da função núcleo: apenas as partículas que estão contidas na região de raio κh em que a partícula <i>i</i> está circunscrita	
	são utilizadas na aproximação.	51
3.2	Comportamento de diferentes funções núcleos e suas derivadas, onde spline ⁴ e spline ⁵ referem-se respectivamente à funções splines de quarta e quinta ordem, e o símbolo	
	aspa-simples (') indica derivada de função	54
4.1	Busca de partículas vizinhas através de malha uniforme. A malha uniforme cobre	
	todo o domínio de simulação, sendo a partícula em vermelho denotada como àquela em que se está efetuando a busca de vizinhos.	58
4.2	Divisão recursiva de um domínio de simulação bidimensional e árvore de busca. A re-	
	gião demarcada de verde na imagem mostrada em (d) refere-se ao espaço de possível	
	presença de partículas vizinhas em relação à partícula <i>i</i>	60
4.3	Ilustração do esquema de integração de Euler.	61
4.4	Ilustração do esquema de integração Leap Frog	61
4.5	Tratamento de fronteiras através de partículas: (esquerda) fantasmas [68], (centro) partículas externas com propriedades simétricas [55], (direita) partículas fantasmas e	
	simétricas [58, 56]	63
4.6	Configuração das partículas virtuais: em azul são representadas as partículas de fluido,	
	em verde as partículas de fronteira e em laranja as partículas virtuais	64

4.7	Configuração das partículas virtuais em regiões a) externas à quinas, e b) internas à quinas	65
5.1	Perfil de densidades nas partículas através da Equação 5.1: (esquerda) resultado com partículas fantasmas, e (direita) ausência de partículas fantasmas (deficiências nas proximidades do contorno).	69
6.1	Problema da imposição de condição de Dirichlet para a pressão em uma simulação da cavidade impulsionada: (a) campo de pressões em t=0.4s, e (b) detalhe do gradiente da pressões na região anda fai imposta a condição da Dirichlet para pressõe	05
6.2	Problema de agrupamento de partículas em altos Reynolds usando o ISPH	83 87
7.1	Resultados obtidos para o problema dos vórtices de Taylor-Green com $Re = 100$, simulação através do método ISPH-DFS com 40×40 partículas em $t = 0.0, 0.25, 0.75$ e 1.0: velocidade na direção x (a), velocidade na direção y (b), campo de pressões p (c), e campo vetorial de velocidades v (d)	93
7.2	Comparações dos resultados obtidos através do método ISPH-DFS com os resul- tados analíticos — para o problema vórtices de Taylor-Green: perfil da velocidade vertical em $x = 0.5$ ((a), (c) e (e)), e perfil da velocidade horizontal em $y = 0.5$ ((b), (d) e (f))	94
7.3	Comparações dos resultados obtidos com os resultados analíticos — para o pro- blema Vórtices de Taylor-Green: decaímento da velocidade máxima	95
7.4	Resultados obtidos para o problema dos vórtices de amortecimento de vórtice com $Re = 10$ para os tempos $t = 0.0s$, $0.25s$, $0.75s$ e $1.0s$. Simulação através do método ISPH-DFS com 40×40 partículas: velocidade na direção x (a), velocidade na direção y (b), campo de pressões p (c), e campo vetorial de velocidades v (d).	97
7.5	Comparações dos resultados obtidos através do ISPH-DFS — com os resultados de [111] para o problema Amortecimento de Vórtice: perfil da velocidade horizontal em $u = 0.5$ (columa asquerda), a perfil da velocidada vertical em $r = 0.5$ (columa direita)	08
7.6	y = 0.5 (contra esquerda), e perm da velocidade ventear em $x = 0.5$ (contra direita). Comparações dos resultados obtidos — com os resultados de [111] para o problema Amortecimento de Vórtice: perfil da pressão em $x = 0.5$	98 99
7.7	Decaimento da velocidade máxima ao longo do tempo para Amortecimento de Vór- tice com $Re = 10$, onde \triangle : resultados de [111] e —: os resultados obtidos com o código desenvolvido	100
70	Esecomente de Hagen Deiseviller (c) e (b) condições de fronteiro	100
7.9	Comparações dos resultados obtidos \triangle com os resultados analíticos — para o pro- blema Escoamento de Hagen-Poiseuille para $t = 5.0s$: perfil da pressão em $y = 0.5$	101
	(coluna esquerda), e perfil da velocidade $u \text{ em } x = 2.5$ (coluna direita).	103

7.10	Comparações de resultados para o perfil de velocidade horizontal no problema da cavidade impulsionada, sendo 40×40 partículas, - 80×80 partículas, - 160×160 partículas e \triangle resultados de [39]	104
		101
8.1	Detalhe da interpenetração de partículas em escoamentos multifásicos: (a) configura-	107
87	çao problematica, (b) configuração corrigida.	107
0.2	superfície livre.	109
8.3	Ilustração sobre o cálculo da normal através de um esquema baseado em três pontos.	112
8.4	Ilustração sobre o cálculo da normal através de rotação do vetor distância entre partí-	
	culas adjacentes.	113
8.5	Configuração das partículas de fluido no problema da deformação de círculo em vór-	
	tices de Tyalor-Green com 60×60 partículas nos tempos t= $0.0s$, $0.2s$, $0.4s$, $0.6s$ e	
	0.8 <i>s</i>	116
8.6	Configuração das partículas de fluido no problema do circulo em vórtice simples com	
	60×60 partículas para os tempos $t = 0.0s, 0.75s, 1.5s, 3.0s \in 6.0s.$	118
8.7	Configuração das partículas de fluido no problema do quadrado em vórtice simples	
	$com 60 \times 60$ partículas para os tempos $t = 0.0s, 0.75s, 1.5s, 3.0s$ e 6.0s	119
9.1	Configuração da bolha estática simulada através do método ISPH-DFS com aproxi-	
	mação da tensão superficial via função-cor para $Re = 1.0$ e $\sigma = 1.0$	125
9.2	Salto da pressão, em campo normalizado, em $y = 0.5$ para simulações do problema	
	da bolha estática para $Re = 1.0$, com valor de $h = 2.1Dx$.	125
9.3	Evolução temporal do raio máximo do círculo descrito pelo fluido interno no pro-	
	blema da bolha estática simulado através do método ISPH-DFS com aproximação da	
	tensão superficial via função-cor	125
9.4	Evolução temporal do problema da bolha quadrada, para $Re = 1.0 \text{ e} \sigma = 1.0$, si-	
	mulado através do método ISPH-DFS com aproximação de tensão superficial via	100
0.5		120
9.5	Evolução temporal do raio máximo descrito pelo fluido interno no problema da bolha quadrada simulado atravás do mátodo ISPH DES com aproximação da tensão super	
	ficial via função-cor para diferentes valores de Revnolds	127
96	Evolução temporal do problema da bolha oscilante para $Be = 100.0 \text{ e} \sigma = 1.0$	127
2.0	simulado através do método ISPH-DFS com aproximação de tensão superficial via	
	função-cor.	128
9.7	Evolução temporal do raio máximo em $x = 0.5$ descrito pelo fluido interno no pro-	
	blema da bolha oscilante simulado através do método ISPH-DFS com aproximação	
	da tensão superficial via função-cor para diferentes valores de Reynolds	129

9.8	Resultados obtidos para o problema da instabilidade de Rayleigh-Taylor para pertu-	
	bação inicial da interface dada pela equação 9.1, com razão de densidade $\rho_1/\rho_2 = 2.0$	
	e razão de viscosidade $\mu_1/\mu_2 = 1$ para os tempos $t = 0.0s, 1.4s, 2.8s, 4.2s, 5.6s$ e	
	7.0s: configuração da densidade.	131
9.9	Resultados obtidos para o problema da instabilidade de Rayleigh-Taylor para pertu-	
	bação inicial da interface dada pela equação 9.2, com razão de densidade $\rho_1/\rho_2 = 2.0$	
	e razão de viscosidade $\mu_1/\mu_2 = 1$ para os tempos $t = 0.0s, 1.0s, 2.0s, 3.0s, 4.0s$ e	
	5.0s: configuração da densidade	132
9.10	Mapa do regime de bolhas em ascenção de acordo com suas propriedades físicas:	
	classificação baseada em obserções experimentais provenientes de [10]	134
9.11	Simulação do problema da bolha ascendente (tabela 9.1: caso-1) utilizando ISPH-DFS:	
	configuração da densidade nos tempos $t=0.0s,2.0s,4.0s,6.0s,8.0s$ e $10.0s.$	135
9.12	Simulação do problema da bolha ascendente (tabela 9.1: caso-2) utilizando ISPH-DFS:	
	configuração da densidade nos tempos $t=0.0s,3.0s,6.0s,9.0s,12.0s$ e $15.0s.$	136
9.13	Simulação do problema da bolha ascendente (tabela 9.1: caso-3) utilizando ISPH-DFS:	
	configuração da densidade nos tempos $t=0.0s,5.0s,10.0s,15.0s,20.0s$ e $25.0s.$	137
10.1	Ilustração sobre o processo de inversão de fase: partículas de borracha (material es-	
	curo) e matriz termoplástica (material claro)	140
10.2	Misturador Haake Rheomix 600 OS (imagem retirada de [2])	141
10.3	Configuração inicial dos experimentos realizados: fluido mais viscoso encontra-se	
	sobre o fluido menos viscoso	142
10.4	Resultados numéricos da evolução da mistura nos tempos $t = 1.0s, 2.0s, 3.0s, 4.0s,$	
	5.0s, 6.0s e 7.0s: configuração da viscosidade	143
10.5	Resultados numéricos da evolução da mistura nos tempos $t = 8.0s, 9.0s, 10.0s, 15.0s,$	
	20.0s, $50.0s$ e $100.0s$: configuração da viscosidade	144

Lista de Tabelas

7.1	Condições de fronteira impostas na simulação do escoamento de Hagen-Poiseuille	
	para velocidade $\mathbf{v} = (u, v)$ e pressão p	101
9.1	Propriedades físicas referentes às simulações do problema da bolha ascendente	133

Lista de Algoritmos

1	Busca de vizinhos por força bruta	57
2	Busca de vizinhos em malha uniforme	59
3	Simulação de escoamentos através do WCSPH	72
4	Simulação de escoamentos através do método ISPH-DF	80
5	Solução da pressão no ISPH através de equação de Poisson	80
6	Simulação de escoamentos através do método ISPH-DFS	89
7	Simulação de escoamentos multifásicos através do método ISPH-DFS com ITBLS	110
8	Simulação de escoamentos multifásicos através do método ISPH-DFS com ITBFT	114

Capítulo 1

Introdução

O poder de manipulação da natureza pelo homem, obtido através de inumeráveis avanços científicos, tem cada vez mais apresentado saltos que proporcionam a concepção de modelos de representação e simulação que permitem a solução ou previsão de ações e fenômenos com notáveis resultados. Entretanto, ainda existem diversas áreas que apresentam uma grande necessidade de exploração e aperfeiçoamento, entre as quais está a dinâmica dos fluidos computacional, a qual provê mecanismos para a solução de problemas de mecânica dos fluidos. Esta questão é ainda mais atenuante no que se refere à classes de escoamentos mais específicas e complexas, como é o caso dos escoamentos multifásicos, os quais estão presentes em diversos tipos de aplicações: escoamentos multifásicos em reatores químicos, microfluidodinâmica, processo de preenchimento de moldes com polímeros, indústria alimentícia, indústria do petróleo, produção de termoplásticos vulcanizados (TPVs), entre outros.

Existem vários métodos consagrados que podem ser utilizados na modelagem de escoamento multifásicos, como, por exemplo, métodos de acompanhamento de fronteira [105, 106, 100, 101, 65], métodos do tipo VOF [45, 41], e métodos de Level Set [102, 80, 31, 107]. Contudo, métodos baseados em malhas apresentam vários problemas e limitações, como o uso intenso de interpolações e a dificuldade de lidar com refinamento adaptativo. Em especial, os métodos citados acima para representação de superfícies trazem várias limitações quanto à deformação que as superfícies podem sofrer, ou quanto à precisão que se pode obter. Neste sentido, a utilização de esquemas alternativos, como, por exemplo, métodos livres de malha, torna-se algo bastante interessante, uma vez que estes permitem um processo de refinamento adaptativo muito mais simples e, consequentemente, proporcionando um bom equilíbrio entre precisão e custo computacional. Entre as alternativas de solução numérica sem a utilização de malhas para problemas de dinâmica de fluidos está o método SPH (do inglês, *Smoothed Particle Hydrodynamics*), o qual é utilizado como base principal do presente trabalho.

1.1 O método SPH

O método SPH foi desenvolvido em 1977 por Gingold e Monagham [40] e independentemente por Lucy [63], para a solução numérica de problemas da astrofísica. De um modo geral, o SPH pode ser descrito como um método puramente lagrangeano, onde um determinado problema é discretizado através de um conjunto finito de partículas, as quais possuem propriedades, como volume, massa, densidade e velocidade, associadas a elas. A dinâmica do problema é aproximada através das interações entre as partículas, as quais estão relacionadas à utilização de uma função núcleo, também conhecida por função suave.

Embora originalmente o SPH se mostrasse bastante adequado para a simulação de escoamentos de fluidos compressíveis, a aplicação para fluidos incompressíveis não se mostrava satisfatória. Neste sentido, a busca por soluções numéricas para este tipo de problema levou ao aperfeiçoamento e adequação do método, e através de uma estratégia que considera os fluidos incompressíveis como quase-compressíveis, foi introduzido um novo método, denominado WCSPH (do inglês, *Weakly Compressible Smoothed Particle Hydrodynamics*) [68]. O WCSPH resolve a pressão através da utilização de uma equação de estado, que baseia-se principalmente na variação da densidade de partículas e na velocidade do som no meio. Entretanto, esta abordagem apresentou alguns problemas e limitações, associados principalmente ao cálculo da pressão e a necessidade de passos de tempos pequenos.

Para resolver os problemas existentes no WCSPH, Cummins e Rudman [25] basearam-se no método da projeção e introduziram uma nova estratégia de cálculo da pressão no SPH, onde esta é resolvida através de uma equação de Poisson, e considera o valor da densidade fixo para todas as partículas. O método foi denominado de ISPH (do inglês, *Incompressible Smoothed Particle Hydrodynamics*), e proporcionou uma considerável melhora nos resultados obtidos, além de permitir a utilização de passos de tempo maiores e a eliminação da dependência de definição de um valor para a velocidade do som. Entretanto, a nova estratégia apresentou problemas em relação à aplicação para a solução de escoamentos com elevados números de Reynolds, onde foram observados a formação de agrupamentos de partículas, devido ao alto movimento inercial relacionado.

A necessidade de solução do problema de agrupamento de partículas no ISPH levou à concepção de modelos alternativos, os quais propuseram, principalmente, uma variação na construção da equação de Poisson, levando-se em conta informações referentes à variação da densidade, a qual, nestes modelos, não é considerada fixa [97, 46]. Além disso, também foram propostas técnicas de tratamento da distribuição de partículas, sem alteração do modelo original do ISPH. Entre estas técncias, a que mostrou-se mais interessante foi a inserção de um deslocamento artificial, baseado na distribuição das partículas, com consecutiva correção das variáveis hidrodinâmicas [111].

Embora o método ISPH proporcione bons resultados para a solução de escoamentos newtonianos monofásicos, sua aplicação para escoamentos multifásicos ainda é um desafio. Em particular, a aplicação do modelo original, proposto por Cummins e Rudman [25], com a utilização da técnica de deslocamento artificial, acaba por provocar erros relacionados à manutenção da interface entre fluidos, devido à interpenetração de partículas entre as fases. Neste sentido, o projeto e elaboração de técnicas que permitam o tratamento da interface em soluções através do ISPH torna-se algo evidente e necessário.

1.2 O fenômeno da inversão de fase

Além da complexidade dos escoamentos multifásicos de caráter geral, existem determinados fenômenos que ocorrem em classes específicas de problemas, e que necessitam de análise e tratamentos direcionados, entres os quais está o fenômeno da inversão de fase. Este fenômeno está presente em processos de interesse industrial, como é o caso da produção de termoplásticos vulcanizados (TPVs). De um modo geral, o fenômeno da inversão de fase pode ser descrito como uma alteração na configuração de um escoamento multifásico, onde a fase contínua passa a ser dispersa, e a fase dispersa torna-se contínua.

Embora exista um esforço considerável na exploração do fenômeno da inversão, a elaboração de métodos numéricos capazes de modelá-los ainda é um desafio. Desta maneira, estudos relacionados ao processo, tais como o comportamento de misturas multifásicas em relação à variação da razão da viscosidade entre fluidos, tornam-se de grande importância.

1.3 Objetivo do trabalho

O objetivo principal deste trabalho é projetar e conceber um código de solução numérica baseado no método ISPH que seja capaz de resolver escoamentos bifásicos. Para tal, foi realizado um estudo a cerca do método SPH, levando-se em conta as vantagens e restrições inerentes à diferentes modelos existentes. Desta maneira, foi concebido inicialmente um código ISPH para a solução de escoamentos monofásicos, baseado no modelo clássico do ISPH, o qual permitiu evidenciar restrições em relação à aplicabilidade do método, particularmente em relação à possibilidade de formação de agrupamentos de partículas. Desta maneira, foram estudadas e aplicadas técnicas de tratamento da distribuição de partículas, o que permitiu alcançar um código mais robusto e capaz de solucionar, de forma adequada, problemas clássicos da dinâmica de fluidos.

A aplicação do código concebido da mostrou que o método ISPH, em conjunto com técnicas de distribuição de partículas, apresenta problemas, quando aplicado à escoamentos multifásicos. Este fato ocorre devido à possibilidade de interpenetração de partículas de uma fase na outra, prejudicando os resultados finais. Para resolver o problema, foram projetadas e aplicadas duas técnicas, as quais são, sucessivamente, baseadas em uma correção através de série de Taylor e através de informações provenientes da utilização de uma malha front-tracking. Os resultados obtidos mostraram-se satisfa-tórios.

Finalmente, o código desenvolvido foi aplicado em um estudo do comportamento da viscosidade, o qual está relacionado com o processo de inversão de fase. Os resultados obtidos mostraram que o ISPH, associado à utilização das técnicas de tratamento de interface propostas neste trabalho, é capaz de capturar as particularidades envolvidas, principalmente no que refere-se ao encapsulamento do fluido de maior viscosidade.

1.4 Organização da tese

Esta tese foi organizada de modo a apresentar uma continuidade entre a teoria, o desenvolvimento e a aplicação relacionada ao código ISPH concebido. Desta maneira, os capítulos referentes aos resultados obtidos neste trabalho, encontram-se diretamente após a apresentação dos modelos utilizado. Nos parágrafos que se seguem é descrito com maiores detalhes os temas abordados em cada capítulo.

No capítulo 2 são apresentadas as equações de conservação que governam os problemas de interesse explorados neste trabalho: as equações de Navier-Stokes. Além disso, são descritas restrições referentes à determinados tipos de escoamentos, como os escoamento newtonianos, salientando o efeito disso sobre a aplicação de métodos numéricos. Também é apresentado o tratamento da tensão superficial em escoamentos multifásicos.

O capítulo 3 descreve os fundamentos do SPH, apresentando uma revisão a cerca dos principais trabalhos relacionados ao método. Além disso, a formulação do método é descrita com detalhes, através de uma discussão sobre a obtenção dos operadores SPH e de questões específicos, como a utilização de uma função núcleo e a forma com que um fluido pode ser discretizado através de partículas.

O capítulo 4 trata dos aspectos numéricos e computacionais relacionados ao SPH, os quais são de grande importância para o processo de projeto e elaboração de um código baseado no método. Entre os pontos explorados, encontram-se questões como algoritmos de busca de partículas vizinhas, integração temporal e o tratamento de fronteira.

No capítulo 5 é apresentado o método WCSPH. Embora o presente trabalho esteja diretamente ligado ao método ISPH, acredita-se que é de interesse conhecer a forma de abstração e aproximação com que o método WCSPH trabalha, principalmente no que refere-se à solução da pressão. Neste sentido, é realizada uma discussão das desvantagens inerentes à este método, as quais levaram ao surgimento do ISPH.

O método ISPH, base do trabalho realizado nesta tese, é descrito em detalhes no capítulo 6. Neste sentido, é realizada uma revisão a cerca das principais características do método, destacando diferentes modelos, vantagens e desvantagens de sua utilização. Além disso, o capítulo também apresenta uma discussão a cerca da aplicação de técnicas utilizadas para a solução do problema de distribuição de partículas, característico do método.

O capítulo 7 apresenta alguns problemas clássicos em dinâmica de fluidos, relativos à escoamentos newtonianos monofásicos, descrevendo-os e apresentando a aplicação do código desenvolvido neste trabalho para a solução destes. Além disso, são apresentadas comparações com soluções analíticas, quando possível, ou com resultados de outros trabalhos científicos, a fim de prover uma verificação e validação do código.

O capítulo 8 se dedica a aplicação do método ISPH para escoamentos multifásicos, levantando questões específicas com esta classe de escoamentos, tais como o cálculo da tensão superficial e o tratamento de interface, onde são introduzidas duas técnicas, desenvolvidas neste trabalho. Além disso, são apresentados alguns resultados preliminares com o propósito de validação de tais técnicas.

1.4 - Organização da tese

Os resultados obtidos através da aplicação do código ISPH com a utilização das técnicas de tratamento de interface propostas são apresentados no capítulo 9. Para tal, são descritos tanto problemas relacionados principalmente com a solução da tensão superficial, quanto problemas de caráter mais geral, como é o caso da ascensão de bolhas e do fenômeno da instabilidade de Reyleigh-Taylor.

O capítulo 10 apresenta uma discussão a cerca do problema da inversão de fase, salientando questões teóricas e desafios relacionados à exploração e compreensão deste. A partir disso, é feito um estudo a cerca do comportamento da viscosidade, onde são apresentados resultados obtidos através do código ISPH desenvolvido.

Finalmente, o capítulo 11 apresenta as considerações finais do trabalho, destacando os progressos e as dificuldades encontradas no processo de concepção do código desenvolvido. Além disso, é feita uma discussão a cerca da aplicabilidade do código, salientando as restrições relativas a este.



Equações conservativas em escoamentos multifásicos

2.1 Introdução

A mecânica dos fluidos é uma área de notável importância, tanto no que diz respeito à compreensão científica de diversos fenômenos, quanto ao avanço industrial alcançado através dela. O foco do estudo desta ciência é a ação de forças sobre os fluidos, ou seja, o comportamento dos escoamentos de fluidos. Existem diversos tipos de escoamentos, que podem variar sob os mais diferentes aspectos, tais como propriedades físicas do fluido, o meio em que o escoamento ocorre ou se o escoamento em questão refere-se à apenas um fluido, neste caso denominado monofásico, ou à dois ou mais fluidos, denominados escoamentos multifásicos.

Matematicamente, existem vários modelos que descrevem o comportamento dos fluidos, os quais são constituídos por equações que relacionam as propriedades físicas destes. Estes modelos foram concebidos de acordo com as características do escoamento a ser tratado, de tal modo que alguns deles podem ser restritos à tipos específicos de escoamentos, como é o caso das equações de Burgers, as equações de águas-rasas, as equações de Euler, entre outras. Por outro lado, escoamentos mais complexos exigem modelos matemáticos mais sofisticados, tal como os escoamentos multifásicos, newtonianos ou não-newtonianos. Para estes tipos de escoamentos é necessário o emprego de um modelo de equações de conservação mais geral, as equações de Navier-Stokes. Entretanto, é importante destacar que em grande parte dos escoamentos, os modelos matemáticos empregados não permitem soluções analíticas, sendo necessário o emprego de técnicas numéricas-computacionais para se aproximar as suas soluções.

Neste capítulo será descrito o modelo de Navier-Stokes, assim como as propriedades físicas dos

fluidos que os diferem de acordo com sua classificação reológica ou por suas características de compressibilidade e incompressibilidade. Também serão descritos os efeitos da tensão superficial, de fundamental importância em escoamentos multifásicos.

2.2 Equações de Navier-Stokes

De um modo geral, o comportamento dos fluidos pode ser modelado matematicamente através das equações de Navier-Stokes. Propostas ainda durante o século XIX, as equações de Navier-Stokes descrevem o fluxo de determinadas propriedades de um escoamento, tais como a velocidade e a pressão. Este conjunto de equações é explorado abrangentemente em diversas áreas, como no estudo das correntes oceânicas, dinâmica celeste, análise dos efeitos de poluição, na aeronáutica, entre outras. Entretanto, tais equações apresentam uma complexidade tamanha que torna necessário o conhecimento detalhado de características do tipo de problema a ser tratado, a fim de levantar-se restrições específicas que possam simplificar o processo de solução, sendo que apenas problemas mais simples permitem a obtenção de soluções analíticas.

A solução de fenômenos fluidos mais complexos torna necessária a aplicação de técnicas de aproximação numérica aliadas à processamentos computacionais. Porém, mesmo através da utilização destes meios de aproximação é interessante considerar-se as restrições do problema a ser tratado. Para isso, é importante se conhecer, inicialmente, a forma geral das equações de Navier-Stokes, e a partir desta realizar as simplificações necessárias. As equações de Navier-Stokes podem ser analisadas através de duas diferentes formulações: a formulação euleriana e a formulação lagrangeana.

A principal característica da formulação euleriana é o fato de que o volume de controle do fluido, isto é, um determinado volume em questão por onde o fluido escoa, permanece fixo no espaço, havendo fluxo de massa através das faces deste volume. Neste sentido, a partir do balanço de fluxo neste volume, as equações que governam o escoamento são determinadas. Esta abordagem é comumente utilizada em vários esquemas de aproximação numérica, como é o caso do Método das Diferenças Finitas (MDF) [76].

Por outro lado, em sua forma lagrangeana, as equações de Navier-Stokes descrevem a dinâmica de um fluido considerando o ponto de vista de uma região formada por um conjunto de partículas de fluido que se movem juntamente com o escoamento, onde não existe fluxo de massa através das fronteiras da região, porém ocorrendo a deformação desta, de acordo o movimento descrito pelo escoamento. Neste sentido, as equações que regem o escoamento são determinadas em função da partícula de fluido e do tempo. Nesta formulação é necessário utilizar o conceito de derivada material, o qual refere-se à taxa de variação de uma determinada propriedade ao longo do tempo transportada pelo fluxo do fluido, sendo definida como:

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla.$$
(2.1)

As equações de Navier-Stokes podem ser representadas, em uma abordagem lagrangeana, como:

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \qquad (2.2)$$

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \frac{1}{\rho}\nabla \cdot \tau + \mathbf{F}, \qquad (2.3)$$

onde ρ é a densidade, t é o tempo, v é o campo de velocidades, p é o campo de pressões e τ é o tensor de tensões. Ainda na equação 2.3, o termo representado por **F** refere-se ao conjunto de forças externas que atuam sobre o escoamento, tais como a força gravitacional e a tensão superficial entre fluidos, descrita com maiores detalhes na seção 8.3. A equação 2.2 é denominada como Lei de Conservação da Massa, enquanto a equação 2.3 como Lei de Conservação da Quantidade de Movimento. Além disso, é importante destacar que o tensor de tensões viscosas τ , presente na equação 2.3, tem sua definição dependente das propriedades do fluido a ser modelado.

2.3 Compressibilidade e Incompressibilidade dos Fluidos

De uma forma geral, os fluidos podem ser classificados como compressíveis ou incompressíveis. Esta caracterização está diretamente relacionada à taxa de variação da densidade. Basicamente, os fluidos classificados como compressíveis referem-se àqueles que apresentam uma variação de seu volume ligada à variação da pressão e, consequentemente, uma alteração no valor da densidade. Os exemplos mais comuns de fluidos que apresentam estas características são os gases.

Os fluidos classificados como incompressíveis, por sua vez, não apresentam variação em seu volume devido à alterações na pressão e, portanto, não apresentam alteração no valor da densidade devido à pressão. Além disso, embora possam ser observadas variações de densidade devido à alterações na temperatura, estas são suficientemente pequenas, podendo ser desconsideradas em fins de cálculo. Neste sentido, considera-se que os fluidos incompressíveis possuem o valor de sua densidade sempre constante, o que permite concluir que:

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

Esta condição permite uma simplificação na equação de conservação de massa (Equação 2.2), de modo que as equações de Navier-Stokes podem então ser escritas como:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \tag{2.4}$$

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \frac{1}{\rho}\nabla \cdot \tau + \mathbf{F}.$$
(2.5)

2.4 Classificação Reológica dos Fluidos

Os fluidos apresentam diversas particularidades relacionadas às suas características físicas, as quais podem influenciar de maneira direta fatores como o fluxo de matéria e a taxa de deformação apresentada. O estudo destas características é denominado reologia, e prevê a classificação dos fluidos de acordo com suas propriedades, entre as quais estão a viscosidade, elasticidade e plasticidade. A figura 2.1 apresenta um quadro descritivo da classificação dos fluidos com base em suas propriedades. A primeira e principal divisão está relacionada à viscosidade dos fluidos, onde estes são classificados como newtonianos e não-newtonianos.



Figura 2.1: Classificação reológica dos fluidos com base em suas propriedades físicas.

2.4.1 Fluidos newtonianos

Os fluidos newtonianos são uma classe de fluidos muito conhecida, e também bastante explorada em diversos tipos de aplicações de métodos numéricos. Basicamente, este fluidos referem-se àqueles em que, em uma determinada temperatura, a taxa de deformação é proporcional à tensão aplicada, ou seja, o valor da viscosidade é sempre o mesmo. Alguns exemplos de fluidos newtonianos são a água, óleo, fluidos de silicone, entre outros. Matematicamente, os fluidos newtonianos podem ser descritos pelas equações de Navier-Stokes, sendo que o termo de tensões viscosas presente na equação de conservação da quantidade de movimento é explicitamente relacionado com a viscosidade, podendo ser escrito através da seguinte lei constitutiva:
$$\tau = 2\mu \mathbf{D} + \left(\lambda - \frac{2}{3}\mu\right) (\nabla \cdot \mathbf{v})\mathbf{I},$$
(2.6)

onde μ é o coeficiente de viscosidade dinâmica, λ o coeficiente de viscosidade volumétrica, **I** o tensor identidade, e **D** o tensor de deformação, dado por:

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T). \tag{2.7}$$

Para fluidos incompressíveis, pode ser considerada a restrição $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ (equação 2.10), que permite que o tensor de tensões para escoamentos newtonianos possa ser simplificado para:

$$\tau = 2\mu \mathbf{D},\tag{2.8}$$

e consequentemente, a seguinte simplificação no termo de tensões visosas presente na equação de conservação da quantidade de movimento:

$$\nabla \cdot \tau = \mu [\nabla \cdot \nabla \mathbf{v} + \nabla \cdot (\nabla \mathbf{v}^T)],$$

$$= \mu [\nabla (\nabla \cdot \mathbf{v}) + \nabla^2 \mathbf{v}],$$

$$= \mu \nabla^2 \mathbf{v}.$$
 (2.9)

Desta maneira, as equações de Navier-Stokes para escoamentos newtonianos incompressíveis podem ser escritas como:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \tag{2.10}$$

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \frac{\mu}{\rho}\nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{F}.$$
(2.11)

2.4.2 Fluidos não-newtonianos

Os fluidos não-newtonianos englobam uma classe de fluidos com propriedades mais complexas, sendo caracterizados por não apresentarem uma linearidade entre a taxa de deformação e a tensão de cisalhamento, o que significa que o valor da viscosidade não é constante, variando de acordo com a taxa de deformação aplicada. É importante destacar que não existe um comportamento padrão de variação da taxa de deformação para os fluidos não-newtonianos, conforme mostrado na figura 2.1. Estas diferenças conferem ao fluidos não-newtonianos uma subclassificação, definindo classes

em que a viscosidade é dependente da taxa de deformação (pseudoplásticos, dilatantes, plástico de Bingham e fluidos Herschel-Bulkley), a viscosidade é dependente do tempo, ou ainda que apresentam comportamento dependente da viscosidade e da elasticidade, denominados viscoelásticos.



Figura 2.2: Gráfico ilustrativo da relação entre a taxa de deformação e a tensão de cisalhamente em diferentes tipos de fluidos.

Os pseudoplásticos referem-se a fluidos onde observa-se uma diminuição da viscosidade com o aumento da taxa de deformação. Este fenômeno ocorre devido ao fato de que ao ser aplicada uma tensão sobre o material, este passa de um estado molecular desordenado, para uma configuração ordenada, onde as moléculas tendem a orientar-se cada vez mais, na direção da tensão aplicada, de acordo com o valor desta. A partir disso, o fluido passa a apresentar uma diminuição da viscosidade aparente, uma vez que quanto maior é a organização molecular, menor é a dissipação da força aplicada, inerente às ligações moleculares. Alguns exemplos de pseudoplásticos são: caldo de fermentação, melaço de cano, tinta de impressão e polpas de fruta.

A classe de fluidos dilatantes referem-se àqueles que, ao contrário dos pseudoplásticos, apresentam um aumento da viscosidade aparente em relação ao aumento da tensão aplicada. Um exemplo prático de fluido não-newtoniano dilatante bastante conhecido e de fácil concepção é uma mistura entre amido de milho e água. Através deste exemplo pode-se notar que, ao realizar a mistura dos dois componentes, quanto maior é a força aplicada maior é a viscosidade aparente, tornando-se a mistura, em um estágio crítico, próxima do estado sólido. Outros exemplos são: silicato de potássio e areia.

Os plásticos de Bingham [11], assim como os fluidos Herschel-Bulkley [44], são tipos de fluidos não-newtonianos que em estado de equilíbrio comportam-se como sólidos, até que seja aplicada uma tensão mínina, quando passam a escoar. A diferença entre eles é que os plásticos de Bingham possuem uma relação linear entre a taxa de deformação e a tensão, enquanto que para os fluidos Herschel-Bulkley, conhecidos também como Bingham generalizados, esta relação é exponencial. Um exemplo de plástico de Bingham é a pasta dental, enquanto para os fluidos de Herschel-Bulkley podem ser citados a pasta de peixe picado e a pasta de uva passas.

Os fluidos com variação da viscosidade aparente como função do tempo envolvem duas classes: os tixotrópicos e os reopéticos. Para os fluidos tixotrópicos, ao aplicar-se uma tensão constante observa-se que com o passar do tempo há uma diminuição da viscosidade aparente. Por outro lado, os fluidos reopéticos quando encontram-se sob a ação de uma tensão constante, apresentam um aumento temporal da viscosidade aparente. Um exemplo de fluido tixotrópico é o ketchup, enquanto para fluidos reopéticos, a maionese.

Finalmente, os fluidos viscoelásticos referem-se à uma classe de fluidos não-newtonianos mais complexa, uma vez que além de apresentar as características de viscosidade, também possuem propriedades elásticas associadas [12]. Esta classe de fluidos engloba diversos tipos de materiais de grande interesse científico e industrial, entre os quais estão os polímeros, alguns tipos de borracha, entre outros. Apesar da crescente quantidade de trabalhos científicos relacionados aos fluidos viscoelásticos, estes ainda representam um dos grandes desafios da mecânica dos fluidos, tanto no que refere-se à sua compreensão quanto na concepção de um modelo matemático que seja capaz de descrever o comportamento de um fluido viscoelástico qualquer [98]. Uma das principais diferenças entre os fluidos viscoelásticos e os newtonianos, é que quando estes fluidos encontram-se sob uma taxa de deformação constante durante um período de tempo, sendo esta interrompida, os fluidos newtonianos apresentam um decaimento instantâneo da tensão, enquanto para os viscoelásticos, a tensão diminui exponencialmente com o tempo. Este tempo necessário para que a tensão chegue a zero é denominado tempo de relaxação [12].

Matematicamente, os efeitos não-newtonianos são incorporados no tensor de tensões τ , presente na equação de conservação da quantidade de movimento. Neste sentido, existem diferentes modelos constitutivos que descrevem o comportamento dos fluidos não-newtonianos, de acordo com suas propriedades, como é o caso do modelo Oldroyd-B [79], para os fluidos viscoelásticos. Maiores detalhes sobres os fluidos não-newtonianos podem ser obtidos em [91].

2.5 Tensão superficial

A tensão superficial trata-se de um efeito físico característico da interface entre fluidos, sejam sistemas líquido-líquido ou gás-líquido. Para compreender a ação da tensão superficial é necessário realizar uma análise a nível molecular. Desta maneira, seja uma molécula de fluido qualquer referente à um determinado fluido, representada em vermelho na figura 2.3. Sabe-se que entre esta molécula e as moléculas vizinhas existem interações de forças atrativas, as quais ocorrem dentro de uma região de vizinhança limitada. Quando esta molécula encontra-se totalmente imersa a um determinado fluido, as interações de atração entre as moléculas vizinhas são simétricas, sendo que a força resultante devido à atração é nula. Por outro lado, quando esta moléculas fisicamente diferentes, sendo que as moléculas do fluido de maior densidade exercerão uma força de atração maior que as demais, desta forma, a resultante será diferente de zero, apontando para a direção do fluido de maior densidade. Além disso, é importante destacar que quanto maior a proximidade com a interface, maior será o módulo da força de atração resultante. A este efeito, denomina-se tensão superficial.



Figura 2.3: Imagem ilustrativa do efeito da interação entre diferentes moléculas de fluido com referência à tensão superficial \mathbf{F}_{ts} , onde as cores azul e vermelha representam dois diferentes fluidos, sendo suas partículas destacadas com a mesma cor.

Existem diferentes modelos matemáticos para descrever a tensão superficial entre fluidos. O modelo de Esmaeeli e Tryggvason [30], por exemplo, define a tensão superficial como:

$$\mathbf{F}_{ts} = \int_{\Gamma} \sigma \kappa \delta^n (\mathbf{x} - \mathbf{x}') \mathbf{n} \Gamma, \qquad (2.12)$$

sendo σ o coeficiente de tensão superficial, κ a curvatura local, **n** a normal a interface e $\delta^n(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ uma função salto, de dimensão *n*, obtida a partir da multiplicação de funções unidimensionais.

Em métodos SPH, o modelo mais empregado é o modelo de força contínua (do inglês, *continuum surface force* - CSF), como pode ser visto em [112]. Este modelo foi inicialmente introduzido por Brackbill *et al.* [13], e descreve a tensão superficial como:

$$\mathbf{F}_{ts} = \sigma \kappa \mathbf{n} \delta, \tag{2.13}$$

sendo δ , neste caso, o delta de Dirac.

2.6 Considerações parciais

Neste capítulo foram apresentadas as equações de Navier-Stokes, e alguns detalhes sobre as propriedades e o comportamento dos fluidos. Este conjunto de equações é abragentemente explorado em métodos SPH, embora a aplicação deste método como solução para tipos de escoamentos mais complexos, como escoamentos multifásicos e não-newtonianos, ainda seja algo relativamente recente. No

2.6 - Considerações parciais

decorrer dos próximos capítulos serão apresentados os conceitos do método SPH, e como este pode ser aplicado para a aproximação de escoamentos governados pelas equações de Navier-Stokes.

Capítulo 3

O método de aproximação Smoothed Particle Hydrodynamics

A simulação de fenômenos naturais através de ferramentas matemáticas e computacionais pode ser considerada como uma das áreas do conhecimento que mais tem recebido contribuições em pesquisa científica. Normalmente tais fenômenos são modelados matematicamente através de Equações Diferenciais Parciais (EDP), as quais apresentam uma grande complexidade em sua solução, o que torna necessário o emprego de técnicas de solução numérica, fornecendo aproximações para a solução destes problemas e auxiliando em seu estudo e compreensão. Neste sentido, uma série de modelos de solução numérica têm sido propostos ao longo dos anos, baseados nos mais diferentes aspectos.

Entre os métodos propostos, pode ser destacado o método denominado *Smoothed Particle Hydrodynamics* (SPH). Através deste método foi possível obter-se uma simples forma de discretização de modelos formais complexos referentes a determinados tipos de fenômenos como, por exemplo, os fluidos, permitindo uma análise simples, porém eficaz, do comportamento apresentado por estes. Além disso, o método SPH apresenta a vantagem de ser flexível a ponto de se adequar a diferentes modelos de representação, tornando possível a sua aplicação em problemas provenientes de diversas áreas de conhecimento como a matemática, engenharia, física, entre outras.

Neste capítulo, serão apresentados os principais conceitos referentes ao modelo de aproximação SPH, detalhando as primícias da concepção deste método, assim como uma descrição comparativa com outros métodos de simulação. A partir deste levantamento teórico inicial, será então desenvolvida uma formalização matemática sobre o método, destacando os mecanismos de sua aplicação.

3.1 Uma visão geral sobre o SPH

Desenvolvido em 1977 por Gingold e Monaghan [40] e independentemente por Lucy [63], o método SPH foi apresentado inicialmente como solução numérica de problemas astrofísicos, em sistemas abertos tridimensionais. Basicamente, o método SPH proporciona a evolução dinâmica de um determinado objeto através da aproximação das leis de conservação que regem este. Para isso, o SPH utiliza conceitos de interpolação, partindo da premissa básica de que o objeto a ser tratado seja descrito através de um conjunto finito de partículas, as quais contém características individuais das propriedades do objeto.

Após a sua elaboração o método recebeu diversas contribuições, sendo consideravelmente aperfeiçoado e adaptado para uma série de diferentes problemas envolvendo fenômenos astrofísicos, entre os quais podem ser citados: colisões estelares [5, 6, 67, 36], colapso de galáxias [71, 9, 7], simulações de buracos negros [53], explosões de anãs brancas [93], entre outros. Entretanto, a flexibilidade apresentada pelo método, principalmente em relação à facilidade de incorporação de leis físicas em suas formulações, permitiu a sua extensão e aplicação em problemas de outras áreas, como é o caso da mecânica dos sólidos e a mecânica dos fluidos. Em [59] é apresentada uma revisão detalhada a cerca dos principais mecanismos do método SPH, e uma discussão a cerca de aplicações nas áreas de hidrodinâmica de alta tensão, detonação de explosivos, microfluidos, hidrodinâmica costeira e fluxos ambiental e geofísico.

Além das aplicações citadas anteriormente, devido às vantagens apresentadas pelo método SPH, significativas contribuições também foram desenvolvidas em outras áreas, como é o caso dos escoamentos com condução de massa e calor [22, 18], explosões submarinas [103, 57, 61], simulação de campos magnéticos [66, 26, 1, 89, 35], escoamentos multifásicos [70, 23, 46, 38, 47], entre outros. Além disso, o método SPH também recebeu contribuições ligadas às Computação Gráfica, apresentando interessantes resultados visuais de simulações de escoamentos [77, 20, 82, 84].

Entre estes trabalhos, podem ser descritos diversos pontos característicos de suas propostas que auxiliam no projeto e desenvolvimento de novas estratégias baseadas no método SPH, como, por exemplo, em trabalhos que apresentam propriedades particulares referentes à utilização do método em escoamentos multifásicos, como é o caso da exploração do método a fim de propiciar um tratamento mais preciso do comportamento da tensão superficial entre fases [86, 23, 87], ou ainda em propostas que unem o SPH a outros métodos consagrados, como na utilização do método Level Set [34] em conjunto com o SPH [62]. Além disso, podem ser observados trabalhos mais específicos como, por exemplos, relacionados a escoamentos que envolvem condições especiais, como a influência do calor [17], processos de solidificação [72], entre outros. Estes e outros trabalhos na área apresentam uma grande aplicabilidade na indústria, servindo como referência em diversas situações.

Existem ainda trabalhos de grande relevância que referem-se a aplicação do SPH para fluidos viscoelásticos e multifásicos. Em [28] é apresentado um estudo numérico sobre fluxos transientes de fluidos viscoelásticos. A partir disso, utilizando como base o método SPH, é descrito um modelo de simulação numérica para este tipo de fenômeno, usando números de Reynolds baixos. Outro trabalho

na mesma linha é descrito em Zainali *et al.* [112], onde é apresentada uma estratégia para a solução de escoamentos viscoelásticos através do método SPH utilizando o modelo constitutivo Oldroyd-B.

Entretanto, a aplicação do método SPH para problemas envolvendo fluidos incompressíveis pode gerar certos tipos de problemas, principalmente quando orientado à tipos de escoamentos mais complexos, onde se enquadram os escoamentos multifásicos e viscoelásticos. Entre estes problemas, um que pode provocar grande alteração nos resultados desejados é a formação de agrupamentos de partículas. Clavet *et al.* [20] propuseram um modelo SPH de simulação de fluidos viscoelásticos que através informações relativas à posição, densidade e pressão, impõe a incompressibilidade e não agrupamento de partículas, trabalhando com a manipulação da elasticidade entre partículas, nas sucessivas iterações da simulação. Através desta estratégia foi alcançado um modelo de simulação eficaz e robusto. Apesar disso, os resultados obtidos ainda apresentam algumas deficiências, como é o caso da conservação de volume do fluido, a qual não é prevista pelo modelo.

Estas deficiências tem sido alvo de exploração em alguns trabalhos. Uma das principais estratégias utilizadas a fim de resolver este problema nas aplicações em escoamentos viscoelásticos é trabalhar com formulações SPH para derivadas mais adequadas à manutenabilidade de energia e com esquemas de correção de alta ordem para estas derivadas [32].

Outro importante trabalho foi proposto por Paiva *et al.* [84]. Neste trabalho é apresentado um modelo de simulação de efeitos viscoelásticos em materiais sólidos, através da aplicação do método SPH e de uma formulação simplificada do modelo tradicional de mecânica do continuum, baseada em [82]. Uma característica bastante interessante deste modelo é a concentração da viscoplasticidade de um objeto em apenas um parâmetro.

Além dos trabalhos descritos anteriormente, o método SPH apresenta ainda outros trabalhos que exploram diferentes estratégias para a simulação de escoamentos viscoelásticos [29, 16]. Entretanto, o método SPH ainda demanda esforços em relação ao aperfeiçoamento e adaptação do método em relação à solução de determinadas propriedades mais complexas como é o caso de situações onde observa-se um escoamento viscoelástico e multifásico envolto sobre um corpo rígido, situação típica de problemas industriais. Além disso, quando aplicado em problemas deste tipo, característicos da engenharia, a precisão dos resultados torna-se um fator de grande importância, o que remete à necessidade de aplicação de estratégias relativas à pontos específicos do método, como a garantia de incompressibilidade, a integração temporal, entre outros, o que pode ser melhorado através da aplicação e adaptação de metodologias alternativas [78, 33, 59]. A seguir será apresentada uma descrição da formulação SPH, detalhando os seus mecanismos de aproximação a fim de conceber um espaço para uma discussão mais direcionada aos aspectos numéricos e computacionais do método, orientando-se, principalmente, para a aplicação do método para escoamentos mais complexos.

3.2 Formulação do SPH

3.2.1 Representação Integral

A obtenção dos esquemas de aproximação do método SPH pode ser feita utilizando-se de dois passos principais. O primeiro destes passos refere-se à representação integral do produto entre uma função qualquer f e um núcleo de suavização, também chamado apenas de núcleo. Esta representação proporcionará uma forma integração de aproximação de f. A partir disso, é desenvolvido o segundo passo do SPH, que refere-se à discretização da aproximação integral obtida através de partículas, o que é comumente conhecido como aproximação por partículas [60].

Partindo-se então do ponto inicial, seja a função $f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$, a qual pode ser descrita em termos da seguinte identidade:

$$f(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}', \qquad (3.1)$$

tal que \mathbf{x} é um ponto ou partícula contido no domínio $\Omega \operatorname{com} \Omega \subset \mathbb{R}^d$, e $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ é uma função delta de Dirac, dada por:

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \begin{cases} 1, & \mathbf{x} = \mathbf{x}', \\ 0, & \mathbf{x} \neq \mathbf{x}', \end{cases}$$
(3.2)

sendo que, quando $f \equiv 1$, tem-se que:

$$\int_{\Omega} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}' = 1.$$
(3.3)

Através disso, a representação integral de f mostrada na Equação 3.1 poderia ser dita rigorosa ou exata. Entretanto, não é possível definir uma função que satisfaça as propriedades da distribuição delta de Dirac. Por outro lado, existe a possibilidade de aproximar tais propriedades utilizando limites suaves, ou seja, uma função de suavização, também conhecida como núcleo de suavização ou apenas núcleo. Através da função núcleo, representada por W, a representação integral da função f é aproximada da seguinte forma:

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

sendo $\langle \rangle$ uma convenção utilizada para denotar a aproximação SPH [37] e h definido como compri-

mento suave, o qual refere-se à um fator responsável pela determinação da região de influência da aproximação SPH (maiores detalhes na seção 3.4).

A função W, utilizada na Equação 3.4 deve satisfazer uma série de propriedades, as quais serão discutidas com maiores detalhes na Seção 3.4. Entre tais propriedades destaca-se o fato de ser uma função par e normalizada, ou seja,

$$\int_{\Omega} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 1, \qquad (3.5)$$

o que permite demonstrar que a representação integral SPH é uma aproximação de segunda ordem. Esta afirmação pode ser demonstrada expandindo $f(\mathbf{x})$ através de Série de Taylor:

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

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

$$= f(\mathbf{x}) \int_{\Omega} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' + f'(\mathbf{x}) \int_{\Omega} (\mathbf{x}' - \mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' + r(h^2),$$

$$(3.6)$$

onde r refere-se ao resíduo. É importante observar que o valor de h está diretamente ligado à quantidade de partículas que infuenciam a aproximação e, consequentemente, com a distância entre as partículas.

Por definição, W foi escolhido de tal forma a ser uma função par, logo tem-se que $(\mathbf{x}' - \mathbf{x})W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)$ é uma função ímpar, e com isso:

$$\int_{\Omega} (\mathbf{x}' - \mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0.$$
(3.7)

Neste sentido, aplicando as Equações 3.5 e 3.7 sobre a Equação 3.6 obtém-se:

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = f(\mathbf{x}) + r(h^2), \tag{3.8}$$

demonstrando que a representação integral do método SPH é uma função de segunda ordem.

3.2.2 Representação Integral da Derivada de uma Função

Um dos pontos de maior importância no emprego de técnicas de aproximação para EDPs é a descrição de como estes métodos podem ser utilizados para a representação de operadores diferenciais. No método SPH a obtenção da representação integral do gradiente de uma função escalar $\nabla f(\mathbf{x})$ pode ser obtida através da simples substituição de $f(\mathbf{x})$ por $\nabla f(\mathbf{x})$ na Equação 3.4, obtendo:

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} \nabla_{\mathbf{x}'} f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}'.$$
(3.9)

Integrando por partes o lado direito da equação anterior tem-se:

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} \nabla_{\mathbf{x}'} [f(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] d\mathbf{x}' - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \nabla_{\mathbf{x}'} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}'.$$
(3.10)

A partir disso, pode-se aplicar o teorema da divergência de Gauss para representar a primeira integral do lado direito da equação anterior, de modo que este torne-se uma integral de superfície, de modo que a Equação 3.10 passe a possuir a seguinte forma:

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{S} f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) \cdot \mathbf{n} \, dS - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \nabla_{\mathbf{x}'} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}', \tag{3.11}$$

onde $S = \partial \Omega$ e **n** é o vetor normal unitário em relação à S.

Uma vez que a função W é definida com suporte compacto, então caso o suporte de W esteja internamente contido em Ω , então a integral de superfície da Equação 3.11 é zero. Ainda existe o caso em que o suporte de W intercepta S, neste caso o suporte de W é truncado para que a integral também seja zero. Neste sentido, a Equação 3.11 pode ser reescrita como:

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}) \rangle = -\int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \nabla_{\mathbf{x}'} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}'.$$
(3.12)

Além disso, por definição W também possui a propriedade de ser uma função simétrica, assim a Equação 3.12 pode ser finalmente escrita na forma integral da aproximação SPH para o gradiente de uma função, tal que:

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \nabla_{\mathbf{x}'} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}'.$$
(3.13)

Outras operações envolvendo diferenciação, como o jacobiano e o divergente, podem ser obtidas de forma semelhante ao descrito anteriormente.

3.3 Discretização Através de Partículas

Após a etapa de definição da formulação integral, a obtenção dos operadores de aproximação SPH faz necessária o desenvolvimento da etapa de discretização. No método SPH, o sistema a ser avaliado é representado utilizando um conjunto finito de partículas, as quais são distribuídas ao longo

do domínio a ser tratado. A partir disso, a integral de uma determinada função aplicada em um ponto do domínio pode ser discretizada através de um somatório sobre as partículas que se encontram contidas no domínio. A mesma estratégia pode ser aplicada para a discretização das derivadas de uma função aproximada pelo SPH. É interessante observar que, como o método SPH possui suporte compacto, então a aproximação é feita apenas sobre a subregião referente ao suporte compacto do núcleo, definida aqui de Θ_i , onde:

$$\Theta_i = \{ \mathbf{x}_i, |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j| \le kh \},\tag{3.14}$$

sendo $\Theta_i \subset \Omega$ e k é um fator de escala que define a extensão de uma determinada função núcleo, sendo que $|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j| \leq kh$ determina o suporte do domínio de uma partícula.

Além disso, o volume infinitesimal $d\mathbf{x}$ presente na forma integral pode ser substituído pelo volume ΔV_j ocupado por uma partícula j, vizinha à partícula i sobre a qual é feita a aproximação, deste modo, partindo-se da formulação integral descrita na Equação 3.4 tem-se:

$$\langle f(\mathbf{x}_i) \rangle = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}') d\mathbf{x}', \approx \sum_{j \in \Theta_i} f(\mathbf{x}_j) W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h) \Delta V_j.$$
 (3.15)

Sabe-se ainda que o volume pode ser descrito através da seguinte expressão:

$$\Delta V = \frac{m}{\rho},\tag{3.16}$$

logo a Equação 3.15 pode ser reescrita como:

$$\langle f(\mathbf{x}_i) \rangle = \sum_{j \in \Theta_i} f(\mathbf{x}_j) W_{ij} \frac{m_j}{\rho_j},$$
(3.17)

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

A discretização das derivadas de uma função descritas através da formulação integral SPH pode ser feita de forma semelhante ao descrito anteriormente, sendo que a Equação 3.13 passa a possuir a seguinte forma:

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}) \rangle = \sum_{j \in \Theta_i} f(\mathbf{x}_j) \nabla_i W_{ij} \frac{m_j}{\rho_j},$$
(3.18)

onde:

$$\nabla W_{ij} = \frac{\mathbf{x}_{ij}}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}}.$$
(3.19)

sendo $r_{ij} = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|.$

Embora esta seja a forma clássica discreta de aproximação de derivadas através do método SPH, existem diversas propostas de regras para obtenção de tais aproximações, as quais buscam melhor precisão e eficiência nos cálculos realizados, baseadas tanto em propriedades implícitas do próprio método, como a composição de operadores, como também na utilização de identidades, como pode ser observado em [104, 74, 57]. Em [88] foi realizado um estudo comparativo sobre diversos operadores diferenciais SPH a partir de uma análise estatística em diferentes cenários de simulação, e destacado quais seriam as melhores alternativas, considerando tanto a precisão dos resultados quanto o custo de cálculo destes. Estes operadores são apresentados a seguir e serão utilizados nos experimentos apresentados neste trabalho.

Gradiente através do operador gradiente SPH diferença:

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}_i) \rangle = \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j \in \Theta_i} m_j (f(\mathbf{x}_j) - f(\mathbf{x}_i)) \nabla_i W_{ij} \right].$$
(3.20)

Divergente através do operador divergente SPH diferença:

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \rangle = \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j \in \Theta_i} m_j (\mathbf{f}(\mathbf{x}_j) - \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)) \cdot \nabla_i W_{ij} \right].$$
(3.21)

Laplaciano através do operador laplaciano SPH Taylor:

$$\langle \nabla^2 f(\mathbf{x}_i) \rangle = 2 \sum_{j \in \Theta_i} \frac{m_j}{\rho_j} \frac{(f(\mathbf{x}_i) - f(\mathbf{x}_j))}{\|\mathbf{x}_{ij}\|} \mathbf{x}_{ij} \nabla_i W_{ij}.$$
(3.22)

Através dos esquemas mostrados anteriormente pode-se aproximar uma função e sua derivada utilizando conjuntos finitos de partículas sem a utilização de malhas. Entretanto é importante ter especial atenção em relação à um fator específico: a determinação do núcleo, uma vez que propriedades

específicas devem ser satisfeitas por este, além do fato de que o comportamento apresentado pelo núcleo possui forte influência sobre os resultados obtidos através do SPH.

3.4 Função núcleo

Um dos pontos de maior importância do método SPH é a função núcleo *W*. Através desta função são determinadas importantes características deste modelo de aproximação, tais como o padrão de aproximação do método, a consistência e a precisão de aproximação. Basicamente, no método SPH, a função núcleo atua como uma forma de definição da região de influência sobre uma determinada partícula, isto é, define o conjunto de partículas que efetivamente influenciarão as propriedades de uma determinada partículas em análise, como pode ser observado na Figura 3.1.



Figura 3.1: Região de influência sobre uma partícula obtida através da função núcleo: apenas as partículas que estão contidas na região de raio κh em que a partícula *i* está circunscrita são utilizadas na aproximação.

A função núcleo pode ser definida sob diferentes formas como, por exemplo, através de funções gaussianas, splines, entre outras. Normalmente, o núcleo é definido como uma função par, devido à necessidade de simetria disposta pelo método, ou seja, a influência que uma partícula i recebe de uma partícula j deve ser a mesma de j em relação a i. Além disso, o núcleo deve satisfazer determinadas propriedades:

• Normalização:

$$\int_{\Omega} W(\mathbf{x}_{ij}, h) d\mathbf{x} = 1$$

• Suavidade:

$$W(\mathbf{x}_{ij}, h) \in C^{\infty} \tag{3.23}$$

• Positividade:

$$W(\mathbf{x}_{ij}, h) \ge 0 \tag{3.24}$$

• Suporte compacto:

 $W(\mathbf{x}_{ij}, h) = 0$ quando $\|\mathbf{x}_{ij}\| > \kappa h$

• Convergência:

$$W(\mathbf{x}_{ij}, h) \to \delta$$
 quando $h \to 0$

sendo $\mathbf{x}_{ij} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$.

Uma série de propostas para a função núcleo do método SPH podem ser observadas na literatura. Entre elas, pode-se inicialmente destacar aquela apresentada por [63] em um dos trabalhos pioneiros do método SPH, descrita da seguinte forma:

$$\mathcal{W}(R) = \alpha_d \begin{cases} (1+3R)(1-R)^3 & , 0 \le R \le 1\\ 0 & , R > 1, \end{cases}$$
(3.25)

considerando $W(\mathbf{x}_{ij,h}) = \mathcal{W}(R) \operatorname{com} R = \frac{\|\mathbf{x}_{ij}\|}{h}.$

Através desta função, Lucy [63] obteve resultados similares aos apresentados por Gingold e Monaghan [40], que descreveram as primícias básicas acerca as propriedades necessárias para a determinação da função núcleo. Em seu trabalho, Gingold e Monaghan apresentaram três possíveis propostas para esta função, baseadas, independentemente, nos conceitos de gaussiana, função de Heaviside (função degrau) e splines esféricas. A função gaussiana apresentada no trabalho foi descrita como:

$$\mathcal{W}(R) = \alpha_d e^{-R^2}.$$
(3.26)

Posteriormente Monaghan afirmou em outros trabalhos sobre o método SPH que a utilização de funções gaussianas é a melhor estratégia a ser utilizada no método SPH. Entretanto, em [88] é destacado que as funções gaussianas apresentam um pequeno problema relacionado à sua utilização como núcleo. Segundo este, tais funções não possuem suporte compacto, o que refere-se à uma das propriedades necessárias para definição de uma função núcleo SPH, desta forma, embora a função tenda rapidamente a zero quando a distância entre partículas aumenta, o suporte compacto pode ser consideravelmente grande para que a função gaussiana seja nula, o que acarretará em um grande número de partículas, o que pode exigir uma demanda computacional inviável. Uma interessante alternativa para este tipo de problema é a utilização de funções baseadas em splines [92], as quais permitem uma boa aproximação das funções gaussianas e possuem a vantagem de ter suporte compacto.

Em [69] é destacado que o uso de núcleos baseados em splines é o tipo mais comum de estratégia utilizada em simulações SPH, principalmente pelo fato de possuírem suporte compacto, como já comentado, e também serem suficientemente suaves. Um exemplo bastante explorado são as splines cúbicas, porém existem propostas de simulação que utilizam splines de mais altas ordens. Em [61] foi proposto o seguinte núcleo baseado em spline quártica, usado posteriormente por [88] na Decomposição de Helmholtz-Hodge com operadores SPH:

$$\mathcal{W}(R) = \alpha_d \begin{cases} \frac{2}{3} - \frac{9}{8}R^2 + \frac{19}{24}R^3 - \frac{5}{32}R^4 & , 0 \le R \le 2\\ 0 & , R > 2, \end{cases}$$
(3.27)

onde, a partir da definição da dimensão d do problema, tem-se $\alpha_1 = 1/h$, $\alpha_2 = 15/(7\pi h^2)$ e $\alpha_3 = 315/(208\pi h^3)$.

Núcleos de quinta ordem também são bastante explorados, um exemplo deste tipo de exploração foi proposto por [73], utilizados também em [82] para simulações de fluidos não newtonianos:

$$\mathcal{W}(R) = \alpha_d \begin{cases} (3-R)^5 - 6(2-R)^5 + 15(1-R)^5 &, 0 \le R < 1\\ (3-R)^5 - 6(2-R)^5 &, 1 \le R < 2\\ (3-R)^5 &, 2 \le R \le 3\\ 0 &, R > 3, \end{cases}$$
(3.28)

com $\alpha_1 = 120/h$, $\alpha_2 = 7/(478\pi h^2)$ e $\alpha_3 = 3/(359\pi h^3)$.

Outra alternativa de função suave são as funções Wendland [110], as quais apresentam todas as características necessárias à sua aplicação no método SPH. Um exemplo deste tipo de função utilizada em métodos SPH é:

$$\mathcal{W}(R) = \alpha_d \begin{cases} (1 - \frac{1}{2}R)^4 (2R + 1) &, 0 \le R \le 2\\ 0 &, R > 2, \end{cases}$$
(3.29)

A figura 3.2 apresenta o comportamento da função Wendland, spline de quarta ordem e spline de quinta ordem, sob as mesmas condições, assim como as suas derivadas. Note que nas proximidades do limite do raio denotado por κh o núcleo spline de quinta ordem apresenta uma maior suavidade, o que pode ser bastante interessante em determinadas situações.

A derivada das funções suaves são utilizadas em operadores de aproximação diferenciais, tais como gradiente e divergente, sendo obtidas através da seguinte relação:

$$\nabla_i W_{ij} = \frac{\mathbf{x}_{ij}}{|\mathbf{x}_{ij}|} \frac{\partial W_{ij}}{\partial |\mathbf{x}_{ij}|}$$
(3.30)

3.5 Considerações parciais

Desde sua criação, o método SPH tem se mostrado como uma considerável estratégia de aproximação numérica para a solução de diferentes fenômenos, devido ao conjunto de vantagens que possui, fato este que justifica sua aplicação em diferentes áreas do conhecimento. Estas vantagens e características, discutidas ao longo deste capítulo, tornam este método uma opção de solução considerável para utilização em diversos problemas de dinâmica dos fluidos computacional. Entretanto, é importante observar que a escolha do SPH como ferramenta de aproximação também deve levar em conta



Figura 3.2: Comportamento de diferentes funções núcleos e suas derivadas, onde spline⁴ e spline⁵ referem-se respectivamente à funções splines de quarta e quinta ordem, e o símbolo aspa-simples (') indica derivada de função.

algumas dificuldades apresentadas pelo método como, por exemplo, condições de fronteira, busca de partículas vizinhas, definição do valor do comprimento suave, solução da pressão, entre outras.

Capítulo 4

Aspectos numéricos e computacionais em dinâmica dos fluidos usando SPH

4.1 Introdução

A implementação do método SPH demanda, além da aplicação dos esquemas de aproximação descritos no capítulo anterior para as equações que governam um problema, a exploração de outros conceitos, direta ou indiretamente ligados ao método. Entre tais conceitos podem ser destacados fatores como a escolha do valor do comprimento suave, a busca de partículas vizinhas, entre outros, os quais influenciam de maneira considerável a eficiência e eficácia do método. Para isso, é necessário efetuar uma análise minuciosa a cerca de cada fator, analisando possíveis estratégias de utilização, assim como a aplicabilidade destes nos problemas onde o SPH poderá ser utilizado, o que torna necessário a implementação, em determinados casos, de estruturas de dados e algoritmos mais refinados.

Neste capítulo serão apresentados os principais fatores numéricos e computacionais ligados à implementação do método SPH, a fim de desenvolver uma visão mais abrangente sobre as escolhas a serem tomadas na aplicação destes para um determinado problema, ressaltando vantagens e desvantagens obtidas através disso, além de denotar as fragilidades inerentes do método.

4.2 A escolha do comprimento suave

Um dos primeiros pontos a serem analisados dentre os aspectos numéricos, de fundamental importância nos resultados obtidos, é a escolha do comprimento suave h. O comprimento suave é um fator de grande importância na aplicação do método de aproximação SPH. Basicamente, ele determina a região do domínio que possuirá influência sobre a aproximação de uma propriedade específica de uma partícula, ou seja, através deste valor são definidas quais partículas vizinhas participarão efetivamente do processo de aproximação. De acordo com [54] o número de partículas que participam da aproximação possui considerável influência sobre a acurácia do método.

Normalmente, o número de partículas internas ao suporte do núcleo é definido como um valor fixo. Em [57] é recomendado que este número seja de pelo menos 20 partículas em simulações 2D e de 56 partículas em simulações 3D, o que pode manter uma considerável acurácia. Entretanto, este valor fixo é recomendável apenas para situações onde a variação espacial da densidade de partículas permanece constante. Em casos onde ocorre grandes variações da densidade de partículas, é recomendável que o valor de h seja ajustável, a fim de manter a acurácia da simulação. Porém, é importante notar que a variação do valor de h pode tornar necessário a utilização de critérios particulares como, por exemplo, a aplicação de regras específicas no processo de busca de partículas vizinhas, como será discutido na Seção 4.4. Alguns critérios de determinação do valor de h em situações onde é necessário a variação deste ao longo da simulação podem ser obtidos em [54].

4.3 Distribuição inicial das partículas

Durante a aplicação do método SPH, é necessário efetuar a inicialização de uma série de propriedades do problema como, por exemplo, a massa das partículas, a velocidade inicial, a densidade de referência, entre outras, as quais podem ser obtidas a partir das propriedades reais do problema a ser resolvido. Entretanto, existem determinados fatores que, embora demandem também uma definição prévia de seus valores, não possuem uma ligação claramente direta com o problema real a ser resolvido, como é o caso da distribuição inicial de partículas. Existem algumas alternativas para esta distribuição de partículas, entre as quais, as mais utilizadas são as baseadas em funções randômicas e as baseadas em malhas uniformes.

A utilização de funções randômicas para a determinação da distribuição inicial de partículas é utilizada, principalmente, para a representação de fenômenos relacionados à astrofísica como, por exemplo, na simulação de fenômenos envolvendo buracos negros [53], colapso e formações de galáxias [8, 71], entre outros.

Por outro lado, em problemas relacionados à dinâmica de fluidos, distribuição inicial baseada em malha uniforme é comumente mais utilizada. Neste tipo de distribuição as partículas são distribuídas uniformemente ao longo do domínio de simulação, levando-se em conta, principalmente, a densidade de partículas no sistema.

4.4 Busca de partículas vizinhas

4.4.1 Visão geral

Uma das principais características do método SPH é a realização das aproximações utilizando uma função núcleo, a qual atua sobre uma região específica do domínio, definida como um circunferência de raio kh e centro na partícula em que estão sendo calculadas as aproximações. Esta região possui

um número finito de partículas em seu interior, as quais são denominadas de partículas vizinhas, de fundamental importância na aproximação de um valor para uma determinada partícula em questão.

A maior parte dos métodos de aproximação possui suas células vizinhas com posição bem definida ao longo de uma simulação. Entretanto, uma das principais características do método SPH é o movimento das partículas em função do tempo, o que evidentemente provoca uma alteração no cenário de vizinhança de uma partícula, ou seja, o conjunto de partículas vizinhas em relação à uma partícula referência pode não ser o mesmo no passo de tempo seguinte, o que torna necessário a aplicação de técnicas de busca de partículas vizinhas. Existem algumas alternativas de estratégias de busca de partículas vizinhas, entre estas, podem ser citadas as buscas através de força bruta, por malha uniforme e através de árvore, sendo estas últimas duas consideravelmente utilizadas em diversas aplicações SPH.

4.4.2 Busca de partículas vizinhas por força bruta

Uma das primeiras idéias que surgem em relação ao desenvolvimento da busca de partículas vizinhas é desenvolver uma análise sobre todo o domínio, verificando a distância entre cada par de partículas e através disso, analisando-se a ocorrência das partículas dentro da região de vizinhança de uma determinada partícula em questão, associando dinamicamente os vizinhos a uma estrutura do tipo lista encadeada relacionada a cada partícula, o que pode ser denominado de busca por força bruta. Entretanto, esta estratégia é computacionalmente cara, tendo complexidade $O(N^2)$, sendo No número de partículas do sistema, o que torna mais interessante o uso de algoritmos mais refinados com menor complexidade. No algoritmo 1 é apresentada uma versão para o pseudo-código da busca de partículas vizinhas através de força bruta.

Algoritmo 1: Busca de vizinhos por força bruta.

1 para cada partícula i do domínio faça

3

4

- 2 para cada partícula j do domínio faça
 - se distância entre o par de partículas i e j é menor que kh então
 - Insira a partícula j na lista de vizinhas da partícula i;

4.4.3 Busca de partículas vizinhas através de malha uniforme

Uma alternativa mais adequada que a utilização de esquemas de força bruta para a busca de partículas vizinhas é o método de busca em malha uniforme. Neste método, uma malha uniforme é associada ao domínio do problema a ser resolvido, sendo o espaçamento da malha, em todas as coordenadas, definido com valor igual ao raio de influência do núcleo kh, como pode ser observado na Figura 4.1. A partir disso, para cada célula da malha é associada uma lista encadeada simples, onde são inseridas todas as partículas que estão na região de tal célula. Este mapeamento pode ser feito definindo-se os índices da célula como o piso da relação entre a posição de uma partícula e o valor de *kh.* Por exemplo, para um domínio bidimensional, uma partícula com posição (x, y) é mapeada na célula indexada em (i, j) pela seguinte expressão:

Capítulo 4

$$(i,j) = \left(\left\lfloor \frac{x}{kh} \right\rfloor, \left\lfloor \frac{y}{kh} \right\rfloor \right)$$
(4.1)



Figura 4.1: Busca de partículas vizinhas através de malha uniforme. A malha uniforme cobre todo o domínio de simulação, sendo a partícula em vermelho denotada como àquela em que se está efetuando a busca de vizinhos.

Após o mapeamento das partículas sobre a malha, o que pode ser desenvolvido com complexidade O(N), a definição das partículas vizinhas pode então ser efetuada. Pelas próprias propriedades da malha construída, as partículas vizinhas de uma partícula referência só podem estar em sua própria célula ou em células que estejam diretamente anexas à esta, o que restringe consideravelmente a área de busca. O Algoritmo 2 apresenta com detalhes o processo de definição de vizinhança de uma partícula realizado através da estratégia de busca em malha uniforme.

goritmo 2: Busca de vizinhos em malha uniforme.
oara cada partícula i faça
Mapeie a partícula sobre a malha (Equação 4.1);
Insira a partícula na lista da célula indexada;
para cada partícula i faça
Verifique a célula em que a partícula está contida;
para cada partícula j das listas da célula indexada e das células anexas faça
se distância entre o par de partículas i e j é menor que kh então
Insira a partícula j na lista de vizinhas da partícula i ;

Embora o esquema de busca através de malha uniforme tenha uma complexidade relativamente baixa, e seja de fácil implementação, ele apresenta a restrição de aplicação para situações onde o valor do comprimento suave h é fixo, uma vez que assim o espaçamento referente a cada célula da malha será ótimo para todas as partículas do sistema. Deste modo, quando o valor de h é variável, torna-se necessário a utilização de estratégias mais adequadas, que possam tratar a variação do suporte compacto, como é o caso da busca através de árvore.

4.4.4 Busca de partículas vizinhas através de árvore

Uma estratégia alternativa, em problemas onde o comprimento suave é variável, é a utilização de esquemas baseados em árvores. Um esquema bastante interessante é dividir o domínio recursivamente em quadrantes, no caso em que o domínio é bidimensional, até que cada um destes possua apenas uma partícula [57]. Em cada passo da divisão de quadrantes, é construído um nível da árvore de busca, como mostra a Figura 4.2. Note que em certas situações a divisão de uma determinada região resultará em quadrantes vazios, os quais, desta forma, serão ignorados no processo de construção da árvore de busca.

Após a construção da árvore de busca, é possível se obter facilmente a lista de partículas vizinhas de uma determinada partícula *i*. Para tal, é definido um quadrado de lado kh_i envolvendo a partícula *i*. A partir disso, em cada nível da árvore é realizado uma verificação de quais células possuem intersecção com o quadrado. No caso de uma célula não possuir intersecção com este, a busca, no ramo pertencente a esta célula é parada. Por outro lado, caso a célula possua intersecção a busca desce um nível e continua até que encontre um nó folha. Com um nó folha encontrado, é verificado se a partícula referente ao nó folha está dentro do suporte compacto, caso esteja, esta é inserida na lista de vizinhos da partícula *i*. De acordo com [43], a complexidade deste esquema de busca de partícula vizinhas é da ordem de O(NlogN). A aplicação deste método para domínios tridimensionais ocorre de forma análoga, sendo apenas o domínio dividido recursivamente em octantes.



Figura 4.2: Divisão recursiva de um domínio de simulação bidimensional e árvore de busca. A região demarcada de verde na imagem mostrada em (d) refere-se ao espaço de possível presença de partículas vizinhas em relação à partícula *i*.

4.5 Integração temporal no SPH

O método SPH, quando aplicado para a aproximação de problemas transientes, como é o caso das equações de Navier-Stokes, necessita da utilização de esquemas de integração numérica, a fim de se obter valores de determinadas propriedades em consecutivos passos de tempo. Existem uma série de métodos de integração temporal, entre os quais podem ser citados os métodos de Euler, Runge-Kutta, Leap-Frog, entre outros [14, 27]. Estes métodos são classificados em métodos explícitos ou implícitos, de acordo com a estratégia de integração que utilizam. A principal diferença entre os métodos explícitos e os implícitos, é que os explícitos utilizam apenas o estado atual e, em determinados casos, estados anteriores, para o cálculo do novo estado, enquanto o implícito utiliza tanto os estados atual e anteriores quanto o novo estado, formando um sistema de equações, o qual demanda a utilização de esquemas algébricos para a sua solução.

As principais vantagens da utilização dos esquemas explícitos é a fácil implementação e o cálculo rápido e eficiente. Entretanto, tais métodos, em sua grande parte, possuem o critério de estabilidade dependente de restrições relacionadas ao passo de tempo Δt , devendo obedecer a uma conhecida condição de estabilidade, denominada condição Courant-Friedrichs-Lewi (CFL) [24], o que não é necessário para os métodos implícitos.

Entre os métodos de integração existente, um dos métodos mais simples e conhecidos é o método de Euler (figura 4.3). Proposto no século dezoito, em sua forma original, o método se apresenta como um esquema de aproximação explícito de primeira ordem, que demanda a utilização de passos de tempo suficientemente pequenos para a prevenção de instabilidade. Basicamente, o método consiste em obter valores de variáveis incógnitas referentes em diferentes intervalos de tempo, partindo de condições iniciais pré-definidas. Na utilização de aproximações SPH para as Equações de Navier-Stokes, o método de Euler pode ser aplicado para obtenção de valores para velocidade e a posição das partículas em sucessivos passos de tempos, de acordo com as seguintes expressões:

$$\mathbf{v}_i^{t+\Delta t} = \mathbf{v}_i^t + \Delta t \mathbf{a}_i^t, \tag{4.2}$$

$$\mathbf{x}_{i}^{t+\Delta t} = \mathbf{x}_{i}^{t} + \Delta t \mathbf{v}_{i}^{t+\Delta t}, \tag{4.3}$$

porém é importante observar que caso os valores de Δt não sejam definidos de forma adequada, a simulação pode tornar-se bastante instável, gerando resultados indesejáveis.



Figura 4.3: Ilustração do esquema de integração de Euler.

Uma alternativa é a utilização do esquema Leap-Frog [90] para a integração temporal. Este método possui uma ampla utilização em diversas trabalhos que usam o SPH como ferramenta de aproximação [57], devidos às vantagens que apresenta. Entre tais vantagens, podem ser destacadas a simplicidade do método, a baixa utilização de espaço de processamento, e também o fato do método possuir ordem de convergência $O(\Delta t^2)$, o que o torna mais interessante que o método Euler explícito. Em sua aplicação para integração temporal das aproximações SPH de Navier-Stokes, o cálculo da velocidade deve ser efetuado nos pontos médios dos intervalos de tempo, como mostrado na Figura 4.4, e a partir destes valores é calculada então a posição no seguinte passo de tempo, da seguinte forma:

$$\mathbf{v}_{i}^{t+\frac{1}{2}\Delta t} = \mathbf{v}_{i}^{t-\frac{1}{2}\Delta t} + \Delta t \mathbf{a}_{i}^{t}$$

$$(4.4)$$

$$\mathbf{x}_{i}^{t+\Delta t} = \mathbf{x}_{i}^{t} + \Delta t \mathbf{v}_{i}^{t+\frac{1}{2}\Delta t}$$

$$(4.5)$$



Figura 4.4: Ilustração do esquema de integração Leap Frog.

Como a velocidade não é dada explicitamente para o tempo t, torna-se necessária a aplicação de uma estratégia para a sua obtenção. Uma forma de obter isso é através da média entre as velocidades implícitas adjacentes $t - \Delta t$ e $t + \Delta t$:

$$\mathbf{v}_i^t = \frac{\mathbf{v}_i^{t-\Delta t} + \mathbf{v}_i^{t+\Delta t}}{2}.$$
(4.6)

É importante observar que no primeiro cálculo através do Leap-Frog é necessário se conhecer o valor da velocidade em t = -1/2. Este valor, embora em determinados casos seja fisicamente fictício, pode ser aproximado, durante a inicialização do sistema, através do método de Euler explícito, da seguinte forma:

$$\mathbf{v}_{i}^{-\frac{1}{2}} = \mathbf{v}_{i}^{0} + \frac{1}{2}\Delta t \mathbf{a}_{i}^{0}.$$
(4.7)

4.6 Tratamento de Fronteiras

4.6.1 Visão Geral

Durante a simulação de fluidos, um ponto que demanda fundamental atenção é o tratamento de fronteiras, o qual está relacionado principalmente à manutenabilidade das propriedades físicas inerentes à regiões próximas às fronteiras e ao confinamento do fluido no domínio definido. À exemplo de outros métodos numéricos, o tratamento de fronteiras no método SPH é uma tarefa bastante complexa, e que ainda demanda esforço para a determinação de uma solução fundamentada [85]. Entretanto, existem algumas propostas que se dispõe a solucionar estes problemas através da utilização de heurísticas. A seguir serão apresentados esquemas de tratamento de fronteira bastante importantes em simulações SPH, tanto baseados na utilização de partículas quanto através de um tratamento puramente geométrico.

4.6.2 Tratamento de fronteira utilizando partículas

A utilização de partículas para o tratamento de fronteiras no método SPH é uma estratégia bastante utilizada, em diversas aplicações. Na literatura são apresentadas diferentes estratégias de tratamento de fronteiras através de partículas, sendo as principais denominadas de tratamento de fronteiras por partículas repulsivas [68], tratamento de fronteiras por partículas fantasmas [55] e tratamento de fronteiras através de partículas virtuais [97].

No tratamento de fronteiras através de partículas repulsivas é adicionado uma camada de partículas extra exatamente sobre a fronteira do problema (Figura 4.5-a), a partir disso, estas partículas exercem uma força de repulsão sobre as partículas de fluido, não permitindo que estas ultrapassem as fronteiras. Esta força de repulsão Γ_{if} entre uma partícula *i* do fluido e uma partícula fantasma *f* é matematicamente descrita como:

$$\Gamma_{if} = \begin{cases} D\left[\left(\frac{r_0}{r_{if}}\right)^{\alpha_1} - \left(\frac{r_0}{r_{if}}\right)^{\alpha_2}\right], & r_0\\ 0, & \frac{r_0}{r_{if}} > 1 \end{cases}$$
(4.8)

onde α_1 e α_2 são valores constantes, considerando a restrição $\alpha_1 > \alpha_2$. De acordo com [68] estes valores normalmente são definidos como 4 e 2, porém outros valores como 12 e 4 também são utilizados com bons resultados, como mostrado em [57]. A variável r_0 refere-se ao raio de interação de uma partícula fantasma com as partículas do fluido, o qual normalmente é definido como sendo um valor próximo ao espaçamento inicial entre as partículas do sistema.

Por outro lado, no tratamento de fronteiras através de partículas fantasmas, nas regiões externas, ligeiramente próximas às fronteiras, são introduzidas partículas com propriedades opostas às internas, a fim de garantir que as condições de fronteira sejam obedecidas, como é mostrado na Figura 4.5. Através deste esquema é possível impor condições de Dirichlet para velocidade e Neumann para a pressão. Em [58, 56] foi desenvolvida uma proposta que une as duas estratégias anteriores, a fim de tornar o processo de simulação mais estável e eficiente. Nesta proposta, são determinados dois tipos de partículas fantasmas. As partículas fantasmas do tipo I funcionam como as apresentadas por [68], exercendo uma força de repulsão nas partículas de fluidos, quando estas aproximam-se das fronteiras. Já as partículas do tipo II, semelhantes à proposta de [55], além de contribuir para o cumprimento das condições de fronteira, atuam também na aproximação das propriedades das partículas de fluidos através da aplicação das regras de aproximação SPH, uma vez que também são incluídas como partículas vizinhas. Este esquema pode ser observado na Figura 4.5.



Figura 4.5: Tratamento de fronteiras através de partículas: (esquerda) fantasmas [68], (centro) partículas externas com propriedades simétricas [55], (direita) partículas fantasmas e simétricas [58, 56].

O tratamento de fronteiras através de partículas virtuais, introduzido no SPH por Shao e Lo [97], é baseado em uma técnica proposta por Koshizuka et al. [50] para impor condições de fronteira no método MPS (do inglês Moving Particle Semi-implicit), a estratégia define camadas de partículas fixas, sendo a primeira localizada exatamente sobre a fronteira, e as demais espaçadas conforme a configuração inicial do problema. A partir disso, são definidos os valores de pressão e velocidade nas partículas virtuais que estão sobre a fronteiras, sendo então repetidos nas demais partículas virtuais, seguindo a direção normal de cada partícula de fronteira, conforme demonstrado na Figura 4.6. Neste sentido, torna-se necessário a solução da pressão nas partículas virtuais de fronteira.

Capítulo 4



Figura 4.6: Configuração das partículas virtuais: em azul são representadas as partículas de fluido, em verde as partículas de fronteira e em laranja as partículas virtuais.

Para o tratamento de regiões onde aparecem quinas, a técnica apresenta algumas particularidades. Quando é necessário tratar uma região onde o fluido encontra-se interno à quina, as propriedades da partícula virtual que está exatamente sobre a quina é repetida para as partículas virtuais na região de quina, como é mostrado na Figura 4.7-a. Por outro lado, quando o fluido encontra-se na parte externa da quina, as partículas que virtuais que estão na diagonal relativa à partícula virtual de quina, tem valor definido como a média das quatro partículas vizinhas, como demonstrado na Figura 4.7-b. Em [97] não é previsto tratamento para situações onde ocorrem duas quinas, com fluidos internos, próximas. Para resolver este problema, [52] propõe usar a mesma estratégia feita com as partículas virtuais em quinas externas, fazendo-se a média das quatro partículas vizinhas.

Embora os esquemas de tratamento de fronteira em simulações SPH baseados na utilização de partículas apresentem algumas desvantagens, como a necessidade de armazenamento e processamento adicional, além da dificuldade no tratamento de geometrias complexas, eles são bastante utilizados, principalmente por permitirem de forma mais direta a imposição de condições de fronteiras necessárias em determinados experimentos. Entretanto, existe a alternativa de se tratar as fronteiras através de esquemas puramente geométricos.



Figura 4.7: Configuração das partículas virtuais em regiões a) externas à quinas, e b) internas à quinas.

4.6.3 Tratamento de fronteira puramente geométrico

Em [82] é proposto um método puramente geométrico, baseado na representação das fronteiras através de malha triangular. Basicamente este esquema trabalha em duas fases: a primeira consiste no processo de detecção de colisão das partículas, as quais são representadas por esferas, com as fronteiras, e a segunda fase refere-se ao cálculo da resposta da colisão. Uma descrição detalhada deste esquema pode ser obtida em [83]. Além desta estratégia de tratamento de fronteira puramente geométrico e das estratégias baseadas em partículas, pode-se ainda explorar a utilização de fronteiras implícitas, o que pode ser vantajoso em casos onde a geometria a ser representada é simples.

4.7 Considerações parciais

Embora a aplicabilidade do método SPH para a solução de problemas de dinâmica de fluidos seja a priori relativamente simples, a necessidade de realização dos tratamentos numéricos e computacionais mostrados anteriormente torna esta tarefa algo mais complexo, demandando esforço sobre o controle e adequação de determinadas propriedades do esquema de solução. Além disso, o método ainda apresenta certos pontos que necessitam de um maior empenho para que a sua flexibilidade possa ser utilizada de maneira mais abrangente. Porém, uma boa análise sobre a aplicação dos tratamentos necessários junto ao SPH pode render resultados consideráveis.

Capítulo 4

Aspectos numéricos e computacionais em dinâmica dos fluidos usando SPH

Capítulo

SPH quase-incompressível

5.1 Introdução

Existem uma série de técnicas numéricas orientadas para a solução de fenômenos fluidos, baseadas em diferentes estratégias, e podendo ser classificadas de acordo com a forma como o problema a ser tratado é discretizado como, por exemplo, através de uma malha ou através de partículas. Entre os métodos de solução numérica para dinâmica dos fluidos que utilizam partículas está o método Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH). O método SPH, através de suas diversas variações, tem chamado atenção devido à sua forma de abstração e por mostrar resultados relativamente bons em diversas aplicações envolvendo fenômenos fluidos, tanto para problemas mais simples, que podem ser modelados através de equações mais restritas, quanto para problemas complexos, tratados através das Equações de Navier-Stokes.

Embora estes resultados se apresentem numericamente mais precisos em esquemas alternativos ao método SPH clássico, conhecido como SPH quase-incompressível (do inglês, *Weakly Compressible Smothed Particle Hydrodynamics*-WCSPH), o conhecimento dos conceitos intrísicos à aplicação do WCSPH são de fundamental importância para uma melhor ambientação com as características do método, permitindo se abstrair os pontos fortes e os aspectos sensíveis do método. Desta forma, neste capítulo será apresentada a formulação WCSPH aplicada às equações de Navier-Stokes, consideradas como o conjunto de equações mais importante da dinâmica dos fluidos, orientado à escoamentos incompressíveis. Neste sentido, serão detalhadas as principais características do métodos relativas à problemas modelados através destas equações, o que permitirá a concepção de uma base para o tratamento de experimentos clássicos solucionados através do WCSPH e possíveis aperfeiçoamentos para problemas mais complexos.

5.2 Formulação WCSPH

Um dos pontos de grande importância na solução numérica escoamentos é a abstração das características destes a fim de definir as restrições permissíveis, proporcionando simplificações no modelo matemático e, consequentemente, no modelo de aproximação numérica, o que representa benefícios numéricos e computacionais. Entre estas possíveis restrições estão àquelas relacionadas a incompressibilidade dos fluidos (seção 2.3), além do comportamento da viscosidade aparente (seção 2.4). Com base nisto, nesta seção, será apresentada a metodologia do WCSPH aplicado à escoamentos incompressíveis newtonianos, que, de uma forma geral, inclue fatores relacionados à aproximação da densidade de partículas, com referência à equação de conservação de massa, e à aproximação da equação de conservação da quantidade de movimento.

5.2.1 Aplicação do SPH para aproximação da densidade

Embora uma das mais importantes propriedades referentes aos escoamentos incompressíveis seja a condição de incompressibilidade, a qual leva intuitivamente, durante a utilização de métodos numéricos, à idéia de determinação de densidade constante nos nós discretos da representação de um determinado problema, o WCSPH baseia-se nas variações de densidade para a obtenção dos valores de pressão ao longo do domínio. Essa característica provém do fato do método ser originalmente projetado para escoamentos compressíveis [63, 40].

A partir disso, na solução de escoamentos através do WCSPH, um dos primeiros passos em cada ciclo a obtenção dos valores de densidade nas partículas. A obtenção dos valores de densidade de partículas pode ser realizada através de duas formas, extensivamente explorados em diversas aplicações [57]. O primeiro esquema, conhecido como Somátorio de Densidades, consiste da aplicação direta da aproximação SPH para uma determinada propriedade, isto é, seja uma partícula de referência *i*, o valor de densidade dependerá essencialmente da quantidade de partículas vizinhas a *i*, tal que a aproximação é feita aplicando o operador SPH descrito na Equação 3.17, tal que:

$$\rho_i = \sum_{j \in \Theta_i} m_j W_{ij}.$$
(5.1)

Uma das principais vantagens desta aproximação é que a conservação de massa é garantida, uma vez que a integração da densidade sobre todo domínio é exatamente a soma da massa de todas as partículas. Entretanto, a utilização desta aproximação pode ter problemas em regiões próximas ao contorno ou em regiões de interface de escoamentos multifásicos, o que, em ambos os casos, apresentará uma variação indesejada nos valores de densidade. Essa deficiência, quando ocorrida devido à proximidade do contorno, pode ser corrigida através da utilização de partículas fantasmas (figura 5.1).

A segunda alternativa para obtenção dos valores de densidade em cada partícula é através da



Figura 5.1: Perfil de densidades nas partículas através da Equação 5.1: (esquerda) resultado com partículas fantasmas, e (direita) ausência de partículas fantasmas (deficiências nas proximidades do contorno).

aplicação de operadores diferenciais SPH diretamente sobre a equação da continuidade (Equação 2.2), o que leva à obtenção da seguinte expressão:

$$\frac{D\rho_i}{Dt} = -\rho_i \sum_{j \in \Theta_i} \frac{m_j}{\rho_j} \mathbf{v}_{ji} \cdot \nabla W_{ij},$$
(5.2)

tornando necessária a integração temporal para a obtenção dos valores devidos da densidade. Uma das principais vantagens na utilização desta segunda alternativa é a não formação de regiões com variações de densidade devido à aproximação de fronteiras ou de interfaces, uma vez que, definindo-se os valores iniciais para a densidade, estes se alterarão apenas quando ocorrer movimento de uma partícula em relação a outra [67]. Além disso, esta formulação permite uma diminuição no esforço computacional, uma vez que não é necessário efetuar um ciclo de cálculo para obtenção dos valores de W_{ij} como ocorre na Equação 5.1.

Além dos esquemas apresentados anteriormente para obtenção dos valores de densidade nas partículas, existem ainda propostas orientadas à solução de problemas mais específicos, capazes de tratar pertubações relativas à instabilidades [57].

5.2.2 Aproximação da equação de conservação da quantidade de movimento através do WCSPH

A equação de conservação da quantidade de movimento para escoamentos incompressíveis newtonianos 2.11, pode ser discretizada no WCSPH da seguinte forma:

$$\frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} = -\frac{1}{\rho_i}\nabla p_i + \frac{\mu}{\rho_i}\nabla^2 \mathbf{v}_i + \mathbf{F}_i,$$
(5.3)

a qual, de uma forma geral, representa a aceleração de uma partícula i do sistema.

Observando-se esta equação, é possível notar a existência de dois termos diferenciais que necessitam a aplicação de regras de aproximação para a sua avaliação: o gradiente da pressão e o termo referente às forças viscosas. Existem uma série de propostas de operadores SPH para a avaliação destes termos, como descrito no capítulo 3. Aqui será apresentada, uma estratégia que leva em conta importantes fatores como, por exemplo, o tratamento de erros devido à instabilidades geradas por assimetria entre partículas. Esta estratégia é descrita com detalhes em [85]. Neste sentido, o primeiro passo é a obtenção dos valores da pressão em cada partícula, para que posteriormente seja calculado o gradiente de pressão.

5.2.2.1 Solução da pressão no WCSPH

Classicamente, a aplicação do método SPH para a classe de fluidos incompressíveis foi possível através da utilização de uma estratégia denominada compressibilidade artificial [68, 57]. Esta estratégia considera que, teoricamente, todo fluido incompressível pode ser aproximado como um fluido compressível, sendo que a incompressibilidade do escoamento de um fluido pode ser modelada através de uma equação de estado quase-incompressível.

Uma equação de estado bastante utilizada em soluções de fluidos incompressíveis através de SPH, conhecida como Equação de Tait, foi aplicada inicialmente por [68], para modelar escoamentos de superfícies livres. Através desta equação, o valor da pressão em cada partícula do sistema é definido, principalmente, através de uma relação entre a densidade da partícula e densidade de referência, da seguinte forma:

$$p_i = B\left(\left(\frac{\rho_i}{\rho_0}\right)^{\gamma} - 1\right),\tag{5.4}$$

sendo que o valor de B é obtido através da seguinte expressão:

$$B = \frac{c^2 \rho_0}{\gamma},\tag{5.5}$$

com c sendo o valor da velocidade do som no meio. Em determinadas situações, de acordo com [75], o valor denotado por B pode ser definido como um valor de pressão inicial.

Outra alternativa para a equação de estado para fluidos incompressíveis com baixo número de Reynolds foi apresentada por [75], tal que:

$$p = c^2 \rho. \tag{5.6}$$

De acordo com [57], a Equação 5.6 apresenta resultados bastante satisfatórios para diversos tipos de escoamentos como, por exemplo, escoamento de Couette, escoamento Poiseuille, escoamento por meios porosos, entre outros. Entretanto, ao se utilizar a estratégia de compressibilidade artificial, seja através das equações de estado anteriormente apresentadas, ou por outras equações, é necessário um considerável cuidado com a determinação da velocidade do som no meio, a qual, se definida de forma inadequada, pode provocar sérios problemas na solução de um determinado escoamento.

A partir da obtenção da pressão em cada partícula do sistema, numa determinada iteração de tempo, é possível obter as contribuições relativas às forças de pressão presente no escoamento, através da avaliação do termo $\frac{1}{\rho}\nabla p$ pelo método SPH. Uma maneira de realizar isto é através da aplicação do operador gradiente SPH Diferença, descrito na Equação 3.20. Deste modo, o gradiente de pressão é avaliado da seguinte forma:

$$\frac{1}{\rho_i}\nabla p_i = -\frac{1}{\rho_i^2}\sum_{j\in\Theta_i} m_j(p_j - p_i)\nabla_i W_{ij}.$$
(5.7)

5.2.2.2 Cálculo das forças viscosas

O segundo passo a ser realizado durante o processo de aproximação SPH para a equação do Momento é a obtenção da contribuição das forças viscosas presentes no sistema. Para isto, é necessário aplicar um esquema de aproximação para a avaliação do termo viscoso presente na Equação 5.3. Uma alternativa a ser realizada é a utilização do operador laplaciano SPH Taylor descrito na Equação 3.22, tal que:

$$\frac{\mu}{\rho_i} \nabla^2 v_i = \frac{2\mu}{\rho_i} \sum_{j \in \Theta_i} \frac{m_j}{\rho_j} \mathbf{v}_{ij} \frac{\mathbf{x}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij}}{\|\mathbf{x}_{ij}\|^2}.$$
(5.8)

Através da aplicação das aproximações SPH do termo viscoso e do gradiente de pressão, pode-se então avaliar individualmente a aceleração das partículas e, consequentemente, efetuar a atualização do sistema, respeitando os fatores físicos existentes em um determinado problema. Neste sentido, em cada passo de tempo as velocidades das partículas são integradas no tempo, tal que:

$$\mathbf{v}_i^{n+1} = \mathbf{v}_i^n + \left(-\frac{1}{\rho_i}\nabla p_i + \frac{\mu}{\rho_i}\nabla^2 v_i + \mathbf{g}_i\right),\tag{5.9}$$

e consequente, as suas posições:

$$\mathbf{x}_i^{n+1} = \mathbf{x}_i^n + \mathbf{v}_i^{n+1} \Delta t.$$
(5.10)

É importante lembrar que a integração pode ser realizada através de técnicas mais específicas, tais como o esquema Leap-Frog, descrito em detalhes em [82], ou ainda esquemas de mais alta ordem como Runge-Kutta de quarta ordem [23].

5.3 Aplicação em experimentos numéricos

Os esquemas clássicos de aproximação baseados no método SPH são aplicáveis à diversos tipos de escoamentos, apresentando resultados consideravelmente satisfatórios [57]. Existem uma grande possibilidade de alternativas para o desenvolvimentos destes esquemas de solução, utilizando diferentes estratégias de integração temporal, operadores de aproximação SPH, entre outros. O algoritimo 3 apresenta em detalhes a sequência de operações realizadas durante os sucessivos cálculos de um esco-amento resolvido através do SPH clássico, utilizando o cálculo da densidade através do Somatório de Densidades. Para que a utilização da versão em que a densidade é cálculada baseando-se na equação da continuidade, basta que a linha 5 do algorítmo seja eliminada e o cálculo da densidade após os passos de cálculo referentes à equação de conservação da quantidade de movimento seja acrescentado, conforme a Equação 5.2, além de sua consecutiva integração.

Algoritmo 3: Simulação de escoamentos através do WCSPH.
1 Iniciar sistema;
2 repita
3 Buscar partículas vizinhas (Seção 4.4);
4 para cada partícula i faça
5 Calcular densidade (Equação 5.1);
6 Atualizar pressão (Equação 5.6);
7 para cada partícula i faça
8 Calcular gradiente de pressão (Equação 5.7);
9 Calcular termo viscoso (Equação 5.8);
10 Obter aceleração (Equação 5.3);
11 para cada partícula i faça
12 Atualizar \mathbf{v}_i (Equação 5.9);
13 Atualizar \mathbf{x}_i (Equação 5.10);
14 Aplicar condições de fronteiras (Seção 4.6);
15 Atualizar Δt através de condição CFL;
16 $ t = t + \Delta t;$
17 até $t < t_{total}$;

Durante a aplicação do método SPH para resolver um determinado problema, é de fundamental importância focar a atenção na primeira etapa do processo: a inicialização do sistema. Durante esta
fase devem ser definidos, de acordo com os fins desejados, os valores das propriedades físicas do fluido e do ambiente onde este se encontra. Além disso, existe também a necessidade de determinação de valores de constantes referentes ao próprio esquema de aproximação, como é o caso da determinação do valor do raio do núcleo de aproximação h, quando este tratar-se de um valor fixo. Embora esta etapa seja aparentemente simples, a atribuição de valores incorretos para as variáveis do sistema podem provocar resultados inesperados e prejudicar toda a simulação.

5.4 Considerações parciais

O método WCSPH apresenta diversas vantagens, tais como a facilidade de implementação e a flexibilidade de discretização, podendo ser aplicado à soluções de problemas com os mais distintos tipos de geometrias. Sua aplicação como solução de escoamentos possui diversas contribuições, principalmente na computação gráfica. Entretanto, enquanto método de solução numérica, o WCSPH possui algumas desvantagens, principalmente no que está relacionado à solução da pressão através de uma equação de estado. Neste sentido, a utilização de esquemas SPH mais sofisticados, como é o caso do método Incompressible SPH, onde a pressão é resolvida através de uma equação de Poisson, torna-se mais interessante e permite alcançar resultados numericamente melhores.

Capítulo

SPH Incompressível

6.1 Introdução

O método SPH foi originalmente desenvolvido para a solução de escoamentos compressíveis, sendo posteriormente aperfeiçoado para a resolução de escoamentos incompressíveis, através da utilização de uma equação de estado quase-incompressível para a solução da pressão, sendo então denominado de WCSPH (do inglês, *weakly-compressible SPH*). Entretanto, a utilização deste tipo de aproximação acabou por acarretar alguns inconvenientes no método, tais como a necessidade de utilização de um passo de tempo consideravelmente pequeno, além da necessidade de definição de valores para a velocidade do som no meio [57], o que em determinados tipos de escoamentos pode ser um obstáculo, devido às dificuldades na determinação desta variável. Para resolver estes problemas, Cummins [25], baseado no método da projeção [19], introduziu um esquema SPH com uma formulação completamente incompressível, onde a pressão é resolvida através de uma equação de Poisson, nomeado aqui de ISPH com campo de velocidade livre de divergência (ISPH-DF, do inglês *Incompressible Smoothed Particle Hydrodynamics divergence-free*).

O método ISPH-DF mostrou-se suficientemente robusto para ser aplicado em uma série de problemas de dinâmica dos fluidos, sendo mais estável e apresentando melhores resultados numéricos que o WCSPH [52], além de permitir simulações utilizando um maior passo de tempo. Entretanto, mesmo diante destas evidentes vantagens, o ISPH-DF apresenta problemas de instabilidade devido à ocorrência, em determinados tipos de escoamentos, de aglomerados de partículas. Neste sentido, esquemas alternativos ao ISPH-DF foram introduzidos, os quais serão discutidos com maiores detalhes neste capítulo.

6.2 Formulações ISPH baseadas no método da projeção

Nesta seção serão apresentadas três diferentes formulações ISPH baseadas no método da projeção: ISPH com campo de velocidade livre de divergência (ISPH-DF), ISPH com densidade invariante (ISPH-DI) e ISPH com controle de velocidade e densidade (ISPH-DFDI). O propósito deste estudo é conhecer as vantagens e desvantagens de cada formulação, além da aplicabilidade destas.

6.2.1 ISPH com campo de velocidade livre de divergência (ISPH-DF)

Ao contrário do que ocorre no WCSPH, onde os valores da densidade das partículas podem variar, tanto de partícula para partícula quanto em cada sucessivo passo de tempo, de acordo com a distribuição das partículas no domínio, no ISPH-DF a densidade sempre permanece constante, sendo associada às partículas na fase inicial da simulação, o que respeita diretamente a condição de incompressibilidade obtida a partir da equação de conservação de massa.

A partir disso, e baseado no método da projeção, a equação de conservação da quantidade de movimento (equação 2.3) é então dividida em duas partes, onde a primeira é responsável por fornecer o fluxo de velocidade no tempo sem respeitar a condição de incompressibilidade, levando-se em conta as contribuições das forças viscosas e das forças externas envolvidas no escoamento, ou seja:

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \tau + \mathbf{F}.$$
(6.1)

Além disso, é necessário que a condição de contorno seja respeitada durante a solução do problema, ou seja, $\mathbf{v} = \mathbf{w} \text{ em } \Gamma$, onde \mathbf{w} é a velocidade no contorno.

Como pode ser observado através desta base equacional, ao se resolver a equação 6.1 obtém-se um campo de velocidades intermediário, o qual será posteriormente utilizado nos cálculos para obtenção do campo de pressões do sistema. Neste sentido, é necessário presumir um espaço intermediário Ω^* , o qual é obtido integrando-se as posições das partículas no tempo:

$$\mathbf{x}_i^* = \mathbf{x}_i^n + \Delta t \mathbf{v}_i^n, \tag{6.2}$$

com contorno Γ^* .

A partir disso, deve-se então obter um campo de velocidade intermediário, o qual não está sujeito à condição de incompressibilidade $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$. Neste sentido, o termo $\frac{D\mathbf{v}}{Dt}$ é então discretizado como:

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \frac{\mathbf{v}^* - \mathbf{v}^n}{\Delta t},\tag{6.3}$$

permitindo que a equação 6.1 seja discretizada como:

$$\mathbf{v}_{i}^{*} = \mathbf{v}_{i}^{n} + \left(\frac{1}{\rho}\nabla\cdot\tau^{n} + \mathbf{F}_{i}^{n}\right)\Delta t, \qquad (6.4)$$

 $\operatorname{com} \mathbf{v}^* = \mathbf{w} \operatorname{em} \Gamma^*$, sendo \mathbf{w} a velocidade no contorno.

O segundo passo na formulação baseada no método da projeção irá proporcionar a correção do campo de velocidade intermediária obtido, através da contribuição das forças devido à pressão, tal que:

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p,\tag{6.5}$$

com $\frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} = q \text{ em } \Gamma^*$, sendo q a pressão no contorno. Discretizando o termo $\frac{D\mathbf{v}}{Dt}$ como apresentado na equação 6.3 tem-se:

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \frac{\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}^*}{\Delta t},\tag{6.6}$$

permitindo discretizar a equação 6.5 como:

$$\left(\frac{1}{\rho}\nabla p\right)_{i} = \frac{\mathbf{v}_{i}^{n+1} - \mathbf{v}_{i}^{*}}{\Delta t}.$$
(6.7)

Aplicando-se divergente de ambos os lados da equação, e considerando a restrição de incompressibilidade ($\nabla \cdot \mathbf{v}^{n+1} = 0$), obtém-se uma equação de Poisson, descrita como:

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla p\right)_i = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{v}_i^*.$$
(6.8)

Os valores obtidos para pressão através da solução da equação 6.8 são então utilizados para correção do campo de velocidades da seguinte forma:

$$\mathbf{v}_i^{n+1} = \mathbf{v}_i^* - \left(\frac{1}{\rho}\nabla p^{n+1}\right)\Delta t.$$
(6.9)

Finalmente, a posição das partículas é integrada no tempo, tal que:

$$\mathbf{x}_i^{n+1} = \mathbf{x}_i^n + \frac{\Delta t}{2} \left(\mathbf{v}_i^{n+1} + \mathbf{v}_i^n \right).$$
(6.10)

Durante a utilização do método ISPH é necessário que determinadas propriedades sejam aproximadas através de operadores SPH. Nos experimentos realizados neste trabalho os operadores foram escolhidos de acordo com análise apresentada no capítulo 3. Além disso, é importante destacar que o termo viscoso, presente na equação 6.1, pode ser simplificado para $\mu \nabla^2 \mathbf{v}$, quando o escoamento a ser tratado for incompressível e newtoniano, desta maneira, semelhantemente ao descrito para o WCSPH, este termo pode ser aproximado através do operador laplaciano SPH Taylor (equação 3.22). Por outro lado, o gradiente de pressão na equação 6.5 é aproximado através do operador gradiente SPH Diferença (equação 3.20). Além disso, para se resolver a equação 6.8 é necessário calcular os valores para o divergente da velocidade intermediária, o qual é aproximado através do operador divergente SPH diferença (equação 3.21), tal que:

$$\nabla \cdot \mathbf{v}^* = \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j \in \Theta_i} m_j (\mathbf{v}_j^* - \mathbf{v}_i^*) \cdot \nabla_i W_{ij} \right].$$
(6.11)

Por outro lado, para obter-se a aproximação para o termo $\nabla \cdot (\kappa \nabla p)$, fazendo-se $\kappa = 1/\rho$, será consideranda a seguinte identidade:

$$\nabla \cdot (\kappa \nabla p) = \frac{1}{2} (\nabla^2 (\kappa p) - p \nabla^2 \kappa + \kappa \nabla^2 p)$$
(6.12)

Os termos presentes na equação anterior são então aproximados através do operador laplaciano SPH Taylor (equação 3.22), tal que:

$$\begin{aligned} (\nabla^2(\kappa p))_i &= 2\sum_{j\in\Omega_i} \frac{m_j}{\rho_j} \frac{(\kappa_i p_i - \kappa_j p_j)}{\|\mathbf{x}_{ij}\|^2} \mathbf{x}_{ij} \nabla_i W_{ij}, \\ (p\nabla^2 \kappa)_i &= 2\sum_{j\in\Omega_i} \frac{m_j}{\rho_j} \frac{(\kappa_i p_i - \kappa_j p_j)}{\|\mathbf{x}_{ij}\|^2} \mathbf{x}_{ij} \nabla_i W_{ij}, \\ (\kappa \nabla^2 p)_i &= 2\sum_{j\in\Omega_i} \frac{m_j}{\rho_j} \frac{(\kappa_i p_i - \kappa_j p_j)}{\|\mathbf{x}_{ij}\|^2} \mathbf{x}_{ij} \nabla_i W_{ij}, \end{aligned}$$

resultando na seguinte aproximação:

$$\nabla \cdot (\kappa \nabla p)_i = \sum_{j \in \Omega_i} \frac{m_j}{\rho_j} \frac{(\kappa_i + \kappa_j) p_{ij}}{\|\mathbf{x}_{ij}\|^2} \mathbf{x}_{ij} \nabla_i W_{ij},$$
(6.13)

sendo $p_{ij} = p_i - p_j$.

Em problemas em que o escoamento apresenta descontinuidade relativa à densidade, ou seja, escoamentos multifásicos, a utilização da aproximação descrita na equação 6.13 pode provocar instabilidade. Em [21] é descrita uma solução para este problema através da seguinte substituição:

$$\kappa_i + \kappa_j \to \frac{4\kappa_i \kappa_j}{\kappa_i + \kappa_j},$$
(6.14)

o que levará a:

$$\nabla \cdot (\kappa \nabla p)_i = \sum_{j \in \Omega_i} \frac{m_j}{\rho_j} \left(\frac{4\kappa_i \kappa_j}{\kappa_i + \kappa_j} \right) \frac{p_{ij}}{\|\mathbf{x}_{ij}\|^2} \mathbf{x}_{ij} \nabla_i W_{ij}.$$
(6.15)

podendo ser reescrita como:

$$\left(\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla p\right)\right)_{i} = \sum_{j \in \Theta_{i}} \frac{m_{j}}{\rho_{j}} \left(\frac{4}{\rho_{i} + \rho_{j}}\right) p_{ij} \frac{\mathbf{x}_{ij}}{\|\mathbf{x}_{ij}\|} \nabla_{i} W_{ij}.$$
(6.16)

A utilização do método ISPH pode ser observada detalhadamente no algoritmo 4, com destaque ao algoritmo 5 onde são descritos os passos para a montagem da matriz obtida através da equação de Poisson. Entretanto, é importante destacar que a aplicação deste método pode apresentar obstáculos durante a solução do sistema linear para obtenção da pressão: uma possível solução é descrita na seção 6.3.

Algoritmo 4: Simulação de escoamentos através do método ISPH-DF.				
1 Iniciar sistema;				
2 repita				
3	Buscar partículas vizinhas (seção 4.4);			
4	para cada partícula i faça			
5	Calcular posição intermediária (equação 6.2);			
6	para cada partícula i faça			
7	Calcular velocidade intermediária (equação 6.4);			
8	Obter pressão através da solução da equação de Poisson (algoritmo 5);			
9	para cada partícula i faça			
10	Calcular gradiente de pressão (equação 5.7);			
11	para cada partícula i faça			
12	Recuperar a velocidade livre de divergência (equação 6.9);			
13	Integrar posição (equação 6.10);			
14	Atualizar Δt através de condição CFL;			
15	$t = t + \Delta t;$			
16 até $t < t_{total}$;				
14 15 16 a	Atualizar Δt através de condição CFL; $t = t + \Delta t$; té $t < t_{total}$;			

Algoritmo 5: Solução da pressão no ISPH através de equação de Poisson.

1 para cada partícula i faça

2 Calcular o divergente da velocidade intermediária (equação 6.11);

3 para cada partícula i faça

4 Associar a linha *i* da matriz a equação do Laplaciano a pressão (equação 6.16);

5 Resolver sistema;

6.2.2 ISPH com densidade invariante (ISPH-DI)

Alternativamente ao ISPH-DF, Shao e Lo [97] introduziram um esquema que difere-se principalmente na forma como é construído o lado direito da equação de Poisson, utilizada para resolver a pressão. Neste método, denominado de ISPH-DI, do inglês *ISPH based on keeping density invariancy*, a densidade é variável nas partículas, sendo calculada através de interpolação SPH, de modo semelhante ao realizado no WCSPH. Neste sentido, em cada passo de simulação, inicialmente é cálculada a velocidade intermediária, tal que,

$$\mathbf{v}_{i}^{*} = \mathbf{v}_{i}^{n} + \left(\frac{1}{\rho}\nabla\cdot\tau^{n} + \mathbf{F}_{i}^{n}\right)\Delta t, \qquad (6.17)$$

e com base nesta velocidade, a posição intermediária:

$$\mathbf{x}_i^* = \mathbf{x}_i^n + \Delta t \mathbf{v}_i^* \tag{6.18}$$

Considerando que a equação de continuidade deva ser satisfeita na posição intermediária, ou seja,

$$(\nabla \cdot \mathbf{v})_{\mathbf{x}_i^*} = -\left(\frac{1}{\rho} \frac{\delta \rho}{\delta t}\right)_{\mathbf{x}_i^*},\tag{6.19}$$

o lado direito da equação 6.8 pode ser substituído pela diferença relativa de densidade, assim:

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho^*} \nabla p^{n+1}\right)_i = \frac{\rho_0 - \rho^*}{\rho_0 \Delta t}.$$
(6.20)

A partir disso, o campo de velocidades no tempo n + 1 pode ser corrigido com a contribuição do gradiente de pressão:

$$\mathbf{v}_i^{n+1} = \mathbf{v}_i^* - \left(\frac{\Delta t}{\rho^*} \nabla p^{n+1}\right),\tag{6.21}$$

e as posições podem ser então integradas:

$$\mathbf{x}_{i}^{n+1} = \mathbf{x}_{i}^{n} + \frac{\Delta t}{2} \left(\mathbf{v}_{i}^{n+1} + \mathbf{v}_{i}^{n} \right).$$
(6.22)

Embora esta estratégia seja mais estável que o ISPH-DF, a solução deteriora com o passar do tempo, principalmente pela possibilidade de grande variação de densidade [111].

6.2.3 ISPH com controle de densidade e velocidade (ISPH-DFDI)

Para resolver o problema de deterioração da solução no ISPH-DI, Hu e Adams [46] propuseram um esquema de correção da densidade, através de algoritmo que combina os conceitos de livre divergência quanto de densidade invariante. Neste sentido, inicialmente, velocidade e posições intermediárias são obtidas como:

$$\mathbf{v}_{i}^{*,n+1/2} = \mathbf{v}_{i}^{n} + \left(\frac{1}{\rho}\nabla\cdot\tau^{n} + \mathbf{F}_{i}^{n}\right)\frac{\Delta t}{2},$$
(6.23)

$$\mathbf{x}_{i}^{*,n+1} = \mathbf{x}_{i}^{n} + \mathbf{v}_{i}^{*,n+1/2} \Delta t.$$
 (6.24)

A partir disso, com base na posição intermediária \mathbf{x}^* é calculada a densidade intermediária $\rho_i^{*,n+1}$ através de interpolação SPH e então é resolvida a equação de Poisson:

$$\frac{\Delta t}{2} \nabla \cdot \left(\left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right)_i^n \right)_i = \frac{\rho_i^n - \rho_i^{*,n+1}}{\rho_i^n}.$$
(6.25)

Considerando-se que:

$$\sigma_i = \sum_j W_{ij},\tag{6.26}$$

obtém-se a seguinte relação:

$$\rho_i = \sum_j m_j W_{ij} = m_i \sigma_i. \tag{6.27}$$

Considerando-se ainda que $\rho_i^n = \rho_i^0 = m_i \sigma_i^0$ e $m_i \sigma_i^{*,n+1}$, a equação 6.25 pode ser reescrita como:

$$\frac{\Delta t}{2} \nabla \cdot \left(\left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right)_i^n \right)_i = \frac{\sigma_i^0 - \sigma_i^{*,n+1}}{\sigma_0^n}.$$
(6.28)

Resolvendo-se esta equação obtém-se o campo de pressões e, através disso, as posições das partículas podem ser corrigidas, tal que:

$$\mathbf{x}_{i}^{n+1} = \mathbf{x}_{i}^{*,n+1} - \left(\frac{1}{\rho}\nabla p\right)_{i}^{n} \frac{\Delta t}{2}.$$
(6.29)

Diferentemente do ISPH-DF, onde a densidade das partículas é constante ao longo da simulação, no ISPH-DFDI a densidade é variável em cada sucessivo passo, sendo calculada pela equação 6.27. Esta variação de densidade pode ser bastante útil na indicação de regiões com possibilidade de formação de aglomerados de partículas, ou vazios. Neste sentido, em [48] é introduzida uma verificação adicional que propõe que, caso a diferença relativa temporal da densidade seja maior que 1%, as posições das partículas são ajustadas através até que o critério seja satisfeito, onde m é o número de iterações. Para isso, são realizados os passos descritos nas seguintes equações:

$$\frac{\Delta t^2}{2} \nabla \left(\left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right)_i^{n,m} \right) = \frac{\sigma_i^0 - \sigma_{i*}^{n+1,m}}{\sigma^0} \to \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right)_i^{n,m}, \tag{6.30}$$

$$\mathbf{x}_{i}^{n+1,m+1} = \mathbf{x}_{i}^{n+1,m} - \left(\frac{1}{\rho}\nabla p\right)_{i}^{n,m} \frac{\Delta t^{2}}{2},$$
(6.31)

$$\sigma_{i*}^{n+1,m+1} \leftarrow \mathbf{x}_i^{n+1,m+1}. \tag{6.32}$$

Após estes passos, que garantem uma distribuição de partículas relativamente uniforme, a velocidade intermediária no tempo n + 1 é então calculada, sem considerar a contribuição do gradiente de pressão, assim:

$$\mathbf{v}_{i}^{*,n+1} = \mathbf{v}_{i}^{*,n+1/2} + \left(\frac{1}{\rho}\nabla\cdot\tau_{i}^{*,n+1/2} + \mathbf{F}_{i}^{*,n+1/2}\right)\frac{\Delta t}{2},$$
(6.33)

(6.34)

A pressão é então resolvida através de uma equação de Poisson, porém agora o lado direito é o divergente da velocidade intermediária e não mais a diferença de densidades, desta forma:

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla p^{n+1}\right)_i = \frac{2}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{v}_i^{*,n+1}.$$
(6.35)

Finalmente, o campo de velocidades é corrigido, fornecendo a velocidade no tempo n + 1:

$$\mathbf{v}_i^{n+1} = \mathbf{v}_i^{*,n+1} - \frac{\Delta}{2\rho} \nabla p_i^{n+1}, \tag{6.36}$$

e com isso as posições das partículas são integradas.

Embora este método possua um esquema bastante interessante para prevenir a formação de aglomerados de partículas, além de fornecer resultados satisfatórios [111], a grande quantidade de cálculos envolvidos em cada passo de simulação pode ser uma grande desvantagem, sendo mais viável, em determinados casos, utilizar o esquemas semelhantes ao ISPH-DF.

6.3 Solução do sistema linear

Entre as características dos métodos ISPH, uma das principais é a forma com que o campo de pressões é obtido, através de uma equação de Poisson. Esta equação refere-se a um sistema de equa-

ções lineares de N variáveis, do tipo Ax = b, sendo A uma matriz $N \times N$, e x e b vetores. O valor N é a quantidade de partículas utilizadas na aproximação, sendo que as variáveis do sistema de equações são as pressões em cada partícula $p_1, p_2, p_3, ..., p_{N-1}, p_N$.

De acordo com Cummins [25], o sistema linear devido à equação de Poisson deve ser montado levando-se em conta as condições de contorno para a velocidade intermediária e para pressão, as quais podem ser aplicadas utilizando-se partículas reflexivas. Entretanto, é importante destacar que a aproximação da equação de Poisson através do ISPH pode apresentar alguns problemas. Entre os obstáculos existentes, pode ser destacado a possibilidade de a matriz gerada ser singular, para os casos em que não há condição prescrita para a pressão, fato este comum nos escoamentos confinados. No caso particular do ISPH, a matriz singular obtida possui infinitas soluções. Neste sentido, é necessário utilizar mecanismos numéricos específicos que permitam a obtenção de uma solução para o sistema. É importante destacar que o fato de a equação possibilitar infinitas soluções não é um problema para o método em si, uma vez que o interesse principal está nos valores do gradiente de pressão, e não especificamente no campo de pressões em si.

Teoricamente, o problema relativo à solução da equação de Poisson pode ser tratado aplicando-se corretamente condições iniciais para o campo de pressões, no sentido de determinar, para um dado ponto do domínio, um valor específico de pressão, ou seja, forçar uma condição de Dirichlet para a pressão em uma partícula. Existem diversas maneiras de realizar este procedimento, entre as quais podem ser citadas a penalização ou eliminação de uma equação do sistema. A penalização de uma variável consiste na multiplicação desta por um valor consideravelmente alto, forçando com que o seu resultado seja nulo, ou próximo disso. Por outro lado, a eliminação de uma equação do sistema, consiste na anulação de todos os elementos da linha e coluna a qual o ponto de pressão a ser forçado pertença, e a sucessiva associação de um valor determinado no lado direito da equação, fazendo com que o resultado desta seja exatamente este valor. Ambas as estratégias fornecem resultados semelhantes, porém a última é mais precisa. Técnicas mais sofisticadas também podem ser utilizadas, tais como os multiplicadores de Lagrange [51], ou soluções baseadas em métodos de colocação [42, 109].

Através do código ISPH-DFS desenvolvido, foram realizados uma série de testes, considerando diferentes tipos de problemas e condições iniciais. Além disso, foram implementadas as técnicas de penalização, eliminação de equação e multiplicadores lagrangeanos. Entretanto, em todos os testes foram detectados problemas em relação à solução da equação de Poisson. Tal problema refere-se a uma diferença entre o valor de pressão forçado e os valores de pressão em todo o resto do domínio, a qual cresce com o decorrer da simulação, e acaba por provocar um gradiente de pressão incorreto na região em que a partícula com a pressão forçada se encontra, tornando a simulação altamente instável. A figura 6.1 apresenta uma simulação onde o problema pode ser observado, sendo que a partícula em azul trata-se daquela onde foi imposta a condição de Dirichlet. Neste resultado é fácil notar a discrepância entre os valores de pressão da partícula com pressão imposta em relação às demais.

Após uma análise a cerca da metodologia ISPH, foi constatado que a equação de Poisson obtida a



Figura 6.1: Problema da imposição de condição de Dirichlet para a pressão em uma simulação da cavidade impulsionada: (a) campo de pressões em t=0.4s, e (b) detalhe do gradiente de pressão na região onde foi imposta a condição de Dirichlet para pressão.

partir do método da projeção, e aproximada através dos operadores SPH, não satisfaz naturalmente a condição de compatibilidade. A condição de compatibilidade está relacionada ao fato de um problema ser ou não bem definido. Neste sentido, para verificar-se a condição de compatibilidade relativa ao presente contexto, supõe-se que as seguintes relações sejam satisfeitas:

$$\nabla \cdot \left(\frac{\nabla p}{\rho}\right) = \frac{\nabla \cdot \mathbf{v}^*}{\Delta t} = f \operatorname{em} \Omega, \tag{6.37}$$

$$\frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} = \mathbf{n} \cdot \nabla p = q \text{ em } \partial \Omega.$$
(6.38)

A partir disso, integrando-se 6.38 sobre todo o domínio Ω , tem-se que:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \left(\frac{\nabla p}{\rho}\right) d\Omega = \int_{\Omega} f d\Omega.$$
(6.39)

Aplicando-se o teorema de Gauss sobre a equação anterior, obtém-se:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \left(\frac{\nabla p}{\rho}\right) d\Omega = \int_{\partial \Omega} \mathbf{n} \cdot \nabla p \, d\partial\Omega, \tag{6.40}$$

logo, para que a condição de compatibilidade seja satisfeita, é necessário que:

$$\int_{\Omega} f d\Omega = \int_{\partial \Omega} q \, d\partial \Omega. \tag{6.41}$$

Como são impostas condições de Neumann para a pressão na fronteira, tem-se previamente o valor $\partial p/\partial \mathbf{n}$ prescrito, de tal modo que a integral do lado direito da equação 6.3 é igual a zero. Entretanto, a integral do lado esquerdo, que no presente contexto refere-se à integral do termo $\nabla \cdot \mathbf{v}^*$, difere-se consideravelmente de zero. Este fato se dá em decorrência da aproximação realizada, através da utilização de operador divergente SPH, para o termo $\nabla \cdot \mathbf{v}^*$, a qual, considerando as condições de fronteiras devidas, não é capaz de fornecer um campo resultante que satisfaça a condição de compatibilidade descrita pela equação . Esse comportamento acaba por provocar um fluxo artificial de massa no sentido exterior ao domínio, prejudicando a simulação.

Para que a condição de compatibilidade fosse satisfeita, deveria ser verdade que $\int_{\Omega} f d\Omega = 0$, o que não ocorre. Desta maneira, para se resolver o problema, de caráter numérico, é adicionado um fator *b* à integral, tal que:

$$\int_{\Omega} (f+b)d\Omega = 0.$$
 (6.42)

Sabe-se que $f = \nabla \cdot \mathbf{v}^*$, então, o fator *b*, neste caso, refere-se à uma alteração no operador SPH responsável pela aproximação de *f*. Para tanto, seja $\nabla \cdot \mathbf{v}^* \approx D_{SPH}(\mathbf{v}^*)$, onde D_{SPH} é o operador divergente SPH. Desta maneira, para que o somatório dos valores do divergente em cada partícula, o que equivale à integral de *f*, fosse o mais próximo de zero, foi adicionado ao operador SPH uma subtração do valor medio do divergente, o que, neste caso, refere-se ao fator *b*, ou seja,

$$\nabla \cdot \mathbf{v}^* \approx D_{SPH} - \frac{D_{SPH}}{N},\tag{6.43}$$

impedindo a possibilidade de um fluxo de massa para fora do domínio, e com isso, tornando as simulações mais estáveis.

6.4 Correção de posição no ISPH

Sendo um método puramente lagrangeano, no ISPH as partículas movimentam-se livremente, de acordo com as propriedades físicas inerentes a elas. Neste sentido, em determinados tipos de simulações utilizando ISPH, o movimento das partículas através das linhas de corrente pode gerar distorções de espaçamento, seja no sentido de alongamento ou compressão, o que pode tornar-se ainda mais grave em casos onde são formadas regiões de agrupamento de partículas. Este fenômeno é observado principalmente na solução de escoamentos com altos números de Reynolds, devido ao elevado movimento inercial relacionado. Entre os problemas provocados, pode ser destacado o enfraquecimento das interações entre partículas quando estas estão muito próximas, fato diretamente ligado às características da função núcleo (seção 3.4). Além disso, a distribuição não uniforme de partículas poderá prejudicar a convergência dos métodos de solução de sistemas lineares utilizados.

O fenômeno da aglomeração de partículas no ISPH pode também ser tratado através da aplicação de técnicas específicas que atuem na distribuição de partículas. Em Chaniotis et al. [17], as partículas tem suas posições periodicamente reiniciadas com base em uma malha uniforme, e os valores de suas variáveis interpolados para as novas posições. Uma desvantagem desta técnica, é o fato de o sistema perder a característica de totalmente livre de malhas. Em [95] é aplicado um deslocamento artificial sobre as posições das partículas, o qual baseia-se na variação da quantidade de partículas. Uma estratégia semelhante foi introduzida por Xu *et al.* [111], onde é aplicado um deslocamento artificial e posteriormente as variáveis hidrodinâmicas tem seus valores corrigidos através de um esquema baseado em série de Taylor. A técnica apresentada por Xu apresenta a vantagem de manter as características do método SPH como um método livre de malhas, além de, através da correção das variáveis hidrodinâmicas, minimizar os erros devido à alteração das posições das partículas. Na figura 6.2 é apresentado resultados para o problema dos vórtices de Taylor-Green simulado com o ISPH-DF sem e com a aplicação da técnica de deslocamento artificial, que será denominada aqui de ISPH-DFS (do inglês, *SPH density-free with shifting particle position*).



Figura 6.2: Problema de agrupamento de partículas em altos Reynolds usando o ISPH.

No ISPH-DFS, o deslocamento artificial aplicado sobre as partículas é feito de acordo com a seguinte expressão:

$$\delta \mathbf{x}_i = C \alpha R_i, \tag{6.44}$$

onde C é uma constante, que pode ter seu valor definido entre 0.01 e 0.1, α a magnitude do deslocamento, onde $\alpha = U_{max}\Delta t$, com U_{max} sendo a velocidade máxima do sistema, e R_i é o vetor de deslocamento dado por:

$$R_i = \sum_{j=1}^{M_i} \frac{\bar{\mathbf{x}}_i}{\|\mathbf{x}_{ij}\|^2} \mathbf{n}_{ij},\tag{6.45}$$

onde M_i é a quantidade de partículas vizinhas da partícula *i* e \mathbf{n}_{ij} , neste caso, é o vetor distância unitário entre as partículas *i* e *j*. O valor de $\bar{\mathbf{x}}_i$, referente à média do espaçamento das partículas vizinhas da partícula *i*, é definido como:

$$\bar{\mathbf{x}}_{i} = \frac{1}{M_{i}} \sum_{j=1}^{M_{i}} \|\mathbf{x}_{ij}\|.$$
(6.46)

Após a aplicação do deslocamento artificial sobre as partículas do sistema, é então realizada a correção das variáveis hidrodinâmicas através de um esquema baseado em série de Taylor, da seguinte forma:

$$\phi_i' = \phi_i + \delta \mathbf{x}_{ii'} \cdot (\nabla \phi)_i + \mathcal{O}(\delta \mathbf{x}_{ii'}^2)$$
(6.47)

onde ϕ é a variável a ser corrigida, e $\delta \mathbf{x}_{ii'}$ é o vetor distância entre a antiga posição \mathbf{x}_i e a posição deslocada \mathbf{x}'_i pela equação 6.44. O método possui erro da ordem de $O(\delta \mathbf{x}^2_{ii'})$. O algoritmo 6 apresenta com detalhes o funcionamento do ISPH-DFS.

Algoritmo 6: Simulação de escoamentos através do método ISPH-DFS. 1 Iniciar sistema; 2 repita Buscar partículas vizinhas (seção 4.4); 3 para cada partícula i faça 4 Calcular posição intermediária (equação 6.2); 5 para cada partícula i faça 6 Calcular velocidade intermediária (equação 6.4); 7 Obter pressão através da solução da equação de Poisson (algoritmo 5); 8 para cada partícula i faça 9 Calcular gradiente de pressão (equação 5.7); 10 para cada partícula i faça 11 Recuperar a velocidade livre de divergência (equação 6.9); 12 Integrar posição (equação 6.10); 13 Aplicar deslocamento artificial nas partículas (equação 6.44); 14 Corrigir o campo de velocidades das partículas (equação 6.47); 15 Atualizar Δt através de condição CFL; 16 $t = t + \Delta t;$ 17 18 até $t < t_{total}$;

6.5 Considerações parciais

Neste capítulo foram apresentados os principais métodos ISPH, baseados no método da projeção, abordando vantagens e desvantagens destes, entre as quais destacam-se fatores como o custo computacional, a acurácia, e a prevenção de instabilidades. Diante destes fatores, e no sentido de aplicação de um método que mantenha as características de totalmente livre de malhas, o ISPH-DF apresenta-se como uma alternativa mais interessante em face aos métodos ISPH-DI e ISPH-DFDI, uma vez estes últimos demandam cálculos adicionais envolvendo a variação da densidade de partículas. Entretanto, o ISPH-DF possui a desvantagem de, quando aplicado à problemas com altos números de Reynolds, poder apresentar o fenômeno de aglomeração de partículas, o qual pode resultar em instabilidades numéricas. Por outro lado, a utilização de técnicas específicas para o tratamento da distribuição de partículas podem resolver este tipo de problema, como é o caso da técnica de deslocamento artificial introduzida por Xu *et al.* [111]. Neste sentido, a utilização do método ISPH-DFS, o qual refere-se ao método ISPH-DF com a utilização da técnica de deslocamento artificial, pode ser considerada uma boa alternativa para a solução de diversos fenômenos de mecânicas de fluidos, apresentado resultados comparáveis a de outros métodos consagrados.

Capítulo 7

Aplicação do ISPH em escoamentos newtonianos monofásicos

7.1 Introdução

Neste trabalho foi desenvolvido um código baseado no ISPH-DFS. Embora o método ISPH já possua diversas análises que mostram sua eficiência e eficácia em relação à solução de escoamentos newtonianos monofásicos, como pode ser visto em [52, 111], a realização do processo de verificação e validação é bastante importante frente à concepção de um novo código. Desta maneira, foram realizados uma série de experimentos para diferentes tipos de problemas, governados pelas equações de Navier-Stokes, e clássicos da dinâmica de fluidos. Em todos os testes realizados foi utilizado o método ILU com pré-condicionador GMRES para a solução da equação de Poisson, relativa ao campo de pressões. Além disso, em todas as simulações foi utilizado o valor de C = 0.09, relativo à técnica de deslocamento artificial para a redistribuição de partículas.

Neste capítulo são apresentados a descrição e os resultados obtidos com o código desenvolvido para os seguintes problemas: vórtices de Taylor-Green, amortecimento de vórtice, escoamento de Hagen-Poiseuille e cavidade impulsionada.

7.2 Vórtices de Taylor-Green

Os vórtices de Taylor-Green tratam-se de um escoamento newtoniano incompressível que descreve campos de velocidades no formato de vórtices opostos entre si, dissipados ao longo do tempo devido à ação da viscosidade, sendo analiticamente descritos através das seguintes expressões:

$$u(x, y, t) = -Ue^{bt} \cos(2\pi x) \sin(2\pi y),$$
(7.1)

$$v(x, y, t) = Ue^{bt} \sin(2\pi x) \cos(2\pi y),$$
 (7.2)

onde U é a velocidade característica, e b é a taxa de decaimento da velocidade, tal que:

$$b = \frac{-8\pi^2}{Re},\tag{7.3}$$

sendo o número de Reynolds definido como $Re = UL/\nu$, onde L é o comprimento característico e ν a viscosidade cinemática. É importante observar que o perfil do campo de velocidades descrito pelos vórtices de Taylor-Green é sempre o mesmo para todos os quadrados unitários $[a, a + 1] \times [b, b + 1]$ com $a, b \in I$.

Numericamente, a representação dos vórtices de Taylor-Green no ISPH-DFS pode ser realizada através da imposição inicial do campo de velocidades descrito pela equação 7.2, considerando t = 0. Além disso, devem ser impostas condições de contorno periódicas. Neste sentido, foram realizadas simulações através do código desenvolvido, para valores de Re = 10, Re = 100 e Re = 1000, considerando unitário $[0, 1] \times [0, 1]$ e uma configuração de 40×40 partículas.

Os resultados obtidos foram comparados aos resultados analíticos, monstrando-se consideravelmente satisfatórios. A figura 7.1 mostra o perfil da velocidade e da pressão, em uma simulação com Re = 100, onde é possível notar que o método utilizado mantém uma boa distribuição de partículas ao longo de toda a simulação. Na figura 7.2 são apresentados os gráficos para os perfis de velocidade vertical e horizontal, sucessivamente em x = 0.5 e y = 0.5. Por outro lado, na figura 7.3 é apresentado o decaimento da velocidade máxima. É importante destacar que para Re = 1000, são observadas algumas oscilações, entretanto, este comportamento é previsto para altos valores de Reynolds [111].

7.3 Amortecimento de vórtice

O problema denominado amortecimento de vórtice (do inglês *spin-down vortex*), consiste na simulação de um escoamento confinado onde a velocidade inicial do fluido com respeito a um vórtice induzido é continuamente dissipada, tanto pelas características inerentes ao fluido, devido à viscosidade, quanto pelas relações físicas entre o fluido e as paredes. Numericamente, no método ISPH-DFS, o vórtice induzido pode ser representado pela imposição de um campo de velocidades inicial, dado por

7.3 - Amortecimento de vórtice



(d) Campo vetorial de velocidades.

Figura 7.1: Resultados obtidos para o problema dos vórtices de Taylor-Green com Re = 100, simulação através do método ISPH-DFS com 40×40 partículas em t = 0.0, 0.25, 0.75 e 1.0: velocidade na direção x (a), velocidade na direção y (b), campo de pressões p (c), e campo vetorial de velocidades **v** (d).



Figura 7.2: Comparações dos resultados obtidos através do método ISPH-DFS - - com os resultados analíticos — para o problema vórtices de Taylor-Green: perfil da velocidade vertical em x = 0.5 ((a), (c) e (e)), e perfil da velocidade horizontal em y = 0.5 ((b), (d) e (f)).



Figura 7.3: Comparações dos resultados obtidos - - com os resultados analíticos — para o problema Vórtices de Taylor-Green: decaímento da velocidade máxima.

$$u(x, y, t) = U(y - 0.5),$$

$$v(x, y, t) = U(0.5 - x),$$
(7.4)

o qual é imposto sobre todas as partículas, distribuídas em um quadrado unitário. Além disso, é importante destacar que são impostas condições de não-deslizamento para todo o contorno, ou seja, a velocidade na parede é nula. Para a pressão são impostas condições de Neumann, tal que $\frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} = 0$. Nos experimentos realizados, as imposições das condições de contorno foram aplicadas utilizando partículas fantasmas (seção 4.6).

Neste sentido, foram realizados experimentos com o código ISPH-DFS para uma configuração de 40×40 partículas, e diferentes valores de viscosidade, resultando em Re = 10, Re = 100 e Re = 1000, onde

$$Re = \frac{UL}{\nu},\tag{7.5}$$

sendo que para todos os experimentos realizados foram utilizados U = 1 e L = 1.

Comparações numéricas tomando-se como referência os resultados apresentados em [111], onde é introduzido o método ISPH-DFS, foram feitas. A figura 7.4 apresenta o perfil da velocidade e do campo de pressões para uma simulação com Re = 10, além de apresentar a configuração das partículas ao longo da simulação. Por outro lado, a Figura 7.7 apresenta o decaimento da velocidade máxima ao longo do tempo. É possível notar que a solução obtida está de acordo com o esperado. Particularmente para Re = 1000 este decaimento apresenta oscilações, porém este comportamento é previsto em [111], o qual apresenta resultados semelhantes a este. Comparações para os perfis de velocidade e pressão também são apresentadas, confirmando concordância dos resultados obtidos com os da literatura (figuras 7.5 e 7.6).

7.4 Escoamento de Hagen-Poiseuille

Um dos poucos escoamentos nos quais as equações de Navier-Stokes admitem solução analítica é o escoamento de Hagen-Poiseuille. Este fato o torna consideravelmente interessante para o processo de validação de métodos numéricos. De forma geral, este problema consiste em um escoamento laminar e em regime permanente através de um tubo, o qual apresenta um perfil de velocidades parabólico em relação ao eixo transversal à direção do escoamento (figura 7.8). Para fins numéricos, este problema pode ser abstraído como o fluxo de um fluido através de um canal bidimensional de dimensões $C \times L$, onde C é o comprimento e L a largura, tal que nas paredes inferior e superior são impostas condições de não-deslizamento, enquanto nas paredes laterais são impostas condições de entrada e saída de fluido, conforme pode ser observado na tabela 7.1. É importante destacar que na parede de entrada a velocidade na direção do deslocamento é definida como a velocidade analítica, obtida



(d) Campo vetorial de velocidades.

Figura 7.4: Resultados obtidos para o problema dos vórtices de amortecimento de vórtice com Re = 10 para os tempos t = 0.0s, 0.25s, 0.75s e 1.0s. Simulação através do método ISPH-DFS com 40×40 partículas: velocidade na direção x (a), velocidade na direção y (b), campo de pressões p (c), e campo vetorial de velocidades **v** (d).



Figura 7.5: Comparações dos resultados obtidos através do ISPH-DFS — com os resultados de [111] para o problema Amortecimento de Vórtice: perfil da velocidade horizontal em y = 0.5 (coluna esquerda), e perfil da velocidade vertical em x = 0.5 (coluna direita).



Figura 7.6: Comparações dos resultados obtidos — com os resultados de [111] para o problema Amortecimento de Vórtice: perfil da pressão em x = 0.5.



Figura 7.7: Decaimento da velocidade máxima ao longo do tempo para Amortecimento de Vórtice com Re = 10, onde \triangle : resultados de [111] e —: os resultados obtidos com o código desenvolvido.



Figura 7.8: Escoamento de Hagen-Poiseuille: (a), e (b) condições de fronteira.

através da resolução das equações de Navier-Stokes para o problema, onde, considerando uma vazão Q constante, é dada por:

$$u(y) = \frac{6}{L^2}(yL - y^2),$$
(7.6)

e, além disso,

$$\frac{\partial p}{\partial x} = -12\frac{\nu}{L}.\tag{7.7}$$

Esquerda:	$\partial u/\partial \mathbf{n} = 0$	v = 0	$\partial p/\partial \mathbf{n} = 0$
Direita:	$\partial u/\partial \mathbf{n} = 0$	v = 0	p = 0
Inferior:	u = 0	v = 0	$\partial p/\partial \mathbf{n} = 0$
Superior:	u = 0	v = 0	$\partial p/\partial \mathbf{n} = 0$

Tabela 7.1: Condições de fronteira impostas na simulação do escoamento de Hagen-Poiseuille para velocidade $\mathbf{v} = (u, v)$ e pressão p.

Na simulação de escoamentos que apresentam entrada e saída de fluido, no qual se encaixa o escoamento de Hagen-Poiseuille, a redistribuição de partículas obtida através da técnica de deslocamento artificial requer especial atenção nas regiões ligeiramente próximas às fronteiras de entrada e saída. A razão disso está associada ao fato de que, quando a partícula se desloca no sentido do escoamento, durante certos períodos de tempo, serão observadas regiões de menor densidade de partículas. Ao detectar tais regiões, a técnica de deslocamento artificial aplicará uma correção, movendo a partícula no sentido contrário à direção do escoamento, a fim de diminuir a variação da densidade de partículas, o que, neste caso, é indesejado. Uma maneira simples de prevenir este fenômeno é limitar a região de atuação da técnica de deslocamento artificial, adicionando um filtro que não permita correções nas regiões próximas às fronteiras de entrada e saída de fluido.

Através do código ISPH-DFS desenvolvido e considerando as restrições relativas às condições de fronteira, foram realizados experimentos para valores de Reynolds Re = 1, 10 e 100. Para tanto foram utilizadas 4800 partículas nas simulações, para uma configuração $L \times 3L$, com L = 1. A figura

7.9 apresenta comparações para o perfil da pressão na direção x e para a velocidade u em seção reta em x = 2.5.

7.5 Cavidade impulsionada

O problema cavidade impulsionada (do inglês *Lid-driven cavity*) é um dos experimentos clássicos na verificação de métodos numéricos para mecânica dos fluidos. Este problema consiste de um escoamento confinado em um quadrado unitário, onde a velocidade na direção x na parede superior é constante e diferente de zero, ao longo de toda a simulação. Nas demais paredes verifica-se condição de não deslizamento, ou seja, a velocidade é nula. Diante disso, o fluido passa a descrever um movimento circular, semelhante a um misturador, até chegar em um estado estacionário, onde, a partir deste ponto, não há mudança considerável no perfil do campo de velocidades formado.

Para os experimentos realizados, foram impostas condições de fronteira de Neumann para a pressão e Dirichlet para a velocidade, sendo que, para a parede superior, que possui velocidade constante u_0 na direção x, a velocidade u_f , referente à velocidade na direção x das partículas fantasmas, foi definida como $u_f = 2u_0 - u_p$, onde u_p é a velocidade na direção x das partículas de fluido.

Foram realizados experimentos para Re = 100 e Re = 400, e comparados com os resultados apresentados em [39], para domínios com distribuição de partículas de 40×40 , 80×80 e 160×160 . É possível observar que com o refinamento, os resultados apresentam-se melhores, o que é previsto em [111]. Para valores de Reynolds altos (Re > 1000), foram verificadas instabilidades nas regiões próximas às quinas superiores.

7.6 Considerações parciais

Neste capítulo foram apresentados resultados obtidos através da utilização do método ISPH-DFS para problemas clássicos em dinâmica dos fluidos, relacionados à escoamentos newtonianos monofásicos. Os resultados obtidos foram comparados com resultados analíticos, nos casos em que isso é possível, e com resultados da literatura, mostrando que o método ISPH-DFS é suficientemente robusto para tais tipos de aplicações. Além disso, através dos testes realizados, também pôde-se verificar que a técnica de deslocamento artificial proporciona uma boa distribuição de partículas nas diferentes simulações realizadas. Porém, para valores altos de Reynolds o método mostrou-se sensível, o que o torna limitado à uma classe de problemas mais restrita.



Figura 7.9: Comparações dos resultados obtidos \triangle com os resultados analíticos — para o problema Escoamento de Hagen-Poiseuille para t = 5.0s: perfil da pressão em y = 0.5 (coluna esquerda), e perfil da velocidade u em x = 2.5 (coluna direita).



Figura 7.10: Comparações de resultados para o perfil de velocidade horizontal no problema da cavidade impulsionada, sendo -.- 40×40 partículas, - - 80×80 partículas, - - 160×160 partículas e \triangle resultados de [39].

Capítulo 8

Novos métodos para escoamentos multifásicos com ISPH

8.1 Introdução

Os escoamentos multifásicos englobam uma série de problemas de grande interesse científico e industrial, tais como o estudo de misturas entre polímeros, emulsões, fenômenos atmosféricos e aplicações características da industria do petróleo. Entretanto, a compreensão e a manipulação desta classe de escoamentos, devido a sua complexidade, torna necessária a aplicação de métodos numéricos para a sua resolução. Todavia, a concepção de mecanismos numéricos para a aplicação em escoamentos multifásicos ainda é um dos grandes desafios da mecânica dos fluidos computacional, tanto pela aproximação das equações que governam este tipo de problema, quanto pela necessidade do tratamento de fenômenos adicionais envolvidos, tais como o cálculo da tensão superficial e o tratamento da interface entre fluidos.

Diversos métodos numéricos têm sido explorados em aplicações para escoamentos multifásicos, tais como refinamento adaptativo de malhas [15], Level-Set [102, 107, 99] e Front-tracking [81, 100]. Além destes, o método SPH também tem sido utilizado como forma de solução de escoamentos multifásicos. Um dos trabalhos pioneiros a aplicar o método SPH para escoamentos multifásicos foi apresentado por Colagrossi [23], onde é introduzida uma alteração nos operadores SPH, sendo utilizado o esquema WCSPH como solução. Por outro lado, Shadloo *et al.* [94] descreve uma aplicação do ISPH para o problema da instabilidade de Rayleigh-Taylor, onde o método é diretamente aplicado, sendo o cálculo da tensão superficial realizado através de uma função-cor, descrita com detalhes na seção 8.3. Por outro lado, Shao [96] introduz um esquema ISPH para o tratamento de escoamentos multifásicos onde o método é aplicado de maneira desacoplada, em cada uma das fases, sendo

Capítulo 8

posteriormente acoplado, aplicando-se pressão e tensão de cisalhamento através da interface, o que proporciona bons resultados, porém com um custo computacional consideravelmente maior que o esquema tradicional. Em Zainali *et al.* [112] é destacado o problema da perturbação de interface, decorrente da aplicação do método ISPH associado à técnicas de correção de distribuição de partículas, sendo proposta a utilização de funções núcleo diferentes para os operadores SPH relacionados ao cálculo da tensão superficial com relação aos demais. Embora a estratégia tenha um acréscimo de custo computacional negligenciável, os resultados apresentados no trabalho mostram que para a técnica ter efeito é necessária a utilização de uma grande quantidade de partículas, o que pode ser inviável em determinados casos.

Neste capítulo serão abordadas questões relacionadas à aplicação do método ISPH para o tratamento de escoamentos multifásicos, onde são destacadas a utilização de técnicas específicas para o tratamento da interface entre fluidos, através de dois modelos distintos desenvolvidos neste trabalho: o primeiro modelo baseado em uma correção através de série de Taylor associado com a utilização da técnica level-set, e o segundo modelo através de uma estratégia front-tracking. Além disso, também será realizada uma discussão a cerca do cálculo da tensão superficial no SPH.

8.2 Tratamento de interface no ISPH

8.2.1 Visão geral

A utilização do método ISPH como ferramenta de resolução de problemas de mecânicas de fluidos torna necessária, de forma geral, a utilização de técnicas auxiliares com propósitos de manutenabilidade de uma boa distribuição de partículas ao longo de toda a simulação. Existem dois esquemas principais para resolver este problema, os quais trabalham com as seguintes estratégias: remapeamento de partículas com base em uma malha uniforme [17], e a aplicação de deslocamento artificial com base na variação da densidade de partículas [111]. As características apresentadas pela técnica introduzida por Xu et al. [111], e os resultados obtidos através dela, a tornam uma melhor alternativa em relação a técnica de remapeamento, a qual prejudica as características do SPH de método totalmente livre de malhas. Entretanto, quando aplicado em escoamentos multifásicos, a técnica de deslocamento artificial pode acabar por provocar a interpenetração de partículas através da interface entre fluidos, ou seja, partículas de uma determinada fase se encontrarão erroneamente imersas na outra fase. Este fenômeno ocorre devido à possibilidade da interface encontrar-se em uma região com alto movimento inercial, onde há uma considerável chance de formação de áreas de aglomeramento ou áreas de baixa densidade de partículas, assim, quando as partículas são artificialmente deslocadas podem passar a se encontrar em uma região fora de sua interface. A figura 8.1 mostra em detalhes uma situação de uma configuração onde pode ser observada a interpenetração de partículas através da interface, comparada à situação onde as partículas tem suas propriedades corrigidas em relação à interface.

A seguir são apresentadas duas técnicas desenvolvidas nestas trabalho como o propósito de tratar o



Figura 8.1: Detalhe da interpenetração de partículas em escoamentos multifásicos: (a) configuração problemática, (b) configuração corrigida.

problema da interpenetração de partículas através da interface. Tais técnicas baseiam-se na utilização de informações extraídas da interface para a construção de funções de avaliação level-set, sendo a primeira delas baseada em uma correção através de série de Taylor, e a segunda através da utilização de um esquema front-tracking.

8.2.2 Tratamento de interface através de série de Taylor

A técnica de deslocamento artificial introduzida por Xu *et al.* prevê a correção das posições das partículas ao longo do tempo, de modo que estas apresentem uma distribuição relativamente uniforme, sendo aplicada uma correção das variáveis hidrodinâmicas baseada em série de Taylor, em particular, no campo de velocidades. Entretanto, como anteriormente destacado, este deslocamento artificial pode prejudicar a interface entre fluidos. Para minimizar este problema, é proposto aqui um tratamento da interface baseado na utilização de uma função level-set, de modo a tornar possível a realização de avaliações sobre a posição das partículas em relação à interface. A técnica será denominada aqui de ITBLS (do inglês, *interface treatment based on level-set function*).

A idéia principal da técnica é definir uma função level-set de tal modo que os zeros desta função encontrem-se exatamente sobre a interface entre fluidos, e os valores positivos representem uma determinada fase, enquanto os negativos representem a outra fase. Uma maneira de construir tal função é utilizar uma função distância com sinal. As informações de interface podem ser tanto consideradas como entrada do problema, ou serem obtidas através de técnicas específicas de detecção de interface. Em Marrone *et al.* [64] é introduzido um esquema de detecção de superfície-livre, baseado em uma análise sobre os autovalores da matriz de renormalização, calculada como:

$$B(\mathbf{x}_i) = \left[\sum_{j} \nabla W_{ij} \otimes \frac{m_j}{\rho_j} \mathbf{x}_{ji}\right]^{-1},$$
(8.1)

onde $\mathbf{x}_{ji} = \mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i$. De acordo com [64], o autovalor mínimo da matriz $B(\mathbf{x}_i)$, denominado aqui de λ , está diretamente relacionado com a distribuição de partículas na vizinhança de *i*, de modo que, quando a partícula encontra-se totalmente imersa no fluido, λ tende para 1, enquanto que, quando a partícula está próxima de uma região de borda, este valor tende para 0. A partir disso, é possível, através de uma avaliação sobre os autovalores mínimos associados a cada partícula, definir quais são àquelas que encontram-se em regiões próximas à borda.

Através da matriz de renormalização (equação 8.1), também é possível se aproximar o valor da normal unitária à superfície **n**, a qual é de grande importância na construção da função level-set. Neste sentido, a normal unitária pode ser aproximada como:

$$\mathbf{n}_i = \frac{\nu_i}{|\nu_i|},\tag{8.2}$$

onde,

$$\nu_i = -B(\mathbf{x}_i) \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \nabla W_{ij}.$$
(8.3)

Após o cálculo da normal, é realizado um segundo passo, onde é feita uma varredura sobre uma região à frente das partículas, seguindo a direção normal, de acordo com o apresentado na figura 8.2. Esta varredura é realizada com o propósito de se definir de maneira mais apurada as partículas que pertencem à uma região envolvente à interface.

O esquema de detecção de superfície livre proposto por Marrone *et al.* pode ser adaptado para escoamentos multifásicos, considerando-se uma das fases como referência e negligenciando as partículas da outra fase. Uma forma mais precisa de se realizar a detecção de interface, é realizar a detecção para uma fase, e em seguida para a outra fase, cruzando as informações obtidas. Além desta estratégia, a detecção de interface, ou mesmo de superfície livre, pode ser realizada utilizando uma função cor, descrita com detalhes na seção 8.3.

A partir da informação de posição das partículas de interface, é possível se construir a função level-set sobre as partículas de fluido, através da seguinte expressão:


Figura 8.2: Esquema de varredura de vizinhança para determinação de partícula em região de superfície livre.

$$\phi_i = (x_i - x_b)\mathbf{n}_x + (y_i - y_b)\mathbf{n}_y, \tag{8.4}$$

onde $\mathbf{x}_i = (x_i, y_i)$, $\mathbf{x}_b = (x_b, y_b)$ refere-se à partícula de borda mais próxima à partícula *i*, e $\mathbf{n} = (\mathbf{n}_x, \mathbf{n}_y)$ é a normal unitária da partícula de borda *b*.

A cada passo de simulação, as partículas alteram sua posição, de acordo com as propriedades inerentes ao problema. Neste sentido, a configuração da interface entre fluidos é continuamente modificada. A função level-set definida representa apenas a configuração inicial da interface, logo, torna-se necessário que esta seja atualizada, respeitando a dinâmica do sistema. Esta correção pode ser realizada utilizando a mesma estratégia usada por Xu *et al.* [111] para a correção de partículas hidrodinâmicas, a qual utiliza um esquema baseado em série de Taylor que usa informações do deslocamento artificial aplicado às partículas. Desta maneira, a função ϕ pode ser corrigida como:

$$\phi_i' = \phi_i + \delta \mathbf{x}_{ii'} \cdot (\nabla \phi)_i, \tag{8.5}$$

onde *i'* refere-se à partícula *i* em sua posição corrigida, e $\delta \mathbf{x}_{ii'}$ é o deslocamento artificial aplicado à partícula *i*. O termo $\nabla \phi$ pode ser aproximado utilizando o operador SPH gradiente diferença:

$$(\nabla\phi)_i = \sum \frac{m_j}{\rho_j} (\phi_j - \phi_i) \nabla_i W_{ij}.$$
(8.6)

Com base na função ϕ , devidamente corrigida em cada passo da simulação, é possível realizar uma avaliação a cerca da posição das partículas de fluido em relação à interface. Para exemplificar este processo, sejam dois fluidos A e B, onde para o fluido A são associados valores positivos e para o fluido B valores negativos. Neste sentido, é feito um teste sobre todas as partículas de fluido, caso uma partícula do fluido A possua valor de ϕ negativo, significa que esta está fora de sua fase, ou seja, interpenetrou a interface. O mesmo é feito com as partículas do fluido B. A partir disso, quando uma partícula é detectada como fora de sua fase, ela tem suas propriedades alteradas, de modo a pertencer à outra fase. Entretanto, é importante observar que ao fazer esta alteração torna-se necessário uma redistribuição da massa entre as partículas, de modo a não afetar a massa total de cada fase. A técnica é descrita em detalhes no algoritmo 7.

Algoritmo 7: Simulação de escoamentos multifásicos através do método ISPH-DFS com IT-						
BL	S					
ı In	niciar sistema;					
2 C	onstruir função level-set;					
3 re	epita					
4	Buscar partículas vizinhas (seção 4.4);					
5	para cada partícula i faça					
6	Calcular posição intermediária (equação 6.2);					
7	para cada partícula i faça					
8	Calcular velocidade intermediária (equação 6.4);					
9	Obter pressão através da solução da equação de Poisson (algoritmo 5);					
10	para cada partícula i faça					
11	Calcular gradiente de pressão (equação 5.7);					
12	para cada partícula i faça					
13	Recuperar a velocidade livre de divergência (equação 6.9);					
14	Integrar posição (equação 6.10);					
15	Aplicar deslocamento artificial nas partículas (equação 6.44);					
16	Corrigir o campo de velocidades das partículas (equação 6.47);					
17	Corrigir a função level-set (equação 8.5);					
18	Avaliar posição das partículas em relação à interface;					
19	Atualizar Δt através de condição CFL;					
20	$t = t + \Delta t;$					
21 até $t < t_{total}$;						

8.2.3 Tratamento de interface através de front-tracking

Baseado na idéia clássica do método front-tracking, foi desenvolvido neste trabalho um esquema para o tratamento de interface no ISPH, denominado aqui de ITBFT (do inglês, *interface treatment based on front-tracking*). De um modo geral, em sua forma clássica, o método front-tracking consiste de um método euleriano-lagrangeano, onde, através de um domínio lagrangeano, a interface é definida e advectada ao longo da simulação, delimitando a fase dispersa, enquanto a fase contínua é representada através de um domínio euleriano [106]. As interações através dos modelos são realizadas através de interpolações.

O esquema ITBFT consiste na utilização de um conjunto finito de partículas marcadoras que delimitam a interface entre fluidos, e atuam como referência na determinação de qual fase uma partícula de fluido pertence. Neste sentido, é necessário seguir uma sequência de passos, relacionados tanto à interação das partículas marcadoras com as partículas de fluido, quanto à própria advecção das partículas marcadoras ao longo da simulação.

No tratamento de interface baseado em front-tracking, inicialmente é necessário determinar a posição das partículas marcadoras, as quais devem encontrar-se exatamente sobre a interface, preferencialmente espaçadas de maneira igual entre si. Computacionalmente, as partículas marcadoras podem ser representadas através de uma lista encadeada, o que pode ser bastante útil no processo de refinamento.

A partir da determinação inicial das posições das partículas marcadoras, em cada passo de simulação, após a realização dos cálculos referentes ao escoamento do fluido em si, são realizadas os seguintes passos:

- Cálculo do vetor normal unitário;
- Construção função level-set;
- Verificação das partículas de fluidos;
- Advecção das partículas marcadoras de interface;
- Teste de refinamento da malha front-tracking.

Uma maneira de aproximar-se o vetor normal unitário nas partículas marcadoras é através de um esquema de cálculo baseado em três pontos. Neste esquema, o cálculo da normal para uma determinada partícula marcadora é realizado levando-se em conta a posição desta partícula e de suas vizinhas adjacentes, as quais deverão formar um triângulo, conforme é apresentado na figura 8.3. A partir disso, calcula-se o ponto médio entre as vizinhas adjacentes, e consequentemente o vetor distância entre a partícula marcadora em questão e o ponto médio calculado, denominado aqui de \mathbf{n}_c , sendo que o vetor normal será igual à norma deste vetor, ou seja,

$$\mathbf{n} = \frac{-\mathbf{n}_c}{|\mathbf{n}_c|}.\tag{8.7}$$

Caso os três pontos adjacentes utilizados para o cálculo da normal unitária sejam co-lineares, esta é então definida como um vetor nulo. O problema desta técnica é a necessidade de uma avaliação adicional sobre as partículas de fluidos vizinhas, a fim de se definir a direção do vetor normal, ou seja, para se definir a direção da normal considera-se a configuração do fluido e percorre-se a vizinhança da partícula marcadora, levando-se em conta apenas uma fase, de modo com que o vetor normal aponte para a direção externa a esta fase.



Figura 8.3: Ilustração sobre o cálculo da normal através de um esquema baseado em três pontos.

Uma alternativa mais simples e direta de obter-se o vetor normal nas partículas marcadoras é utilizar as próprias informações de conectividade entre as partículas adjacentes. Para tal basta calcular-se o vetor distância entre uma partícula marcadora e sua vizinha seguinte, e em seguida rotacionar este vetor em um ângulo de 90° na direção externa ao fluido definido como referência, normalizando-o. Este cálculo deve ser feito para todas as partículas marcadoras, sendo que para a última partícula da lista, faz-se o cálculo utilizando a vizinha anterior. Embora esta técnica, em sua forma mais simples, seja restrita à problemas bidimensionais, ela é bastante eficiente e possui uma baixa complexidade, da ordem O(n), sendo n a quantidade de partículas marcadoras. A figura 8.4 apresenta uma ilustração de sua aplicação para um problema genérico.

Após o cálculo do vetor normal para cada partícula marcadora, é construída uma função level set ϕ para as partículas de fluido, baseada na configuração da interface. Neste contexto, é importante destacar que o papel da função level-set é apenas de servir como referência ao processo de verifi-



Figura 8.4: Ilustração sobre o cálculo da normal através de rotação do vetor distância entre partículas adjacentes.

cação da posição das partículas em relação à interface. A função ϕ é construída tomando-se como base as relações de posição entre as partículas de fluido e as partículas marcadoras, através de uma função distância com sinal, de modo que, para uma determinada partícula de fluido *i* com posição (x_i, y_i) , encontra-se a partícula marcadora *m* mais próxima, com posição (x_m, y_m) e vetor normal $\mathbf{n} = (\mathbf{n}_x, \mathbf{n}_y)$, e calcula-se:

$$\phi_i = \mathbf{n}_x(x_i - x_m) + \mathbf{n}_y(y_i - y_m). \tag{8.8}$$

Para efeitos de minimização da quantidade de cálculos envolvidos, a função ϕ pode ser calculada apenas em uma região de vizinha à interface, delimitada por kH, sendo que, para as regiões externas à esta faixa, pode ser associado um valor positivo ou negativo, conforme à fase a qual a partícula de fluido pertença. Além disso, é importante destacar que as relações de vizinhança podem ser obtidas através da própria estrutura de busca utilizada no SPH.

Após a construção da função ϕ nas partículas de fluidos, é possível realizar um teste de verificação sobre a possibilidade de interpenetração sobre a interface. Este teste é equivalente ao teste de interpenetração realizado na técnica ITBLS.

Finalmente, após a construção da função ϕ e a verificação das partículas de fluidos, as partículas marcadoras de interface são então advectadas. Para tal, é realizada uma interpolação sobre o campo de velocidades do fluido, sendo então associado um valor de velocidade a cada partícula marcadora. Como a correção de posição aplicada sobre as partículas de fluido não interfere os valores do campo de

velocidades, uma vez que é realizada uma correção sobre as variáveis hidrodinâmicas (seção 6.4,logo não haverá perturbação na interface, havendo apenas o erro de interpolação e integração. Os detalhes da técnica aplicada no método ISPH-DFS são apresentados no algoritmo 8.

Além dos passos descritos anteriormente, é importante destacar também que, durante a advecção da malha de front-tracking, dois pontos adjacentes podem ficar muitos distantes, o que acaba por prejudicar a descrição da interface entre fluidos. Para prevenir este problema é necessário realizar um refinamento periódico. Uma forma de realizar isso é verificando-se a distância entre dois pontos adjacentes, e quando estes apresentarem uma distância maior que um valor pré-defenido, insere-se um novo ponto entre eles. A mesma idéia é utilizada para situações onde tem-se pontos extremamente próximos, onde, neste caso, exclui-se um dos pontos. Também é possível utilizar-se técnicas mais refinadas de aproximação de curvas, como splines, mínimos-quadrados, entre outros.

Algoritmo 8: Simulação de escoamentos multifásicos através do método ISPH-DFS com							
ITBFT.							
1 Iniciar sistema;							
2 Definir posição das partículas marcadoras de interface;							
3 repita							
4 Buscar partículas vizinhas (seção 4.4);							
para cada partícula i faça							
6 Calcular posição intermediária (equação 6.2);							
para cada partícula i faça							
8 Calcular velocidade intermediária (equação 6.4);							
9 Obter pressão através da solução da equação de Poisson (algoritmo 5);							
10 para cada partícula i faça							
11 Calcular gradiente de pressão (equação 5.7);							
12 para cada partícula i faça							
13 Recuperar a velocidade livre de divergência (equação 6.9);							
14 Integrar posição (equação 6.10);							
15 Aplicar deslocamento artificial nas partículas (equação 6.44);							
Corrigir o campo de velocidades das partículas (equação 6.47);							
Integrar posição das partículas marcadoras de interface;							
Obter valor da normal nas partículas marcadoras de interface;							
Construir função level-set (equação 8.8);							
20 Avaliar posição das partículas em relação à interface;							
Atualizar Δt através de condição CFL;							
22 $t = t + \Delta t;$							
23 até $t < t_{total}$;							

8.2.4 Verificação das técnicas de tratamento de interface

8.2.4.1 Deformação de círculo em vórtices de Taylor-Green

O problema da deformação de círculo em vórtices de Taylor-Green trata-se de um problema hipotético, onde é descrito uma configuração bifásica tal que uma das fases encontra-se inicialmente em um domínio circular, de centro (0.5, 0.5) e raio 0.4, enquanto a outra fase encontra-se no restante do domínio, de dimensão $[0, 1] \times [0, 1]$. A partir disso, é aplicado o campo de velocidades dado por:

$$u(x, y, t) = -\cos 2\pi x \sin 2\pi y,$$

$$v(x, y, t) = \sin 2\pi x \cos 2\pi y,$$
(8.9)

o qual descreve quatro vórtices, sendo aplicada condição de fronteira periódica. O campo de velocidades da equação 8.9 é prescrito durante um tempo T/2, sendo invertido a partir daí. Neste sentido, espera-se que, ao final da simulação, a configuração seja equivalente à inicial. Para minimizar erros numéricos, é preferível utilizar-se um esquema de integração de alta ordem. Nos experimentos realizados para a verificação do tratamento da interface foi utilizado o esquema Runge-Kutta de quarta ordem. Além disso, é importante destacar que, como a velocidade é prescrita a todo o tempo, não é necessária a solução de uma equação de conservação, ou seja, o intuito deste teste está voltado essencialmente à descrever e tratar o fenômeno da interpenetração de partículas através da interface.

Nos testes realizados foi considerado um tempo total T = 0.8s. A figura 8.5 apresenta os resultados obtidos. Através destes resultados, é possível observar que a técnica ITBLS proporciona uma considerável melhora da distribuição de partículas em relação à interface, porém ainda podem ser observadas partículas de uma fase imersas na outra fase. Por outro lado, a técnica ITBFT permite uma correção melhor, sendo as partículas corretamente distribuidas em suas fases.

8.2.4.2 Circulo em vórtice simples

Um exemplo bastante útil do problema de interpenetração de partículas é o experimento do vórtice simples. Este experimento trata-se de um problema hipotético, onde um campo de velocidades no formato de um vórtice, dado por:

$$\Psi = \frac{1}{\pi} \sin^2(\pi x) \sin^2(\pi y), \tag{8.10}$$

é prescrito ao longo de um tempo T/2 em um domínio bidimensional $[0, 1] \times [0, 1]$, sendo T o tempo total da simulação. No instante t = T/2, o campo de velocidades é invertido, sendo imposto até t = T. Neste sentido, é definida uma configuração onde um fluido A encontra-se inicialmente sob um domínio circular, de raio 0.15, com centro em (0.5, 0.75), enquanto o fluido B ocupa todo o domínio



(d) Simulação com deslocamento artificial e ITBFT.

Figura 8.5: Configuração das partículas de fluido no problema da deformação de círculo em vórtices de Tyalor-Green com 60×60 partículas nos tempos t=0.0s, 0.2s, 0.4s, 0.6s e 0.8s.

restante. A partir disso, espera-se que, quando a simulação alcance o tempo final, a configuração apresentada pelas partículas seja equivalente à configuração descrita no instante inicial.

A figura 8.6 apresenta resultados obtidos em testes para o problema do círculo em vórtice simples. Na primeira parte (figura 8.6-(a)) encontram-se os resultados de uma simulação onde não é utilizada qualquer técnica para o tratamento das posições das partículas, ou seja, existe a formação de regiões de agrupamento e de baixa densidade, o que numericamente prejudicial ao SPH. Entretanto, através destes resultados, é possível observar que o movimento induzido ao fluido, de rotacionar para uma direção durante um certo período, e a seguir na direção inversa, o conduz para uma configuração final equivalente à inicial. Por outro lado, nos testes realizados com a utilização da técnica de deslocamento artificial de partículas (figura 8.6 - (b)), é possível notar que a dispoção das partículas em relação à interface é afetada com a progressão da simulação, de modo que, no instante final, as partículas apresentam uma configuração consideravelmente distinta da esperada. Na figura 8.6 - (c), são apresentados os resultados utilizando-se a técnica ITBLS, onde é possível notar que a técnica, até um certo passo, consegue manter uma boa distribuição de partículas em relação à interface. Entretanto, a técnica não proporciona melhora no resultado final obtido, o que deve-se ao erro acumulado durante toda a simulação. Finalmente, a figura 8.6 - (d) descreve os resultados utilizando a técnica ITBFT, a qual apresentou a melhor distribuição das partículas em relação a interface, proporcionado um resultado final consideravelmente satisfatório.

É importante destacar que em problemas onde não ocorrem situações com picos e fraturas extremamente finos, tais quais os descritos na figua 8.6, a técnica ITBLS possiu um bom comportamento, sendo aplicável nestes casos.

8.2.4.3 Quadrado em vórtice simples

O problema do quadrado em vórtice simples é semelhante ao do círculo em vórtice simples, diferenciando-se essencialmente no que diz respeito à configuração dos fluidos. Neste problema, o fluido A encontra-se distribuído em um quadrado de lado 1.5, com centro em (0.5, 0.75), enquanto o fluido B ocupa o restante do domínio $[0, 1] \times [0, 1]$. É aplicado o vórtice descrito pela equação 8.10, durante um tempo T/2, quando o campo é invertido é aplicado até o fim da simulação.

A figura 8.7 apresenta os resultados obtidos sem a utilização de técnicas de correção de posição e interface, puramente com a técnica de deslocamento artificial, com deslocamento artificial e ITBLS, e deslocamento artificial e ITBFT. Este mostram a robustez da técnica ITBFT, uma vez que, mesmo em situações críticas, como no tratamento de quinas, esta consegue proporcionar bons resultados, permitindo que a simulação retorne à uma configuração consideravelmente próxima da inicial.

8.3 Cálculo da tensão superficial no ISPH

A tensão superficial é um fenômeno de grande importância nos problemas multifásicos, uma vez que sua contribuição pode alterar, de forma considerável, as características do escoamento ao longo do tempo, a destacar a posição da interface e a mistura entre fluidos. Em problemas resolvidos através do método SPH, a tensão superficial pode ser aproximada utilizando as próprias características do método, através de uma técnica chamada de função cor. Esta técnica permite o cálculo de propriedades importantes, tais como a normal à interface, a curvatura, e consequentemente a tensão superficial. Neste sentido, para cada partícula de fluido é associada uma função cor \tilde{C} , de acordo com a fase a qual esta partícula pertence, tal que:



(d) Simulação com deslocamento artificial e ITBFT.

Figura 8.6: Configuração das partículas de fluido no problema do circulo em vórtice simples com 60×60 partículas para os tempos t = 0.0s, 0.75s, 1.5s, 3.0s e 6.0s.

$$\tilde{C} = \begin{cases} 1, & \text{para o fluido A,} \\ 0, & \text{para o fluido B.} \end{cases}$$
(8.11)

Após a associação da função cor a cada partícula de fluido, esta função é suavizada através de uma interpolação SPH, tal que:



(d) Simulação com deslocamento artificial e ITBFT.

Figura 8.7: Configuração das partículas de fluido no problema do quadrado em vórtice simples com 60×60 partículas para os tempos t = 0.0s, 0.75s, 1.5s, 3.0s e 6.0s.

$$C_i = \sum_j \tilde{C}_j W_{ij}.$$
(8.12)

A partir disso, a equação de tensão superficial do modelo de força contínua (equação 2.13) pode ser então aproximada utilizando a função cor. Para tanto, considera-se que a função delta de Dirac seja aproximada como $\delta \approx |\nabla C|$. A normal unitária é calculada da seguinte maneira:

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla C}{|\nabla C|},\tag{8.13}$$

e a curvatura como:

$$\kappa = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla C}{|\nabla C|}\right). \tag{8.14}$$

Valores obtidos para a normal em regiões mais afastadas da interface podem conter erros, devido à baixa variação de cor [112]. Neste sentido, torna-se necessário a utilização de um limiar, onde partículas que estejam fora de uma determinada faixa ao redor da interface tenham o valor da normal definido como zero. Uma maneira de ser realizar este tratamento é fazendo um teste, onde para que o valor de uma normal seja utilizável deva obedecer ao critério $|\nabla C| > \epsilon/h$. Em [112] é sugerido utilizar $\epsilon = 0.08$. A partir disso, o valor da tensão superficial utilizando função cor pode ser aproximado como:

$$\mathbf{F}_{ts} = -\sigma \nabla \cdot \left(\frac{\nabla C}{|\nabla C|}\right) \nabla C. \tag{8.15}$$

Além da utilização da função cor na aproximação da tensão superficial, esta também pode ser útil na suavização de propriedades como a densidade e a viscosidade dos fluidos, como forma de se prevenir variações bruscas na interface para os campos gradientes calculados. Neste sentido, em cada passo da simulação aplica-se:

$$\rho_i = C_i \rho_A + (1 - C_i) \rho_B, \tag{8.16}$$

$$\mu_i = C_i \mu_A + (1 - C_i) \mu_B. \tag{8.17}$$

8.4 Considerações parciais

Embora a utilização do método ISPH como ferramenta de solução de escoamento multifásicos já seja objeto de diversos trabalhos, o método ainda demanda estudo e aperfeiçoamento para se consagrar como uma boa alternativa. Um dos maiores problemas no método é a perturbação da interface decorrente da distribuição de partículas. Neste capítulo foram propostas duas técnicas para minimizar este problema, as quais conseguem prover de forma considerável simulações de escoamentos multifásicos. Porém, tais técnicas ainda demandam aperfeiçoamentos no sentido de tratarem fenômenos mais complexos, como a coalescência. No próximo capítulo, serão apresentados resultados e comparações

8.4 - Considerações parciais

da utilização do ISPH em escoamentos multifásicos, através da aplicação das técnicas apresentadas aqui.

Capítulo 9

Aplicação do ISPH em escoamentos newtonianos multifásicos

9.1 Introdução

A simulação de escoamentos multifásicos é um campo de grande interesse na mecânica dos fluidos computacional. Esta classe de escoamentos engloba problemas de grande importância em estudos de fenômenos naturais, assim como problemas nomeadamente industriais, com especial atenção para a indústria do petróleo. Diversos modelos de aproximação têm sido explorados na solução destes escoamentos, os quais se propõe, principalmente, utilizando metodologias específicas, na solução das equações de Navier-Stokes. Além da aproximação das equações que governam os escoamentos multifásicos, devido à complexidade apresentada por estes, a solução numérica torna necessário o emprego de técnicas para o tratamento de problemas adicionais, como é o caso da possibilidade de perturbação na interface entre fluidos, devido à erros numéricos ou mesmo à características do método de solução empregado.

No presente trabalho, foi desenvolvido um código ISPH para a solução de escoamentos multifásicos, baseado na metodologia ISPH com campo de velocidade livre de divergência, proposta por Cummins [25]. Além disso, devido à necessidade de tratamento da distribuição de partículas, é utilizada a técnica de deslocamento artificial introduzida por Xu *et al.*, sendo que, em todos os testes realizados, foi empregado o valor da constante de proporcionalidade C = 0.09. A tensão superficial, característica dos escoamentos multifásicos, é aproximada utilizando uma função cor, que se baseia na distribuição de partículas de cada fase do escoamento. Para o tratamento da interface entre fluidos, é empregada a técnica baseada em front-tracking, desenvolvida neste trabalho. Finalmente, é importante destacar que a solução do sistema de equações referentes à equação de Poisson para o cálculo da pressão foi realizado utilizando o método ILU com pré-condicionador GMRES, sendo que, para tal, foi utilizada a biblioteca Petsc (*Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation*) [4].

Os resultados apresentados a seguir são organizados em duas partes, sendo os primeiros especialmente relacionados com a tensão superficial: bolha estática, bolha quadrada e bolha oscilante, e os resultados seguintes referindo-se a testes de caráter mais geral na validação e verificação de métodos para escoamentos multifásicos: instabilidade de Rayleigh-Taylor, instabilidade de Kelvin-Helmholtz e bolha ascendente. Através destes resultados pretende-se demonstrar a capacidade do método ISPH como ferramenta de solução para escoamentos multifásicos, destacando as limitações envolvidas e as vantagens obtidas, tanto com o método em si, quanto com as técnicas de tratamento adicionais empregadas.

9.2 Bolha estática

O problema da bolha estática trata-se de um teste voltado principalmente para a verificação de esquemas de aproximação para a tensão superficial entre fluidos. Neste problema, é considerado um ambiente de gravidade nula, onde um determinado fluido encontra-se completamente imerso, descrevendo uma configuração circular, dentro de outro fluido. Neste sentido, a tensão superficial descrita apresentará um campo resultante totalmente em equilíbrio, não provocando perturbação na configuração dos fluidos. Além disso, é importante destacar que, devido à ausência de gravidade, a única força atuante será devido à tensão superficial.

Através do código ISPH-DFS desenvolvido, foram realizados experimentos para o problema da bolha estática, considerando valor de Re = 1.0, e constante de tensão superficial $\sigma = 0.5$ e $\sigma = 1.0$. Para tal, foi considerado um domínio bidimensional $[0, 1] \times [0, 1]$, onde o fluido A encontra-se inicialmente em um círculo de raio 0.25 e centro (0.5, 0.5), e o fluido B encontra-se no restante do domínio. Para os testes foram utilizadas 2500 partículas, e foram impostas condições de Dirichlet para velocidade e Neumann para pressão.

A figura 9.1 mostra a evolução da bolha ao longo do tempo. É possível observar que a variação da geometria da bolha é unicamente devido ao seu formato inicial, o qual, devido à discretização computacional utilizada, não se trata de um círculo perfeito. O perfil do campo de pressões em y = 0.5 é apresentado na figura 9.2, e mostra que há uma convergência dos resultados obtidos para o esperado, o qual trata-se de um salto de pressão abrupto na região de fronteira entre as duas fases. Finalmente, para se ter uma melhor visualização dos resultados obtidos, foi realizada a medição do raio máximo R da bolha ao longo do tempo, o qual, teoricamente, não deve sofrer grandes alterações, devido à bolha se encontrar em estado de equilíbrio. Na figura 9.3, é possível notar que o raio máximo converge de um determinado valor, associado à discretização computacional, para o valor esperado.

9.3 Bolha quadrada

O problema da bolha quadrada é um problema clássico em testes relacionados à tensão superficial. Neste experimento, é considerado um ambiente de gravidade nula, onde dois fluidos encontram-se



Figura 9.1: Configuração da bolha estática simulada através do método ISPH-DFS com aproximação da tensão superficial via função-cor para $Re = 1.0 \text{ e} \sigma = 1.0$.



Figura 9.2: Salto da pressão, em campo normalizado, em y = 0.5 para simulações do problema da bolha estática para Re = 1.0, com valor de h = 2.1Dx.



Figura 9.3: Evolução temporal do raio máximo do círculo descrito pelo fluido interno no problema da bolha estática simulado através do método ISPH-DFS com aproximação da tensão superficial via função-cor.

sob um domínio bidimensional $[0, 1] \times [0, 1]$, sendo que o fluido A ocupa inicialmente uma região no formato de um quadrado de lado 0.3 e centro em (0.5, 0.5). Decorrente das características da geometria do fluido A, é verificada a atuação de uma força devido à tensão superficial na região da quina, a qual atua no sentido de alcançar uma configuração de equilíbrio, a qual, neste caso, ocorre quando o fluido A encontra-se disposto em um círculo.

As condições de fronteira consideradas para o problema são de Dirichlet para velocidade e Neumann para pressão. Neste sentido, foram realizados diferentes testes através do código ISPH-DFS com utilização da técnica função-cor para aproximação da tensão superficial. A figura 9.4 apresenta a evolução do problema ao longo do tempo para valores de Re = 1.0 e $\sigma = 1.0$. Nesta figura é possível observar claramente a evolução contínua da bolha para um formato circular. Na figura 9.5 é apresentado a evolução do raio máximo R para diferentes valores de Reynolds e σ . Analisando-se a evolução do raio máximo, é possível notar que o método proporciona convergência para um estado de equilíbrio, o que pode ser notado quando o raio máximo não sofre grandes alterações. Entretanto, também é possível notar que com o aumento do número de Reynolds, os resultados passam a apresentar variações, podendo causar instabilidades.



Figura 9.4: Evolução temporal do problema da bolha quadrada, para Re = 1.0 e $\sigma = 1.0$, simulado através do método ISPH-DFS com aproximação de tensão superficial via função-cor.

9.4 Bolha oscilante

No problema da bolha oscilante, uma bolha descreve uma variação oscilatória em sua geometria, devido à ação da tensão superficial. Este fenômeno está associado à geometria inicial da bolha (figura 9.6-a), a qual faz com que a força relativa à uma direção seja maior que a força observada na direção transversal, provocando, até um determinado ponto, um achatamento da bolha, posteriormente é observado uma inversão na força. Este comportamento é continuamente repetido, até a bolha alcançar um estado de equilíbrio, o que ocorre mais rápido para problemas com números de Reynolds menores.

Para os testes numéricos realizados foi considerado um problema onde um dos fluidos está inserido em uma região retangular de base 0.3, altura 0.5 e centro em (0.5, 0.5), e o outro fluido encontra-se na região envolvente, sendo o domínio total $[0, 1] \times [0, 1]$. A figura 9.6 apresentada a evolução do problema para um caso com Re = 100, onde é possível observar a variação da forma descrita pela bolha. Além disso, foram realizados testes em relação à evolução do raio máximo da



Figura 9.5: Evolução temporal do raio máximo descrito pelo fluido interno no problema da bolha quadrada simulado através do método ISPH-DFS com aproximação da tensão superficial via função-cor para diferentes valores de Reynolds.

bolha em x = 0.5, os quais são apresentados na figura 9.7. Nestes resultados é possível notar o caráter oscilatório característico do problema. Em todos os testes foram utilizadas 2500 partículas, sendo impostas condições de não-deslizamento para as fronteiras.



Figura 9.6: Evolução temporal do problema da bolha oscilante, para $Re = 100.0 \text{ e} \sigma = 1.0$, simulado através do método ISPH-DFS com aproximação de tensão superficial via função-cor.

9.5 Instabilidade de Rayleigh-Taylor

A instabilidade de Rayleigh-Taylor é um fenômeno da natureza observado quando um fluido mais denso encontra-se sobre um fluido de menor densidade, o que acaba por provocar, devido à atuação da força gravitacional, um movimento característico, onde o fluido mais denso empurra continuamente o menos denso, formando, em determinados momentos, figuras semelhantes à cogumelos. Este fenômeno é bastante interessante na verificação e validação de métodos numéricos para a solução de escoamentos multifásicos, uma vez que permite, de maneira clara, o acompanhamento da evolução da interface entre fluidos ao longo do tempo.

Utilizando o código desenvolvido, foram realizados dois diferentes experimentos relativos à instabilidade de Rayleigh-Taylor, os quais diferem-se essencialmente pela disposição inicial da interface. Em ambos os experimentos foram impostas condições de fronteira de Dirichlet para velocidade e Neumann para a pressão. Entretanto, é importante observar que ainda existe a possibilidade de se utilizar fronteiras do tipo periódicas para este tipo de experimento.

Foram realizados testes utilizando o método ISPH-DFS, tanto com a utilização da técnica de tratamento de interface ITBFT, quanto sem a utilização de quaisquer técnicas de tratamento de interface. Nos resultados obtidos, é possível observar claramente que a utilização da técnica de tratamento de interface ITBFT proporciona uma considerável melhora na disposição das partículas na região da interface entre fluidos, resolvendo o problema da interpenetração devido ao deslocamento artificial utilizado.

No primeiro experimento, a interface inicial entre os fluidos é perturbada de acordo com a seguinte expressão:



Figura 9.7: Evolução temporal do raio máximo em x = 0.5 descrito pelo fluido interno no problema da bolha oscilante simulado através do método ISPH-DFS com aproximação da tensão superficial via função-cor para diferentes valores de Reynolds.

$$y = 0.15\sin(2.0\pi x),$$
 (9.1)

sendo que os resultados obtidos para este caso, para um problema onde foram utilizados valores de densidade $\rho_1 = 1.0$ e $\rho_2 = 2.0$, valores de viscosidade $\mu_1 = \mu_2 = 0.01$ e 3600 partículas, são apresentados na figura 9.8.

No segundo experimento, é aplicada inicialmente a seguinte perturbação na interface entre fluidos:

$$y = 0.05 \cos(2.0\pi x),$$
 (9.2)

onde foram considerados os valores de densidade $\rho_1 = 1.0$ e $\rho_2 = 2.0$, valores de viscosidade $\mu_1 = \mu_2 = 0.01$ e utilizadas 3600 partículas na discretização. Os resultados são apresentados na figura 9.9.

9.6 Bolha ascendente

A ascensão de bolhas é um fenômeno comum, e que pode ser observado em uma diversidade de situações cotidianas, como é o caso de bebidas gaseificadas quando abertas, fervura de água, entre outros. Em métodos numéricos, este fenômeno é bastante explorado, e utilizado como referência na verificação e validação destes. Para simular numericamente a dinâmica de uma bolha em ascensão, é necessário realizar a discretização tanto da bolha quanto do fluido que a cerca. Em métodos SPH, a discretização é realizada utilizando-se um conjunto finito de partículas, sendo as propriedades físicas da bolha associadas às partículas que encontram-se localizadas na região desta, e, de igual modo, as propriedades do fluido que envolve a bolha associadas às demais partículas. Neste sentido, devido à força gravitacional presente associada à diferença de densidade entre a bolha e o fluido envolvente, é observado o contínuo movimento da bolha.

Neste problema, o número de Reynolds pode ser calculado como:

$$Re = \frac{\rho_1 U_g L}{\mu_1},\tag{9.3}$$

onde $\rho_1 e \mu_1$ são, sucessivamente, a densidade e a viscosidade do fluido envolvente à bolha, enquanto $L = 2r_0 e U_g = \sqrt{g2r_0}$ referem-se ao comprimento característico e à velocidade característica, sendo r_0 o raio inicial da bolha. Enquanto o número de Eötvös pode ser calculado como:



(b) Resultados utilizando ITBFT.

Figura 9.8: Resultados obtidos para o problema da instabilidade de Rayleigh-Taylor para pertubação inicial da interface dada pela equação 9.1, com razão de densidade $\rho_1/\rho_2 = 2.0$ e razão de viscosidade $\mu_1/\mu_2 = 1$ para os tempos t = 0.0s, 1.4s, 2.8s, 4.2s, 5.6s e 7.0s: configuração da densidade.



(b) Resultados utilizando ITBFT.

Figura 9.9: Resultados obtidos para o problema da instabilidade de Rayleigh-Taylor para pertubação inicial da interface dada pela equação 9.2, com razão de densidade $\rho_1/\rho_2 = 2.0$ e razão de viscosidade $\mu_1/\mu_2 = 1$ para os tempos t = 0.0s, 1.0s, 2.0s, 3.0s, 4.0s e 5.0s: configuração da densidade.

$$E_0 = \frac{\rho_1 U_g^2 L}{\sigma},\tag{9.4}$$

tal que σ é o coeficiente de tensão superficial entre as fases.

Para os experimentos numéricos realizados foi considerado um domínio bidimensional $[0, 1] \times [0, 2]$, onde a bolha é representada por um círculo, sendo impostas condições de fronteira de Dirichlet para velocidade e Neumann para pressão. A tabela 9.1 apresenta as propriedades físicas utilizadas nas simulações. A partir disso, foram realizadas comparações do perfil descrito pelas bolhas, obtido através das simulações, com um mapa experimental (figura 9.10). As comparações indicam que o método ISPH-DFS proporciona resultados coerentes com o esperado, uma vez que o perfil das bolhas, nos testes realizados, e considerando suas propriedades físicas, estão de acordo com o mapa do regime de ascensão de bolhas. O perfil apresentado pela ascensão da bolha, nos três casos analisados, são apresentados nas figuras 9.11, 9.12 e 9.13. Para valores de Reynolds elevados, assim como para valores baixos de E_0 , o método mostrou-se instável.

	ρ_1	ρ_2	μ_1	μ_2	σ	r_0	Re	E_0
Caso-1	2.0	1.0	10^{-2}	10^{-2}	10^{-4}	0.20	70.71	5000.0
Caso-2	2.0	1.0	10^{-1}	10^{-1}	10^{-3}	0.25	7.07	500.0
Caso-3	2.0	1.0	10^{-1}	10^{-1}	10^{-2}	0.25	7.07	50.0

Tabela 9.1: Propriedades físicas referentes às simulações do problema da bolha ascendente.

9.7 Considerações parciais

Os resultados obtidos com a aplicação da técnica de tratamento de interface proposta no presente trabalho mostraram uma considerável melhora em relação à aplicação do código ISPH-DFS sem tratamento de interface. Por outro lado, os testes realizados com a utilização da função-cor para a aproximação da tensão superficial revelaram que, para valores de Reynolds altos, esta técnica apresenta-se instável, devido à uma alta influência de correntes de velocidade parasitas, porém para valores de Reynolds baixos (Re < 1000), os resultados mostraram-se satisfatórios. De qualquer maneira, os resultados obtidos para a tensão superficial mostram que a utilização de estratégias alternativas, que proporcionem uma maior precisão na aproximação dos valores, pode ser bastante interessante.



Figura 9.10: Mapa do regime de bolhas em ascenção de acordo com suas propriedades físicas: classificação baseada em obserções experimentais provenientes de [10].

9.7 - Considerações parciais



(b) Simulação utilizando ISPH-DFS com ITBFT.

Figura 9.11: Simulação do problema da bolha ascendente (tabela 9.1: caso-1) utilizando ISPH-DFS: configuração da densidade nos tempos t = 0.0s, 2.0s, 4.0s, 6.0s, 8.0s e 10.0s.



(b) Simulação utilizando ISPH-DFS com ITBFT.

Figura 9.12: Simulação do problema da bolha ascendente (tabela 9.1: caso-2) utilizando ISPH-DFS: configuração da densidade nos tempos t = 0.0s, 3.0s, 6.0s, 9.0s, 12.0s e 15.0s.

9.7 - Considerações parciais



(b) Simulação utilizando ISPH-DFS com ITBFT.

Figura 9.13: Simulação do problema da bolha ascendente (tabela 9.1: caso-3) utilizando ISPH-DFS: configuração da densidade nos tempos t = 0.0s, 5.0s, 10.0s, 15.0s, 20.0s e 25.0s.

Capítulo 9

Capítulo 10

O fenômeno da inversão de fase na produção de termoplásticos vulcanizados

10.1 Introdução

Os escoamentos multifásicos englobam uma série de diferentes problemas, entre os quais podem ser destacados os escoamentos envolvidos com a produção dos elastômeros termoplásticos (TPEs, do inglês *thermoplastic elastomers*). De um modo geral, os TPEs referem-se à materiais constituídos de misturas entre polímeros e borracha, os quais apresentam uma combinação entre as propriedades elásticas e mecânicas da borracha com as propriedades de processamento dos termoplásticos [108].

Os TPEs podem ser classificados por diferentes critérios: composição química, tecnologia de produção, e relação entre as propriedades e estrutura química inerentes aos compostos envolvidos. Neste sentido, os termoplásticos vulcanizados (TPVs, do inglês *thermoplastic vulcanisates*) são uma classe de TPEs, de grande interesse científico e industrial, que merece especial atenção. Os TPVs são tipos de materiais que possuem alta processabilidade e reciclabilidade, devido às características apresentadas por sua fase contínua, a qual se refere a um termoplástico, que em conjunto com as vantagens apresentadas pela fase dispersa, referente à borracha vulcanizada, o torna uma alternativa bastante interessante ao uso industrial de produtos puramente derivados da borracha [49].

Embora exista um grande interesse científico e um contínuo crescimento da aplicação dos TPVs em processos industriais, a compreensão relativa à produção deste produto ainda exige a realização de estudos mais sistematizados, de modo a proporcionar um aperfeiçoamento neste processo, que atualmente é, de forma geral, baseado em informações empíricas [3]. Além disso, é importante destacar que ainda existem grandes obstáculos no sentido da compreensão do fenômeno da inversão de fase, característico da produção dos TPVs, e relacionado com o comportamento da viscosidade dos

materiais envolvidos. Desta maneira, a elaboração de estudos voltados à concepção de ferramentas numéricas que permitam melhorar do processo de produção dos TPVs são essencialmente positivos para o desenvolvimento da área.

Neste capítulo, serão apresentadas, de forma geral, as principais características dos TPVs, enfatizando o fenômeno da inversão de fase. Além disso, será realizado um estudo do comportamento da viscosidade em escoamentos bifásicos através do código ISPH-DFS, e discutida sua relevância deste estudo em relação ao processo de produção dos TPVs.

10.2 Termoplásticos vulcanizados

As borrachas vulcanizadas representam uma classe de materiais de grande importância industrial, estando presente entre os compostos utilizados na confecção de diversos tipos de produtos, tais como pneus, peças automobilísticas, sapatos, luvas, entre outros. Porém, suas propriedades físicas e químicas tornam seu processo de reciclagem extremamente complexo e caro, tornando-as um problema de caráter ambiental. Além disso, a produção da borracha vulcanizada demanda a utilização de equipamentos específicos e de alto custo, restrigindo sua produção.

A utilização de materiais sustentáveis em alternativa à borracha vulcanizada apresenta um crescimento eminente. Neste sentido, Os TPVs representam uma ótima opção, por apresentarem propriedades similares à borracha vulcanizada, no que diz respeito à processabilidade e elasticidade, e por, além disso, possuírem propriedades similares aos termoplásticos, as quais tornam o seu processo de reciclagem consideravelmente mais simples. Entretanto, o processo de produção dos TPVs ainda necessita de uma melhor compreensão.

De forma geral, a produção dos TPVs é realizada através de um complexo processo de derretimento, dispersão, dissolução e reticulação, sendo realizado através do uso de misturadores específicos, como o mostrado na figura 10.2. Durante este processo, a borracha, que inicialmente encontra-se como fase dispersa, apresenta um comportamento de variação de sua viscosidade, o que acaba fazendo que esta se converta em fase contínua, enquanto o termoplástico passe de fase contínua para fase dispersa, como é ilustrado na figura 10.1. A este processo denomina-se inversão de fase.



Figura 10.1: Ilustração sobre o processo de inversão de fase: partículas de borracha (material escuro) e matriz termoplástica (material claro).

O processo de inversão é de fundamental importância na produção dos TPVs, devido à sua efetividade na obtenção das características finais do produto obtido, a destacar o desempenho referente à uma boa distribuição da matriz termoplástica em relação à borracha. Porém, o estudo deste fenômeno ainda é um grande desafio, sendo as principais contribuições existentes baseadas em observações experimentais [49].



Figura 10.2: Misturador Haake Rheomix 600 OS (imagem retirada de [2]).

10.3 Estudo do comportamento da viscosidade em misturas

Embora o estudo da inversão de fase e sua resolução através de ferramentas numéricas ainda apresentem muitos obstáculos, a realização de estudos relacionados, embora mais restritos, é de grande interesse e pode auxiliar na compreensão deste fenômeno. Neste sentido, aqui é desenvolvido um estudo do comportamento de misturas bifásicas entre fluidos newtonianos, onde são destacadas as diferenças pertinentes à variação de suas propriedades físicas, em particular, a viscosidade.

O problema a ser tratado consiste de um escoamento confinado, onde uma das paredes possui velocidade constante e diferente de zero, semelhante ao que ocorre no problema da cavidade impulsionada. Neste sentido, os dois fluidos são dispostos, inicialmente, um sobre o outro, conforme é apresentado na figura 10.3. Teoricamente, devido à dinâmica apresentada por este tipo de escoamento, o fluido de maior viscosidade, com o decorrer do tempo, tende a se concentrar na região do vórtice. Este efeito ocorre mais rápido com o aumento da razão de viscosidade, além de ser observado também um progressivo encapsulamento do fluido mais viscoso.

Numericamente, a mistura foi simulada em um domínio $[0, 1] \times [0, 1]$, onde foram impostas condições de não-deslizamento nas paredes laterais e inferior, e velocidade constante e igual a 1.0 na



Figura 10.3: Configuração inicial dos experimentos realizados: fluido mais viscoso encontra-se sobre o fluido menos viscoso.

direção x para a parede superior. Os testes foram simulados com o código ISPH-DFS com tratamento de interface via ITBLS. Foram realizados testes para razões de viscosidade entre 10 e 200. Observando-se os resultados, apresentados nas figuras 10.4 e 10.5, é possível notar uma ligeira diferença no avanço do fluido mais viscoso, além disso, é possível notar a ocorrência de encapsulamento do fluido mais viscoso. Tais resultados servem como um indicativo do comportamento em escoamentos bifásicos, e provêem informações a cerca da aplicação do método ISPH para a solução de escoamentos mais complexos envolvendo inversão de fase.

10.4 Considerações Parciais

O estudo do comportamento de misturas com relação à variação da viscosidade é de grande importância no âmbito da exploração do problema da inversão de fase. Neste sentido, a aplicação do método ISPH contribui para a base de conhecimento relacionada, de modo a permitir, através dos resultados obtidos pelo código ISPH-DFS, a verificação do pressuposto teórico relativo ao fenômeno. Entretanto, estudos mais específicos e direcionados ao problema da inversão de fase são de grande interesse, principalmente no que refere-se à otimização do processo de produção de TPVs.

10.4 - Considerações Parciais



Figura 10.4: Resultados numéricos da evolução da mistura nos tempos t = 1.0s, 2.0s, 3.0s, 4.0s, 5.0s, 6.0s e 7.0s: configuração da viscosidade.



Figura 10.5: Resultados numéricos da evolução da mistura nos tempos t = 8.0s, 9.0s, 10.0s, 15.0s, 20.0s, 50.0s e 100.0s: configuração da viscosidade.
Capítulo 11

Considerações finais

Esta tese apresentou a aplicação do método ISPH como solução de escoamentos bifásicos e newtonianos. Para tanto, foi realizado um estudo a cerca do método SPH, de modo a destacar suas vantagens e desvantagens, além de definir a sua aplicabilidade para problemas de mecânicas dos fluidos. Neste sentido, foram apresentadas diferentes metodologias do método ISPH, a saber ISPH-DF, ISPH-DI, ISPH-DFDI e ISPH-DFS. Diante das necessidades inerentes ao propósito do trabalho, foi então desenvolvido um código numérico baseado no ISPH-DFS. Diversos testes, relacionados a escoamentos monofásicos, foram realizados, mostrando a eficácia do método. O código foi então aplicado para a solução de escoamentos bifásicos, o que acabou por revelar a sensibilidade do ISPH-DFS em relação à preservação da interface entre fluidos durante a simulação.

Estratégias de tratamento de interface foram estudadas, e com isso, propostas duas técnicas para a solução do problema. A primeira delas baseia-se na associação de uma função level-set ao problema, e a contínua correção da interface com base na evolução desta função, a qual é realizada através de um esquema baseado em série de Taylor. A segunda técnica utiliza informações de uma malha front-tracking, que é advectada de acordo com as propriedades do escoamento. Foram realizados testes com ambas as técnicas, os quais mostraram a efetividade destas em relação a correção da interface, principalmente para a técnica baseada em front-tracking, que apresentou resultados consideravelmente satisfatórios.

Durante o trabalho, também foi realizado um estudo a cerca do comportamento de misturas bifásicas, particularmente com variação da razão de viscosidade entre fluidos. Este estudo está relacionado ao problema da inversão de fase, de especial interesse científico e industrial. Os resultados obtidos servem de indicativo para a possível aplicação do método ISPH em estudos mais complexos, voltados, de forma mais direta, ao problema da inversão de fase.

De modo geral, através do trabalho desenvolvido, tanto em relação ao estudo do método quanto à

concepção e aplicação do código numérico desenvolvido, foi possível definir de forma mais clara o poder de manipulação e a aplicabilidade prática relativa ao ISPH. Neste sentido, puderam ser notados problemas inerentes ao método, tais como a solução da equação de Poisson para a obtenção do campo de pressões, a qual, no ISPH, não satisfaz naturalmente a condição de compatibilidade, tornando necessário o emprego de estratégias adicionais. Outro ponto de importante destaque é a aproximação da tensão superficial em escoamentos multifásicos. Embora o cálculo baseado em função-cor proporciona resultados coerentes para diversos tipos de problemas, para determinados valores da constante de tensão superficial ele se mostra instável, tornando evidente a necessidade de elaboração de técnicas mais sofisticadas. Além disso, nos vários testes realizados, foi constatado que o ISPH-DFS apresenta-se instável para valores de Reynolds altos, estando limitado à escoamentos com Re < 1000.

Apesar dos problemas relacionados ao métodos ISPH e às restrições de aplicação, o método apresenta um considerável potencial para a solução de problemas de fluidos. Suas vantagens, tais como a facilidade de implementação, o baixo custo computacional em relação à métodos baseados em malhas, e a adaptatividade a diferentes tipos de problemas, o torna uma importante alternativa, sendo possível considerar que, com o aperfeiçoamento dos pontos problemáticos do método, citados anteriormente, este possa tornar-se competitivo com métodos de solução numérica já consagrados.

Em relação ao trabalho desenvolvido existem alguns pontos que podem ser listados como possibilidades de continuidade. Entre estes está a necessidade de aperfeiçoamento das técnicas de tratamento de interface propostas, de modo com que estas possam tratar situações mais complexas, tais como a coalescência entre bolhas. Além disso, existe também a possibilidade de utilizar as informações inerentes à malha front-tracking para a realização da aproximação da tensão superficial, dado que esta malha possui informação a cerca das normais à interface e também à curvatura. A principal dificuldade neste processo é determinar uma força de difundir a informação da malha front-tracking para as partículas SPH. Por outro lado, a aplicação do código desenvolvido para o estudo do comportamento de misturas também pode ser mais explorada, no sentido de realizar novos testes, considerando situações mais específicas, onde seja previsível a inversão do encapsulamento entre fluidos. Finalmente, a adaptação do código desenvolvido para o tratamento de problemas tridimensionais pode ser destacada como um grande desafio.

Referências Bibliográficas

- G. Ala, E. Francomano, A. Tortofici, e. Toscano, and F. Viola. Corrective meshless particle formulations for time domain maxwell's equations. *Journal Comp. App. Math.*, 210:34–46, 2007.
- [2] Carla Filipa Silva Antunes. Dynamic Vulcanization of EDPM/PP blends: Effect of Viscosity Ratio, Composition and Cross-linking on Morphology Development. Phd thesis, Universidade do Minho, 2010.
- [3] Carla Melo Antunes, António Gaspar-Cunha, Ana Vera Machado, and Martin van Duin. Dynamic vulcanisation of pp/epdm blends: Effect of crosslinking on phase inversion. In *Keynote Lectures of PPS-24*, Salerno, Italy, June 2008.
- [4] Satish Balay, Jed Brown, Kris Buschelman, William D. Gropp, Dinesh Kaushik, Matthew G. Knepley, Lois Curfman McInnes, Barry F. Smith, and Hong Zhang. PETSc Web page, 2011. http://www.mcs.anl.gov/petsc.
- [5] W. Benz. Applications of smoothed particle hydrodynamics (sph) to astrophysical problems. *Computer Physics Communications*, 48:97–105, 1988.
- [6] W. Benz. *Numerical Modeling of Non-linear Sttelar Pulsation: Problems and Prospects*, chapter Smoothed particle hydrodynamics: a review. Kluwer Academic, Boston, 1990.
- [7] P. Berczik. Modeling the star formation in galaxies using the chemodynamical sph code. *Astronomy and Astrophysics*, 9:1–11, 2000.
- [8] P. Berczik and I. G. Kolesnik. Smoothed particle hydrodynamics and its applications to astrophysical problems. *Kinematics and Physics of Celestial Bodies*, 9:1–11, 1993.
- [9] P. Berczik and I. G. Kolesnik. Gas dynamical model of the triaxial protogalaxy collapse. *Astronomical and Astrophysical transaction*, 16:163–185, 1998.

- [10] D. Bhaga and M. E. Weber. Bubbles in viscous liquids: shapes, wakes and velocities. *Journal of Fluid Mechanics*, 105:61–85, 1981.
- [11] E.C. Bingham. An investigation of the laws of plastic flow. *Bulletin of the Bureau of Standards*, 13:309–353, 1916.
- [12] R. B. Bird, W. E. Stewart, and E. N. Lightfoot. *Transport Phenomena*. John Wiley and Sons, Inc., USA, 2002.
- [13] J. U. Brackbill, D. B. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 100:335–354, 1992.
- [14] Richard L. Burden and J. Douglas Faires. Numerical Analysis. Brooks Coole, 8th edition, 2004.
- [15] Hector D. Ceniceros, Rudimar L. Nós, and Alexandre M. Roma. Three-dimensional, fully adaptive simulations of phase-field fluid models. *Journal of Computational Physics*, 229(17):6135–6155, 2010.
- [16] Yuanzhang Chang, Kai Bao, Youquan Liu, Jian Zhu, and Enhua Wu. A particle-based method for viscoelastic fluids animation. In VRST '09: Proceedings of the 16th ACM Symposium on Virtual Reality Software and Technology, pages 111–117, New York, NY, USA, 2009. ACM.
- [17] A. K. Chaniotis, D. Poulikakos, and P. Koumoutsakos. Remeshed smoothed particle hydrodynamics for the simulation of viscous and heat conducting flows. J. Comput. Phys., 182(1):67–90, 2002.
- [18] J. K. Chen, J. E. Beraun, and T. C. Carne. A corrective smoothed particle method for boundary value problems in heat conduction. *Int. Journal Num. Meth. Eng.*, 46:231–252, 1999.
- [19] A. J. Chorin. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Mathematics of Computation*, 22, 745–762.
- [20] Simon Clavet, Philippe Beaudoin, and Pierre Poulin. Particle-based viscoelastic fluid simulation. In SCA '05: Proceedings of the 2005 ACM SIGGRAPH/Eurographics symposium on Computer animation, pages 219–228, New York, NY, USA, 2005. ACM.
- [21] P. Cleary and J. Monaghan. Conduction modelling using smoothed particle hydrodynamics. J. Comput. Phys., 148(1):227–264, 1999.
- [22] P. W. Cleary. Modelling confined multi-material heat and mass flow using sph. App. Math. Model, 22(12):981–993, 1998.
- [23] Andrea Colagrossi and Maurizio Landrini. Numerical simulation of interfacial flows by smoothed particle hydrodynamics. J. Comput. Phys., 191(2):448–475, 2003.

- [24] R. Courant, K. Friedrichs, and H. Lewy. On the partial difference equations of mathematical physics. *IBM Journal*, 11, 215–234.
- [25] S. Cummins and Rudman M. An sph projection method. *Journal of Computational Physics*, 152:584–607, 1999.
- [26] K. Dolag, M. Bartelmann, and H. Lesch. Sph simulations of magnetic fields in galaxy clusters. Astron Astrophys, 348:351–363, 1999.
- [27] D. H. Eberly. Game Physics. Morgan Kaufamann, 2004.
- [28] M. Ellero and R.I. Tanner. Sph simulations of transient viscoelastic flows at low reynolds number. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 132(1-3):61 – 72, 2005.
- [29] Marco Ellero, Martin Kröger, and Siegfried Hess. Viscoelastic flows studied by smoothed particle dynamics. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 105(1):35 51, 2002.
- [30] Asghar Esmaeeli and Grétar Tryggavason. Direct numerical simulations of bubbly flows. part 1. low reynolds number arrays. *Journal of Fluid Mechanics*, 377:313–345, 11 1998.
- [31] L. C. Evans and J. Spruck. Motion of level sets by mean curvature. *International Journal of Differential Geometry*, 33:635–681, 1991.
- [32] Jiannong Fang, Aurèle Parriaux, Martin Rentschler, and Christophe Ancey. Improved sph methods for simulating free surface flows of viscous fluids. *Applied Numerical Mathematics*, 59(2):251 – 271, 2009.
- [33] Angela Ferrari, Michael Dumbser, Eleuterio F. Toro, and Aronne Armanini. A new 3d parallel sph scheme for free surface flows. *Computers and Fluids*, 38(6):1203 1217, 2009.
- [34] Nick Foster and Ronald Fedkiw. Practical animation of liquids. In SIGGRAPH '01: Proceedings of the 28th annual conference on Computer graphics and interactive techniques, pages 23–30, New York, NY, USA, 2001. ACM.
- [35] E. Francomano, A. Tortorici, E. Toscano, G. Ala, and F. Viola. On the use of a meshless solver for pdes governing electromagnetic transients. *Appl Math Comput*, 209(1):42–51, 2009.
- [36] A. R. Frederic and C. L. James. Smoothed particle hydrodynamics calculations of stellar interactions. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 109:213–230, 1999.
- [37] D. A. Fulk. *A numerical analysis of smoothed particle hydrodynamics*. Phd thesis, Air Force Institute of Technology, 1994.

- [38] R. Garg, C. Narayanan, D. Lakehal, and S. Subramaniam. Accurate numerical estimation of interphase momentum transfer in lagrangian-eulerian simulations of dispersed two-phase flows. *Int Journal Multiph. Flow*, 33(12):1337–1364, 1995.
- [39] U. Ghia, K. N. Ghia, and C. T. Shin. High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method. *Journal of Computational Physics*, 48:387–411, December 1982.
- [40] R. A. Gingold and J. J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics Theory and application to non-spherical stars. *Royal Astronomical Society*, 181:375–389, November 1977.
- [41] I. Ginzburg and G. Wittum. Two-phase flows on interface refined grids modeled with VOF, staggered finite volumes, and splines interpolants. *Journal of Computational Physics*, 166:302–335, 2001.
- [42] J. Gosz and W. K. Liu. Admissible approximations for essential boundary conditions in the reproducing kernel particle method. *Computational Mechanics*, 19:120–135, November 1996.
- [43] L. Hernquist and N. Katz. TREESPH A unification of SPH with the hierarchical tree method. *Astrophysical Journal Supplement Series*, 70:419–446, June 1989.
- [44] WinslowH. Herschel and Ronald Bulkley. Konsistenzmessungen von gummi-benzollösungen. Kolloid-Zeitschrift, 39(4):291–300, 1926.
- [45] C. W. Hirt and B. D. Nichols. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Phisics*, 39:201–225, 1981.
- [46] X. Y. Hu and N. A. Adams. A multi-phase sph method for macroscopic and mesoscopic flow. *Journal Comput. Phys*, 213(2):844–861, 1995.
- [47] X. Y. Hu and N. A. Adams. A constant-density approach for incompressible multi-phase sph. *Journal Comput. Phys.*, 228(6):2082–2091, 2009.
- [48] X.Y. Hu and N.A. Adams. An incompressible multi-phase {SPH} method. Journal of Computational Physics, 227(1):264 – 278, 2007.
- [49] J. Karger-Kocsis. *Polymer Blends and Alloys*, chapter Thermoplastic Rubbers via Dynamic Vulcanisation. Marcel Dekker, New Yorker, 1999.
- [50] S. Koshizuka, A. Nobe, and Y. Oka. Numerical analysis of breaking waves using the moving particle semi-implicit method. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 26:751–769, 1998.
- [51] L. S. Lasdon. *Optimization Theory for Large Systems*. The Macmillan Company, 1 edition, 1970.

- [52] E. S. Lee, C. Moulinec, R. Xu, D. Violeau, D. Laurence, and P. Stansby. Comparisons of weakly compressible and truly incompressible algorithms for the sph mesh free particle method. *Journal of Computational Physics*, 227, 2008.
- [53] W. H. Lee and W. Kluźniak. Newtonian hydrodynamics of the coalescence of black holes with neutrons stars i: Tidally locked binaries with a stiff equation of state. *The Astr. J.*, 526:178–199, 1999.
- [54] Shaofan Li and Wing Kam Liu. Meshfree Particle Methods. Springer-Verlag, 2004.
- [55] L. D. Libersky, A. G. Petscheck, T. C. Carney, J. R. Hipp, and F. A. Allahdadi. High strain lagrangian hydrodynamics - a three-dimensional sph code for dynamic material response. *Journal of Computational Physics*, 109:67–75, 1993.
- [56] G. R. Liu, K. Y. Dai, Lim K. M., and Gu Y. T. A point interpolation mesh free method for static and frequency analysis of two-dimensional piezoeletric structures. *Computational Mechanics*, 29(6):510–519, 2002.
- [57] G. R. Liu and M. B. Liu. *Smoothed Particle Hydrodynamics a meshfree particle method*. World Scientific, Singapure, 2003.
- [58] G. R. Liu and Gu Y. T. A local radial point interpolation method (lr-pim) for free vibration analyses of 2-d solids. *Journal of Sound and Vibration*, 246(1):29–46, 2001.
- [59] M. B. Liu and G. R. Liu. Smoothed particle hydrodynamics (sph): an overview and recent developments. *Arch. Comput. Methods Eng.*, 17:25–76, 2010.
- [60] M. B. Liu, G. R. Liu, and K. Y. Lam. Comparative study of the real and artificial detonation models in underwater explosions. *Enginnering Simulation*, 25(1), 2003.
- [61] M. B. Liu, G. R. Liu, and Z. Zong. Smoothed particle hydrodynamics for numerical simulation of underwater explosion. *Comput. Mech.*, 30(2):106–118, 2003.
- [62] Frank Losasso, Jerry Talton, Nipun Kwatra, and Ronald Fedkiw. Two-way coupled sph and particle level set fluid simulation. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, 14(4):797–804, 2008.
- [63] L. B. Lucy. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *Astron. Journal*, 82:1013–1024, December 1977.
- [64] S. Marrone, A. Colagrossi, D. Le Touzé, and G. Graziani. Fast free-surface detection and level-set function definition in {SPH} solvers. *Journal of Computational Physics*, 229(10):3652 – 3663, 2010.

- [65] S McKee, M. F Tome, V. G Ferreira, J. A Cuminato, A Castelo, F. S Sousa, and N Mangiavacchi. The mac method. *Comput Fluids*, 37(8):907–930, Jan 2008.
- [66] Z. Meglicki. Verification and accuracy of smoothed particle magnetohydrodynamics. *Comput Phys Commun*, 81:91–104, 1994.
- [67] J. J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics. *Annual Review of Astronomical and Astrophysics*, 30:543–574, 1992.
- [68] J. J. Monaghan. Simulating free surface flow with sph. *Journal of Computational Physics*, 110:399–406, 1994.
- [69] J. J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics. Rep. Prog. Phys., 68:1703–1759, 2005.
- [70] J. J. Monaghan and A. Kocharyan. Sph simulation of multiphase flow. *Comput Phys Commun*, 87:225–235, 1995.
- [71] J. J. Monaghan and J. C. Latanzio. A simulation of the collapse and fragmentation of cooling molecular clouds. *Astrophysical Journal*, 375:177–189, 1991.
- [72] Joseph J. Monaghan, Herbert E. Huppert, and M. Grae Worster. Solidification using smoothed particle hydrodynamics. J. Comput. Phys., 206(2):684–705, 2005.
- [73] J. P. Morris. *Analysis of Smoothed Particle Hydrodynamics with Applications*. Phd thesis, Monash University, 1996.
- [74] Joseph Morris and J. J. Monaghan. A switch to reduce sph viscosity. J. Comput. Phys., 136:41–50, 1997.
- [75] Joseph P. Morris, Patrick J. Fox, and Yi Zhu. Modeling low reynolds number incompressible flows using sph. *J. Comput. Phys.*, 136(1):214–226, 1997.
- [76] K.W. Morton and D.F. Mayers. Numerical Solution of Partial Differential Equations, An Introduction. Cambridge University Press, 2005.
- [77] Matthias Müller, David Charypar, and Markus Gross. Particle-based fluid simulation for interactive applications. SCA '03: Proceedings of the 2003 ACM SIGGRAPH/Eurographics symposium on Computer animation, pages 154–159, 2003.
- [78] G. Oger, M. Doring, B. Alessandrini, and P. Ferrant. An improved sph method: Towards higher order convergence. *Journal of Computational Physics*, 225(2):1472 – 1492, 2007.
- [79] J. G. Oldroyd. On the formulation of rheological equations of state. *Proc. R. Soc.*, 200:523–541, 1950.

- [80] S. Osher, W. Mulder, and J. A. Sethian. Computing interface motion in compressible gas dynamics. *Journal of Computational Physics*, 100:209–228, 1992.
- [81] Stanley Osher and James A. Sethian. Fronts propagating with curvature dependent speed: Algorithms based on hamilton-jacobi formulations. JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHY-SICS, 79(1):12–49, 1988.
- [82] A. Paiva, F. Petronetto, T. Lewiner, and G. Tavares. Particle-based non-newtonian fluid animation for melting objects. *Computer Graphics and Image Processing SIBGRAPI '06*, pages 78–85, 2006.
- [83] Afonso Paiva. Uma Abordagem Lagrangeana para Simulação de Escoamentos de Fluidos Viscoplásticos e Multifásicos. Phd thesis, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2007.
- [84] Afonso Paiva, Fabiano Petronetto, Thomas Lewiner, and Geovan Tavares. Particle-based viscoplastic fluid/solid simulation. *Comput. Aided Des.*, 41(4):306–314, 2009.
- [85] Afonso Paiva, Fabiano Petronetto, Geovan Tavares, and Thomas Lewiner. Simulação de Fluidos sem malha: Uma Introdução ao Método SPH. Coleção Colóquio Brasileiro de Matemática 27º. Impa, Rio de Janeiro, 1 edition, 2009.
- [86] Jiao Peigang, Zhou Yiqi, Fang Jianhua, Chen Lei, and Cui Xiangyang. Smoothed particle hydrodynamics for numerical simulation of duct conveying. In *PACIIA* (2), volume 2, pages 634–639, Dec. 2008.
- [87] Jiao Peigang, Zhou Yiqi, Li Zirui, and Chen Lei. Simulation of two-phase flow using smoothed particle hydrodynamics. In *Knowledge Acquisition and Modeling Workshop*, 2008. KAM Workshop 2008. IEEE International Symposium on, pages 296–300, Dec. 2008.
- [88] Fabiano Petronetto. *A Equação de Poisson e a Decomposição de Helmholtz-Hodge com Operadores SPH.* Phd thesis, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2008.
- [89] L. C. A. Pimenta, M.L. Mendes, R.C. Mesquita, and G. A. S. Pereira. Fluids in electrostatic fields: an analogy for multirobot control. *IEEE Trans Magn*, 43:1765–1768, 2007.
- [90] W. H. Press, S. A. Teukolski, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery. *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press, 2 edition, 1992.
- [91] M. A. Rao. *Rheology of Fluid and Semisolid Foods Principles and Applications*. Springer, 2 edition, 2007.
- [92] I. J. Schoenberg. Contributions to the problem of approximation of equidistant data by analytic functions: part a. *Q. Appl. Math.*, IV:45–99, 1946.

- [93] D. G. Senz, E. Bravo, and S. E. Woosley. Single and multiple detonations in white dwarfs. *Astr. Astrophys.*, 349:177–188, 1999.
- [94] Mostafa S. Shadloo and Mehmet Yildiz. ISPH Modelling of Rayleigh-Taylor Instability. In Thomas Rung and Christian Ulrich, editors, 6th International SPHERIC Workshop. SPH European Research Interest Community (SPHERIC), Hamburg Univ. of Technology (TUHH), June 2011.
- [95] Mostafa Safdari Shadloo, Amir Zainali, Samir H. Sadek, and Mehmet Yildiz. Improved incompressible smoothed particle hydrodynamics method for simulating flow around bluff bodies. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 200:1008–1020, 2011.
- [96] Songdong Shao. Incompressible smoothed particle hydrodynamics simulation of multifluid flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 69(11):1715–1735, 2012.
- [97] Songdong Shao and Edmond Y. M. Lo. Incompressible sph method for simulating newtonian and non-newtonian flows with a free surface. *Advances in Water Resources*, 26:787–800, 2003.
- [98] M. T. Shaw and W. J. Macknight. *Introduction to Polymer Viscoelasticity*. Wiley-InterScience, USA, 2005.
- [99] F. S. Sousa and N. Mangiavacchi. A lagrangian level-set approach for the simulation of incompressible two-fluid flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 47(10-11):1393–1401, 2005.
- [100] F. S. Sousa, N. Mangiavacchi, L. G. Nonato, A. C. Castelo, M. F. Tomé, V. G. Ferreira, J. A. Cuminato, and S. McKee. A front-tracking/front-capturing method for the simulation of 3D multi-fluid flows with free surfaces. *Journal of Computational Physics*, 198:469–499, 2004.
- [101] F. S. Sousa, L. M. Portela, R. F. Mudde, and N. Mangiavacchi. DNS of deformable bubbles in wall-bounded simple shear flows. In *Proceedings of 6th International Conference on Multiphase Flow (ICMF2007)*, 2007.
- [102] M. Sussman, P. Smereka, and S. Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 114:146–159, 1994.
- [103] J. W. Swegle and S. W. Attaway. On the feasibility of using particle hydrodynamics for underwater explosion calculations. *Comp. Mech.*, 17:151–168, 1994.
- [104] H. Takeda, S. Miyama, and M. Sekiya. Numerical simulation of viscous flow by smoothed partile hydrodynamics. *Progress of Theorical Physics*, 92:939–960, 1994.

- [105] G. Tryggvason, B. Bunner, A. Esmaeeli, D. Juric, N. Al-Rawahi, W. Tauber, J. Han, S. Nas, and Y.-J. Janz. A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *Journal of Computational Physics*, 169:708–759, 2001.
- [106] S. O. Unverdi and G. Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 100:25–37, 1992.
- [107] S. P. van der Pijl, A. Segal, and C. Vuik. A mass-converving level-set (MCLS) method for modelling of multi-phase flows. Reports of the Department of Applied Mathematical Analysis Report 03-03, Delft University of Technology, Delft, Holland, 2003.
- [108] M. van Duin and A.V. Machado. Epdm-based thermoplastic vulcanisates: Crosslinking chemistry and dynamic vulcanisation along the extruder axis. *Polymer Degradation and Stability*, 90(2):340 – 345, 2005.
- [109] Gregory J. Wagner and Wing Kam Liu. Application of essential boundary conditions in mesh-free methods a corrected collocation method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 47(8):1367–1379, 2000.
- [110] H. Wendland. Piecewise polynomial, positive definite and compactly supported radial functions of minimal degree. *Advances in Computational Mathematics*, 4:389–396, 1995.
- [111] Rui Xu, Peter Stansby, and Dominique Laurence. Accuracy and stability in incompressible sph (isph) based on the projection method and a new approach. *Journal of Computational Physics*, 228:6703–6725, 2009.
- [112] A. Zainali, N. Tofighi, M.S. Shadloo, and M. Yildiz. Numerical investigation of newtonian and non-newtonian multiphase flows using {ISPH} method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 254(0):99 – 113, 2013.