UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO INSTITUTO DE MATEMÁTICA INSTITUTO TÉRCIO PACITTI DE APLICAÇÕES E PESQUISAS COMPUTACIONAIS PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM INFORMÁTICA

GUILHERME DAS NEVES SEGURO

SPH E REDUÇÃO DE MODELOS APLICADOS À DINÂMICA DOS FLUIDOS

Rio de Janeiro 2015

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO INSTITUTO DE MATEMÁTICA INSTITUTO TÉRCIO PACITTI DE APLICAÇÕES E PESQUISAS COMPUTACIONAIS PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM INFORMÁTICA

GUILHERME DAS NEVES SEGURO

SPH E REDUÇÃO DE MODELOS APLICADOS À DINÂMICA DOS FLUIDOS

Dissertação de Mestrado submetida ao Corpo Docente do Departamento de Ciência da Computação do Instituto de Matemática, e Instituto Tércio Pacitti de Aplicações e Pesquisas Computacionais da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários para obtenção do título de Mestre em Informática.

Orientador: Marcello G. Teixeira Co-orientador: Thomas M. Lewiner

> Rio de Janeiro 2015

S456s

Seguro, Guilherme das Neves

SPH e redução de modelos aplicados à dinâmica dos fluidos / Guilherme das Neves Seguro. – 2015.

139 f.: il.

Orientador: Marcello G. Teixeira; Co-orientador: Thomas M. Lewiner.

Dissertação (Mestrado em Informática) — Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Matemática, Instituto Tércio Pacitti de Aplicações e Pesquisas Computacionais, Programa de Pós-Graduação em Informática, Rio de Janeiro, 2015.

1. SPH. 2. POD. 3. Redução de modelos. 4. Dinâmica dos fluidos. 5. Fluxo incompressível. 6. Escoamento de Poiseuille bidimensional. 7. SVD. 8. XSPH. 9. POD linearizado. 10. Método de Euler. — Teses. I. Teixeira, Marcello G. (Orient.). II. Lewiner, Thomas M. (Co-orient.). III. Universidade Federal do Rio de Janeiro. IV. Título

CDD:

GUILHERME DAS NEVES SEGURO

SPH e redução de modelos aplicados à dinâmica dos fluidos

Dissertação de Mestrado submetida ao Corpo Docente do Departamento de Ciência da Computação do Instituto de Matemática, e Instituto Tércio Pacitti de Aplicações e Pesquisas Computacionais da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários para obtenção do título de Mestre em Informática.

| Aprovado em: | Rio de Janeiro, | de | de |
|--------------|-----------------|-----------------|--------------------|
| | | | |
| | Prof. Dr. Ma | rcello G. Teixe | eira (Orientador) |
| | Prof. Dr. Thon | nas M. Lewine | er (Co-orientador) |
| | Prof. D | r. Daniel G. A | Alfaro Vigo |
| | Dr. Ale | essandro P. Ba | nêta Neves |
| | Profa. Dr | ra. Juliana Via | anna Valério |
| | Prof. D | r. Alex Laier | Bordignon |
| | Prof. Dr. (| Gladson Octav | riano Antunes |

Rio de Janeiro 2015

Ao meu avô Chico.

AGRADECIMENTOS

De todas as partes da dissertação, talvez nenhuma tenha sido mais pensada do que esta. Creio que uma de minhas preocupações mais constantes na vida é nunca ser injusto ou ingrato, com maior pesar para a última. Então, a parte dos agradecimentos foi construída desde o momento em que me inscrevi no mestrado até hoje, sempre com muita atenção para nunca ser injusto e deixar de mencionar meus agradecimentos a alguém importante na caminhada que aqui se encerra.

Aos meus pais, José Luiz e Eliane, eu reservo a primeira e maior parte, sem eles eu não seria nada ou pelo menos nada do que sou hoje. Todo o amor e carinho que me deram ao longo da vida tal como o incentivo pelo estudo desde pequeno, cada qual à sua maneira, fez com que eu me motivasse a querer buscar sempre mais. Não posso deixar de lado, nesse primeiro núcleo a importância que minha irmã, Roberta (Ninha), tem. Ela sempre foi um espelho e parâmetro para mim na vida, até mesmo quando eu estudava para não sofrer com as comparações das conquistas dela. Um dia retribuirei toda essa pressão e carinho na minha afilhada que amo, filha dela, a Manu!

Em seguida, devo deixar aqui meus agradecimentos aos meus mestres. O primeiro deles, meu orientador Marcello Teixeira que me permito dizer que não ficou somente no âmbito acadêmico de influência de vida. Tal como os rumos desta dissertação, já nos deparamos falando sobre a vida em geral e outras filosofias que não se encaixam na academia. Além disso o professor Marcello me apresentou e me presenteou com a possibilidade de trabalhar com o professor Thomas Lewiner, co-orientador deste trabalho, uma pessoa incrível, dedicada e extremamente paciente. Dentre tantos outros professores que passaram pela minha vida, vale ressaltar alguns que me inspiraram: Mauro Rincón, Luis Adauto, Juliana Valério, Susana Scheimberg e Antônio Roberto já na fase de graduação e mestrado tais como os professores Max Madeira, Waldemir Tavares, Maria de Fátima e irmã Célia, ainda na época de Fundamental e Médio.

Aos meus companheiros de LC3 (Laboratório de Computação Científica e Combinatória), por todos os dias que se tornaram mais leves quando a pesquisa e a vida se mostravam mais exaustivas do que o necessário e, com certeza e ênfase, por todas as risadas extraordinárias e histórias que carregarei comigo para sempre: Adriano Alcântara, Aline Riguetti, Amauri Freitas, Bruna Xavier, Bruno Alves, Carla Moraes, Charles Barros, Felipe Alves, Gabriel Thomaz, Juliana Castanon, Júlio Reuther, Mateus Torres, Rodrigo Veloso, Rabi Modesto, Romulo Brito, Thiago Elias e Thiago Sabatucci.

Àqueles que me apoiaram e desejaram meu bem ao longo dessa caminhada fica

aqui também o meu muito obrigado!

Ao CENPES fica meu agradecimento pela bolsa que tive ao longo do curso e que tornou muito mais fácil dispor de tempo para me dedicar aos estudos.

Após a defesa e nos processos de correções que seguem me vi inserido em uma situação que nunca imaginei, mas a vida nos reserva boas surpresas nos momentos difíceis e pessoas se fazem especiais. Gostaria de agradecer à minha namorada Vanessa por ter sido tão incentivadora e presente, sempre me dando força para que eu seguisse em frente. Beijo, Chu, te amo!

RESUMO

SEGURO, Guilherme das Neves. **SPH e redução de modelos aplicados à dinâmica dos fluidos**. 2015. 139 f. Dissertação (Mestrado em Informática) - PPGI, Instituto de Matemática, Instituto Tércio Pacitti de Aplicações e Pesquisas Computacionais, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2015.

O estudo de escoamentos em dutos de placas paralelas é fundamental em diversas áreas da engenharia e suas simulações numéricas facilitam muito tal compreensão. Neste trabalho, as equações que regem o movimento dos fluidos, denominadas equações de Navier-Stokes, são simuladas numericamente pelo SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics), um método lagrangiano e sem malha desenvolvido na década de 1970 cujo interesse tem crescido nos últimos anos. No método SPH, devido à ausência de malha, a aproximação numérica das derivadas da modelagem do problema são feitas através de uma convolução da própria função por uma função de suavização escolhida pelo analista. O método é discretizado em partículas que funcionam como estrutura física e computacional para a simulação, tornando-o extremamente adaptativo, uma vantagem para problemas com grandes deformações, fronteiras livres ou irregulares, por exemplo. Devido ao fato de simulações numéricas terem se tornado cada vez mais comuns em processos industriais, uma grande quantidade de informação é requerida nesse processo e mesmo com computadores cada vez mais potentes ainda se esbarra nas limitações físicas de memória da máquina e processador. A Decomposição Ortogonal Própria, do inglês POD, é um Método de Redução de Modelo (MRM) que processa uma grande quantidade de dados e reproduz a solução esperada utilizando apenas parte destes, feitas as devidas decomposições na matriz que guarda as informações da simulação. A Decomposição em Valores Singulares (SVD) é o método POD escolhido para a realização das decomposições. Nesta dissertação, os métodos SPH e uma linearização do POD foram acoplados para verificar como funcionam juntos e os resultados se mostram fisicamente coerentes para os problemas abordados.

Palavras-chave: SPH, POD, redução de modelos, dinâmica dos fluidos, fluxo incompressível, escoamento de Poiseuille bidimensional, SVD, XSPH, POD linearizado, método de Euler.

ABSTRACT

SEGURO, Guilherme das Neves. **SPH e redução de modelos aplicados à dinâmica dos fluidos**. 2015. 139 f. Dissertação (Mestrado em Informática) - PPGI, Instituto de Matemática, Instituto Tércio Pacitti, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2015.

The study of flows in parallel plate ducts is important in many areas of engineering and its numerical simulations make such understanding much easier. In this work, the governing equations governing of fluids' motion, called Navier-Stokes equations, are numerically simulated by SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics), a meshless Lagrangian method developed in the 1970's whose interest has increased in recent years. In SPH, because of the meshless characteristic, the numerical approximation of the derivative on the problem model are made through a convolution of the specific function by a smoothing function chosen by the programmer. The method is discretized into particles which works as physical and computational structure, making it an extremely adaptive method, an advantage to large deformation problems, free or irregular borders, for example. As numerical simulations has become increasingly common in industrial processes, a large amount of data is required in the process and although computers get more powerful they still face memory limitations and also processor problems. The Proper Orthogonal Decomposition, POD, is a Model Reduction Method (MRM) processing a large amount of data and reproduces the expected solution using only part of the given data, made the appropriate arrengements in the matrix that stores the simulation informations. The Singular Value Decomposition (SVD) is the POD method chosen to carry out the decomposition. In this dissertation, the SPH methods and POD linearization were coupled to verify how they work together and the results are physically show consistent for the problems addressed.

Keywords: SPH, POD, model reduction, fluid dynamics, incompressible flow, bidimensional Poiseuille flow, SVD, XSPH, linear POD, Euler's method.

LISTA DE FIGURAS

| 2.1 | Partícula de fluido como dado em ANDERSON JR. (1995); LIU ; LIU (2003) |
|------|--|
| 2.2 | Pressão hidrostática em um ponto |
| 2.3 | Escoamento laminar |
| 2.4 | Escoamento turbulento |
| 2.5 | Escoamento de Poiseuille |
| 2.6 | Escoamento de Couette |
| 2.7 | Escoamento numa caixa com tampa móvel |
| 2.8 | Tensões em uma partícula de fluido (direção x) ANDERSON JR. |
| | $(1995) \dots \dots$ |
| 2.9 | Tensão viscosa |
| 2.10 | Tensão cisalhante |
| 3.1 | Aproximação por partículas feitas em um domínio suporte circu- |
| | lar de raio κh HOLMES; WILLIAMS; TILKE (2000) 54 |
| 4.1 | Exemplos de domínios suportes |
| 4.2 | Possíveis problemas para a paproximação de partículas 80 |
| 4.3 | Função de cúpula quadrática |
| 4.4 | Função quártica |
| 4.5 | Função cúbica por partes |
| 5.1 | Transformação de uma esfera em S_1 em um elipsóide em S_2 102 |
| 6.1 | Esquema de diferenças finitas |
| 6.2 | Resultado obtido \times resultado apresentado em (BODOIA ; OS- |
| | TERLE, 1961) |
| 6.3 | Desenvolvimento do perfil de velocidades |
| 6.4 | Evolução da pressão ${\cal P}$ no escoamento de Poiseuille comparada |
| | com (BODOIA ; OSTERLE, 1961) |
| 6.5 | Valores singulares da matriz de dados matrizU |
| 6.6 | Aproximação por postos de 1 a 6 |
| 6.7 | Diferenças entre a solução por MDF em 6.3 e as aproximações |
| | por postos de 1 a 6 |
| 6.8 | Extrapolações com tolerâncias de 10^{-1} à 10^{-9} |
| 6.9 | Comparação de evoluções do perfil central de velocidades com o |
| | MDF e o POD |

| 6.10 | Diferença entre o resultado por MDF e as extrapolações com to- |
|------|---|
| | lerâncias de 10^{-1} à 10^{-9} |
| 6.11 | Evolução temporal do sistema massa-mola com integração tem- |
| | poral de Euler |
| 6.12 | Estado inicial SPH |
| 6.13 | Superfície de velocidades SPH |
| 6.14 | Perfil final da coluna do meio |
| 6.15 | Valores singulares da matriz de dados data_matrix |
| 6.16 | Reprodução de 6.13 via POD |
| 6.17 | Comparação entre 6.13 e as superfícies dadas em 6.16 127 |
| 6.18 | Superfícies de velocidade de acordo com a tolerância $tol.$ 130 |
| 6.19 | Comparação: velocidades SPH x velocidades da extrapolação com |
| | POD |
| 6.20 | Diferença de velocidades SPH (6.18) x velocidades da extrapola- |
| | ção com POD (6.13) |

LISTA DE TABELAS

| 2.1 | Valores típicos de densidade |
|-----|---|
| 2.2 | Valores típicos de viscosidade |
| 2.3 | Valores de Re típicos para escoamento laminar 45 |
| 2.4 | Valores de Re típicos para escoamento turbulento 45 |
| 6.1 | Velocidade máxima de acordo com a discretização 109 |
| 6.2 | Ordem da diferença da aproximação em função do número de |
| | valores singulares utilizados |
| 6.3 | Número de valores singulares de acordo com a tolerância 116 |
| 6.4 | Ordem da diferença da aproximação em função do número de |
| | valores singulares utilizado |
| 6.5 | Número de valores singulares de acordo com a tolerância 130 |
| | |

LISTA DE ALGORITMOS

| 1 | Resolução do escoamento de Poiseuille usando o MDF | 107 |
|---|---|-----|
| 2 | Reprodução do escoamento de Poiseuille por MDF usando o POD | 114 |
| 3 | Resolução do escoamento de Poiseuille usando MDF + POD | 116 |
| 4 | Resolução do escoamento de Poiseuille via SPH | 125 |
| 5 | Resolução do escoamento de Poiseuille usando SPH + POD $ \dots \dots $ | 128 |
| 6 | Simulação extrapolada do escoamento de Poiseuille usando SPH + POI | 129 |

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CFD Computational Fluid Dynamics

CFL Courant-Friedrichs-Lewy

CGS Centímetro-Grama-Segundo

CNTP Condições Normais de Temperatura e Pressão

CPU Central Processing Unit

EDO Equação Diferencial Ordinária

FIM Finite Integration Method

EDP Equação Diferencial Parcial

KLD Karhunen-Loève Decomposition

MDF Método de Diferenças Finitas

MEF Método de Elementos Finitos

MRK Método de Runge-Kutta

MRM Método de Redução de Modelo

PCA Principal Component Analysis

POD Proper Orthogonal Decomposition

SPH Smoothed Particle Hydrodynamics

SI Sistema Internacional de unidades

SVD Single Value Decomposition

SUMÁRIO

| 1 IN | NTRODUÇÃO | 17 |
|-------|--|-----|
| 1.1 | MOTIVAÇÃO | 17 |
| 1.2 | ESCOPO DA DISSERTAÇÃO | 20 |
| 1.3 | ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO | 21 |
| | LUBOS | 0.0 |
| | LUIDOS | 23 |
| 2.1 | PROPRIEDADES FÍSICAS | 25 |
| 2.1.1 | Densidade | 25 |
| 2.1.2 | | 26 |
| 2.1.3 | | 27 |
| 2.2 | REGIMES DE ESCOAMENTO | 28 |
| 2.2.1 | Quanto a direção da trajetória das partículas | 29 |
| 2.2.2 | V 3 1 | 31 |
| 2.2.3 | V 3 0 1 | 31 |
| 2.2.4 | Quanto ao seu movimento de rotação | 32 |
| 2.3 | ESCOAMENTOS PROTOTÍPICOS | 32 |
| 2.3.1 | Escoamento de Poiseuille | 32 |
| 2.3.2 | Escoamento de Couette | 33 |
| 2.3.3 | Cavidade com tampa móvel | 33 |
| 2.4 | AS EQUAÇÕES QUE GOVERNAM OS FLUIDOS | 35 |
| 2.4.1 | Descrição lagrangiana x descrição euleriana | 35 |
| 2.4.2 | | 36 |
| 2.4.3 | As equações de Navier-Stokes | 37 |
| 2.5 | O COEFICIENTE DE REYNOLDS | 44 |
| 2.6 | O COEFICIENTE DE MACH (MA) | 45 |
| _ | | |
| | MOOTHED PARTICLE HYDRODYNAMICS | 47 |
| 3.1 | REPRESENTAÇÃO INTEGRAL | 50 |
| 3.1.1 | 1 3 0 | 50 |
| 3.1.2 | 1 | 52 |
| 3.2 | APROXIMAÇÃO POR PARTÍCULAS | 53 |
| 3.2.1 | Aproximação por partícula de uma função | 53 |
| 3.2.2 | Aproximação por partículas de operadores básicos | 55 |
| 3.2.3 | Operadores SPH | 56 |
| 3.3 | SPH APLICADO À DINÂMICA DE FLUIDOS | 60 |
| 3.3.1 | Equação de continuidade | 60 |

| 3.3.2 | Equação de momento | 63 |
|-------|---|-----|
| 3.3.3 | Integração temporal | |
| 4 F | UNÇÕES DE SUAVIZAÇÃO | 70 |
| 4.1 | PROPRIEDADES | 70 |
| 4.2 | CONDIÇÕES DE CONSTRUÇÃO DAS FUNÇÕES DE SUAVIZAÇÃO | 73 |
| 4.2.1 | Aproximando uma função de campo | 74 |
| 4.2.2 | Aproximando uma derivada | 76 |
| 4.2.3 | Aproximando a segunda derivada | 77 |
| 4.2.4 | | |
| 4.2.5 | Consistência da aproximação por partículas | 79 |
| 4.3 | CONSTRUINDO FUNÇÕES DE SUAVIZAÇÃO | 81 |
| 4.3.1 | Funções polinomiais | |
| 4.3.2 | Funções por partes | |
| 4.4 | EXEMPLOS DE CONSTRUÇÃO | |
| 4.4.1 | Função de cúpula quadrática | |
| 4.4.2 | Função quártica | |
| 4.4.3 | Função cúbica por partes | |
| 4.5 | DETERMINAÇÃO DO DOMÍNIO SUPORTE κH | 91 |
| 5 D | ECOMPOSIÇÃO ORTOGONAL PRÓPRIA | 92 |
| 5.1 | MOTIVAÇÃO | |
| 5.2 | CASO DE DIMENSÃO FINITA | |
| 5.2.1 | A decomposição em valores singulares | |
| 5.2.2 | Aproximações de posto reduzidas | |
| 5.3 | INTERPRETAÇÃO GEOMÉTRICA | |
| 6 S | IMULAÇÕES E RESULTADOS | 103 |
| 6.1 | ESCOAMENTO DE POISEUILLE COM MDF | |
| 6.1.1 | As equações de governo | |
| 6.1.2 | | |
| 6.1.3 | | |
| 6.2 | ESCOAMENTO DE POISEUILLE COM MDF USANDO O POD | 111 |
| 6.2.1 | Reprodução do resultado com MDF usando o POD | |
| 6.2.2 | POD como método de extrapolação para os MDF | 114 |
| 6.3 | ESCOAMENTO DE POISEUILLE VIA SPH | |
| 6.3.1 | A equação de movimento | |
| 6.3.2 | Suavização da velocidade: XSPH | |
| 6.3.3 | Resultados | |
| 6.4 | ESCOAMENTO DE POISEUILLE POR SPH USANDO O POD | 124 |
| 6.4.1 | Reprodução SPH via POD | |
| | | |

| 6.4 | .2 POD como extrapolação para os resultados SPH 1 | 27 |
|-----|---|-----|
| 7 | CONCLUSÃO | .32 |
| 7.1 | AVALIAÇÕES DOS RESULTADOS E CONTRIBUIÇÕES DA DIS- | |
| | SERTAÇÃO | 32 |
| 7.2 | TRABALHOS FUTUROS | 34 |
| REI | FERÊNCIAS | 36 |

1 INTRODUÇÃO

1.1 Motivação

A ciência, de maneira geral, pode ser descrita como um conjunto de conhecimentos ordenados e sistemáticos decorrentes de análises teóricas, observações, comparações, deduções lógicas e experimentos que tem por objetivo compreender o mundo material no qual a humanidade está inserida para aproveitá-lo da melhor maneira possível. O que hoje se chama de ciência já teve a alcunha de filosofia natural, onde a matemática desenvolve um papel fundamental.

A matemática, por sua vez, pode ser dividida em duas partes: pura e aplicada. A primeira estuda os conceitos numéricos e espaciais enquanto a segunda estuda as noções da matéria e do tempo, usando os conceitos desenvolvidos na parte pura. Uma das principais áreas de aplicação da matemática é a mecânica, que pode ser descrita como a teoria matemática do movimento e suas causas. Uma interessante ramificação da mecânica é a mecânica de fluidos, que quando trata basicamente de líquidos (na maioria dos casos "água") é denominada hidrodinâmica, que tem por interesse básico estabelecer relações teórico-analíticas entre os elementos cinemáticos do movimento, ou fluxo, e as forças que o causam e mantém TOKATY (1994).

Com o desenvolvimento de novas tecnologias proporcionando ao homem êxitos e avanços notáveis na ciência ao longo do tempo, desde o domínio do fogo, ainda como homo erectus, às mais recentes descobertas como a estrutura do DNA e a exploração espacial, já como homo sapiens, o computador tornou-se uma ferramenta indispensável nas descobertas mais recentes, pois não só aumentou a capacidade hu-

mana de simular e resolver sistemas complicados como também analisar uma grande quantidade de dados.

A Dinâmica de Fluidos Computacional, do inglês CFD, é uma ramificação da mecânica de fluidos que utiliza métodos numéricos e algoritmos para resolver e analisar, através de simulações de computador, problemas que envolvam escoamentos de fluidos. O interesse acerca da CFD tem crescido devido à sua ampla gama de aplicações na indústria automotiva, naval, petroquímica, civil, ambiental e aerospacial.

Escoamentos laminares escoando em tubos e canais são de grande interesse prático por frequentemente aparecerem em processos industriais, ambientais e biológicos. Muitas aplicações em química, engenharia de petróleo e mecânica envolvem fluxos viscosos incompressíveis e lentos através de filtros de dutos, substratos, materiais porosos e outros dispositivos. Portanto, soluções das equações de Navier-Stokes, que descrevem o comportamento de tais fluxos, são de importância fundamental para seu melhor entendimento.

Existem várias abordagens numéricas amplamente estudadas e utilizadas em CFD, a maioria dos métodos convencionais, como o Método de Elementos Finitos (MEF) e o Método de Diferenças Finitas (MDF), utiliza uma grade ou malha computacional no espaço e no tempo, a fim de discretizar e avaliar as equações de Navier-Stokes nos pontos estabelecidos dessa malha. Recentemente, houve um aumento do interesse em relação aos métodos sem malha (meshfree methods), que não requerem a definição de tal grade, o que melhora a flexibilidade do código, porém trazendo novos desafios a serem resolvidos. A principal vantagem da descrição sem malha do problema é quando se lida com fronteiras móveis ou grandes deformações. O método Hidrodinâmico de Partículas Suavizadas (Smoothed Particle Hydrodynamics - SPH) é uma ferramenta numérica sem malha, robusta e de programação

relativamente simples amplamente difundido na literatura.

O método SPH, introduzido simultaneamente por GINGOLD; MONAGHAN (1977); LUCY (1977) para resolução de problemas de fluxos de gases interestelares, teve sua aplicação estendida a outros tipos de problemas dinâmicos da literatura como: transferência de calor CLEARY; MONAGHAN (1999); CARMO (2008), computação gráfica MüLLER; CHARYPAR; D. GROSS (2003), dinâmica de fluidos COLIN; EGLI; LIN (2006); LOBOVSKY; VIMMR (2007); MORRIS; FOX; ZHU (1997); SIGALOTTI et al. (2003); TAKEDA; MIYAMA; SEKIYA (1994) em especial fluidos de superfície livre AZEVEDO (2013); MONAGHAN (1994) e em meios porosos HOLMES; WILLIAMS; TILKE (2000), dentre outros como magneto-hidrodinâmica, explosões gasosas e fluxos granulares. Uma das vantagens do método SPH é a relativa facilidade que podemos incorporar novos termos físicos na formulação do problema e seu tratamento computacional, além da simplicidade do tratamento de fronteiras móveis ou deformações no modelo. Estas características tornaram o método bastante popular para simulações em meso e macro-escala nas diferentes áreas citadas.

Com o advento da computação de alto desempenho, os métodos numéricos estão se estabelecendo como uma ferramenta importantíssima nos estudos hidrodinâmicos e por realizarem simulações cada vez maiores e com quantidades enormes de dados para serem interpretadas. Os Métodos de Redução de Modelos (MRM) tem como uma das questões centrais a redução de dados do sistema dinâmico tratado no problema e expressar suas informações essenciais como médias de alguns vetores da base do problema, mantendo, naturalmente, as características da solução.

Entretanto, mesmo com *softwares* cada vez mais poderosos e memórias maiores, problemas de controle ótimo para EDP's são, geralmente, difíceis de solucionar numericamente surgindo, assim, uma necessidade de desenvolvimento de novas técnicas, tais como: estratégias de controle sub-ótimo e métodos de redução de modelos (redução de ordem). Estes últimos consistem em projetar o sistema dinâmico sobre subespaços consistidos de elementos de base que contenham características da solução esperada. Um dos métodos de redução de modelos é a Decomposição Ortogonal Própria (POD) CHATTERJEE (2000); KUNISCH; VOLKWEIN (1999); LIANG et al. (2002); LUO et al. (2013)

Portanto, a combinação do SPH como método sem malha em problemas de CFD aliado ao POD pode resultar em algo sinérgico, interessante e inovador.

1.2 Escopo da dissertação

O escopo desta dissertação pode ser dividido em quatro partes: i) é feita uma apresentação sobre fluidos, suas propriedades e introduz-se a equação de conservação de massa (2.7) e as equações de Navier-Stokes (2.17), que descrevem seu movimento, ii) apresenta-se o método SPH que em seguida é aplicado à dinâmica de fluidos e às equações de governabilidade para fluidos newtonianos incompressíveis (3.29) e (3.38), iii) apresenta-se o POD, sua equivalência a outros MRM's e chega-se ao teorema da Decomposição em Valores Singulares (SVD) e por fim iv) mostram-se os resultados combinando os temas apresentados anteriormente à problemas hidrodinâmicos de fluxos laminares sob certas condições de contorno. Para tais resultados foram desenvolvidos programas em MatLab no Laboratório de Computação Científica e Combinatória (LC3) da UFRJ.

1.3 Estrutura da dissertação

Esta dissertação é estruturada em 6 capítulos. No capítulo 2 é dada a definição de fluidos tal como suas propriedades físicas e a classificação dos principais regimes de escoamentos. Além disso, apresenta-se as equações que determinam o comportamento hidrodinâmico do fluido de acordo com os princípios físicos fundamentais e, mais especificamente, restringe-se as equações de momento (equações de Navier-Stokes) obtidas para fluidos newtonianos, como, por exemplo, a água e o ar; já que estes representam a grande maioria dos fluidos encontrados na natureza.

No capítulo 3 apresenta-se o método SPH, sua aplicação ao estudo de dinâmica de fluidos e nas equações obtidas no capítulo anterior. É feito um estudo em cima dos operadores SPH que melhor se adequam ao problema apresentado conforme trabalhos feitos anteriormente.

No capítulo 4 é feito um estudo mais detalhado das funções de suavização W que compõem o método SPH. Suas propriedades são exploradas, tal como suas condições de construção para funções polinomiais e por partes, onde há um controle maior de seu comportamento. Por fim são apresentados alguns exemplos e a função que é usada ao longo do presente texto. Por fim, uma pequena discussão sobre o comprimento de suavização que também é um parâmetro na qual W depende.

No capítulo 5 é apresentado o método de decomposição ortogonal, sua motivação e suas aplicações práticas. O teorema da decomposição em valores singulares é apresentado após o desenvolvimento das ideias em dimensões finitas do método POD.

No capítulo 6 são apresentados os 3 resultados do presente trabalho. O primeiro se trata de uma reprodução dos resultados de um estudo feito sobre dinâmica

dos fluidos bidimensional com o MDF. O segundo trata-se da reprodução do primeiro resultado usando o método POD e em seguida a extrapolação do mesmo para uma reprodução a partir apenas de uma parte dos dados. O terceiro resultado é a reprodução do escoamento tratado no primeiro resultado através do método SPH.

No capítulo 7 é o último do presente trabalho e fica reservado para tratarmos das conclusões do trabalho bem como suas contribuições e indicar possíveis futuros trabalhos e interesses de pesquisa sobre o tema.

Para os leitores que já estejam familiarizados com o método SPH, os capítulos 3 e 4 pode ser facilmente pulados tal como o capítulo 2 pode ser dispensado para os leitores que já estejam familiarizados com a dinâmica dos fluidos e suas equações de governabilidade.

2 FLUIDOS

Sir Isaac Newton na seção V do livro II do *Principia* em 1687 definiu um fluido como sendo qualquer corpo cujas partes cedem à qualquer força impressa sobre ele e, por ceder, é movido facilmente entre si, ou seja, apresenta a propriedade de fluir ou escoar. Pode-se então definir um fluido como uma substância que não fornece resistência significativa à tensão tangencial¹ (tensão de cisalhamento ou *shear stress*) e, informalmente, como a substância com a habilidade de tomar a forma de seu recipiente, isto é, um meio deformável. Os fluidos incluem os líquidos, gases, plasmas e, de certa maneira, os sólidos plásticos.

Em matéria condensada - sólidos, líquidos e gases - a diferença fundamental entre sólidos (corpos rígidos) e fluidos está na maneira de responder às tensões tangenciais. Um fluido não pode equilibrar uma tensão tangencial, por menor que ela seja, o que não ocorre em corpos rígidos. Enquanto a força está sendo aplicada o fluido escoa e permanece em movimento. Uma força arbitrariamente pequena pode produzir uma força arbitrariamente grande desde que atue por tempo suficiente no fluido.

Em mecânica dos fluidos, o menor "corpo" de fluido a ser estudado é chamado de elemento infinitesimal de fluido ou partícula de fluido². O principal objetivo da mecânica dos fluidos é a procura do entendimento de como esses elementos se deslocam com seus vizinhos e influenciam tanto o comportamento local quanto global do fluido. Assim sendo, o movimento ou fluxo em uma região influencia e é influenciado pelo movimento de regiões vizinhas em escalas locais e globais. A resistência

¹A tensão tangencial é um tipo de tensão gerada por forças aplicadas em sentidos opostos, porém nas mesmas direções no material analisado.

²Termo físico criado pelo matemático Leonard Euler TOKATY (1994).

ao escoamento determina, em boa parte, o comportamento do fluido.

A figura 2.1 mostra a representação de um elemento infinitesimal de fluido, com um volume diferencial dV, se movendo com velocidade $\mathbf{u}=(v_x,v_y,v_z)=(u,v,w)$, junto com o fluxo representado pelas linhas de campo da figura, como, por exemplo, água escoando em um canal.

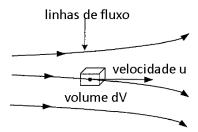


Figura 2.1: Partícula de fluido como dado em ANDERSON JR. (1995); LIU ; LIU (2003)

Observações:

- 1. Em um fluido em equilíbrio estático (velocidade nula), não pode haver tensões tangenciais, pois todas as porções estão em equilíbrio. Para isto, é necessário que a resultante das forças que atuam sobre cada porção do fluido seja nula.
- 2. Na escala macroscópica, um fluido se comporta como um meio contínuo (infinitamente divisível) e suas propriedades variam com a continuidade no entorno de cada ponto do fluido. Na escala microscópica, onde as propriedades sofrem flutuações que refletem a estrutura atômica da matéria, essa hipótese deixa de ser válida. Em condições usuais, as distâncias interatômicas são tão pequenas em confronto com dimensões macroscópicas que as flutuações se tornam imperceptíveis, levando ao modelo do meio contínuo.

2.1 Propriedades físicas

2.1.1 Densidade

A densidade ou massa específica de um fluido pode ser definida por:

$$\rho = \lim_{\Delta V \to 0} \left(\frac{\Delta m}{\Delta V} \right) = \frac{dm}{dV}.$$
 (2.1)

Unidade (no SI): $[\rho] = 1 \frac{kg}{m^3}$.

Seja Δm a massa de um certo volume $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$ de um dado elemento de fluido, como visto na figura 2.1. Isto significa que as dimensões de Δx , Δy e Δz devem ser muito menores que distâncias macroscópicas, mas, ao mesmo tempo, muito maiores que distâncias interatômicas, para que ΔV contenha um grande número de átomos e as flutuações sejam desprezíveis como dito na observação 2. Um cubo de 10^{-8} cm de aresta satisfaz ambas as condições de maneira bem satisfatória. NUSSENZVEIG (2002)

Tabela 2.1: Valores típicos de densidade

| Substância ou objeto | Densidade (kg/m^3) |
|------------------------------|----------------------|
| Melhor vácuo em laboratório | 10^{-17} |
| Ar (a 20°C e 1 atm) | 1,21 |
| Ar (a 20°C e 50 atm) | 60, 5 |
| Água (a 20°C e 1 atm) | $0,998 \cdot 10^3$ |
| Água (a 20°C e 50 atm) | $1,000 \cdot 10^3$ |
| Sangue | $1,060 \cdot 10^3$ |
| Buraco negro (1 massa solar) | 10^{19} |

2.1.2 Pressão

A capacidade de escoar impossibilita o fluido de sustentar uma força paralela à sua superfície, sob condições estáticas, a única componente de força que necessariamente deve ser considerada é a que atua na direção normal externa à superfície do fluido. Independentemente da forma assumida, as forças entre o interior e o exterior estarão, para todas as posições, fazendo um ângulo reto com o contorno do fluido.

A intensidade da força normal $\Delta \mathbf{F}$ por unidade de área de superfície ΔS é chamada pressão e é definida a seguir. Deve-se notar que a pressão p é sempre positiva e uma grandeza escalar:

$$p = \lim_{\Delta S \to 0} \left| \frac{\Delta \mathbf{F}}{\Delta S} \right| = \left| \frac{d\mathbf{F}}{dS} \right|. \tag{2.2}$$

Unidade (no SI): [p] = 1Pa (Pascal) $= 1N/m^2$.

Observação: existem outras unidades encontradas para medir a pressão, por exemplo, define-se a pressão exercida pela atmosfera ao nível do mar como 1 atmosfera (1 atm = $1,01325 \cdot 10^5 \ Pa$).

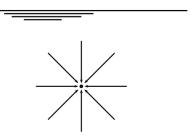


Figura 2.2: Pressão hidrostática em um ponto

Princípio de Pascal: Pela lei de Stevin, a diferença de pressão entre dois pontos de um líquido homogêneo em equilíbrio é constante, dependendo apenas do desnível

entre esses pontos. Portanto se uma variação de pressão é aplicada em um ponto de fluido confinado em equilíbrio, essa variação será transmitida integralmente a todas as porções do fluido e às paredes do recipiente, ou seja, todos os pontos do líquido sofrem a mesma variação de pressão.

2.1.3 Coeficiente de viscosidade

Um fluido real opõe resistência ao deslizamento relativo de camadas adjacentes: esta resistência mede a viscosidade do fluido e depende da taxa de variação espacial da velocidade relativa ao deslizamento. As tensões em sólidos são desenvolvidas quando um material é deformado ou cisalhado elasticamente; para um fluido, as tensões de cisalhamento aparecem devido ao escoamento viscoso FOX; MCDONALD; PRITCHARD (2004).

A viscosidade é uma força volumétrica de atrito interno que aparece no deslizamento de camadas fluidas umas sobre as outras, dando origem às tensões tangenciais.

Lei de Newton para a viscosidade: Para certos fluidos, denominados *newtonianos* como água, ar e gasolina, por exemplo, a tensão de cisalhamento numa interface paralela à direção do escoamento é diretamente proporcional à razão de variação de velocidade na direção normal à interface. Isto é expresso por:

$$\tau = \mu \frac{\partial u}{\partial n},\tag{2.3}$$

onde τ é a tensão de cisalhamento e μ o coeficiente de viscosidade, comumente chamado apenas de viscosidade.

Unidade (no SI): $[\mu] = 1Pa \cdot s$.

Unidade (sistema CGS): $[\mu] = 1P$ (Poise³) = $1P = 1\frac{g}{cm \cdot s}$. $(10P = 1Pa \cdot s)$

| Tabela 2.2: Valores típicos de vis | cosidade |
|------------------------------------|----------|
|------------------------------------|----------|

| Substância | Temperatura (${}^{\circ}C$) | Viscosidade (cP) |
|-----------------|-------------------------------|------------------|
| Éter benzílico | 20 | 5,33 |
| Ar | -192,3 | 0,173 |
| Éter | 20 | 0,233 |
| Água | 20 | 1,002 |
| Água | 99 | 0,2848 |
| Clorofórmio | 20 | 0,58 |
| Glicerina | 20 | 1,490 |
| Álcool etílico | 20 | 1,2 |
| Benzeno | 20 | 0,652 |
| Mercúrio | 20 | 1.554 |
| Azeite de oliva | 20 | 84,0 |

Um fluido é dito perfeito, ideal ou invíscido quando tem seu coeficiente de viscosidade desprezível $(\mu \to 0)$.

Observação: $\mu \equiv \mu(T,p)$ - para líquidos, a viscosidade decresce conforme a temperatura T aumenta e é praticamente independente da pressão p. Nos gases ela cresce junto a temperatura. A generalização da lei de Newton para a viscosidade é dada pela lei de Stokes da viscosidade, que pode ser encontrada em SHAMES (1973).

2.2 Regimes de escoamento

Para simular um escoamento de fluido, faz-se uso da representação físicomatemática da partícula de fluido da figura 2.1 ao longo do tempo. A quantidade física mais importante a ser representada é a velocidade do fluido, pois a velocidade determina não só como o próprio o fluido se move, mas também como outras quantidades físicas (densidade, pressão, temperatura etc) variam com o tempo. O modelo

 $^{^3{\}mbox{Poise}}$ em homenagem a Jean-Louis-Marie Poiseuille.

matemático tradicional para descrever o comportamento de um fluido é dado por um conjunto de EDP's que são deduzidas a partir das seguintes leis físicas:

- conservação de massa: a massa de um elemento de fluido é invariante com o tempo;
- balanço da quantidade de movimento (2^a lei de Newton): a taxa de variação temporal do momento de um elemento de fluido é igual à resultante das forças que atuam sobre o mesmo;
- conservação de energia (1^a lei da termodinâmica): a taxa de variação temporal da energia em um elemento de fluido é igual a soma do fluxo de calor para dentro do elemento com o trabalho realizado por forças que agem sobre o elemento.

O regime de escoamento diz como o fluido se comporta em relação a algumas variáveis.

2.2.1 Quanto a direção da trajetória das partículas

1. Escoamento laminar (streamline flow): neste tipo de escoamento, também conhecido como tranquilo, existe o mínimo de agitação das camadas (lâminas) do fluidos. As diferentes secções do fluido se deslocam ordenadamente em planos paralelos ou em círculos concêntriocs coaxiais sem se misturar. Num fluxo laminar o vetor velocidade u é aproximadamente constante em cada ponto do fluido e as linhas de corrente não se cruzam (figura 2.3). O perfil de velocidade nas seções normais à direção do escoamento deve ser invariantes SHAMES (1973). Por uma definição mais formal, diz-se que um escoamento paralelo é uma solução da equação de condição de continuidade simplificada

em (3.28) $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ da forma $\mathbf{u_0} = (u(y,t),0,0)$. O que quer dizer que as variações no escomaneto ocorrem apenas na componente ao longo da corrente e que essas variações são transversais.

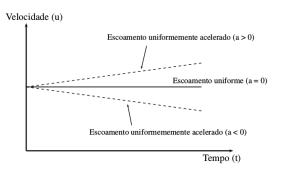


Figura 2.3: Escoamento laminar

2. Escoamento turbulento: as trajetórias das partículas são curvilíneas e irregulares, alterando-se em sentido e se entrecruzando (figura 2.4), formando uma série de minúsculos redemoinhos. O escoamento turbulento é também conhecido como turbilhonário ou hidráulico e, na prática, o escoamento de um fluido, em geral, é turbulento.

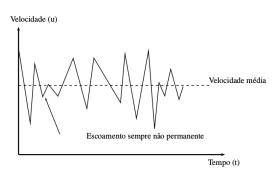


Figura 2.4: Escoamento turbulento

2.2.2 Quanto a variação no tempo

- 1. Escoamento permanente: as propriedades físicas do fluido em determinado ponto do escoamento não variam com o tempo, ou seja, são funções apenas das coordenadas espaciais. A velocidade e a pressão podem variar de um ponto para outro do fluxo, mas são constantes em cada ponto fixo do espaço, a qualquer tempo. Este tipo de escoamento é também chamado de estacionário e sua corrente fluida é estável.
- 2. Escoamento não-permanente: as propriedades do fluido, em determinado ponto, variam com o tempo, ou seja, são funções espaciais e temporais. Elas também variam de um ponto a outro do escoamento. Este tipo é também chamado de variável ou transitório e sua que corrente é instável.

Observação: a estabilidade de um escoamento não está associada à variação temporal. De uma forma geral, estabilidade é a resposta às perturbações nas condições iniciais.

2.2.3 Quanto a variação das trajetórias da partícula

- 1. Escoamento uniforme: é um caso específico do escoamento permanente no qual todos os pontos da mesma trajetória que as partículas seguem apresentam a mesma velocidade. Entre os pontos de uma mesma trajetória, não há variação da velocidade (seu módulo, direção e sentido permanecem constantes). Pode haver variação entre as trajetórias, mas na mesma trajetória, todos os pontos têm a mesma velocidade.
- Escoamento variado: os diversos pontos de uma mesma trajetória não apresentam constância alguma de velocidade em qualquer intervalo de tempo considerado.

2.2.4 Quanto ao seu movimento de rotação

- 1. Escoamento rotacional: a partícula está sujeita à uma velocidade angular em relação ao seu centro de massa. Em virtude da viscosidade o escoamento de fluidos reais sempre se comporta como escoamento rotacional.
- Escoamento irrotacional: numa aproximação prática, em que se desconsidera o comportamento rotacional, as partículas são consideradas indeformáveis e despreza-se a viscosidade.

2.3 Escoamentos prototípicos

2.3.1 Escoamento de Poiseuille

Todo escoamento laminar de fluidos viscosos que ocorrem em dutos e que tenham por uma causa primária de movimento uma diferença de pressão é chamado de Poiseuille. Nesse tipo de escoamento, o fluido é conduzido por paredes que restringem o movimento, a velocidade no centro é máxima e tende a zero quando se aproxima da parede.

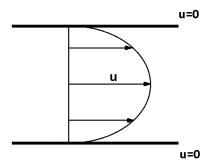


Figura 2.5: Escoamento de Poiseuille

Além de laminar, o fluxo deve ser incompressível e de baixa viscosidade. A força que "empurra" o líquido através do tubo corresponde à variação da pressão aplicada na área transversal do duto, sendo a direção desta força a mesma do movimento do escoamento.

2.3.2 Escoamento de Couette

Se o fluido estiver em um espaço confinado e o escoamento tiver como causa o movimento relativo de superfícies, ele é dito de Couette. A sua causa primária é o arraste viscoso causado pela superfície em movimento e o gradiente de pressão é paralelo às placas. O escoamento de Couette também é laminar.

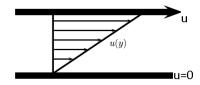


Figura 2.6: Escoamento de Couette

2.3.3 Cavidade com tampa móvel

O fluido fica confinado numa cavidade retangular e a causa do escoamento é o movimento, a uma velocidade constante, da tampa superior enquanto as demais permanecem paradas. O fluxo atingirá um estado estável e, em geral, formará um padrão de recirculação.

Considerações gerais:

1. as condições de contorno de um escoamento são mais facilmente enunciadas no

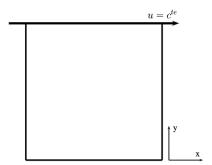


Figura 2.7: Escoamento numa caixa com tampa móvel

caso de superfícies de contorno sólidas. A componente de velocidade normal à superfície deve ser nula no caso da fronteira estacionária (Poiseuille), caso contrário haveria escoamento através da mesma (vazamento);

- 2. nos escoamentos de Couette e da cavidade com tampa móvel, sob CNTP, admite-se que o fluido "cola" na superfície e adquire a sua velocidade, isto é, não há velocidade relativa entre o fluido e a superfície de contorno. Tal fato é conhecido como condição de aderência ou não escorregamento;
- 3. nos escoamentos de Poiseuille e Couette a velocidade instantânea em qualquer ponto é sempre unidirecional. No caso de fronteira sólida, o fluxo apresenta características cinemáticas que resulta em um gradiente de velocidade a partir da fronteira e a velocidade tangencial na fronteira é nula (condição de aderência). O gradiente de velocidade gera tensões de cisalhamento no fluido e consequentemente forças viscosas dissipativas por todo campo de escoamento.

2.4 As equações que governam os fluidos

2.4.1 Descrição lagrangiana x descrição euleriana

Para obter as equações básicas do movimento de fluidos precisa-se adotar os princípios físicos fundamentais adequados à situação e aplicá-los ao modelo escolhido de escoamento. Neste trabalho adota-se o modelo representado na figura 2.1 em que um elemento de fluido de volume dV se desloca no espaço junto com o fluxo e com velocidade \mathbf{u} . Portanto, ao invés de analisar o fluido como um todo, os princípios físicos fundamentais serão aplicados diretamente ao elemento infinitesimal, o que leva às equações fundamentais na forma de EDP's. Considera-se, como dito anteriormente na observação 2, o fluido como sendo um meio contínuo, o que significa que ele não contém vazios, como bolhas dissolvidas de gás, e que todas as variáveis de interesse tais como pressão, velocidade e densidade sejam diferenciáveis e, portanto, contínuas. Isto significa que não ocorre transição de fase e para tal efeito o interesse principal é a forma diferencial das equações, já que sua forma integral permite a presença de descontinuidades dentro do volume de controle do fluido quando fixados no espaço ANDERSON JR. (1995).

A descrição euleriana de um problema dinâmico adota um intervalo de tempo de observação e define um volume de controle no espaço, considerando que todas as partículas passem por esse local, como, por exemplo um observador que escolhe um trecho do rio para por um termômetro na água e fazer as medições. As propriedades do escoamento são dadas em função do espaço (pontos de observação - os vários termômetros no exemplo dado) e do tempo. A descrição lagrangiana por sua vez descreve o movimento de cada partícula, acompanhando-a em sua trajetória total. As partículas são observadas como uma função do tempo e o referencial desloca-se simultaneamente com o elemento. No exemplo dado do termômetro no rio, a descri-

ção lagrangiana seria como uma bóia com um termômetro medindo a temperatura da água que se desloca junto com a mesma.

2.4.2 A equação de continuidade

Como um sistema é, por definição, uma porção arbitrária de matéria com identidade fixa, ele é constituído da mesma quantidade de matéria em todos os instantes de tempo analisados, portanto a massa de um sistema deve ser conservada e permanecer constante.

A equação de continuidade é baseada no princípio físico de conservação de massa. Assim sendo, considera-se um elemento infinitesimal lagrangiano de fluido como na figura 2.1 suficientemente pequeno, que se mova junto com o fluxo e que possua uma massa Δm fixa, mas seu formato e volume ΔV podem sofrer alterações conforme o mesmo se movimenta. Considerando a equação dada em 2.1, tem-se:

$$\Delta m = \rho \Delta V, \tag{2.4}$$

sendo Δm a massa fixa, ΔV o volume infinitesimal, chamado de volume de controle, e ρ sua densidade. Como a massa é conservada, pode-se dizer que a variação temporal de massa desse elemento de fluido ao longo do escoamento é nula, ou seja:

$$\frac{D(\Delta m)}{Dt} = 0. (2.5)$$

Combinando as equações (2.4) e (2.5) e em seguida dividindo ambos os lados por ΔV chega-se a:

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \frac{1}{\Delta V} \frac{D(\Delta V)}{Dt} = 0. \tag{2.6}$$

Usando a igualdade $\frac{1}{\Delta V}\frac{D(\Delta V)}{Dt} = \nabla \cdot \mathbf{u}$ LIU ; LIU (2003) finalmente chega-se

a equação de conservação de massa na forma lagrangiana, dada por:

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \tag{2.7}$$

onde $\frac{D(*)}{Dt}$ é a derivada total⁴ da grandeza envolvida. Uma observação interessante a ser feita é o significado físico de $\nabla \cdot \mathbf{u}$, que representa a taxa de variação temporal do volume do elemento infinitesimal de fluido em movimento por unidade de volume. Em outras palavras, pode-se dizer que a variação da massa de um fluido no interior do volume de controle V, em relação ao tempo, é igual ao fluxo através de sua fronteira ∂S .

A equação na forma euleriana é bastante similar e dada abaixo:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \tag{2.8}$$

Neste trabalho, porém, será usada a relação obtida em (2.7) visto que o método utilizado e apresentado no capítulo 3 é de descrição lagrangiana. Em AN-DERSON JR. (1995) pode-se encontrar a equivalência entre as duas formas apresentadas e mais duas formas usando um volume de controle ao invés da abordagem de um elemento de fluido como feito aqui. Em LEWINER et al. (2009) é feita uma demonstração da equação de continuidade a partir do teorema do transporte.

2.4.3 As equações de Navier-Stokes

Os três fatores principais na conceituação do escoamento dos fluidos são devido às forças de convecção, pressão e viscosidade. Os três determinam como o fluido se comportará uma vez dada a condição inicial e se o fluido está ou não confinado.

 $[\]overline{}^4$ A derivada total ou material de uma grandeza é a soma de todas as derivadas parciais da mesma: $\frac{D(\cdot)}{Dt} = \frac{\partial(\cdot)}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)(\cdot)$. É descrita como a taxa de variação em relação ao tempo de alguma quantidade (calor ou momento) que está sendo transportado por correntes de fluido.

As forças convectivas⁵ são devidas tanto à difusão quanto à advecção. A difusão vem de forças randômicas em consequência do movimento das moléculas do fluido e, portanto, é a soma de forças que se dão em escalas muito pequenas. A advecção, por outro lado, é devida às forças que acontecem nas grandes escalas como, por exemplo, um fluido em turbulência ou submetido a uma fonte de calor.

A força que provém da pressão é expressa como gradiente da pressão usual, ou seja, a variação espacial de forças transversais ao fluido por unidade de área, seja ela positiva (compressão) ou negativa (rarefação). Essas forças são bastante influenciadas pela densidade do fluido (como será mostrado na equação (3.34)), assim fluidos incompressíveis tendem a ter pouca variação de pressão.

A viscosidade, por sua vez, é o termo mais delicado de se tratar. Duas características têm uma importância preponderante: a difusão e o número de Reynolds. A difusão é definida como a variação espacial do gradiente da velocidade, ou seja, o laplaciano da velocidade, enquanto que o número de Reynolds expressa, na média, a relação entre as forças convectivas e as de difusão.

As equações de Navier-Stokes são equações diferenciais que descrevem o escoamento de fluidos e permitem determinar os campos de velocidade e de pressão (frequentemente se usa o plural porque a equação é apresentada em termos de um vetor, de modo que possui diversas componentes). Essas equações foram desenvolvidas para descrever o movimento de substâncias fluidas e estabelecem que as mudanças no momento e aceleração de uma partícula fluida são simplesmente o produto das mudanças na pressão e forças viscosas dissipativas que atuam no fluido e que se originam na interação molecular.

 $^{^5{\}rm A}$ convecção é a forma de transmissão do calor (energia térmica) que ocorre nos fluidos e se dá através de seu fluxo envolvendo transporte de matéria.

Diferentemente das equações algébricas, as equações de Navier-Stokes são EDP's que descrevem o movimento do fluido e não procuram estabelecer uma relação entre as variáveis de interesse e sim relações entre as taxas de variação destas quantidades. Em termos matemáticos, estas razões correspondem a suas derivadas e ao operador divergente. Para o caso mais simples, de um fluido ideal ($\mu = 0$), as equações de Navier-Stokes estabelecem que a aceleração (razão de variação da velocidade em relação tempo) é proporcional à derivada da pressão interna (equação de Euler).

Princípio da quantidade de movimento Também chamado de princípio de ação de forças, diz que a força resultante agindo sobre um sistema é igual à taxa com a qual a quantidade de movimento do sistema está mudando. Em outras palavras, trata-se da segunda lei de Newton ($\sum F = ma$). Classifica-se as forças atuantes sobre um porção de um meio contínuo em forças de corpo e forças superficiais.

1. Forças de corpo: As forças de corpo ou volumétricas são forças de longo alcance e atuam em todos os pontos do meio, de tal forma que a força resultante sobre um elemento de volume é proporcional ao mesmo. Tais forças são proporcionais à massa atuando em todo o material e são ditas propriedades extensivas do mesmo. Portanto, a força total agindo no elemento de volume dV, onde f é a força por unidade de massa:

$$F_{corpo} = \int_{V} \rho f dV. \tag{2.9}$$

Os campos gravitacional, elétrico e magnético são exemplos de forças de corpo, assim como forças centrífugas sobre um fluido em rotação a partir de um referencial não inercial, que não acompanha a rotação do fluido. Para um estudo de fluidos apenas o primeiro grupo de forças é considerado e, na maioria dos problemas hidrodinâmicos, apenas o campo gravitacional é levado em consi-

deração como força de corpo o que leva a:

$$F_{corpo} = mg. (2.10)$$

2. Forças de superfície: As forças de superfície são forças de interação entre uma dada porção do meio, limitada por uma superfície S e porções adjacentes, interatômicas de curto alcance, transmitidas através da superfície S. Por serem resultado da interação com o material, agem na fronteira já que dependem de contato. A força superficial total agindo sobre S pode ser escrita como:

$$F_{superficie} = \int_{\partial S} \mathbb{T} dS, \qquad (2.11)$$

onde \mathbb{T} é o tensor simétrico 3×3 , chamado tensor das tensões e ilustrado na figura 2.8 e dado por:

$$\mathbb{T} = \begin{pmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{pmatrix},$$
(2.12)

onde τ_{ij} representa a tensão exercida na direção j sobre um plano perpendicular ao eixo i.

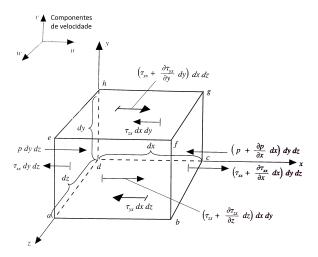


Figura 2.8: Tensões em uma partícula de fluido (direção x) ANDERSON JR. (1995)

Tais forças são decorrentes de apenas duas fontes:

- (a) Forças de pressão que agem perpendicularmente à superfície do elemento de fluido, em decorrência da pressão exercida por um elemento exterior que envolve o elemento de fluido, pois em regiões de alta pressão, o elemento de fluido é comprimido. Enquanto que em regiões de baixa pressão, o elemento tende a esticar. Portanto, as forças de pressão são proporcionais à variação temporal do volume do elemento de fluido.
- (b) Tensões viscosas normais que agem perpendicularmente à superfície do elemento de fluido, alterando o seu volume (figura 2.10) e tensões de cisalhamento que agem tangencialmente à superfície do elemento por meio de fricção com elementos vizinhos causando-lhe uma deformação cisalhante (figura 2.9). A distribuição dessas tensões de T como dado em (2.12) se dá da seguinte forma: os coeficientes da diagonal são as tensões normais e os demais são as tensões de cisalhamento.

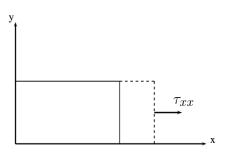


Figura 2.9: Tensão viscosa

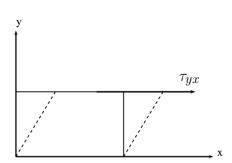


Figura 2.10: Tensão cisalhante

Considerando um elemento de fluido infinitesimal de volume dV = dxdydz com as forças descritas representadas na figura 2.8, a força resultante na direção x se dá por:

$$F_{x} = - \left[\left(p + \frac{\partial p}{\partial x} dx - p \right) \right] dy dz + \left[\left(\tau_{xx} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} dx \right) - \tau_{xx} \right] dy dz + \left[\left(\tau_{yx} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} dy \right) - \tau_{yx} \right] dx dz + \left[\left(\tau_{zx} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} dz \right) - \tau_{yx} \right] dx dy,$$

$$(2.13)$$

o que pode ser reescrito como:

$$F_x = \left(-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z}\right) dx dy dz. \tag{2.14}$$

Considerando o movimento na direção do eixo x tem-se:

$$\underbrace{\left(-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z}\right) dx dy dz}_{F_{corpo}} + \underbrace{\rho dx dy dz g}_{F_{corpo}} = \underbrace{\rho dx dy dz}_{m} \underbrace{\frac{Du}{dx}}_{a}. \tag{2.15}$$

Vale reparar que foi usada a relação dada em 2.1, considerando o volume dV = dxdydz do elemento de fluido da figura 2.8 e ao invés de escrever m para representar a massa, usa-se $\rho dxdydz$.

Isolando o termo de aceleração $\frac{Du}{Dt}$ e fazendo um modelo análogo para as forças nos eixos y e z obtém-se:

$$\begin{cases}
\frac{Du}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + g \\
\frac{Dv}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + g \\
\frac{Dw}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + g.
\end{cases} (2.16)$$

As três equações de momento descritas acima podem ser escritas como sendo apenas uma em notação vetorial usando os operadores gradiente e divergente como feito abaixo. Tais equações são as ditas equações de Navier-Stokes:

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla\mathbf{p} + \frac{1}{\rho}\nabla\cdot\mathbf{T} + \mathbf{g}.$$
 (2.17)

Caso o fluido seja newtoniano, a lei de viscosidade dada em (2.3) é válida e as tensões τ_{ij} exercidas sobre o fluido são proporcionais aos gradientes de velocidade,

isto é, ao tensor taxa de deformação \mathbb{D} :

$$\tau_{ij} = 2\mu \left[\mathbb{D}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \operatorname{traço}(\mathbb{D}) \right]$$
 (2.18)

sendo δ_{ij} o delta de Kronecker⁶ com

$$\mathbb{D}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mathbf{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \mathbf{u}_j}{\partial x_i} \right). \tag{2.19}$$

Assim sendo, o tensor das tensões \mathbb{T} na equação (2.17) fica:

$$\mathbb{T} = 2\mu \left[\mathbb{D} - \frac{1}{3} \operatorname{traco}(\mathbb{D}) \mathbb{I} \right], \tag{2.20}$$

com $\mathbb{D} = \frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T \right)$ e \mathbb{I} representando a matriz identidade. Note também que $\mathsf{traço}(\mathbb{D}) = \nabla \cdot \mathbf{u}$ LEWINER et al. (2009).

Finalmente, obtém-se a equação lagrangiana de Navier-Stokes para fluidos newtonianos, dada por:

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla\mathbf{p} + \frac{\mu}{\rho}\nabla^2\mathbf{u} + \mathbf{g}.$$
 (2.21)

Uma observação interessante sobre T, para tais fluidos, Stokes em 1845 obteve

$$\begin{cases}
\tau_{xx} = \lambda(\nabla \cdot u) + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} \\
\tau_{yy} = \lambda(\nabla \cdot u) + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} \\
\tau_{zz} = \lambda(\nabla \cdot u) + 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} \\
\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \\
\tau_{xz} = \tau_{zx} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\
\tau_{yz} = \tau_{zy} = \mu \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right),
\end{cases}$$
(2.22)

⁶Delta de Kronecker: $\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & , \text{ se } i = j \\ 0 & , \text{ se } i \neq j. \end{cases}$

onde μ é o coeficiente de viscosidade molecular e λ é o segundo coeficiente de viscosidade. Stokes ainda fez a hipótese que

$$\lambda = -\frac{2}{3}\mu,\tag{2.23}$$

o que é frequentemente utilizado, mas não foi provado com sucesso até o presente ANDERSON JR. (1995). No presente trabalho, não se utiliza destes resultados.

A equação (2.21) na forma euleriana fica como:

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)(\mathbf{u}) \right] = \rho \mathbf{g} + \mu \nabla^2 \mathbf{u} - \nabla \mathbf{p}.$$
 (2.24)

O tratamento matemática das equações de Navier-Stokes

2.5 O coeficiente de Reynolds

O coeficiente, número ou módulo de Reynolds, denotado por Re, é um número adimensional usado em mecânica dos fluidos para o cálculo do regime de escoamento de determinado fluido sobre uma superfície. O seu significado físico é um quociente entre as forças de inércia $(\mathbf{u}\rho)$ e as forças viscosas (μ/L) . É expressado por:

$$Re = \frac{\mathbf{u}\rho L}{\mu} \tag{2.25}$$

sendo ${\bf u}$ a velocidade média do fluido, ρ a massa específica do fluido, L a longitude característica do fluxo, também chamada de comprimento de desenvolvimento, e μ a viscosidade dinâmica do fluido.

A significância fundamental do número de Reynolds é que ele permite avaliar o tipo do escoamento (a estabilidade do fluxo) e pode indicar se flui de forma laminar ou turbulenta. De maneira geral, admite-se os valores de 2.000 e 2.400 como limites,

isto é, para valores menores que 2.000 o fluxo será laminar, e para valores maiores que 2.400 o fluxo será turbulento. Entre estes dois valores o fluxo é considerado como transitório.

O número de Reynolds constitui a base do comportamento de sistemas reais, pelo uso de modelos físicos reduzidos. Pode-se dizer que dois sistemas são dinamicamente semelhantes se o número de Reynolds for o mesmo para ambos.

Tabela 2.3: Valores de Re típicos para escoamento laminar

| Fluxo | Re |
|----------------------------|-----------------------|
| Água (CNTP) | $1,006 \cdot 10^{-6}$ |
| Fluxo de sangue no cérebro | 10^{2} |
| Fluxo de sangue na aorta | 10^{3} |

Tabela 2.4: Valores de Re típicos para escoamento turbulento

| Fluxo | Re |
|----------------|------------------|
| Pessoa nadando | $4 \cdot 10^{6}$ |
| Avião | 10^{7} |
| Baleia azul | $3 \cdot 10^{8}$ |

2.6 O coeficiente de Mach (Ma)

Assim como o coeficiente de Reynolds, o coeficiente ou módulo de Mach, denotado por Ma ou M, é uma medida adimensional de velocidade e é definido como a razão entre a velocidade média do fluido \mathbf{u}_m e a velocidade do som no mesmo c, ou seja,

$$Ma = \frac{\mathbf{u}_m}{c}. (2.26)$$

Em casos de estudos aerodinâmicos mais complexos, Ma é definido como a razão da velocidade média do objeto pela velocidade do som do meio em que esse

objeto se encontra. Faz-se a seguinte classificação do escoamento de acordo com o número de Mach

$$\begin{cases} Ma < 0.3, \text{ escoamento incompressível} \\ Ma > 0.3, \text{ escoamento compressível} \end{cases}$$
 (2.27)

Ainda na classificação dos escoamentos compressíveis, pode-se classificá-los como: escoamento subsônico (0.3 < Ma < 0.8) onde não há onda de choque, escoamento transônico (0.8 < Ma < 1.2) quando já há um início de formação de ondas de choque, escoamento supersônico (1.2 < Ma < 3) e escoamento hipersônico (Ma > 3).

3 SMOOTHED PARTICLE HYDRODYNAMICS

Como dito no capítulo 1 o SPH é um método de simulação numérica sem malha, adaptativo, estável, de escala macroscópica e de descrição lagrangiana, inicialmente desenvolvido para simulação de fluxo de gás interestelar em GINGOLD; MONAGHAN (1977); LUCY (1977), mas que nos últimos anos tem sido usado para modelar problemas hidrodinâmicos e de mecânica dos sólidos que se encontram modelados na forma de EDP's.

A discretização do método SPH é dada por um conjunto de partículas, definidas como pontos no espaço, às quais outras propriedades individuais relacionadas à física do fenômeno simulado como densidade, velocidade, temperatura, pressão, energia e etc podem ser associadas. Em um dado ponto do domínio, cada função ou uma de suas derivadas é aproximada por uma média ponderada de contribuições dadas por partículas que estão próximas ao ponto.

Assim, no SPH o estado do sistema é totalmente representado por um conjunto de partículas, isto é, além de representar o objeto material da simulação mostrando suas propriedades físicas, as partículas também são utilizadas como estrutura computacional, o que torna a programação simples. Além disso, a massa do sistema é trivialmente conservada, ou seja, o problema de difusão numérica presente nos métodos eulerianos não ocorre no SPH.

O SPH é basicamente um método de interpolação e sua formulação pode ser compreendida em duas fases: representação integral e aproximação por partículas. Na primeira, uma dada propriedade f(x) é definida pela convolução de f por uma

¹Convolução: é um operador que a partir de duas funções produz uma terceira. O conceito de

função suave W, chamada de função de suavização ou função kernel, dentro de um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, cuja extensão é proporcional ao comprimento de suavização h.

As ideias chave do método SPH podem ser descritas da seguinte forma (LIU ; LIU, 2003):

- 1. O domínio do problema é representado por um conjunto de partículas distribuídas arbitrariamente, caso já não esteja nessa forma. Nenhuma conectividade é necessária entre as mesmas e esse aspecto é a característica sem malha do método. O principal problema desse tipo de abordagem está em assegurar a estabilidade da solução numérica, especialmente em condições de contorno de Neumann;
- 2. A representação integral de uma função, chamada de aproximação de núcleo, kernel approximation ou kernel interpolation é usada para a aproximação das funções de campo e fornece a estabilidade matemática necessária do método, dado que a representação integral tem um efeito de suavização, semelhante à formulação fraca do problema. As formulações fracas em geral são muito estáveis desde que a integração numérica seja realizada com boa precisão;
- 3. A aproximação de núcleo é novamente aproximada usando-se partículas, tal processo é chamado de aproximação de partículas (particle approximation). Isto é feito substituindo as integrais por somatórios sobre todos os valores correspondentes nas partículas vizinhas em um domínio local, chamado domínio suporte². Isso produz sistemas lineares com matrizes de banda ou esparsas o

convolução está ligado ao de média móvel e é crucial no estudo de sistemas lineares invariantes no tempo MEDEIROS ; MIRANDA (2011).

$$(f*g)(x) = \int_{\mathbb{R}} f(x-y)g(y)dy = \int_{\mathbb{R}} f(y)g(x-y)dy.$$

 $^{^{2}}$ Ver equação (4.2).

que é conveniente já que o esforço computacional é levado em consideração. Problemas com grandes deformações necessitam de um grande número de partículas para representar o domínio do problema e isso pode levar um tempo demasiadamente longo para a CPU resolver tais sistemas caso as matrizes estejam cheias;

- 4. A aproximação de partículas é realizada a cada passo de tempo e, portanto, o uso de partículas depende da atualização da distribuição espacial das mesmas, o que forma a característica adaptativa do método. Devido a esta aproximação adaptativa a formulação do SPH não é afetada pela arbitrariedade da distribuição de partículas que varia com o tempo e daí pode facilmente lidar com problemas de grandes deformações. Para garantir a precisão da integração e a estabilidade numérica, um número suficiente de partículas deve ser utilizado no somatório. Além disso, um valor de massa é atribuído às partículas, o que significa que elas são efetivamente as partículas do material físico;
- 5. A aproximação de partículas é realizada em todos os termos relacionados às funções de campo das EDP's para produzir um conjunto de EDO's discretizadas em relação ao tempo (característica lagrangiana);
- 6. As EDO's são resolvidas usando um algoritmo de integração temporal explícito para alcançar um passo de tempo rápido e obter o histórico de todas as variáveis. O que precisa ser feito é descobrir uma maneira de determinar o passo de tempo adequado para assegurar a estabilidade do integrador temporal utilizado.

Sendo assim, a essência do método está baseada em duas ideias: a primeira é de que as propriedades do material em um ponto são aproximadas pela média ponderada das propriedades ao seu redor e a segunda é de que o meio contínuo é aproximado por um número finito de partículas, que se movimentam livremente sob interação mútua e ação de qualquer força externa.

As principais vantagens e facilidades de métodos lagrangianos sem malha são:

- utilização em problemas com grandes deformações, uma vez que as partículas não apresentam nenhuma conectividade fixa;
- captura de superfícies livres e suas variações;
- utilização em problemas com geometrias complexas ou irregulares, umas vez que a distribuição de partículas acontece somente no início da simulação.

Representação integral 3.1

A representação integral ou aproximação de núcleo é o primeiro passo dos dois essenciais descritos no método SPH.

3.1.1 Representação integral de uma função de campo:

A formulação integral de uma função $f:\Omega\subset\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^m$ (em geral, n=3 e m=1) bem definida e contínua em Ω começa a partir da seguinte identidade:

$$f(x) = \int_{\Omega} f(x')\delta(x - x')dx' \quad ; \quad x, x' \in \mathbb{R}^n,$$
 (3.1)

onde δ é a distribuição Delta de Dirac³.

A equação (3.1) mostra que a função pode ser representada na forma integral e é exata, contanto que f(x) esteja definida e seja contínua em Ω . A partir dessa

 $^{^3\}mathrm{O}$ delta de Dirac é uma distribuição com as seguintes propriedades:

¹⁾ $\delta(x)=0$ se $x\neq 0$ e $\delta(0)=\infty;$ 2) $\int_{\mathbb{R}}\delta(x)dx=1.$ Seu análogo no domínio discreto é o Delta de Kronecker.

formulação, substitui-se o Delta de Dirac por uma função suave $W \equiv W(x - x', h)$ chamada função de suavização (*smoothing function*) e faz-se sua convolução com f(x') para aproximar o valor de f(x):

$$f(x) = \int_{\Omega} f(x')W(x - x', h)dx', \tag{3.2}$$

onde h é o comprimento de suavização que define a área de influência da função de suavização W, cuja construção e propriedades serão descritas e tratadas no capítulo 4. A princípio, de maneira mais rigorosa, deve-se existir $W^* : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ tal que:

$$W(x - x', h) = \frac{1}{h^n} W^* \left(\frac{1}{h} || \mathbf{x} || \right), \tag{3.3}$$

onde n é a dimensão do problema, h é um número positivo e W^* é uma função diferenciável, com suporte compacto e integral unitária. Uma família W de funções diferenciáveis, com suporte compacto e integral unitária, é dita uma aproximação da identidade LEWINER et al. (2009).

Notação: O operador da representação integral é marcado por (*).

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

- Propriedades de $\langle * \rangle$: Sejam f_1, f_2 funções $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ e $c \in \mathbb{R}$.

1.
$$\langle f_1 + f_2 \rangle = \langle f_1 \rangle + \langle f_2 \rangle = \langle f_2 \rangle + \langle f_1 \rangle$$

2.
$$\langle f_1 \cdot f_2 \rangle = \langle f_1 \rangle \cdot \langle f_2 \rangle = \langle f_2 \rangle \langle f_1 \rangle$$

3.
$$\langle cf_1 \rangle = c \langle f_1 \rangle$$

3.1.2 Representação integral da derivada de uma função:

Utilizando o operador dado em (3.4) para uma função $f:\Omega\subset\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^m$ e a condição de compacidade de seu suporte, obtém-se a representação integral de um operador diferencial de f. Para obter o operador divergente " $\nabla \cdot$ ", basta substituir "f" por " $\nabla \cdot f$ "

$$\langle \nabla \cdot f(x) \rangle = \int_{\Omega} [\nabla \cdot f(x')] W(x - x', h) dx'. \tag{3.5}$$

Fazendo uso da igualdade a seguir,

$$[\nabla \cdot f(x')]W(x-x',h) = \nabla \cdot [f(x')W(x-x',h)] - f(x') \cdot W(x-x',h),$$

separa-se a expressão em duas integrais LIU; LIU (2003):

$$\langle \nabla \cdot f(x) \rangle = \int_{\Omega} \nabla \cdot f(x') W(x - x', h) dx' - \int_{\Omega} f(x') \cdot \nabla W(x - x', h) dx', \quad (3.6)$$

aplicando então o teorema da divergência⁴ no primeiro termo do lado direito da equação (3.6):

$$\langle \nabla \cdot f(x) \rangle = \int_{\partial \Omega} [f(x')W(x - x', h)] \cdot \mathbf{n} dS - \int_{\Omega} [f(x') \cdot \nabla W(x - x', h)] dx', \quad (3.7)$$

onde **n** é o vetor normal à superfície $\partial\Omega$.

Finalmente, usando o fato de W ter suporte compacto (Ideia chave 4.2 e propriedade 4.3 da seção 4.1) chega-se a:

$$\langle \nabla \cdot f(x) \rangle = -\int_{\Omega} f(x') \cdot \nabla W(x - x', h) dx'.$$
 (3.8)

$$\int_{\partial\Omega} (F \cdot \mathbf{n}) dS = \int_{\Omega} (\nabla \cdot F) d\Omega$$

⁴Teorema da divergência (Teorema de Gauss): Seja Ω uma região fechada e limitada de \mathbb{R}^3 cuja fronteira $\partial\Omega$ é uma superfície orientada positivamente. Se F é um campo vetorial de classe \mathcal{C}^1 em um subconjunto aberto de \mathbb{R}^3 que contém Ω então:

Vale observar que para casos onde o domínio suporte sobrepõe-se ao domínio do problema algumas modificações serão necessárias.

Seguindo o mesmo raciocínio, pode-se obter a representação integral para o gradiente de uma função escalar, dada por:

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

As representações integrais do SPH em (3.8) e (3.9) de uma função de campo permitem que o divergente e o gradiente sejam determinados a partir dos valores da função e das derivadas espaciais da função de suavização W ao invés das derivadas da própria função, isto é uma característica similar às formulações fracas de outros métodos.

3.2 Aproximação por partículas

A aproximação por partículas ($particle\ approximation$) é o segundo passo dos dois essenciais no SPH.

3.2.1 Aproximação por partícula de uma função

No SPH todo o sistema é representado por um número finito de partículas distribuídas no domínio do problema, que carregam massa e ocupam um determinado espaço. A representação integral obtida anteriormente nas equações (3.4), (3.8) e (3.9) é convertida em uma forma discreta com somatório sobre todas as partículas contidas no domínio suporte, como mostrado na figura 3.1. O processo discreto do somatório sobre as partículas é chamado de aproximação por partículas.

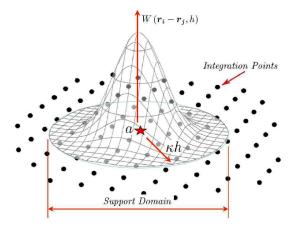


Figura 3.1: Aproximação por partículas feitas em um domínio suporte circular de raio κh HOLMES ; WILLIAMS ; TILKE (2000).

A aproximação por partículas é usada para calcular o valor de uma função ou de suas derivadas numa posição conhecida do espaço discreto como a convolução dos valores da função em partículas vizinhas com uma função de distância analítica conhecida, sem a necessidade de malhas. Usando a condição de compacidade, a integração sobre o domínio do problema Ω se reduz à integração sobre o suporte compacto do núcleo e, portanto, o somatório também pode ser calculado localmente.

Substituindo-se o volume infinitesimal dx' na partícula j pelo volume ΔV_j que obedece a relação $m_j = \rho_j \Delta V_j$, adaptada da equação (2.1), sendo m a massa e ρ a densidade, com $j = 1, \ldots, N$, onde N é o número de partículas no domínio suporte da partícula i, tem-se:

$$dx' = \Delta V_j = \frac{m_j}{\rho_j}. (3.10)$$

Então a aproximação por partículas é dada por:

$$\langle f(x_i) \rangle = \sum_{j=1}^{N} \frac{m_j}{\rho_j} f(x_j) W_{ij} \quad ; \quad W_{ij} = W(x_i - x_j, h),$$
 (3.11)

ou seja, o valor da função na partícula i é aproximado pela média dos valores em todas as partículas j do domínio ponderada pela função de suavização W. Note que W_{ij} tem unidade inversa de volume.

3.2.2 Aproximação por partículas de operadores básicos

De modo análogo ao que foi feito na seção anterior, os operadores divergente e gradiente de uma função f vetorial e escalar serão aproximados, respectivamente, por:

$$\langle \nabla \cdot f(x_i) \rangle \equiv \langle \nabla \cdot f_i \rangle = \sum_{j=1}^{N} \frac{m_j}{\rho_j} f(x_j) \cdot \nabla_i W_{ij} = \sum_{j=1}^{N} \frac{m_j}{\rho_j} f_j \cdot \nabla_i W_{ij}$$
(3.12)

е

$$\langle \nabla f(x_i) \rangle \equiv \langle \nabla f_i \rangle = \sum_{j=1}^{N} \frac{m_j}{\rho_j} f(x_j) \nabla_i W_{ij} = \sum_{j=1}^{N} \frac{m_j}{\rho_j} f_j \nabla_i W_{ij},$$
 (3.13)

onde:

$$\nabla_i W_{ij} = \frac{x_i - x_j}{\|x_i - x_j\|} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} = \frac{x_{ij}}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}}.$$
 (3.14)

Deve-se notar que o gradiente da função de suavização é tomado com respeito a partícula i e portanto o sinal negativo nas equações (3.12) e (3.13) são removidos nas aproximações por partículas.

O uso dessa soma em partículas arbitrariamente distribuídas para aproximar a integral faz do SPH um método muito atraente para simulações de fluidos que sofrem grandes deformações ou de superfície livre AZEVEDO (2013); MONAGHAN (1994). Vale ressaltar que a aproximação por partículas introduz massa e densidade às equações, o que é convenientemente aplicado a problemas hidrodinâmicos nos quais a densidade é uma variável de interesse.

Entretanto, a aproximação por partículas também está relacionada a alguns problemas numéricos inerentes ao SPH como a inconsistência da partícula e a instabilidade à trações. Deve-se mencionar que o número de pontos da amostragem, para a integração deve ser maior do que os nós de campo (partículas). Sugestões para tratamentos de tais problemas são encontrados em LIU; LIU (2003).

3.2.3 Operadores SPH

As aproximações obtidas nas equações (3.12) e (3.13) para os operadores diferenciais são raramente utilizadas quando o SPH é usado para simulações em CFD, pois são imprecisos e frequentemente não obedecem às propriedades de conservação associadas às equações do modelo contínuo. Outras aproximações resultantes de propriedades implícitas do próprio método ou de identidades para os operadores diferenciais se mostraram mais adaptados à física do problema ou à definição matemática TAKEDA; MIYAMA; SEKIYA (1994).

3.2.3.1 Operadores de primeira ordem

Quando os operadores aproximados pelas equações dadas anteriormente são combinados com um termo que contém a expressão nula:

$$\nabla W(x) = \sum_{j=1}^{N} \nabla W(x - x_j) = 0,$$

desde que $\{W(x-x_j)\}_j$ seja uma partição da unidade, pode-se encontrar melhores aproximações, como os exemplos a seguir.

Gradiente SPH I:

$$\langle \nabla f_i \rangle = \sum_{j=1}^{N} \frac{m_j}{\rho_j} (f_i - f_j) \nabla_i W_{ij}$$
 (3.15)

Divergente SPH I:

$$\langle \nabla \cdot f_i \rangle = \sum_{j=1}^{N} \frac{m_j}{\rho_j} (f_i - f_j) \cdot \nabla_i W_{ij}, \qquad (3.16)$$

onde podemos representar $f_i - f_j$ como f_{ij} .

Outras aproximações são encontradas na literatura. Em MONAGHAN (1992) é sugerido escrever o gradiente de um campo escalar usando a regra do produto abaixo a fim de obter aproximações mais precisas para os operadores diferenciais:

$$\nabla f = \frac{1}{\rho} [\nabla(\rho f) - f \nabla \rho] \tag{3.17}$$

e similarmente o divergente de um campo vetorial como:

$$\nabla \cdot f = \frac{1}{\rho} [\nabla \cdot (\rho f) - f \cdot \nabla \rho]. \tag{3.18}$$

Aplicando (3.17) e (3.18) às equações (3.13) e (3.12), respectivamente, obtémse os operadores SPH a seguir.

Gradiente SPH II:

$$\langle \nabla f_i \rangle = \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} (f_i - f_j) \nabla_i W_{ij} \right]. \tag{3.19}$$

Divergente SPH II:

$$\langle \nabla \cdot f_i \rangle = \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} (f_i - f_j) \cdot \nabla_i W_{ij} \right]. \tag{3.20}$$

Note que as aproximações (3.15) e (3.19) são bastante semelhantes às aproximações (3.19) e (3.20), a diferença entre os conjuntos de operadores I e II é o uso do volume $\frac{m_j}{\rho_j}$ nas equações (3.15) e (3.15) ao invés de $\frac{m_j}{\rho_i}$ utilizado nas equações (3.19) e (3.20).

Com o intuito de obter operadores simétricos, isto é, a interação entre duas partículas i e j é simétrica, considere a seguinte identidade:

$$\frac{\nabla f}{\rho} = \frac{1}{\rho^{2-\theta}} \nabla \left(\frac{f}{\rho^{\theta-1}} \right) + \frac{f}{\rho^{\theta}} \nabla \left(\frac{1}{\rho^{1-\theta}} \right). \tag{3.21}$$

Pode-se definir novos operadores SPH variando o valor de θ na igualdade acima. Os operadores listados abaixo foram obtidos com $\theta = 2$.

Gradiente SPH III:

$$\langle \nabla f_i \rangle = \rho_i \left[\sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{f_j}{\rho_j^2} + \frac{f_i}{\rho_i^2} \right) \nabla_i W_{ij} \right]. \tag{3.22}$$

Divergente SPH III:

$$\langle \nabla \cdot f_i \rangle = \rho_i \left[\sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{f_j}{\rho_j^2} + \frac{f_i}{\rho_i^2} \right) \cdot \nabla_i W_{ij} \right]. \tag{3.23}$$

Uma característica dos operadores obtidos nessa seção é que a interação entre as partículas aparece explicitamente no operador SPH. Nos conjuntos I e II o termo " $-f_j$ " assegura que a aproximação dos operadores diferenciais para as funções constantes seja exata e em funções que diferem por uma constante, qualquer uma dessas aproximações, obtém o mesmo resultado para ambas as funções CARMO (2008).

3.2.3.2 Operador laplaciano

A aproximação básica para o laplaciano de uma função escalar poderia ser obtida usando-se as representações integrais dos operadores gradiente e divergente dados nas equações (3.9) e (3.8) para então obter a representação integral do laplaciano

$$\langle \nabla^2 f \rangle(x) = \int_{\Omega} f(x) \nabla^2 W(x - x', h) dx'. \tag{3.24}$$

Assim chega-se ao seguinte operador laplaciano após a aproximação por partículas:

$$\langle \nabla^2 f \rangle(x_i) \equiv \langle \nabla^2 f_i \rangle = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(x_j) \nabla_i^2 W_{ij} = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f_j \nabla_i^2 W_{ij}.$$
 (3.25)

Porém, a equação (3.25) é muito sensível à desordem de partículas como foi mostrado em CLEARY; MONAGHAN (1999). Uma outra maneira de obter o operador laplaciano no SPH é aplicar o operador gradiente à alguma função escalar f e então definir ∇f como uma nova função g utilizando um dos operadores divergentes definidos anteriormente, obtendo $\nabla \cdot g$. O resultado obtido após essas duas aproximações é uma aproximação para o laplaciano

$$\nabla \cdot g = \nabla \cdot \nabla f = \nabla^2 f = \Delta f. \tag{3.26}$$

Usando os operadores gradiente e divergente no grupo II dados pelas equações (3.19) e (3.20) obtém-se o operador laplaciano composto CARMO (2008)

$$\langle \nabla^2 f_i \rangle \equiv \langle \Delta f_i \rangle = \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j=1}^N m_j \left(\langle \nabla f_j \rangle - \langle \nabla f_i \rangle \right) \cdot \nabla_i W_{ij} \right]. \tag{3.27}$$

onde

$$\langle f_k \rangle = \frac{1}{\rho_k} \left[\sum_{l=1}^{N'} m_l (f_l - f_k) \nabla_k W_{kl} \right]$$

e N' é o número de vizinhos da partícula k.

Outras aproximações para o operador laplaciano são construídas em CLE-ARY; MONAGHAN (1999); COLIN; EGLI; LIN (2006).

3.3 SPH aplicado à dinâmica de fluidos

Visto que o SPH é um método eficiente para a simulação e solução de fenômenos descritos por EDP's, pretende-se então discretizar as equações de governabilidade de fluidos vistas no capítulo 2: a equação de continuidade, que descreve a conservação de massa, dada em (2.7) e a equação de momento, que descreve como o fluido se movimenta, dada em (2.21). Faz-se a discretização espacial dessas equações que irão gerar um sistema de EDO's em relação ao tempo que por sua vez será resolvido via integração temporal.

3.3.1 Equação de continuidade

A equação de continuidade lagrangiana dada em (2.7),

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0,$$

diz que a massa contida no volume de controle de um elemento de fluido como o da figura 2.1 permanece inalterada mesmo que o fluido sofra expansão, compressão ou deformação.

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

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

Dessa maneira a equação de continuidade (2.7) toma uma forma simples:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \tag{3.28}$$

Matematicamente, um fluido que escoa através de um campo de velocidade de divergência nula é incompressível e a restrição (3.28) é dita uma condição de incompressibilidade. Os líquidos compõe uma rica classe de fluidos incompressíveis, entretanto, no mundo real nenhum fluido é realmente incompressível, até mesmo um líquido pode ter a sua densidade aumentada aplicando-se a pressão adequada para tal.

A equação de conservação de massa (3.28) não serve como equação evolutiva para nenhuma variável e passa a ser apenas uma restrição do campo de velocidade. Mais ainda, nenhuma relação termodinâmica pode ser utilizada para obter a pressão em escoamentos incompressíveis, ou seja, a pressão não é uma grandeza termodinâmica nesse tipo de escoamento.

Aproximações SPH da densidade: A aproximação da densidade é muito importante no SPH uma vez que a densidade determina a distribuição das partículas e a evolução do comprimento de suavização h. Existem dois métodos de aproximação mais comuns para a densidade, o mais tradicional é chamado de densidade de somatório (summation density) e consiste em aplicar diretamente a densidade em (3.11), ou seja, tomar a densidade de uma partícula i como uma média ponderada das massas de suas partículas vizinhas j:

$$\langle \rho_i \rangle \equiv \rho_i = \sum_{j=1}^N m_j W_{ij}.$$
 (3.29)

Entretanto, a aproximação (3.29) torna a simulação um pouco mais lenta já que a densidade é calculada antes dos demais parâmetros. Uma alternativa para esse cálculo é usar a densidade contínua (continuity density), que aproxima a densidade de acordo com a equação de continuidade dada em (2.7):

$$\frac{D\rho_i}{Dt} - \rho_i \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} (u_j - u_i) \cdot \nabla_i W_{ij} = 0.$$
(3.30)

A densidade da partícula i é obtida integrando a equação (3.30) em relação ao tempo. Essa aproximação foi usada em LOBOVSKY; VIMMR (2007); MONAGHAN (1989) por ter o benefício de reduzir erros de inconsistência de partículas devido a sua forma antissimétrica de velocidades relativas.

A densidade de somatório (3.29) conserva a massa de maneira precisa dado que a integração da densidade sobre o domínio do problema é exatamente a massa de todas as partículas (massa do sistema) ao contrário da densidade de somatório (3.30) MONAGHAN (1992). Todavia, a densidade de somatório tem efeitos de borda quando aplicada em partículas localizadas perto da fronteira do domínio do problema e suaviza demais a densidade dessas partículas, levando a resultados espúrios. Tais resultados podem ser corrigidos com a aplicação de partículas virtuais

na borda HOLMES; WILLIAMS; TILKE (2000); LOBOVSKY; VIMMR (2007); SIGALOTTI et al. (2003).

Uma possível melhora de acurácia para aproximação de somatório é normalizar o lado direito da equação (3.29) com o somatório da própria função W sobre as partículas vizinhas:

$$\rho_{i} = \frac{\sum_{j=1}^{N} m_{j} W_{ij}}{\sum_{j=1}^{N} \left(\frac{m_{j}}{\rho_{j}}\right) W_{ij}}.$$
(3.31)

Essa expressão melhora a acurácia perto das fronteiras e interfaces materiais quando o somatório é tomado somente sobre partículas do mesmo material com densidade descontínua.

3.3.2 Equação de momento

A aceleração em cada partícula i é calculada através da equação de momento que foi dada em (2.21):

$$\frac{D\mathbf{u}_i}{Dt} = \mathbf{g} - \frac{1}{\rho_i} \nabla p_i + \frac{\mu}{\rho_i} \nabla^2 \cdot \mathbf{u}_i. \tag{3.32}$$

Existem três tipos de forças no lado direito da equação (3.32): as que modelam as forças externas (de superfície), a pressão e a viscosidade (forças de corpo). A soma dessas forças determina a variação do momento da partícula *i*. A ideia é aplicar os operadores apresentados na seção 3.2.3 nos dois últimos termos, pressão e viscosidade, já que apenas a gravidade atua como força externa e é diretamente aplicada sobre a partícula sem a necessidade de uso do SPH.

1. Gradiente de pressão: Usando o operador simétrico para o gradiente dado

na equação (3.22), tem-se:

$$-\frac{1}{\rho_i} \nabla p_i = -\sum_{j=1}^{N} m_j \left(\frac{p_j}{\rho_j^2} + \frac{p_i}{\rho_i^2} \right) \nabla_i W_{ij}.$$
 (3.33)

Neste caso, uma vez que a função de suavização tem gradiente nulo no centro e a partícula *i* usa apenas a pressão na posição da partícula *j* para calcular a força de pressão, e vice-versa, as forças de pressão serão simétricas. Caso a pressão seja diferente nas posições das partículas isso ainda satisfaz a terceira lei de Newton.

No SPH, ao contrário dos métodos com malha onde a pressão é a solução implícita de uma equação de Poisson, a pressão é uma função explícita da densidade local do fluido semelhante às equações de estado da termodinâmica. Dado que as partículas apenas carregam três grandezas: massa, posição e velocidade CARMO (2008), a pressão nas posições das partículas deve ser avaliada primeiro e isto é feito em duas etapas:

- (a) a massa e a densidade da partícula aparecem na equação (3.11), uma vez que cada partícula i representa um determinado volume. Enquanto a massa m_i é constante para toda a simulação, a densidade ρ_i varia e deve ser calculada a cada instante de tempo, assim basta usarmos (3.29) ou (3.31).
- (b) calcula-se a pressão pela equação de estado introduzida em MORRIS; FOX; ZHU (1997) em simulações de fluidos quase-incompressíveis de alta viscosidade, dada por:

$$p = c^2 \rho, \tag{3.34}$$

onde c é a velocidade do som no meio. A forma discreta de (3.34) é dada por:

$$p_i = c^2(\rho_i - \rho_0). (3.35)$$

Os primeiros trabalhos com o método SPH GINGOLD; MONAGHAN (1977); LUCY (1977) tratavam de fluxos de gases interestelares, isto é, uma abordagem com fluidos compressíveis, em MONAGHAN (1994) foi mostrado que o SPH também poderia ser utilizado para simulação de fluidos incompressíveis. Além disso, MONAGHAN (1994) mostrou duas maneiras de tratar essa aproximação para fluidos incompressíveis: a primeira utilizava as equaçãos de Gibbs-Appell, o que não se mostrou muito eficiente devido aos cálculos extramamente laboriosos e, a segunda, em uma equação de estado diferente da introduzida em (3.34) por MORRIS; FOX; ZHU (1997), já que é possível observar em fluidos reais, como a água, algum tipo de compressibilidade. Assim, ao contrário da maioria das aproximações que consideram um fluido compressível como incompressível, a abordagem feita é contrária: o fluido real é aproximado por um que seja mais compressível.

O objetivo de introduzir a compressibilidade artificial dada pela equação de estado (3.34) é produzir a derivada temporal da pressão. Para isso a velocidade do som deve ser escolhida cuidadosamente para garantir uma solução eficiente e precisa de um determinado problema. De acordo com MONAGHAN (1994) o valor da variação de densidade δ_{ρ} é dado por:

$$\delta_{\rho} = \frac{\Delta \rho}{\rho_0} = \frac{|\rho - \rho_0|}{\rho_0} = \frac{V_b^2}{c^2} = Ma^2, \tag{3.36}$$

onde V_b é a velocidade média de massa do fluido (bulk velocity) e Ma é o número de Mach como definido em (2.26). Como a velocidade do som real é muito grande e o número de Mach correspondente é muito pequeno a variação de densidade δ_{ρ} é desprezível.

Sendo assim, a fim de aproximar um fluido real como sendo um fluido artificialmente compressível (quase-incompressível), um valor muito menor que a velocidade do som real deve ser utilizado. O valor de c, por um lado, deve ser grande o suficiente para que o comportamento do fluido quase-incompressível seja suficientemente parecido com o fluido real; por outro lado, não deve ser

tão elevado de maneira que torne o passo de tempo proibitivamente pequeno MORRIS; FOX; ZHU (1997).

Considerando o equilíbrio entre o passo de tempo (3.44) e o comportamento incompressível do fluido, deve haver um valor ideal para o velocidade do som. A partir da equação (3.36) pode ser visto que a velocidade do som a ser escolhida está intimamente relacionada com a velocidade média do fluxo V_b . Portanto, gradientes de pressão obtidos utilizando uma velocidade de som alta são potencialmente ruidosos. No entanto, as velocidades obtidas são precisas se suavizadas, por exemplo, pela técnica XSPH (6.22). Em MORRIS; FOX; ZHU (1997) há uma sugestão para a estimativa de c considerando o equilíbrio entre as forças de pressão, viscosidade e corpo.

Para muitas aplicações, uma estimativa aproximada de movimento do fluido em massa é suficiente. No entanto, para outros problemas, são necessárias estimativas precisas do campo de pressão. O cálculo da pressão é um ponto muito delicado nas simulações de fluidos incompressíveis via SPH, pois há uma grande dificuldade de manter a incompressibilidade do fluido devido à falta de um controle explícito da densidade global MORRIS; FOX; ZHU (1997).

O método proposto para forçar a incompressibilidade no escoamento separa o cálculo da pressão do da velocidade, sendo, por isso, muitas vezes chamado de método de desacoplamento pressão-velocidade.

2. **Força de viscosidade:** Para o termo viscoso, pode-se usar a aproximação sugerida em LEWINER et al. (2009):

$$\frac{\mu}{\rho_i} \nabla^2 \mathbf{u}_i = \frac{2\mu}{\rho_i} \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i) \frac{(x_j - x_i) \cdot \nabla_i W_{ij}}{r_{ij}^2}.$$
 (3.37)

Finalmente chegamos a equação de momento através do método SPH para

um fluido incompressível:

$$\frac{D\mathbf{u}_{i}}{Dt} = -\sum_{j=1}^{N} m_{j} \left[\frac{c^{2}(\rho_{i} - \rho_{0})}{\rho_{i}^{2}} + \frac{c^{2}(\rho_{j} - \rho_{0})}{\rho_{j}^{2}} \right] \nabla_{i}W_{ij} + \frac{2\mu}{\rho_{i}} \sum_{j=1}^{N} \frac{m_{j}}{\rho_{j}} (\mathbf{u}_{j} - \mathbf{u}_{i}) \frac{(x_{j} - x_{i}) \cdot \nabla_{i}W_{ij}}{r_{ij}^{2}} + g.$$
(3.38)

3.3.3 Integração temporal

Como visto, o método SPH permite calcular as derivadas a partir de partículas distribuídas aleatoriamente no espaço, obtendo densidade, pressão e outras grandezas envolvidas no problema. Porém, as equações (2.7) e (2.21) envolvem derivadas temporais e para tratar este tipo de derivada usam-se métodos construídos a partir de amostras temporais distribuídas uniformemente, o que faz tais métodos se aparentarem com a discretização de derivadas em reticulados, onde o MDF é o método mais usado.

No contexto temporal, calcula-se um ponto do reticulado (ou malha) em função apenas dos pontos inferiores (instantes anteriores). Quando o cálculo é direto, isto é, determina apenas o instante atual da simulação, o método é chamado de explícito e é plenamente satisfatório para as simulações lagrangianas, embora haja um meio termo entre a qualidade de aproximação a priori de uma discretização e seu custo computacional LEWINER et al. (2009).

O método de Euler: O método de Euler é o método explícito mais simples e conhecido e corresponde à primeira aproximação da derivada, conhecida como diferença para frente (forward) que pode ser escrito como:

$$\frac{du}{dt}(t) = \lim_{h \to 0} \frac{u(t+h) - u(t)}{h} \approx \frac{u(t+\Delta t) - u(t)}{\Delta t}.$$
 (3.39)

Esta estimativa de derivada permite calcular o instante seguinte, $t + \Delta t$,

diretamente a partir do instante atual t, o que torna o integrador eficiente, dado que necessita de apenas dois pontos de tempo.

Como a velocidade pode ser vista como uma função vetorial do tempo, se a função for bem aproximada, por seu polinômio de Taylor, tem-se:

$$u(t + \Delta t) = u(t) + \Delta t \cdot \frac{du}{dt}(t) + \mathcal{O}((\Delta t)^2). \tag{3.40}$$

A aproximação de Euler pode ser escrita como:

$$\left(\frac{du}{dt}(t)\right)_{Euler} = \frac{du}{dt}(t) + \mathcal{O}(\Delta t).$$
(3.41)

Por causa dessa análise, o método de Euler é dito de primeira ordem, supondo que a velocidade seja uma função suficientemente suave, o que não ocorre em fluido perto de um vórtice ou em turbulência, por exemplo. A baixa ordem do integrador pode tornar a simulação bastante sensível em certas circunstâncias, mas pode ser remediada tomando-se um passo de tempo idealmente pequeno para que $\mathcal{O}(\Delta t)$ seja inferior à precisão desejada LEWINER et al. (2009). Em LIU ; LIU (2003) é sugerido que o método de integração seja algum método de segunda ordem como Leap-Frog, preditor-corretor ou ainda o MRK, mas que ainda assim apresentariam problemas parecidos com o método de Euler em relação ao passo de tempo e o comprimento de suavização. Uma sugestão para esse problema seria utilizar o passo de tempo adaptativo para minimizar o erro da integração.

Assim sendo, a equação (3.38) fica:

$$\mathbf{u}_{i}^{t+1} = \mathbf{u}_{i}^{t} + \Delta t. \left[-\sum_{j=1}^{N} m_{j} \left[\frac{c^{2}(\rho_{i} - \rho_{0})}{\rho_{i}^{2}} + \frac{c^{2}(\rho_{j} - \rho_{0})}{\rho_{j}^{2}} \right] \nabla_{i} W_{ij} \right] + \Delta t. \left[\frac{2\mu}{\rho_{i}} \sum_{j=1}^{N} \frac{m_{j}}{\rho_{j}} (\mathbf{u}_{j} - \mathbf{u}_{i}) \frac{(x_{j} - x_{i}) \cdot \nabla_{i} W_{ij}}{r_{ij}^{2}} + g \right].$$
(3.42)

Estimativa do passo de tempo: Como dito, os métodos de integração temporal aproximam bem a derivada temporal caso o passo de tempo tenda a zero. Numericamente isso é muito caro e limitado pela própria máquina. Assim sendo, existe um meio termo entre precisão do método e tempo de processamento.

Os esquemas explícitos de integração temporal estão sujeitos à condição de Courant-Friedrichs-Lewy para a estabilidade. A condição CFL estabelece que o domínio computacional de dependência em uma simulação numérica deve incluir o domínio físico da dependência ou que a velocidade máxima de propagação numérica deve exceder a velocidade máxima de propagação física. Ou seja, a condição CFL requer que o passo de tempo seja proporcional à menor resolução espacial da partícula, dada pelo comprimento de seu domínio suporte κh no método SPH. A avaliação do domínio físico é relacionada às propriedades do material simulado, geralmente caracterizado pela velocidade do som c neste meio. A velocidade c caracteriza a velocidade máxima com a qual uma modificação se propaga mecanicamente. Em termos matemáticos temos:

$$\Delta t < \frac{\kappa h}{c}.\tag{3.43}$$

A condição CFL se aplica a priori para soluções através do MDF para fenômenos regidos por EDP's hiperbólicas. No nosso contexto, ela pode ser extrapolada em um passo de tempo adaptativo dado pela expressão (3.44) encontrada em MORRIS; FOX; ZHU (1997).

$$\Delta t = 0.1 \min_{i} \left\{ \frac{h}{\|u_i\| + c}, \frac{h^2 \rho_i}{8\mu_i} \right\}. \tag{3.44}$$

Outras estimativas para o passo de tempo podem ser encontradas, dentre outros, em MONAGHAN (1989, 1992); MORRIS; FOX; ZHU (1997).

4 FUNÇÕES DE SUAVIZAÇÃO

Um dos principais interesses dos métodos numéricos quando usados para modelagens dinâmicas é o quão efetiva é a aproximação feita da função encontrada na modelagem do problema. Na representação integral do SPH faz-se uso de funções de suavização W, também chamadas de funções kernel ou funções núcleo, que tem um papel importante em todo o método. As funções W determinam a acurácia da representação da função de campo, a eficiência computacional e o padrão para a aproximação do método, define a dimensão do domínio suporte das partículas, determina a consistência do método e as precisões das aproximações de núcleo e de partícula.

4.1 Propriedades

As funções de suavização W devem obedecer as propriedades a seguir:

1. Condição unitária: a função de suavização deve ser normalizada sobre seu domínio suporte Ω_s , tal fato assegura a consistência de ordem zero (C^0) da representação integral de uma função contínua. Essa condição também é chamada de condição de normalização.

$$\int_{\Omega_s} W(x - x', h) dx' = 1.$$
 (4.1)

 Suporte compacto: a função de suavização deve ter suporte compacto. Esta propriedade transforma a aproximação do SPH de uma operação global para uma operação local.

$$W(x - x') = 0 \; ; \; ||x - x'|| > \kappa h, \tag{4.2}$$

onde h é o comprimento ou raio de suavização e κ é um parâmetro escalar que determina que a propagação da função reside no domínio suporte e garante que o erro associado com tal suposição é pequeno.

Vale lembrar que o suporte de uma função real f, contínua em]a,b[é o fecho em]a,b[do conjunto dos pontos de]a,b[onde f não é nula. Representa-se o suporte de f por supp(f) MEDEIROS ; MIRANDA (2011). Simbolicamente tem-se:

$$supp(f) = \overline{]a, b[} = \{x \in]a, b[\mid f(x) \neq 0\}.$$
 (4.3)

Um conjunto é dito compacto quando é fechado e limitado LIMA (2012).

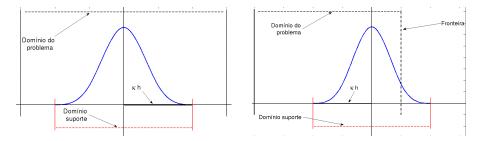


Figura 4.1: Exemplos de domínios suportes

Associando as duas propriedades citadas até aqui tem-se:

$$\int_{\Omega} W(x - x', h)dx' = 1. \tag{4.4}$$

3. Positividade: a função deve ser não-negativa no seu domínio suporte. Esta não é uma propriedade matematicamente necessária para a convergência, mas é importante para garantir o significado físico e estável do fenômeno em questão.

$$W(x - x') \ge 0 \quad ; \quad \forall x \in Dom(W). \tag{4.5}$$

4. Decaimento: o valor da função de suavização para uma partícula deve ser monotonicamente decrescente conforme a distância para a própria partícula aumenta. Essa propriedade é baseada na consideração física de que quanto mais próxima uma dada partícula estiver à partícula em questão deve haver maior influência da função.

$$W(x - x', h) < W(x - x", h)$$
 se $||x - x'|| > ||x - x"||$. (4.6)

5. Propriedade da distribuição Delta: essa propriedade garante que conforme o comprimento de suavização tenda a zero a função de campo se aproxime do valor real da função, ou seja, $\langle f(x) \rangle \to f(x)$ quando $h \to 0$, ou ainda:

$$\lim_{h \to 0} W(x - x', h) = \delta(x - x'). \tag{4.7}$$

- 6. Simetria: a função de suavização deve ser uma função par (com simetria no eixo vertical). O significado desta propriedade é de que partículas de diferentes posições, mas com a mesma distância, terão efeito igual sobre a partícula observada. Entretanto, esta não é uma condição muito rígida devido a alguns tratamentos de fronteira ou da própria modelagem.
- 7. Suavidade: a função de suavização deve ser suficientemente suave $(W \in C^k, k > 1)$. Para a função e suas derivadas serem bem aproximadas as funções de suavização devem ser suficientemente contínuas para obter bons resultados.

Assim sendo, qualquer função que obedeça a essas propriedades pode ser uma função de suavização do SPH.

4.2 Condições de construção das funções de suavização

Dadas as propriedades das funções W na seção anterior, a pergunta que aparece é se existe algum procedimento padrão para o desenvolvimento das funções de suavização. No MDF, o conceito de consistência define o quanto um sistema de equações discretas se aproxima das EDP's que modelam o problema físico. O teorema de equivalência de Lax-Richtmyer feito em LAX; RITCHMYER (1956) diz que, dado um problema bem posto, isto é, um problema que depende continuamente das condições inicias, em um esquema de aproximação numérica (em MDF) consistente a existência de estabilidade é uma condição necessária e suficiente para a convergência do sistema linear de equações obtidas pelo esquema.

De maneira semelhante, usando expansão em série de Taylor, uma análise das aproximações SPH pode ser considerada. Primeiramente, essa análise é considerada sobre as aproximações contínuas do método SPH, obtidas pelas representações integrais de uma função e suas derivadas (equações (3.4), (3.8) e (3.9)). No que se segue, ver-se-á que condições devem ser satisfeitas para que uma função defina um núcleo no método SPH de tal forma que as aproximações tenham certa ordem de precisão. Além disso, essas condições podem ser usadas para definir núcleos no método SPH de forma sistemática LIU; LIU; LAM (2002).

Em CFD a derivada de maior ordem encontrada nas EDP's das modelagens matemáticas feitas é de segunda ordem, somente será feita a aproximação das duas primeiras derivadas de uma dada função de campo f.

4.2.1 Aproximando uma função de campo

Dadas uma função de campo f suave e uma função de suavização W no domínio Ω , como dado em (3.4), sua representação integral é:

$$\langle f(x) \rangle = \int_{\Omega} f(x')W(x - x', h)dx'.$$
 (4.8)

Para f(x) suficientemente suave, pode-se calcular sua expansão em série de Taylor em x' ao redor do ponto x:

$$f(x') = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(x)}{k!} (x' - x)^k.$$
 (4.9)

Toma-se:

$$f(x') = \sum_{k=0}^{n} \frac{(-1)^k h^k f^{(k)}(x)}{k!} \left(\frac{x - x'}{h}\right)^k + r_n \left(\frac{x - x'}{h}\right), \tag{4.10}$$

sendo r_n o resto da série de Taylor. Substituindo 4.10 em 4.8, obtém-se:

$$\langle f(x) \rangle = \int_{\Omega} \left[\left(\sum_{k=0}^{n} \frac{(-1)^k h^k f^{(k)}(x)}{k!} \left(\frac{x - x'}{h} \right)^k \right) W(x - x', h) \right] dx' + r_n \left(\frac{x - x'}{h} \right)$$

$$\tag{4.11}$$

e depois:

$$\langle f(x) \rangle = \sum_{k=0}^{n} A_k f^{(k)}(x) + r_n \left(\frac{x - x'}{h} \right), \tag{4.12}$$

onde:

$$A_k = \frac{(-1)^k h^k}{k!} \int_{\Omega} \left(\frac{x - x'}{h}\right)^k W'(x - x', h) dx'. \tag{4.13}$$

Portanto, as seguintes igualdades, tomando k = n, são válidas:

Como h > 0, chega-se a:

$$\begin{cases}
M_0 = \int_{\Omega} W(x - x', h) dx' = 1, \\
M_1 = \int_{\Omega} (x - x') W(x - x', h) dx' = 0, \\
M_2 = \int_{\Omega} (x - x')^2 W(x - x', h) dx' = 0, \\
\vdots \vdots \vdots \vdots \vdots \vdots \vdots \\
M_n = \int_{\Omega} (x - x')^n W(x - x', h) dx' = 0.
\end{cases}$$
(4.15)

A primeira equação em (4.15) é a condição de unidade e a segunda, a de simetria. Com essas duas condições satisfeitas tem-se a consistência de primeira ordem para a aproximação de núcleo da função f.

4.2.2 Aproximando uma derivada

Procedendo de maneira análoga com a aproximação da derivada f' de uma função f, substituindo f por f' em (4.8):

$$\langle f'(x)\rangle = \int_{\Omega} f'(x')W(x - x', h)dx'. \tag{4.16}$$

Integrando por partes:

$$\langle f'(x)\rangle = \int_{\partial\Omega} f(x')W(x - x', h) \cdot ndS - \int_{\Omega} f(x')W'(x - x', h)dx', \tag{4.17}$$

onde n é o vetor normal à superfície $\partial\Omega$. Substituindo o segundo termo do lado direito da equação por (4.12):

$$\langle f'(x)\rangle = \int_{\partial\Omega} f(x')W(x - x', h) \cdot ndS + \sum_{k=0}^{n} A'_k f^{(k)}(x) + r_n \left(\frac{x - x'}{h}\right), \quad (4.18)$$

sendo o termo A'_k :

$$A'_{k} = \frac{(-1)^{k+1}h^{k}}{k!} \int_{\Omega} \left(\frac{x-x'}{h}\right)^{k} W(x-x',h)dx'.$$
 (4.19)

Logo, chega-se às seguintes igualdades, tomando k = n:

$$\begin{cases}
M'_{0} = \int_{\Omega} W'(x - x', h) dx' = 0, \\
M'_{1} = \int_{\Omega} (x - x') W'(x - x', h) dx' = 1, \\
M'_{2} = \int_{\Omega} (x - x')^{2} W'(x - x', h) dx' = 0, \\
\vdots \vdots \vdots \vdots \vdots \vdots \vdots \vdots \\
M'_{n} = \int_{\Omega} (x - x')^{n} W'(x - x', h) dx' = 0.
\end{cases} (4.20)$$

e

$$W(x - x', h)|_{S} = 0. (4.21)$$

A condição (4.21) requer que W desapareça na superfície do domínio suporte (condição de suporte compacto).

4.2.3 Aproximando a segunda derivada

Novamente procede-se de maneira análoga para a aproximação da segunda derivada de uma função f, como foi feita em (4.16):

$$\langle f''(x)\rangle = \int_{\Omega} f''(x')W(x - x', h)dx'. \tag{4.22}$$

Integrando mais uma vez por partes:

$$\langle f''(x)\rangle = \int_{\partial\Omega} f'(x')W(x-x',h)\cdot ndS - \int_{\partial\Omega} f(x')W'(x-x',h)\cdot ndS + \int_{\Omega} f(x')W''(x-x',h)dx',$$

o que finalmente leva a:

$$\langle f''(x) \rangle = \int_{S} f(x')W(x-x',h) \cdot \vec{n} dS - \int_{S} f(x')W'(x-x',h) \cdot \vec{n} dS + \sum_{k=0}^{n} A_{k}'' f^{(k)}(x) + r_{n} \left(\frac{x-x'}{h}\right)$$
(4.23)

onde:

$$A_k'' = \frac{(-1)^k h^k}{k!} \int_{\Omega} \left(\frac{x - x'}{h}\right)^k W''(x - x', h) dx'. \tag{4.24}$$

Assim, as igualdades a seguir são válidas, tomando k = n:

as igualdades a seguir são válidas, tomando
$$k = n$$
:
$$\begin{cases}
M'''_{0} = \int_{\Omega} W''(x - x', h) dx' &= 0, \\
M'''_{1} = \int_{\Omega} (x - x') W''(x - x', h) dx' &= 0, \\
M'''_{2} = \int_{\Omega} (x - x')^{2} W''(x - x', h) dx' &= 2, \\
\vdots &\vdots &\vdots &\vdots &\vdots \\
M'''_{n} = \int_{\Omega} (x - x')^{n} W''(x - x', h) dx' &= 0.
\end{cases}$$

$$\begin{cases}
W(x - x', h)|_{S} = 0, \\
W'(x - x', h)|_{S} = 0
\end{cases}$$
(4.26)

е

$$\begin{cases} W(x - x', h)|_{S} = 0, \\ W'(x - x', h)|_{S} = 0 \end{cases}$$
(4.26)

as condições em (4.26) requerem que W e W' desapareçam na superfície do domínio suporte, novamente como a condição de suporte compacto.

4.2.4 Considerações finais

As condições de construção das funções de suavização podem ser classificadas em dois grupos:

- 1. O primeiro grupo, (4.15), (4.20) e (4.25), mostra a habilidade da função de reproduzir um polinômio. Satisfeito isso, a função pode ser aproximada com ordem n de precisão.
- 2. O segundo grupo, (4.21) e (4.26), define os valores de superfície da função, tal como suas primeiras derivadas, e é requisito para a propriedade de suporte compacto da função. Satisfeitas tais condições, a função de campo é aproximada com exatidão de ordem n.

A análise baseada em expansão em series de Taylor está diretamente relacionada ao conceito de consistência para o MDF. Similarmente, o conceito de consistência para o MEF também pode ser aplicado ao método SPH. No MEF a consistência é caracterizada pela maior ordem polinomial que pode ser exatamente reproduzida usando uma função base RINCON; LIU (2012). Pode-se mostrar que, no método SPH, a representação integral reproduz exatamente polinômios de grau menor que ou igual a n desde que as condições (4.15) e (4.20) sejam satisfeitas pelo núcleo.

4.2.5 Consistência da aproximação por partículas

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

O problema no qual as aproximações por partículas dos momentos M_k dados em (4.15) não são satisfeitas em métodos de partículas é conhecido como inconsistência de partículas. A versão discreta da consistência é dada por:

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{N} W(x - x_j, h) \Delta x_j &= 1\\ \sum_{j=1}^{N} (x - x_j)^k W(x - x_j, h) \Delta x_j &= 0, k = 1, \dots, n, \end{cases}$$
(4.27)

sendo N o total de partículas contidas dentro do domínio suporte para a partícula de posição x.

As condições discretizadas de consistência dadas em (4.27) nem sempre são satisfeitas, como por exemplo, os casos onde uma partícula está localizada perto da fronteira ou quando há uma distribuição irregular como mostrados na figura 4.2

Em LIU; LIU; LAM (2002) é descrito um algoritmo para a construção de

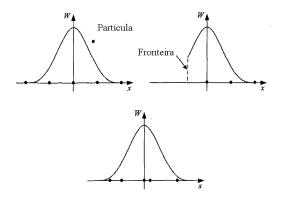


Figura 4.2: Possíveis problemas para a paproximação de partículas

um núcleo polinomial de grau n:

$$W(x - x_j, h) = \sum_{j=1}^{k} b_I(x, h) \left(\frac{x - x_j}{h}\right)^I,$$
 (4.28)

tal que as condições de consistência discretas dadas em (4.27) para uma aproximação de ordem n sejam satisfeitas.

Os coeficientes $b_I(x, h)$ são determinados pelo algoritmo resolvendo o sistema abaixo, obtido ao substituir a função de suavização como dada em (4.28) em todos os momentos discretos.

$$\begin{pmatrix}
m_0(x,h) & m_1(x,h) & \dots & m_k(x,h) \\
m_1(x,h) & m_2(x,h) & \dots & m_{k+1}(x,h) \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
m_k(x,h) & m_{k+1}(x,h) & \dots & m_{2k}(x,h)
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
b_0(x,h) \\
b_1(x,h) \\
\vdots \\
b_n(x,h)
\end{pmatrix} =
\begin{pmatrix}
1 \\
0 \\
\vdots \\
0
\end{pmatrix}$$
(4.29)

onde

$$m_k(x,h) = \sum_{j=1}^N \left(\frac{x - x_j}{h}\right)^k \Delta x_j. \tag{4.30}$$

Após determinar os coeficientes $b_I(x,h)$, a função de suavização polinomial dada em (4.28) determina uma aproximação por partículas com consistência de ordem n. Porém o elevado custo desse método deve ser levado em consideração, o

qual concentra-se em construir essa matriz de momento e resolver o sistema determinado por ela para cada partícula. Mais ainda, para resolver o problema, a matriz deve ser não-singular e, portanto, a distribuição das partículas deve satisfazer certas condições. Por último, vale ressaltar, que o núcleo obtido pode não ter algumas propriedades desejáveis, como por exemplo: positividade, decaimento e simetria.

4.3 Construindo funções de suavização

Com as propriedades obtidas em (4.15) e (4.26), contrói-se analiticamente expressões para as funções de suavização.

$$\begin{cases}
M_0 = \int_{\Omega} W(x - x', h) dx' = 1, \\
M_1 = \int_{\Omega} W(x - x', h) dx' = 0, \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
M_n = \int_{\Omega} W(x - x', h) dx' = 0.
\end{cases}$$

$$\begin{cases}
W(x - x', h)|_{S} = 0 \\
W'(x - x', h)|_{S} = 0
\end{cases}$$
(4.32)

e

$$\begin{cases}
W(x - x', h)|_{S} = 0 \\
W'(x - x', h)|_{S} = 0
\end{cases}$$
(4.32)

Funções polinomiais 4.3.1

Caso a função W seja polinomialmente dependente da distância relativa Rdos pontos x e x', pode-se assumir que a função de suavização tem a seguinte forma no domínio suporte com uma influência κh :

$$W(x - x', h) \equiv W(R) = a_0 + a_1 R + a_2 R^2 + \dots + a_n R^n,$$
(4.33)

sendo $R = \frac{r}{h} = \frac{\|x - x'\|}{h}$ e r a distância dos pontos x e x'.

Caso exista a i-ésima derivada em R=0:

$$W^{(i)}(0) = \begin{cases} i!a_i & ; (x - x') \to 0_+ \\ (-1)^i i!a_i & ; (x - x') \to 0_- \end{cases}$$
 (4.34)

com $i=1,\ldots,n$. Portanto $W^{(i+1)}(x-x',h)$ existe em R=0 (x=x') somente se as expressões abaixo são satisfeitas:

$$\begin{cases}
 a_0, a_1, ..., a_i = 0 & ; i = par \\
 a_1, a_2, ..., a_{i-1} = 0 & ; i = impar.
\end{cases}$$
(4.35)

Então para que a segunda derivada da função de suavização exista, o termo linear deve desaparecer da equação (4.33) e assim:

$$W(x - x', h) = W(R) = a_0 + a_2 R^2 + \dots + a_n R^n.$$
(4.36)

Observações:

- 1. Positividade × reprodução de alta ordem: As equações obtidas em (4.31) e (4.32) fornecem um conjunto de condições a mais para a construção das funções W. A função W não será necessariamente positiva em todo domínio, especialmente quando um alto valor de precisão é requerido. Núcleos negativos podem resultar em incoerências físicas, como, por exemplo, densidades negativas. Sendo assim, é muito difícil construir uma função de suavização que possua positividade e alta ordem de reprodução.
- 2. Valor do pico central: O valor do pico central de W determina o quanto a própria partícula contribui na aproximação. Se W for positiva, então o maior índice de acurácia será o de segunda ordem e quanto mais elevado for o valor de pico maior será a precisão, pois a função se aproxima mais do Delta de Dirac.

3. Em duas dimensões, as funções de suavização são geralmente definidas como funções radiais, entretanto, em dimensões maiores podem ser definidas como produtos tensoriais de funções núcleo de uma dimensão.

4.3.2 Funções por partes

Em alguns casos, uma função de suavização por partes é preferida, uma vez que sua forma é mais fácil de ser controlada mudando apenas o número de partes em que a função é dividida e os pontos de conexão. A forma geral de uma função de suavização de duas partes é dada por:

$$W(R) = \begin{cases} W_1(R) &, 0 \le R \le R_1 \\ W_2(R) &, R_1 \le R \le R_2 \\ 0 &, R_2 \ge R \end{cases}$$
 (4.37)

A função e suas duas primeiras derivadas devem ser contínuas nos pontos de conexão, ou seja:

$$\begin{cases}
W_1(R_1) = W_2(R_2) \\
W_1'(R_1) = W_2'(R_2) \\
W_1''(R_1) = W_2''(R_2)
\end{cases}$$
(4.38)

Considerando os requisitos nesses pontos juntamente com a propriedade de suporte compacto, uma possível forma para a função de suavização é:

$$W(R) = \begin{cases} b_1(R_1 - R)^n + b_2(R_2 - R)^n & , \ 0 \le R \le R_1 \\ b_2(R_2 - R)^n & , \ R_1 \le R \le R_2 \\ 0 & , \ R_2 \ge R. \end{cases}$$
(4.39)

Para uma função com mais partes, expressões análogas podem ser usadas para construir funções de suavização desse tipo.

4.4 Exemplos de construção

4.4.1 Função de cúpula quadrática

O exemplo mais simples de uma função de suavização construída a partir das propriedades descritas no início do capítulo e utilizando a equação (4.36) é uma expressão quadrática de R chamada função de cúpula quadrática ou dome-shaped quadratic function com fator escalar $\kappa = 1$ e é tida na seguinte forma:

$$W(R,h) = a_0 + a_2 R^2 = a_0 + a_2 \left(\frac{r}{h}\right)^2.$$
(4.40)

Para o caso unidimensional, sobre a condição de unidade, ter-se-á:

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

utilizando a equação (4.4), obtém-se:

$$\int_{-\kappa h}^{\kappa h} \left[a_0 + a_2 \left(\frac{r}{h} \right)^2 \right] dr = 1$$

o que leva a:

$$2h\kappa \left(a_0 + \frac{a_2}{3}\right) = 1. \tag{4.41}$$

Pela condição de suporte compacto:

$$W(x - x', h)|_S = W(R, h)|_{R=1} = 0$$

 $a_0 + a_2 = 0.$ (4.42)

Assim, montado um sistema linear com as equações (4.41) e (4.42), tem-se:

$$\begin{cases} 2ha_0 + (\frac{2}{3}h)a_2 = 1 \\ a_0 + a_2 = 0 \end{cases} \quad \therefore \begin{cases} a_0 = \frac{3}{4h} \\ a_2 = \frac{-3}{4h}. \end{cases}$$
 (4.43)

E finalmente chega-se a expressão para a função de cúpula quadrática para o caso unidimensional:

$$W(R,h) = \frac{3}{4h}(1-R^2). \tag{4.44}$$

Para o caso bidimensional, a condição de unidade fica:

$$\int_{0}^{2\pi} \int_{-h}^{h} \left[a_0 + a_2 \left(\frac{r}{h} \right)^2 \right] r d\theta dr = 1$$

$$\pi h^2 \left(a_0 + \frac{a_2}{2} \right) = 1. \tag{4.45}$$

Assim, usando (4.45) e (4.42):

$$\begin{cases} \pi h^2 a_0 + \left(\frac{\pi h^2}{2}\right) a_2 = 1 \\ a_0 + a_2 = 0 \end{cases} \therefore \begin{cases} a_0 = \frac{2}{\pi h^2} \\ a_2 = \frac{-2}{\pi h^2}. \end{cases}$$
 (4.46)

Logo, a expressão para a função de cúpula quadrática, no caso bidimensional fica:

$$W(R,h) = \frac{2}{\pi h^2} (1 - R^2). \tag{4.47}$$

Para o caso tridimensional a condição de unidade terá a seguinte forma:

$$\int_{0}^{\pi} \int_{0}^{2\pi} \int_{-h}^{h} \left[a_{0} + a_{2} \left(\frac{r}{h} \right)^{2} \right] r^{2} sen\phi d\phi d\theta dr = 1$$

$$4\pi h^{3} \left(\frac{a_{0}}{3} + \frac{a_{2}}{5} \right) = 1. \tag{4.48}$$

Assim, usando agora (4.48) e (4.42):

$$\begin{cases} \frac{4\pi h^3}{3} a_0 + \left(\frac{4\pi h^3}{5}\right) a_2 = 1 \\ a_0 + a_2 = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a_0 = \frac{15}{8\pi h^3} \\ a_2 = \frac{-15}{8\pi h^3}. \end{cases}$$
(4.49)

E finalmente, obtém-se a forma para o caso tridimensional da função de cúpula quadrática:

$$W(R,h) = \frac{15}{8\pi h^3} (1 - R^2). \tag{4.50}$$

De forma mais geral, pode-se escrever a expressão dada abaixo, que resume as três expressões obtidas em (4.44), (4.47) e (4.50):

$$W(R,h) = \alpha_n (1 - R^2) \quad ; \quad \alpha_n = \begin{cases} \frac{3}{4h} &, n = 1\\ \frac{2}{\pi h^2} &, n = 2\\ \frac{15}{8\pi h^3} &, n = 3 \end{cases}$$
 (4.51)

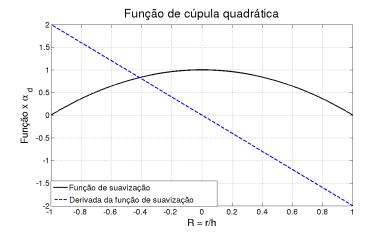


Figura 4.3: Função de cúpula quadrática

Essa função foi usada no Método Finito de Integração (FIM) em HICKS; LIEBROCK (2000). Vale a pena notar que como a primeira derivada não se anula na fronteira do domínio suporte, ou seja, a função de cúpula quadrática não tem suporte compacto para sua primeira derivada, como pode ser visto na figura (4.3).

4.4.2 Função quártica

A função de suavização quártica ou quartic function utilizada em LUCY (1977) pode ser construída como uma expressão quártica de R com fator escalar $\kappa = 1$. A função pode ser escrita da seguinte forma:

$$W(R,h) = a_0 + a_2 R^2 + a_3 R^3 + a_4 R^4 = a_0 + a_2 \left(\frac{r}{h}\right)^2 + a_3 \left(\frac{r}{h}\right)^3 + a_4 \left(\frac{r}{h}\right)^4.$$

Usando a propriedade de suporte compacto:

$$\begin{cases} W(R,h)|_{R=1} = a_0 + a_2 + a_3 + a_4 = 0 \\ W'(R,h)|_{R=1} = 2a_2 + 3a_3 + 4a_4 = 0 \\ W''(R,h)|_{R=1} = 2a_2 + 6a_3 + 12a_4 = 0. \end{cases}$$
(4.52)

Pela condição de unidade unidimensional:

$$1 = \int_{-h}^{h} \left[a_0 + a_2 \left(\frac{r}{h} \right)^2 + a_3 \left(\frac{r}{h} \right)^3 + a_4 \left(\frac{r}{h} \right)^4 \right] dr,$$

$$2h \left[a_0 + \left(\frac{a_2}{3} \right) + \left(\frac{a_3}{4} \right) + \left(\frac{a_4}{5} \right) \right] = 1.$$
(4.53)

Pela condição de unidade bidimensional:

$$1 = \int_{0}^{2\pi} \int_{-h}^{h} \left[a_0 + a_2 \left(\frac{r}{h} \right)^2 + a_3 \left(\frac{r}{h} \right)^3 + a_4 \left(\frac{r}{h} \right)^4 \right] r d\theta dr,$$

$$2\pi h \left[\frac{a_0}{2} + \left(\frac{a_2}{4} \right) + \left(\frac{a_3}{5} \right) + \left(\frac{a_4}{6} \right) \right] = 1. \tag{4.54}$$

Pela condição de unidade tridimensional:

$$\int_{0}^{\pi} \int_{0}^{2\pi} \int_{-h}^{h} \left[a_{0} + a_{2} \left(\frac{r}{h} \right)^{2} + a_{3} \left(\frac{r}{h} \right)^{3} + a_{4} \left(\frac{r}{h} \right)^{4} \right] r^{2} sen\phi d\phi d\theta dr = 1,$$

$$2\pi h \left[\frac{a_{0}}{2} + \left(\frac{a_{2}}{4} \right) + \left(\frac{a_{3}}{5} \right) + \left(\frac{a_{4}}{6} \right) \right] = 1. \tag{4.55}$$

Com as equações de (4.52) mais a condição de unidade obtida de acordo com a dimensão em (4.41), (4.45) ou (4.48), obtém-se do sistema linear:

$$W(R,h) = \alpha_n (1 - 6R^2 + 8R^3 - 3R^4) \quad ; \quad \alpha_n = \begin{cases} \frac{5}{4h} &, n = 1\\ \frac{5}{\pi h^2} &, n = 2\\ \frac{105}{16\pi h^3} &, n = 3 \end{cases}$$
 (4.56)

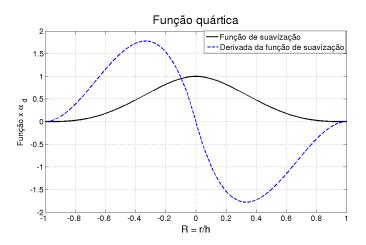


Figura 4.4: Função quártica

4.4.3 Função cúbica por partes

Para a construção de uma função cúbica por partes ou piecewise cubic function define-se o ponto de conexão em R=1 e usa-se $\kappa=2$, sendo assim:

$$W(R,h) = \begin{cases} b_1 \left(1 - \frac{r}{h}\right)^3 + b_2 \left(2 - \frac{r}{h}\right)^3 & , 0 \le r < h \\ b_2 \left(2 - \frac{r}{h}\right)^3 & , h \le r < 2h \\ 0 & , r \ge 2h \end{cases}$$

A função tem suporte compacto tal como suas duas primeiras derivadas, se existirem. Para que elas existam na origem deve-se ter a relação de construção das funções W e o coeficiente linear tender a zero como dado em (4.36). Assim chega-se

a:

$$b_1 \left(1 - \frac{r}{h} \right)^3 + b_2 \left(2 - \frac{r}{h} \right)^3$$

$$b_1 \left(1 - 3\frac{r}{h} + 3\left(\frac{r}{h}\right)^2 - \left(\frac{r}{h}\right)^3 \right) + b_2 \left(8 - 12\frac{r}{h} + 6\left(\frac{r}{h}\right)^2 - \left(\frac{r}{h}\right)^3 \right).$$

O que leva a:

$$-(b_1 + 4b_2) = 0. (4.57)$$

A condição de unidade para o caso unidimensional fica:

$$2\left[\int_{0}^{h} \left(b_{1}\left(1-\frac{r}{h}\right)^{3}+b_{2}\left(2-\frac{r}{h}\right)^{3}\right) dr+\int_{h}^{2h} b_{2}\left(2-\frac{r}{h}\right)^{3} dr\right]=1,$$

$$\frac{hb_{1}}{2}+8hb_{2}=1.$$
(4.58)

Já no caso bidimensional, a condição de unidade fica:

$$2\left[\int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{h} \left(b_{1} \left(1 - \frac{r}{h}\right)^{3} + b_{2} \left(2 - \frac{r}{h}\right)^{3}\right) r dr d\theta + \int_{h}^{2h} b_{2} \left(2 - \frac{r}{h}\right)^{3} r dr d\theta\right] = 1,$$

$$\frac{\pi h^{2} b_{1}}{10} + \frac{16\pi h^{2} b_{2}}{5} = 1.$$
(4.59)

A condição de unidade para o caso tridimensional fica:

$$2\left[\int_{0}^{\pi} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{h} \left(b_{1} \left(1 - \frac{r}{h}\right)^{3} + b_{2} \left(2 - \frac{r}{h}\right)^{3}\right) r^{2} sen\phi d\phi d\theta dr + \int_{h}^{2h} b_{2} \left(2 - \frac{r}{h}\right)^{3} r^{2} sen\phi d\phi d\theta dr\right] = 1,$$

$$\frac{4\pi h^{3} b_{1}}{6} + \frac{64\pi h^{3} b_{2}}{15} = 1. \tag{4.60}$$

Sendo assim, combinando (4.57) com (4.58), (4.59) ou (4.60) e resolvendo os sistemas para b_1 e b_2 chega-se a:

$$W(R,h) = \alpha_d \cdot \begin{cases} \frac{2}{3} - R^2 + \frac{R^3}{2} &, 0 \le R < 1\\ \frac{1}{6}(2 - R)^3 &, 1 \le R < 2\\ 0 &, R \ge 2 \end{cases}$$
(4.61)

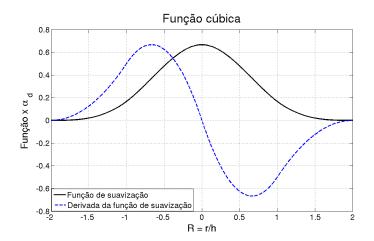


Figura 4.5: Função cúbica por partes

onde $\alpha = \frac{1}{h}, \frac{15}{7\pi h^2}, \frac{3}{2\pi h^3}$ nos casos uni, bi e tridimensional, respectivamente.

Essa função foi proposta em MONAGHAN; LATTANZIO (1985) e tem sido a função mais usada na literatura SPH, como, por exemplo em CLEARY; MONAGHAN (1999); LOBOVSKY; VIMMR (2007); MONAGHAN (1992, 1994); MORRIS; FOX; ZHU (1997); SIGALOTTI et al. (2003) já que assemelha-se com a função Gaussiana com o benefício de possuir um suporte compacto mais estreito. A continuidade da segunda derivada significa que a função não é sensível à desordem e os erros de aproximação da formulação integral quando feita a aproximação de partículas é pequeno, o que causa uma desordem pequena das partículas MONAGHAN (1992). Entretanto, a segunda derivada da função (4.61) é uma função linear por partes e as propriedades de estabilidade podem ser inferiores às funções mais suaves. Além disso, a função de suavização dada em partes é um pouco mais difícil de usar se comparada com as funções dadas em (4.51) e (4.56).

No presente trabalho usa-se a função cúbica por partes, chamada de B-spline em MONAGHAN ; LATTANZIO (1985) definida em (4.61) sempre que o método SPH for utilizado.

Em FULK ; QUINN (1996) é feita uma análise do comportamento de várias funções de suavização em uma dimensão.

4.5 Determinação do domínio suporte κh

O comprimento de suavização h, também chamado de raio de suavização é muito importante para o SPH porque influencia diretamente a eficiência computacional e a acurácia da solução. Seu valor determina o número de partículas utilizado nas interpolações. Se h é muito pequeno, podem não existir partículas suficientes no domínio suporte κh para exercer influência sobre uma dada partícula, prejudicando a acurácia. Se, por outro, lado h for muito grande, o esforço computacional é maior e também pode ocorrer resultados imprecisos, pois todos os detalhes e propriedades locais usadas pelo método podem ser muito suavizados por partículas mais afastadas.

As aproximações por partículas dadas em (3.11), (3.12) e (3.13) dependem de termos um número necessário no domínio suporte de κh . O esforço computacional e a velocidade de processamento também dependem desse número de partículas. Em LIU; LIU (2003) é sugerido que o número de partículas para uma, duas e três dimensões seja 5, 21 e 57, respectivamente, se as partículas estão dispostas de modo que o comprimento de suavização tenha 1,2 vezes o espaçamento da partícula, e $\kappa = 2$.

5 DECOMPOSIÇÃO ORTOGONAL PRÓPRIA

A Decomposição Ortogonal Própria ou POD (Proper Orthogonal Decomposition, em inglês) é um método poderoso e elegante de análise de dados, como procedimento de determinação dos elementos de base para a aproximação dos subespaços nos quais resolve-se o controle ótimo do problema. O POD, cujo objetivo é obter uma descrição aproximada de dimensão mais baixa de um problema de alta dimensão, fornece uma base para a decomposição modal de um conjunto de funções, tais como os dados obtidos no decorrer de experiências ou simulações numéricas. Sua característica marcante é a otimização: o método fornece a maneira mais eficiente de obter as componentes dominantes de um processo de dimensão finita com apenas um pequeno número de "modos".

Em geral, existem duas interpretações diferentes para o POD. A primeira considera o POD como a Decomposição Karhuen-Loève (KLD) e a segunda considera que o POD consiste em três métodos: o KLD, a Análise de Componentes Principais (PCA) e Decomposição em Valores Singulares (SVD). Devido às conexões próximas e da equivalência dos três métodos citados, neste trabalho usa-se a segunda interpretação para o método POD como feita em LIANG et al. (2002), ou seja, o POD inclui KLD, PCA e SVD.

Recentemente, o POD tem sido aplicado a diversos tipos de problema como, por exemplo: análise de variáveis aleatórias, processamento de imagens, análise de sinais, compressão de dados, processos de identificação, problemas de controles em processos químicos e oceonografia, também é usado para obter aproximações de ordem mais baixa de fluxos de escoamentos turbulentos, vibrações estruturais, detecção de danos, sistemas dinâmicos caóticos e sistemas microeletromecânicos

(LIANG et al., 2002).

5.1 Motivação

Suponha que queira-se aproximar uma função z(x,t) em algum domínio de interesse como a soma finita nas variáveis na forma:

$$z(x,t) \approx \sum_{k=1}^{\Gamma} a_k(t)\phi_k(x), \tag{5.1}$$

usualmente x é tomado como coordenada espacial e t como coordenada temporal $(t \ge 0)$. Uma expectativa não muito errônea é que a aproximação se torne exata no limite conforme Γ tenda ao infinito, exceto em um conjunto de medida nula¹.

A representação da equação (5.1) não é única. Por exemplo, se $x \in X \subset \mathbb{R}$, sendo X o domínio do problema, as funções $\phi_k(x)$ podem ser escolhidas por série de Fourier ou por polinômios como os de Legendre e Chebyshev. Para cada escolha de uma sequência de ϕ_k 's que forme uma base para uma classe de funções z(x,t) a sequência de funções $a_k(t)$ é diferente. O método POD está interessado em apenas uma única possibilidade de escolha para as funções $\phi_k(x)$ (CHATTERJEE, 2000).

Se as funções de base são ortonormais, ou seja:

$$\int_{X} \phi_{i}(x)\phi_{j}(x)dx = \begin{cases} 1 & \text{, se } i \neq j \\ 0 & \text{, caso contrário} \end{cases}$$
 (5.2)

e então multiplicando-se ambos os lados da igualdade por $\phi_k(x)$ e, por fim, inte-

¹Um conjunto $X \subset \mathbb{R}$ tem medida nula quando para todo $\varepsilon > 0$ existe uma família enumerável de intervalos abertos { I_k }_{k∈ℕ} satisfazendo às seguintes condições MEDEIROS ; MELLO (2011):

^{1.} $X \subset \bigcup_{k=1}^{\infty} I_k$, isto é, $\{I_k\}$ é um recobrimento de X,

^{2.} $\sum_{k=1}^{\infty} vol(I_k) < \varepsilon$

grando em relação a x obtém-se:

$$a_k(t) = \int_X z(x,t)\phi_k(x)dx. \tag{5.3}$$

Isto é, para bases ortonormais a determinação da função coeficiente $a_k(t)$ depende somente de $\phi_k(x)$ e não de outras funções ϕ_i 's. Nesse caso, usar a ortonormalidade do espaço como critério para selecionar tais funções base parece bastante útil e conveniente.

Essas funções ortonormais e ordenadas são chamadas de nós ortogonais próprios para a função z(x,t). Com essas funções, a expressão (5.1) é chamada a Decomposição Ortogonal Própria de z(x,t).

5.2 Caso de dimensão finita

A principal ideia do POD é achar um conjunto de vetores base ortonormais em um subespaço, \mathbb{R}^M , onde um vetor aleatório pode ser expresso de maneira otimizada usando apenas os primeiros l vetores base. Dessa maneira o erro obtido por essa aproximação pode fornecer uma medida do problema ótimo:

$$||x - x_l|| \le ||x - \bar{x}_l||,\tag{5.4}$$

onde x_l é a aproximação do vetor arbitrário x usando os primeiros l vetores de uma dada base ortonormal e \bar{x}_l é uma aproximação usando l vetores arbitrários de uma base do espaço.

Considere agora um sistema em que se tome medidas de M variáveis espaciais, por exemplo M sondas de velocidade em um fluido, em n instantes de tempo, medidos simultaneamente nesses M locais. Define-se a matriz A do tipo $n \times M$

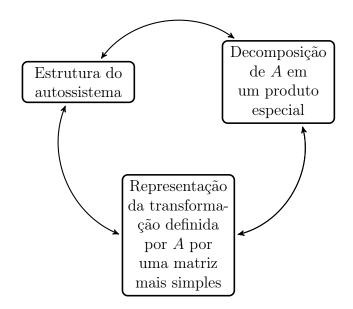
como a matriz de dados do problema formada pelos elementos a_{ij} que representa a medida da j-ésima sonda no i-ésimo instante de tempo. De maneira mais geral, poder-se-ia simplesmente considerar uma matriz $A \in \mathcal{M}_{n \times M}(\mathbb{R})$.

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1M} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nM} \end{pmatrix} . \tag{5.5}$$

Pode ser útil pensar nas colunas $\{A_{\cdot,j}\}_{j=1}^{M}$ como as trajetórias temporais do sistemas na localidade x_{j} , ou seja, a evolução temporal da sonda número j e nas linhas $\{A_{i,\cdot}\}_{i=1}^{n}$ como o vetor das coordenadas espaciais no tempo t_{i} . Também é comum extrair, de cada coluna de A, a média da mesma, por exemplo: $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}A_{i,j}$ pode ser vista como a média temporal da trajetória localizada em x_{j} . Caso isso não seja feito, não afetará os cálculos básicos, embora altere a interpretação dos resultados.

5.2.1 A decomposição em valores singulares

Um problema importante da estrutura de um autossistema de uma matriz A é equivalente a problemas relativos às decomposições de A e às mudanças de bases efetuadas a fim de simplificar a representação da transformação linear padrão definida por A, como mostrado no esquema a seguir NOBLE ; DANIEL (1986).



Em tais decomposições uma grande vantagem é o uso de matrizes unitárias², que preservam ângulo e comprimento, isto é, preservam o produto interno, pois é equivalente a usar bases ortonormais, computacionalmente convenientes para representar espaços vetoriais.

Considerando a matriz $A \in \mathcal{M}_{n \times M}$ como uma transformação linear de \mathbb{R}^M em \mathbb{R}^n (ou de \mathbb{C}^M em \mathbb{C}^n), por meio de $A(x) \equiv Ax$, e usando bases ortonormais arbitrárias tanto para o espaço imagem quanto para o espaço domínio (e não somente no espaço imagem como na decomposição QR), veremos que é possível achar uma representação muito simples (diagonal) para A, mesmo que seja necessário encontrar muitas informações sobre alguns autossistemas relacionados a A. A utilidade da simplificação (ou decomposição), no entanto, compensa o trabalho necessário para achá-la NOBLE; DANIEL (1986).

 $^{^2}$ Uma matriz Mé dita unitária caso $MM^H=I,$ sendo Ia matriz identidade e $M^H=\hat{M}^T$ a matriz transposta hermitiana (complexa conjugada da transposta ordinária) NOBLE ; DANIEL (1986).

Para o espaço domínio \mathbb{R}^M supõe-se um conjunto ortonormal arbitrário de vetores v_1, \ldots, v_M para ser usado como base, enquanto que o conjunto ortogonal arbitrário u_1, \ldots, u_n é usado como base para o espaço imagem \mathbb{R}^n . Definimos as matrizes unitárias $V_{M \times M}$ e $U_{n \times n}$ por meio de:

$$V = [v_1, \dots, v_M]$$
 e $U = [u_1, \dots, u_n].$ (5.6)

Sendo assim, reescreve-se um dado vetor $x \in \mathbb{R}^M$ em relação à nova base dada em V como x' por:

$$x' = V^H x, \quad x = V x'. \tag{5.7}$$

Enquanto que as relações análogas a um dado vetor y no espaço imagem \mathbb{R}^n são dadas por:

$$y' = U^H y, \quad y = U y'. \tag{5.8}$$

Se Ax=y chega-se a $U^HAVx'=y'$. De maneira resumida, a transformação linear A é representada relativamente às duas novas bases ortonormais pela matriz $A'_{n\times M}$

$$A' = U^H A V. (5.9)$$

Portanto, deseja-se achar duas matrizes unitárias U e V tais que A', como dada em (5.9), seja a mais simples possível.

Se n=M, a matriz A seria quadrada e a forma de Schur forneceria a redução dada acima em (5.9) com U=V e A' uma matriz triangular superior. Se $n\neq M$ a decomposição QR fornece uma redução mais simples para (5.9) com A' triangular à

direita e V = I, mas de maneira mais geral tem-se:

mas de manera mais gerar tem-se.
$$\begin{cases} \Sigma = U^H A V \text{ , onde} \\ A \not\in n \times M \\ U \not\in n \times n \text{ } e V \not\in M \times M \text{, ambas unitárias.} \end{cases}$$

$$\begin{cases} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_M \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} 5.10 \end{cases}$$

Vale ressaltar que mudou-se a notação de A' para Σ e que Σ está representada com n>M por mera conveniência. A condição sobre Σ é que seja nula, exceto sobre sua "diagonal principal", ou seja,

$$\Sigma = (\sigma_{ij})_{n \times M}$$
, com $\sigma_{ij} = 0$ se $i \neq j$. (5.11)

Então, se (5.10) é verificada, chega-se então à decomposição:

$$A = U\Sigma V^H. (5.12)$$

Assim sendo, tem-se:

$$A^{H}A = V(\Sigma^{H}\Sigma)V^{H}, \tag{5.13}$$

onde $\Sigma^H \Sigma$ é uma matriz diagonal $M \times M$. Como V é unitária, os elementos diagonais σ_i^2 são simplesmente os autovalores de $A^H A$, enquanto que as colunas de V fornecem

os respectivos autovetores associados. Os elementos não nulos σ_i da diagonal de Σ são chamados de valores singulares de A.

De maneira semelhante, tem-se:

$$AA^{H} = U(\Sigma \Sigma^{H})U^{H}, \tag{5.14}$$

onde $\Sigma\Sigma^H$ é diagonal e os elementos σ_i^2 são os autovalores de AA^H com autovetores associados pelas colunas de U. Assim sendo, pode-se definir as matrizes U, V e Σ a partir dessa relação de autovalores e autovetores e demonstra-se (5.10) e (5.12) para qualquer que seja a matriz A pelo teorema a seguir.

Teorema (Decomposição em valores singulares - SVD): Suponha que a matriz A, do tipo $n \times M$ tem posto K. Existem então: os valores singulares $\sigma_1 \ge \sigma_2 \dots \ge \sigma_K > 0$ de A, uma matriz unitária $U_{n \times n} = [u_1, \dots, u_n]$, e uma matriz unitária $V_{M \times M} = [v_1, \dots, v_M]$, tais que $\Sigma = U^H A V$ e $A = U \Sigma V^H$ com a matriz $\Sigma_{n \times M}$:

$$\Sigma = \begin{pmatrix} D & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

onde $D_{K\times K}$ é uma matriz diagonal com seu i-ésimo elemento $d_{ii}=\sigma_i>0$ para $1\leq i\leq K$. Além disso, para $1\leq i\leq K,\ u_i=\sigma_i^{-1}AU$ e $v_i=\sigma_i^{-1}A^Hu_i$ são autovetores de AA^H e A^HA , respectivamente, ambos associados com o autovalor $\sigma_i^2>0$; os vetores u_i para $K+1\leq i\leq n$ e v_i para $K+1\leq i\leq M$ são autovetores de AA^H e A^HA , respectivamente, todos associados ao autovalor zero.

Observação: Se A é uma matriz real, então U e V podem ser tomadas como matrizes reais e, portanto, ortogonais.

A demonstração desse teorema encontra-se em NOBLE ; DANIEL (1986) e em BUENO (2006) encontra-se uma demonstração diferente e interessante do mesmo.

Note que o posto da matriz A é igual ao número de valores singulares não nulos que A possui e que estes se encontram dispostos de maneira decrescente na diagonal da matriz D por causa da ordenação da base do espaço domínio. Outro comentário interessante que deve ser feito é que U e V na Decomposição em Valores Singulares não são necessariamente únicas, pois são compostas de autovetores que também não estão determinados de maneira única (dependem da base do espaço!). A principal importância prática do teorema é a existência da decomposição por meio de autovetores u_i e v_j , e não as relações entre eles.

O SVD pode ser visto como uma extensão da decomposição em autovalores para o caso de matrizes não-quadradas e é uma importante ferramenta na teoria das matrizes, sistemas lineares, estatística e análise de sinais LIANG et al. (2002).

Equivalência entre (5.1) **e** (5.3): Em CHATTERJEE (2000) foi feita a equivalência entre as equações (5.1) e (5.3) como segue.

Na equação (5.12), denota-se $U\Sigma = Q$. Portanto, a matriz Q é do tipo $n \times N$ e $A = QV^H$. Sendo q_i a i-ésima coluna de Q e v_i a i-ésima coluna de V, o produto dessas matrizes é dado por:

$$A = QV^{H} = \sum_{i=1}^{M} q_{i} v_{i}^{T}.$$
 (5.15)

A equação (5.15) é a forma discreta de (5.1). A função z(x,t) é representada pela matriz A, $a_k(t)$ pelas colunas q_k e as funções $\phi_i(x)$ pelas colunas v_i . A aproximação feita em (5.1) agora é exata por conta da dimensão finita. Devido à ortonormalidade das colunas de V, a equação (5.3) corresponde a multiplicar a equação (5.15) por algum dos v's a direita.

5.2.2 Aproximações de posto reduzidas

Mantendo as condições do teorema SVD e considerando uma matriz retangular $A_{n\times M}$ de posto K < n. Escrevendo a matriz U em blocos, $U = [U_K | U_{M-K}]$, e também a matriz $V^H = [V_K^H | V_{n-K}^H]$, sendo $U_K \in \mathcal{M}_{n\times K}$ e $V_K \in \mathcal{M}_{M\times K}$ dadas por:

$$\begin{cases}
U_{ij}^{(K)} = U_{ij} &, 1 \le i \le n \text{ e } 1 \le j \le K, \\
V_{ij}^{(K)} = V_{ij} &, 1 \le i \le n \text{ e } 1 \le j \le K.
\end{cases}$$
(5.16)

A decomposição $A = U\Sigma V^H$ pode ser expressa por:

$$A = \begin{pmatrix} U_K & U_{M-K} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_K \\ V_{n-K} \end{pmatrix}$$
 (5.17)

$$= U_K \Sigma_K V_K^H \tag{5.18}$$

Para qualquer inteiro s < K a matriz Σ_s obtida quando define-se $\sigma_{s+1} = \sigma_{s+2} = \ldots = \sigma_K = 0$ em Σ pode ser utilizada para calcular a aproximação ótima de posto s para A, dada por:

$$A_s = U\Sigma_s V^H. (5.19)$$

A otimização da aproximação feita na equação (5.19) é devida ao fato de que nenhuma matriz de posto s pode ser mais próxima a A na norma de Frobenius³ (que é a forma discreta da norma L_2^4). Sendo assim, as primeiras s colunas da matriz V dão uma base ortonormal ótima para aproximar os dados, para qualquer s. As colunas de V são os modos ortogonais próprios.

$$F(A) = \left(\sum_{i,j=1}^{n} |a_{i,j}^2|\right)^{\frac{1}{2}}$$

³Norma de Frobenius: A norma de Frobenius F(A) de uma matriz A é dada por:

 $^{^4}$ Norma L^2 : Seja fuma função real, $\|f(x)\|^2=\int |f(x)|^2 dx$

5.3 Interpretação geométrica

O SVD possui uma interpretação geométrica muito interessante. Uma matriz $A_{n\times M}$ pode ser vista como um operador linear de um espaço S_1 de dimensão M em um espaço S_2 de dimensão n. Dada a esfera unitária em S_1 , ou seja, o conjunto dos vetores de magnitude 1 na norma definida em S_1 . Essa esfera unitária é levada em um elipsóide no espaço S_2 . Os valores singulares $\sigma_1, \sigma_2, \ldots$ são os comprimentos dos raios principais do elipsóide. Como U e V são isometrias⁵ as direções desses raios principais são dados pelas colunas de V. A matriz Σ aumenta ou diminui o tamanho dos autovetores.

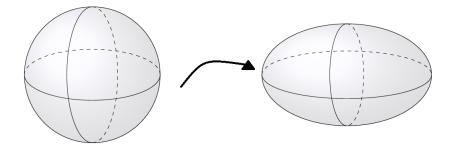


Figura 5.1: Transformação de uma esfera em S_1 em um elipsóide em S_2 .

Em CHATTERJEE (2000) é dada uma segunda interpretação geométrica do SVD em relação a pontos em espaços M-dimensionais.

 $^{^5}$ Uma aplicação (não necessariamente linear) M entre dois espaços euclidianos é uma isometria se para quaisquer vetores x,y do domínio tem-se: ||Mx - My|| = ||x - y||.

6 SIMULAÇÕES E RESULTADOS

6.1 Escoamento de Poiseuille com MDF

No primeiro momento do trabalho, foi feita uma simulação numérica do escoamento de Poiseuille bidimensional em placas paralelas (figura 2.5) de um fluido viscoso. Usou-se o MDF a fim de reproduzir os resultados obtidos em BODOIA; OSTERLE (1961), que obteve a variação do perfil de velocidades além do termo de pressão.

Se inicialmente o fluido encontra-se no estado estacionário e ocorre uma diferença de pressão o mesmo entra em movimento e o desenvolvimento completo do fluxo acontece depois de uma certa distância, chamada distância crítica ou comprimento de desenvolvimento, ao longo do canal a partir de sua entrada. O conhecimento deste comprimento torna-se muito importante e útil para o estudo completo do escoamento, mesmo que a distância seja apenas uma pequena parte do canal. Um processo de correspondência dos perfis de velocidade foi desenvolvido em SCH-LICHTING (1955) para obter o comprimento de desenvolvimento, embora esta não seja a abordagem aqui feita. Além disso, os resultados obtidos em BODOIA; OSTERLE (1961) são mais satisfatórios para o escoamento de Poiseuille do que em SCHLICHTING (1955).

6.1.1 As equações de governo

As equações que governam o movimento de fluido são dadas abaixo através da equação de momento de Prandtl, um caso particular da equação (2.21), e a equação

de continuidade, dada anteriormente em (2.7), sem a variação da densidade:

$$\rho \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = -\frac{dp}{dx} + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \tag{6.1}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, (6.2)$$

sendo u a velocidade horizontal, ou seja, ao longo do canal, v a velocidade vertical, transversal ao canal, ρ a densidade e μ a viscosidade do fluido e p a pressão (assumida constante através do canal). No lado esquerdo de (6.1) encontram-se os termos de inércia que tendem a desaparecer conforme o fluxo tende ao seu desenvolvimento completo.

Considerando \bar{u} a velocidade média de u ao longo do canal e h a altura do canal, podemos expressar o princípio de continuidade através da equação abaixo:

$$\bar{u}h = \int_0^h u dy. \tag{6.3}$$

De maneira adimensional, como em BODOIA ; OSTERLE (1961) as equações (6.1), (6.2) e (6.3) ficam:

$$U\frac{\partial U}{\partial X} + V\frac{\partial U}{\partial Y} = -\frac{dP}{dX} + \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2},\tag{6.4}$$

$$\frac{\partial U}{\partial X} + \frac{\partial V}{\partial Y} = 0, (6.5)$$

$$1 = \int_0^1 U dY. (6.6)$$

O esquema de diferenças finitas usado está representado na malha dada na figura 6.1. A coordenada X é discretizada com espaçamento uniforme ΔX , analogamente Y é discretizada com espaçamento ΔY e índices j e k para X e Y, respectivamente.

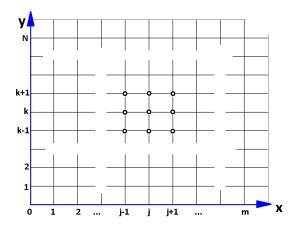


Figura 6.1: Esquema de diferenças finitas

Assim sendo, as aproximações para as derivadas encontradas na equação (6.4) são dadas por:

$$\begin{cases}
\frac{\partial U}{\partial X} \approx \frac{U_{j+1,k}-U_{j,k}}{\Delta X}, \\
\frac{\partial U}{\partial Y} \approx \frac{U_{j+1,k+1}-U_{j+1,k-1}}{2\Delta Y}, \\
\frac{\partial^2 U}{\partial Y^2} \approx \frac{U_{j+1,k+1}-2U_{j+1,k}+U_{j+1,k-1}}{(\Delta Y)^2}, \\
\frac{\partial P}{\partial X} \approx \frac{P_{j+1}-P_j}{\Delta X}.
\end{cases} (6.7)$$

Aplicando diretamente (6.7) em (6.4) tem-se:

$$\frac{U_{j+1,k+1} - 2U_{j+1,k} + U_{j+1,k-1}}{(\Delta Y)^2} - \frac{P_{j+1} - P_j}{\Delta X} = U_{j,k} \frac{U_{j+1,k} - U_{j,k}}{\Delta X} + V_{j,k} \frac{U_{j+1,k+1} - U_{j+1,k-1}}{2\Delta Y}.$$
(6.8)

Já para as derivadas da equação (6.5) usaremos:

$$\begin{cases}
\frac{\partial U}{\partial X} \approx \frac{U_{j+1,k+1} + U_{j+1,k} - U_{j,k+1} - U_{j,k}}{2\Delta X}, \\
\frac{\partial V}{\partial Y} \approx \frac{V_{j+1,k+1} - V_{j+1,k}}{\Delta Y}.
\end{cases} (6.9)$$

A equação (6.1) com o esquema dado em (6.9) pode ser rearrumada como:

$$V_{j+1,k+1} - V_{j+1,k} = \frac{\Delta Y}{2\Delta X} (U_{j+1,k+1} + U_{j+1,k} - U_{j,k+1} - U_{j,k}). \tag{6.10}$$

Usando o método dos trapézios para a integral dada em (6.6) obtém-se:

$$\frac{U_{j,0} + U_{j,n+1}}{2} + \sum_{k=1}^{n} U_{j,k} = n+1.$$
 (6.11)

As equações obtidas em (6.8) e (6.10) são demonstradas consistentes e estáveis conforme BODOIA; OSTERLE (1961). Para aplicar as discretizações dadas em (6.7), (6.9) e (6.11) e simular o escoamento de Poiseuille, as seguintes condições de contorno são necessárias:

$$\begin{cases} X = 0 & e & 0 < Y < 1 \\ U = 1 & , & V = 0 \end{cases}, \quad (boca do canal)$$

$$(6.12)$$

onde P_0 é a pressão adimensional na boca do canal.

$$\begin{cases} X > 0 & e \ Y = 0 \ (parede inferior): \ U = 0 \ , \ V = 0 \\ X > 0 & e \ Y = 1 \ (parede superior): \ U = 0 \ , \ V = 0. \end{cases}$$
 (6.13)

Considerando as condições dadas em (6.12) e (6.13), para qualquer coluna j, a equação (6.11) se reduz a:

$$\sum_{k=1}^{n} U_{j,k} = n+1. (6.14)$$

6.1.2 Esquema de resolução

Para a simulação do fluxo descrito, desenvolveu-se um código em MatLab que segue os passos descritos a seguir e no pseudo-código descrito no algoritmo 1.

- 1. Aplicar o esquema de diferenças finitas às equações adimensionais dadas em (6.4), (6.5) e (6.6);
- 2. Aplicar as condições de contorno (6.12) e (6.13) na boca do canal (P_0 , U_0 e V_0 , coluna j=0);
- 3. Na coluna j=1 seguinte à boca do canal, utilizar (6.8) e (6.14) para obter o vetor $[U_{1,1},\ldots,U_{1,n},P_1]$;
- 4. Incorporar $[U_{1,1}, \ldots, U_{1,n}]$ à variável matrizU e P_1 à vetorP;
- 5. Obter as velocidades $V = [V_{1,1}, \dots, V_{1,n}]$ utilizando (6.10) e incorporá-las à variável matrizV;
- 6. Dar um passo no eixo ao longo do tubo (j = j + 1);
- 7. Repetir o processo, a partir do item (3) acima, ao longo do tubo até sua última coluna.

Algoritmo 1: Resolução do escoamento de Poiseuille usando o MDF

```
Entrada: P_0, U_0, V_0, m, N

Saída: matrizU, matrizV, vetorP

inicio

Aplica-se as condições de contorno para u e v na boca do canal (j=0);

Aplica-se o MDF as equações adimensionais dadas;

repita

Aplicar condições de contorno (6.12) e (6.13);

Calcular o vetor [U_{j+1}, P_{j+1}] a partir de (6.8) e (6.11);

Incorporar U_{j+1} a matrizU e P_{j+1} a vetorP;

Calcular o vetor [V_{j+1}] a partir de (6.10);

Incorporar V_{j+1} a matrizV

até j = m (última coluna);
```

6.1.3 Resultados

Todos os sistemas lineares que aparecem no algoritmo para obter U_{j+1} , V_{j+1} e P_{j+1} foram resolvidos por eliminação Gaussiana. Além disso, foram usados 42 pontos ao longo do comprimento do tubo (eixo x) e 101 através do tubo (eixo y). O desenvolvimento das velocidades horizontais em diferentes alturas do duto está representado no gráfico $X \times U$ da figura 6.2 que, por conveniência da simetria do escoamento, foi representado até a altura média do duto.

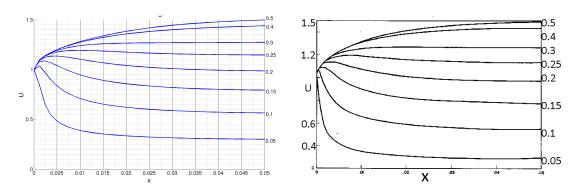


Figura 6.2: Resultado obtido \times resultado apresentado em (BODOIA ; OSTERLE, 1961).

As velocidades horizontais desenvolvem o perfil parabólico esperado com velocidade adimensional máxima em seu centro de 1.499263877049720. A figura 6.3 mostra o desenvolvimento desses perfis de velocidade ao longo do canal. Inicialmente com uma forma mais achatada e uniforme devido à condição de contorno, o perfil ganha a forma parabólica e partir de x=0.05 esse perfil apresenta diferenças da ordem de 10^{-2} e assume-se que o mesmo está em seu estado desenvolvido.

Conforme a malha é refinada a velocidade central tende a ficar mais próxima a 1.5 como esperado analiticamente. Os resultados estão destacados na tabela 6.1 6.1:

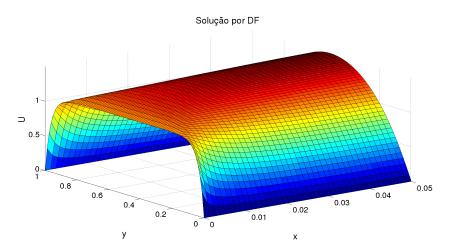


Figura 6.3: Desenvolvimento do perfil de velocidades

Tabela 6.1: Velocidade máxima de acordo com a discretização

| Discretização $(m \times N)$ | Velocidade máxima (U_{max}) |
|------------------------------|-------------------------------|
| 14×21 | 1.473012794376349 |
| 44×61 | 1.488577427846190 |
| 54×81 | 1.491225677998326 |
| 64×101 | 1.491428739718554 |
| 84 × 101 | 1.484428483048655 |
| 64×121 | 1.488740575043642 |
| 64×141 | 1.493736758772272 |
| 64×181 | 1.493255627534239 |
| 84 × 181 | 1.491457540267231 |
| 54×141 | 1.495268615210378 |
| 42×121 | 1.498005157292806 |
| 42×101 | 1.498641855527040 |
| 40 	imes 101 | 1.499263877049720 |
| 42×81 | 1.497797119388411 |
| 40×81 | 1.498855761360764 |

O comportamento da pressão 1 na região de desenvolvimento é mostrado na figura 6.4 e comparado com o resultado obtido em BODOIA ; OSTERLE (1961)

¹O termo usado como pressão é, na verdade, a diferença entre a pressão total e a pressão hidrostática (pressão de repouso). Isso faz com que as forças de corpo se cancelem conforme estão em equilíbrio com a pressão hidrostática.

assim como foi feito com o desenvolvimento das velocidades horizontais. A diferença de pressão $\Delta P = P_0 - P$ é definida negativa por convenção $(P_0 < P)$, ou seja, decresce na direção do movimento para que a velocidade seja positiva sobre todo o comprimento do canal. Para valores negativos de P a velocidade em alguma porção do canal pode ficar negativa $(back \ flow)$, tal fato ocorreria próximo à parede que se encontra em estado estacionário SCHLICHTING (1955).

O gráfico da figura 6.4 também mostra a diferença de pressão $(\Delta P)_0$ que seria obtida caso o fluxo estivesse completamente desenvolvido a partir da boca do canal, isto é, caso as forças de inércia da equação (6.1) fossem desconsideradas, como dado a seguir:

$$\frac{dP}{dX} = \frac{d^2U}{dY^2}. (6.15)$$

A partir desta equação, considerando as condições de contorno dadas em (6.12) e (6.13), além de U(0.5) = 1.5, mostra-se que:

$$\begin{cases} (\Delta P)_0 &= 12X & e \\ U &= 6Y(1-Y) & . \end{cases}$$
 (6.16)

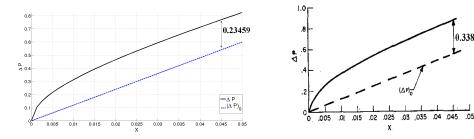


Figura 6.4: Evolução da pressão P no escoamento de Poiseuille comparada com (BODOIA ; OSTERLE, 1961)

Note que no resultado obtido a diferença $\Delta P - (\Delta P)_0$ se aproxima do valor constante de 0.23459 enquanto que em BODOIA ; OSTERLE (1961) esse valor é

de 0.338 como assinalado na figura. Tal diferença, muito provavelmente, se deve a erros numéricos.

6.2 Escoamento de Poiseuille com MDF usando o POD

6.2.1 Reprodução do resultado com MDF usando o POD

Após a reprodução e validação dos resultados obtidos em BODOIA ; OSTERLE (1961) na seção anterior, deseja-se reproduzir os resultados do experimento usando o método POD descrito no capítulo 5.

Como dito anteriormente a figura 6.3 representa a evolução do perfil de velocidades horizontais ao longo do canal, tais velocidades foram armazenadas na variável matriz uma matriz de dados do tipo 101×43 na qual a primeira coluna armazena as condições de contorno impostas em (6.12) e (6.13).

O SVD é então aplicado sobre matrizU e observando a diagonal da matriz Σ obtida podemos observar seus valores singulares (figura 6.5). Em CHATTERJEE (2000) podemos encontrar um código semelhante ao usado neste trabalho para o método POD com aproximações de posto reduzido.

Os valores singulares decrescem muito rapidamente, $\sigma_1 \approx 71.4$ e com σ_5 já na ordem de 10^{-2} e a partir de σ_{27} ($posto(\mathtt{matrizU}) = 27$) os valores permanecem praticamente constantes na ordem de 10^{-13} . Portanto uma aproximação reduzida até posto 5 seria satisfatória para a reprodução do experimento, na figura 6.6 mostra-se as superfícies aproximadas até posto 6.

A figura 6.7 compara efetivamente os resultados obtidos pelas aproximações

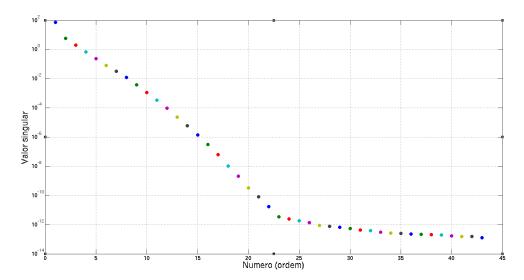


Figura 6.5: Valores singulares da matriz de dados matrizU

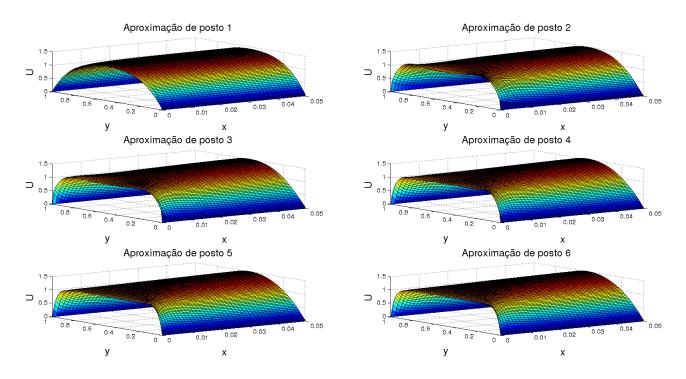


Figura 6.6: Aproximação por postos de 1 a 6

de posto $k=1,\ldots,6$ com a solução pelo MDF apresentada em 6.3. A tabela 6.2 mostra a ordem da diferença de aproximação de acordo com o número de valores singulares utilizados na redução de modelo e o algoritmo 2 descreve a reprodução por posto reduzido.

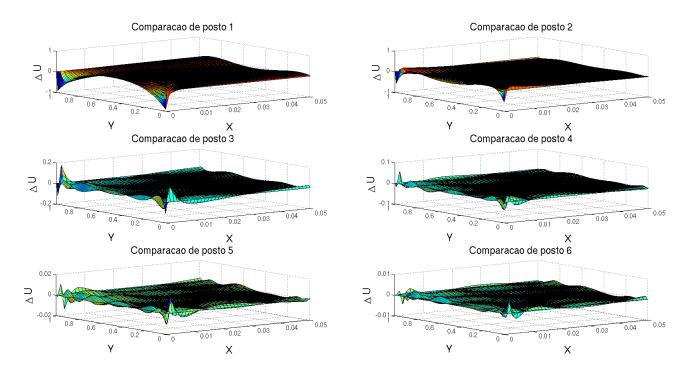


Figura 6.7: Diferenças entre a solução por MDF em 6.3 e as aproximações por postos de 1 a 6.

| Posto | Ordem da diferença | Posto | Ordem da diferença |
|-------|--------------------|-------|--------------------|
| 1 | 10^{-1} | 13 | 10^{-7} |
| 4 | 10^{-2} | 15 | 10^{-8} |
| 6 | 10^{-3} | 16 | 10^{-9} |
| 8 | 10^{-4} | 18 | 10^{-10} |
| 10 | 10^{-5} | 19 | 10^{-11} |
| 11 | 10^{-6} | 20 | 10^{-12} |

Tabela 6.2: Ordem da diferença da aproximação em função do número de valores singulares utilizados.

Algoritmo 2: Reprodução do escoamento de Poiseuille por MDF usando o POD

```
Entrada: P_0, U_0, V_0, m, N

Saída: matrizU, matrizV, vetorP

inicio

Roda-se o algoritmo 1;
Aplica-se a decomposição SVD em matrizU;

repita

Reproduz-se matrizU por z = U_k \Sigma_k V_k^H;
Faz-se a diferença: matrizU - z para comparação da aproximação de posto reduzida;

até j = k (posto desejado);

fin
```

6.2.2 POD como método de extrapolação para os MDF

Como descrito no capítulo 5, o POD tem como objetivo fornecer uma descrição aproximada da simulação a partir apenas de parte dos dados obtidos (elementos da base), feitas as devidas decomposições. Na seção 6.2.1 viu-se que o POD reproduz muito bem o resultado obtido por MDF caso sejam usados todos os dados da simulção que estavam armazenados na variável matrizU. O que se deseja saber agora é: o POD é igualmente ou quase tão eficiente para reproduzir todo o resultado a partir de uma porção pequena desses dados? Ou seja, deseja-se saber se as primeiras K colunas de matrizU são suficientes para reproduzir todo o escoamento.

Para isso mostra-se primeiro como fazer a linearização da redução do modelo. Na decomposição SVD feita em $\mathtt{matrizU}_{n\times M}$ obtivemos as matrizes $U_{n\times n}$, $\Sigma_{n\times M}$ e $V_{M\times M}$. Definimos, então, a matriz D

$$D_{M \times M} = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 1 & \ddots & & \vdots \\ & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{6.17}$$

uma matriz nula com exceção dos elementos abaixo da diagonal principal, isto é, $d_{i,i-1} = 1, i = 2, ..., M$.

O que se deseja obter é um vetor de velocidades u_{j+1} ao longo do canal a partir apenas do seu precedente u_j , um método semelhante ao método de Euler (3.39). Define-se então o operador T e obtém-se um método POD linearizado como dado a seguir:

$$T = U\Sigma V^H D V \hat{\Sigma} U^H, \tag{6.18}$$

onde a matriz $\hat{\Sigma}_{m \times N}$ atua como uma "matriz inversa" de Σ e que será definida de acordo com a tolerância tol estabelecida para os valores singulares de Σ e usados na extrapolação. O esquema de resolução é dado a seguir e resumido no algoritmo 3:

- 1. Aplica-se o algoritmo 1 para gerar a matriz de dados matrizU;
- 2. Faz-se a decomposição SVD em matriz
U, ou seja, matriz U = $U\Sigma V^H;$
- 3. Define-se a tolerância tol para a "inversão" dos valores singulares na matriz $\hat{\Sigma}$ da seguinte forma;
 - (a) Se $\sigma_k < tol$ então $\hat{\Sigma}_{k,k} = 0$, isto é, se o valor singular for muito pequeno, então desconsideraremos o mesmo (e os seguintes) para a redução de modelo;
 - (b) Caso contrário, $\sigma_k > tol$, então $\hat{\Sigma}_{k,k} = \frac{1}{\sigma_k}$;
- 4. Sendo K o número de autovalores invertidos de acordo com a tolerância, tem-se $z_{:,1:K} = \mathtt{matrizU}_{:,1:K};$
- 5. Define-se o operador T como dado em (6.18);
- 6. Calcula-se o vetor $z_{:,K+1}$ das velocidades horizontais por $z_{:,K+1} = T*\mathtt{matrizU}_{:,K}$;
- 7. Repete-se o último item para as colunas seguintes até que j=m.

Algoritmo 3: Resolução do escoamento de Poiseuille usando MDF + POD

```
Entrada: P_0, U_0, V_0, M, n, tol
Saída: nova_matrizU
inicio
    Roda o algoritmo 1 e obtém-se matrizU;
    Aplicar a decomposição SVD em matrizU;
    repita
        if \sigma_i < tol then
          \hat{\Sigma}_{i,i} = 0;
        end if
        else
         \hat{\Sigma}_{i,i} = 1/\sigma_i
        end if
    até i = m;
    Define-se K como o último valor singular invertido; repita
      z_{:,K} = \mathtt{matrizU}_{:,K}
    até i = K;
    T = U\Sigma V^H D V \hat{\Sigma} U^H;
    repita
        z_{:,j+1} = T * z_{:,j};
       nova_matrizU_{:,j} = u_{:,j};
    até j = K:(m-1);
fin
```

A tabela 6.3 mostra o número de valores singulares utilizado de acordo com a tolerância estabelecida para a inversão dos valores singulares da matriz Σ .

| tol | Número | tol | Número |
|-----------|--------|-----------|--------|
| 10^{-1} | 5 | 10^{-6} | 15 |
| 10^{-2} | 8 | 10^{-7} | 16 |
| 10^{-3} | 10 | 10^{-8} | 18 |
| 10^{-4} | 11 | 10^{-9} | 19 |
| 10^{-5} | 13 | | |

Tabela 6.3: Número de valores singulares de acordo com a tolerância.

Os resultados obtidos para essas aproximações linearizadas do POD podem ser vistos na figura 6.8. Tais aproximações fazem com que o POD, quando linea-

rizado, perca sua eficiência e oscile ao longo das iterações conforme o escoamento se desenvolve. Além disso, o número de oscilações, tal como seus picos, aumenta conforme a tolerância para os valores singulares diminui, até que "explode" com a tolerância de 10^{-9} .

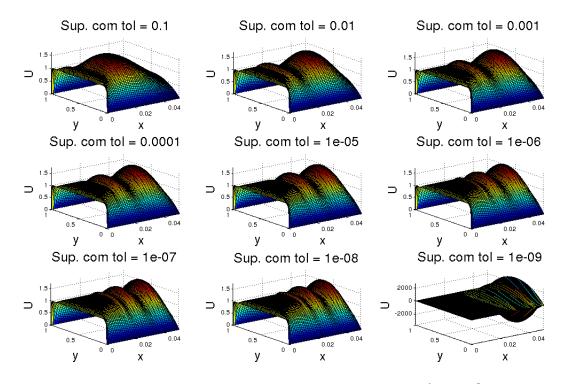


Figura 6.8: Extrapolações com tolerâncias de 10^{-1} à 10^{-9}

Na figura 6.9 mostra-se a evolução da velocidade no centro do duto comparada com a evolução obtida pelo MDF (figura 6.2).

A comparação dos erros gerados pelas oscilações nas superfícies geradas na figura 6.8 em relação às obtidas na figura 6.3 é feita na figura 6.10.

Como dito, o operador T funciona como o integrador temporal de Euler que possui instabilidade inerente em seus cálculos, por se tratar um operador de primeira ordem (equação (3.39)). Para ilustrar tal efeito oscilante, resolveu-se a equação que

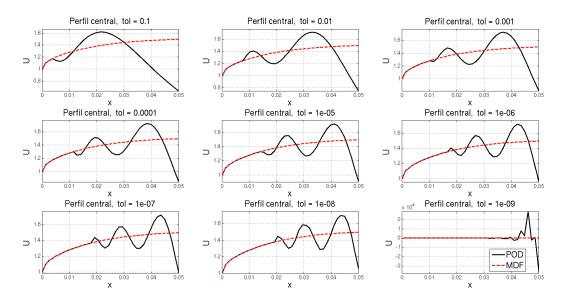


Figura 6.9: Comparação de evoluções do perfil central de velocidades com o MDF e o POD.

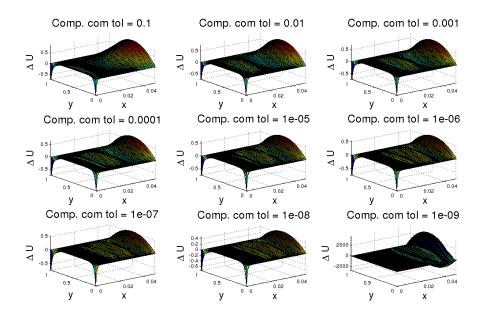


Figura 6.10: Diferença entre o resultado por MDF e as extrapolações com tolerâncias de 10^{-1} à 10^{-9}

modela um sistema massa-mola $(\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{kx}{m} - \frac{c}{m}\frac{dx}{dt})$, com c = 0 - coeficiente de amortecimento da mola, k = 1 - constante de rigidez da mola e m = 1 - massa da mola) e observou-se o mesmo efeito após um certo tempo decorrido (Figura 6.11).

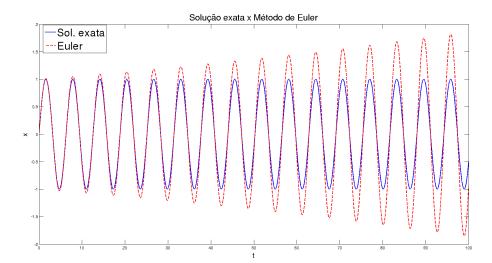


Figura 6.11: Evolução temporal do sistema massa-mola com integração temporal de Euler

Tendo em vista que o efeito oscilante seria esperado no comportamento da solução aproximada com o operador linearizado utilizado para o POD, observa-se na figura 6.9 que a solução analítica corta tais oscilações aproximadamente no meio de seus picos, fazendo com que o comportamento da solução do POD linearizado seja coerente e condizente com o comportamento esperado da solução por MDF de uma equação não-linear. Em LUO et al. (2013) é feita uma análise mais completa do escoamento nesse tipo de problema, fazendo a redução do espaço do problema, em seguida reescrevendo todo o problema em dimensão menor para então aplicar-se o método POD.

6.3 Escoamento de Poiseuille via SPH

6.3.1 A equação de movimento

Em um segundo momento do estudo, foram feitas simulações do escoamento de Poiseuille de um fluido invíscido ($\mu = 0$), incompressível ($\Delta \rho = 0$) e isotérmico usando o método SPH.

Assim como na abordagem com o MDF, as forças de corpo são desconsideradas e a equação de movimento, dada em (2.21), fica restrita a:

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla \mathbf{p},\tag{6.19}$$

conhecida como a equação de Euler.

Sua discretização no método SPH, feitas as adaptações em (3.42), é dada por:

$$\mathbf{u}_{i}^{t+1} = \mathbf{u}_{i}^{t} - \Delta t. \sum_{j \in V_{i}} m_{j} \left(\frac{c^{2}(\rho_{i} - \rho_{0})}{\rho_{i}^{2}} + \frac{c^{2}(\rho_{j} - \rho_{0})}{\rho_{j}^{2}} \right) \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} \frac{\mathbf{x}_{ij}}{r_{ij}}, \tag{6.20}$$

onde
$$\frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} \frac{\mathbf{x}_{ij}}{r_{ij}} = \nabla_i W_{ij}$$
.

Além disso, usaremos para a equação de continuidade a aproximação para a densidade dada na equação (3.29).

6.3.2 Suavização da velocidade: XSPH

Com o objetivo de prevenir a interpenetração de partículas em fluxos de alta velocidade, o que poderia gerar aglomerados instáveis de partículas, a técnica do

XSPH foi introduzida em MONAGHAN (1989). O objetivo de modificar as velocidades obtidas na equação de momento é criar um movimento mais suave de partículas que estão próximas, ou seja, velocidades quase idênticas para determinada porção do fluido. Além disso, deseja-se que os momentos linear e angular sejam conservados e que o termo de correção seja um invariante galileano². Estes objetivos são conseguidos no tratamento de fluidos quase-incompressíveis através da substituição abaixo:

$$\mathbf{u}_i \leftarrow \mathbf{u}_i + \sum_{j=1}^N \frac{2m_j}{\rho_i + \rho_j} (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) W_{ij}. \tag{6.21}$$

Em MONAGHAN (1994), a velocidade é corrigida através da média das velocidades das partículas vizinhas ponderada por um parâmetro global constante $\varepsilon \in [0,1]$ da seguinte forma:

$$\mathbf{u}_i \leftarrow \mathbf{u}_i + \varepsilon \sum_{j \in V_i} \frac{2m_j}{\rho_i + \rho_j} (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) W_{ij}$$
 (6.22)

onde V_i representa a vizinhança da partícula i. Em MONAGHAN (1994) tomouse $\varepsilon = 0.5$, mas na maioria dos casos $\varepsilon = 0.3$ parece ser uma boa escolha para a simulação de fluidos incompressíveis e $\varepsilon \geq 0.5$ pode ser usado para simulações com explosões. A técnica quando aplicada a escoamentos incompressíveis tende a deixar as partículas mais ordenadas e em escoamentos compressíveis evitar penetração entre as partículas de fato LIU; LIU (2003).

6.3.3 Resultados

O fluido foi inicialmente distribuído por 40 partículas verticais e 20 partículas horizontais (figura 6.12), tal como foi feito em LIU; LIU (2003). O tubo possui altura

²Invariância de Galileu: princípio de relatividade no qual as leis fundamentais da Física são as mesmas em todos os sistemas de referência inerciais, isto é, a forma das equações físicas não pode depender do estado de movimento de um observador, uma vez que o movimento é relativo.

1 e comprimento 2.5. Todas as partículas possuem massa m=1000 e densidade inicial $\rho_0=1000$ que é atualizada pela equação 3.29, além disso, com exceção das partículas localizadas na borda do tubo todas possuem velocidade horizontal u=1, análogo a 6.12 e 6.13 com exceção do termo de pressão. O comprimento de suavização é 2.5 vezes o raio da partícula, h=2.5R, que por sua vez é dado para que todas as 40 partículas na vertical caibam exatamente no tubo, isto é, $R=\frac{1}{80}=0.0125$. O parâmetro escalar κ é igual a 2, o tempo inicial $t_0=0$, o passo de tempo $dt=10^{-4}$ (pela condição CFL dada em (3.44) $dt<10^{-2}$) e o número de passos $N_{passos}=1000$.

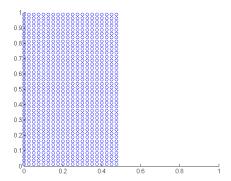


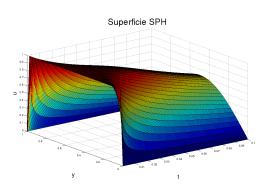
Figura 6.12: Estado inicial SPH

Como a ausência de termos dissipativos nas equações (3.29) e (6.20) causa instabilidades numéricas LOBOVSKY; VIMMR (2007), os batch tests iniciais foram feitos para o ajuste dos seguintes parâmetros: ε , o parâmetro escalar do XSPH, e a velocidade do som c. Por fim, ficou determinado que os melhores resultados eram gerados com $\varepsilon = 0.3$ assim como sugerido em LIU; LIU (2003) e c = 1.45, o que causa um escoamento tranquilo, causado por uma baixa diferença de pressão. É importante ressaltar que as grandezas envolvidas não estão sob unidades do SI que reproduzam o fenômeno físico real.

Para garantir a condição unitária das funções de suavização, define-se o vetor SomaW contendo a soma dos valores da função W em cada partícula na disposição

inicial para ponderar o cálculo das funções de suavização a cada *loop* temporal do programa. Além disso, o XSPH foi utilizado devido a ausência do tratamento de fronteira em todo tubo para prevenir incoerências físicas como velocidades negativas (*back flow*) durante o escoamento e acaba funcionando como uma viscosidade artificial.

A evolução temporal do perfil de velocidades da coluna central do fluido é dado na figura 6.13 enquanto seu perfil final de velocidades é dado na figura 6.14. Nota-se que o perfil parabólico do escoamento de Poiseuille é obtido rapidamente, devido às condições de contorno e à força simétrica de pressão no escoamento, apesar do decréscimo de velocidade que ocorre em virtude da suavização excessiva forçada pelo XSPH. O tratamento de fluido quase-incompressível mostra-se bem reproduzido já que a variações de ρ se encontram entre 92,32% e 104,95% que pela equação (3.36) leva uma variação do número de Mach de 0.222485955 a 0.277073997, ambos menores do que 0.3 que garante o fluxo como incompressível.



0.5

Figura 6.13: Superfície de velocidades SPH

Figura 6.14: Perfil final da coluna do meio

O esquema abaixo se encontra no algoritmo 4 usado para a simulação.

1. Definem-se as constantes iniciais do problema: N, altura, comprimento, m, ρ , c, h, κ , dt, t_0 , N_{passos} e ε ;

- 2. Faz-se a distribuição inicial das partículas no tubo e define-se $t=t_0$;
- 3. Aplica-se a condição inicial u = 0 para as partículas localizadas junto à fronteira (paredes), u = 1 para as demais;
- 4. Lista-se os vizinhos de cada partícula e em seguida, calcula-se SomaW;
- 5. Início do *loop*: Calcula-se os vizinhos de cada partícula;
- Aplica-se a equação de conservação de massa (3.29) e caulcula-se a nova densidade, ponderada por SomaW;
- 7. Aplica-se a condição de contorno como dada em 6.12 e (6.13) (com exceção de $P = P_0$);
- 8. Calcula-se o termo de pressão em cada partícula, fazendo uso da equação de estado discreta (3.35);
- 9. Calcula-se a nova velocidade de cada partícula, usando a equação de Euler (6.20) e a integração temporal dada em (3.39);
- 10. Aplica-se o XSPH (6.22);
- 11. Incrementa-se o tempo, t = t + dt, e repete-se o loop até que $t = N_{passos}.dt$.

6.4 Escoamento de Poiseuille por SPH usando o POD

6.4.1 Reprodução SPH via POD

Assim como feito com a solução por MDF, reproduziu-se o escoamento obtido pelo método SPH usando a aproximação de posto reduzido do método POD. Os dados das velocidades horizontais de todas as partículas ao longo do tempo foram

Algoritmo 4: Resolução do escoamento de Poiseuille via SPH

```
Entrada: N, altura, comprimento, m, \rho_i, c, h, \kappa, t_0, dt, N_{passos} e \varepsilon; Saída: x_i^{t_{final}}, u_i^{t_{final}}, \rho_i^{t_{final}}, p_i^{t_{final}}, i = 1, \ldots, N
inicio
     Faz-se a distribuição espacial inicial (x_0, y_0);
     Aplica-se a condição inicial;
     Lista-se as partículas vizinhas no estado inicial;
     Define-se somaW;
     repita
          Calcular os vizinhos de cada partícula;
          Aplicar a conservação de massa;
         Calcular a nova densidade \frac{\rho_i^{t+\Delta t}}{SomaW};
          Aplicar a condição de contorno;
          Calcular a nova pressão p_i^{t+\Delta t};
         Calcular a nova velocidade u_i^{t+\Delta t} (integração temporal);
         Calcular a nova posição x_i^{t+\Delta t};
         Suavizar a velocidade usando o XSPH;
     até t = N_{passos} \cdot dt;
fin
```

armazenados na variável A_u , uma matriz de dados 800×1001 , com a primeira coluna novamente reservada às condições de contorno impostas. Devido ao uso do XSPH, as partículas apresentam um desenvolvimento parecido e portanto para a análise da evolução de velocidades a coluna do meio foi escolhida por razões de simetria e também por suas partículas terem mais vizinhos do que as colunas da "borda" como a primeira e a última.

As velocidades horizontais da coluna central foram extraídas de $\texttt{A_u}$ e armazenadas na variável $\texttt{data_matrix}$, uma matriz do tipo 40×1001 . Em seguida a Decomposição em Valores Singulares é feita sobre $\texttt{data_matrix}$ e os valores singulares da matriz Σ são apresentados na figura 6.15.

Os valores singulares também decrescem rapidamente, $\sigma_1 \approx 41.25$ e σ_6 na

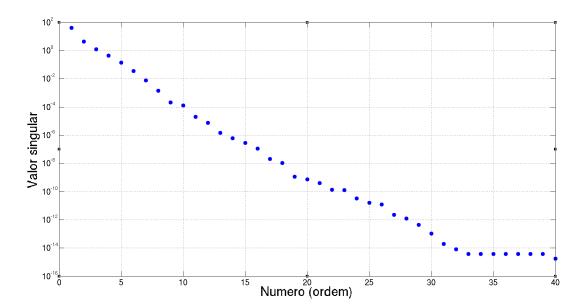


Figura 6.15: Valores singulares da matriz de dados data_matrix.

ordem de 10^{-2} . O posto da matriz Σ é 37 e os valores singulares dessa ordem já se encontram na ordem de 10^{-15} . Como a aproximação reduzida em MDF até posto 6 gerou uma diferença de 10^{-3} , inicialmente as simulações de reprodução foram feitas até essa ordem e apresentadas na figura 6.16. O método de reprodução é análogo ao feito no caso com o MDF.

A figura 6.17 compara efetivamente a solução via SPH e as aproximações de posto $k=1,\ldots,6$ dadas na figura anterior, para posto 5 a diferença já se encontra na ordem de 10^{-3} . A tabela 6.4 mostra a ordem de diferença máxima obtida na aproximação de acordo com o número de valores singulares utilizados e o algoritmo 5 explica o processo de simulação.

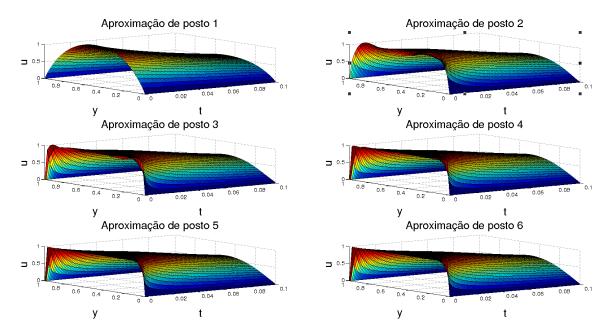


Figura 6.16: Reprodução de 6.13 via POD.

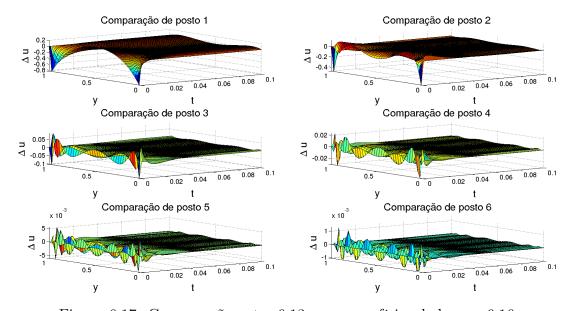


Figura 6.17: Comparação entre 6.13 e as superfícies dadas em 6.16.

6.4.2 POD como extrapolação para os resultados SPH

Tal como foi feito para a solução em MDF, deseja-se extrapolar os resultados obtidos com o método SPH usando o POD, isto é, deseja-se saber se as k primeiras

| Ordem da diferença | Posto | Ordem da diferença | posto |
|--------------------|-------|--------------------|-------|
| 10^{-1} | 1 | 10^{-7} | 14 |
| 10^{-2} | 4 | 10^{-8} | 15 |
| 10^{-3} | 6 | 10^{-9} | 17 |
| 10^{-4} | 8 | 10^{-10} | 19 |
| 10^{-5} | 9 | 10^{-11} | 21 |
| 10^{-6} | 12 | 10^{-12} | 25 |

Tabela 6.4: Ordem da diferença da aproximação em função do número de valores singulares utilizado

```
Algoritmo 5: Resolução do escoamento de Poiseuille usando SPH + POD

Entrada: x_i^0, u_i^0, v_i^0, N, t_0, dt, Npassos, m_i, \rho_i, altura, comprimento, \mu, c, h, \kappa, r e \varepsilon

Saída: x_i^t, u_i^t, v_i^t, \rho_i^t
inicio

Rodar o algoritmo 4 e obtém-se a matriz de dados data_matrix;
Aplicar a decomposição SVD em data_matrix;
repita

Reproduz-se matrizU por z = U_k \Sigma_k V_k^H;
Faz-se a diferença: data_matrix - z para comparação da aproximação de posto reduzida;
até j = k (posto desejado);
fin
```

colunas de data_matrix são suficientes ou satisfatórias, para reproduzir o escoamento obtido e representado na figura 6.13. O modelo de resolução é análogo ao feito em MDF, definindo-se a matriz D (6.17) e o operador linearizado T (6.18). O algoritmo 6 descreve o procedimento.

A tabela 6.5 apresenta o número de valores singulares utilizados de acordo com a tolerância dada em tol para a inversão dos autovalores na matriz $\hat{\Sigma}$:

Na figura 6.18 são apresentadas as aproximações extrapoladas do método POD linearizado com tolerâncias de 10^{-1} até 10^{-9} . A perda de eficiência devido a

Algoritmo 6: Simulação extrapolada do escoamento de Poiseuille usando SPH + POD

```
Entrada: x_i^0, u_i^0, v_i^0, N, t_0, dt, Npassos, m_i, \rho_i, altura, comprimento, \mu, c,
              h, \kappa, r \in \varepsilon
Saída: x_i^t, u_i^t, v_i^t, \rho_i^t
inicio
    Rodar o algoritmo 4 e obtém-se a matriz de dados data_matrix;
    Aplicar a decomposição SVD em data_matrix;
    repita
         if \sigma_i < tol then
            \hat{\Sigma}_{i,i} = 0;
         else
             \hat{\Sigma}_{i,i} = 1/\sigma_i
    até i=m;
    Define-se K como o último valor singular invertido;
         z_{:,i} = \mathtt{data\_matrix}_{:,i} \ \mathtt{new\_data\_matrix}_{:,1} = z_{:,1};
    até i = K;
    T = U\Sigma V^H DV\hat{\Sigma}U^H;
    repita
         z_{:,t} = T * z_{:,t-1};
        new_data_matrix_{:,t} = z_{:,t};
    até t = K : Npassos;
fin
```

linearização do POD é maior do que no método MDF devido ao tamanho da matriz de dados a ser decomposta (40×1001 ao invés de 101×41) por causa do tratamento da posição de cada partícula em cada passo de tempo da simulação, nota-se que as extrapolações "explodem" com $tol = 10^{-8}$. A comparação dos perfis centrais é apresentada na figura 6.19 e, mais uma vez, a solução gerada "analiticamente" na simulação SPH passa entre os picos das oscilações da aproximação extrapolada, o que torna a linearização do POD através da matriz D e do operador T um método coerente de resolução.

| tol | Número | tol | Número |
|-----------|--------|------------|--------|
| 10^{-1} | 6 | 10^{-6} | 16 |
| 10^{-2} | 8 | 10^{-7} | 17 |
| 10^{-3} | 9 | 10^{-8} | 20 |
| 10^{-4} | 12 | 10^{-9} | 23 |
| 10^{-5} | 14 | 10^{-10} | 26 |

Tabela 6.5: Número de valores singulares de acordo com a tolerância.

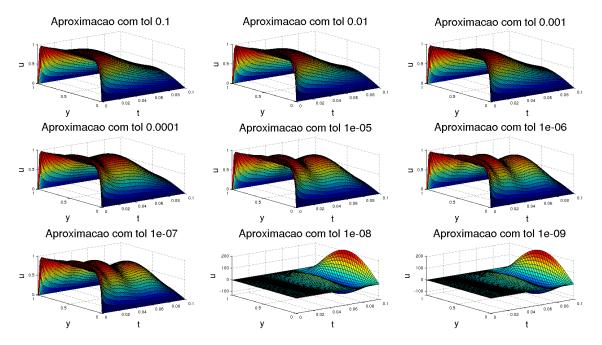


Figura 6.18: Superfícies de velocidade de acordo com a tolerância tol.

A comparação das superfícies apresentadas em 6.18 com a apresentada em 6.13 é feita na figura 6.20 e as diferenças se encontram na ordem de 10^{-1} , mas até a metade do desenvolvimento do escoamento tais diferenças ficam na ordem de 10^{-2} para todas as tolerâncias observadas.

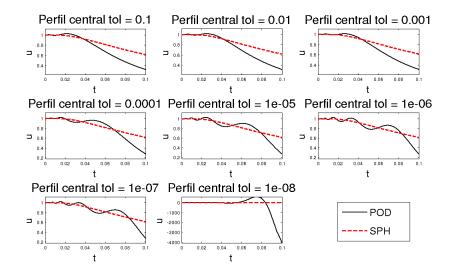


Figura 6.19: Comparação: velocidades SPH x velocidades da extrapolação com POD

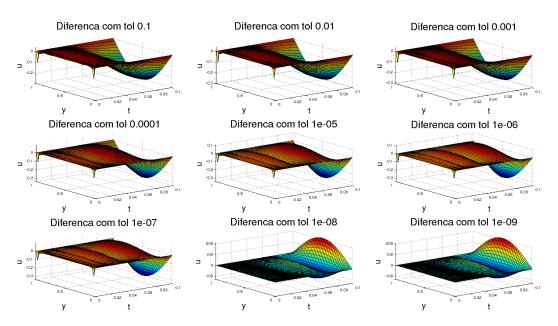


Figura 6.20: Diferença de velocidades SPH (6.18) x velocidades da extrapolação com POD (6.13).

7 CONCLUSÃO

7.1 Avaliações dos resultados e contribuições da dissertação

O objetivo principal da dissertação foi acoplar dois métodos poderosos, o SPH como método de simulação numérica e o POD como método de análise de dados, e ver sua interação. Inicialmente ambos foram testados separadamente para que houvesse indícios de que funcionariam bem juntos, o POD com MDF e o método SPH sozinho, porém amparado em artigos semelhantes como HOLMES; WILLIAMS; TILKE (2000); LOBOVSKY; VIMMR (2007); MORRIS; FOX; ZHU (1997); SIGALOTTI et al. (2003).

Das subseções 6.2.1 e 6.4.1 pode-se concluir que o POD reproduz muito bem os resultados obtidos com uma aproximação de posto reduzido, assim como em CHATTERJEE (2000); KUNISCH ; VOLKWEIN (1999). A ordem da diferença entre a superfície analítica obtida via MDF e as superfícies de posto reduzido foi de 10^{-2} já com o posto 5, para o resultado obtido via SPH para o mesmo valor de posto a ordem da diferença já se encontrava em 10^{-3} , como mostrado nos gráficos das figuras 6.7 e 6.17 e nas tabelas 6.2 e 6.4, respectivamente. A Decomposição em Valores Singulares, proposta no teorema da subseção 5.2.1 mostra-se um resultado extremamente poderoso quando aplicado computacionalmente, já que fornece a decomposição em bases ortonormais, o que facilita bastante os cálculos no computador.

Devido à complexidade do tratamento do método POD para a descrição lagrangiana do escoamento, decidiu-se linearizá-lo e ainda assim testar o acoplamento com o SPH. Com o intuito de verificar se os resultados obtidos se mostrariam corretos, eficientes e coerentes com os resultados reais, ao final do processo pode-se dizer que resposta é sim.

Mesmo quando linearizado e extrapolado, nas subseções 6.2.2 e 6.4.2, o método POD conseguiu obter resultados coerentes para as simulações feitas com MDF e SPH, respectivamente. A linearização da decomposição cria um efeito oscilatório crescente na solução, típico do integrador de Euler ao qual a linearização se assemelha. Entretanto, os pontos intermediários dos picos dessas oscilações encontram-se próximos dos valores das soluções obtidas por MDF e SPH nas seções 6.1.3 e 6.3.3. Em ambos os casos, as diferenças iniciais, aproximadamente até o meio da simulação, eram da mesma ordem das diferenças encontradas em 6.2.1 e 6.4.1.

Quando forçou-se a linearização da Decomposição Ortogonal Própria era de se esperar que a precisão do método não fosse tão rígida, embora sua acurácia de certa maneira não ficasse tão afetada. O tratamento das equações de Navier-Stokes é muito delicado devido aos seus termos não-lineares, além disso, as simplificações feitas neste trabalho causam algumas perturbações do fenômeno. Um outro aspecto que não se deve deixar de notar é a diferença da modelagem dos problemas feitos em MDF e SPH, já que a primeira está sob formulação euleriana e não depende do tempo como a segunda, que por sua vez, está sob a formulação lagrangiana e não apresenta tratamento de fronteira.

A principal contribuição deste trabalho está no acoplamento realizado para o SPH e o POD com bons resultados para a reprodução e resultados satisfatórios para a extrapolação. Tal junção não tinha sido encontrada na literatura até então. Além disso, os batch tests realizados para o ajuste de parâmetros do SPH, como a velocidade do som, o comprimento de suavização, o passo de tempo e o parâmetro ponderador do XSPH, embora não aprofundados no texto, sobre seu processo contribuem para trabalhos que sigam nessa abordagem, já que o método SPH é

extremamente sensível aos seus parâmetros e os valores se encontram explícitos no texto, o que não é tão comum na literatura.

7.2 Trabalhos futuros

Pode-se destacar algumas futuras possíveis boas contribuições à literatura, as primeiras, no âmbito da simulação com o SPH, são: a inclusão do termo viscoso real $(\frac{\mu}{\rho}\nabla^2 u)$ ou artificial como feito em LOBOVSKY; VIMMR (2007) ao escoamento e a possível retirada do auxílio do XSPH, um tratamento de fronteira com partículas fantasmas ao longo do duto que tornaria o escoamento mais próximo à realidade física e os parâmetros utilizados poderiam ser os destacados nas tabelas de unidades do SI tal como as dimensões espaciais da simulação.

Outra contribuição interessante se encontra na junção dos métodos SPH e POD. Realizar a extrapolação não-linearizada seria o maior resultado a se obter, algo semelhante ao que foi feito em LUO et al. (2013) para MDF, numa descrição Euleriana do problema.

Em um patamar um pouco mais elevado, pode-se realizar os dois passos aqui descritos e realizados numa simulação em três dimensões e, mais a frente, em dutos cilíndricos, transformando o escoamento de Poiseuille (dutos cartesianos) no que se conhece como escoamento de Hagen-Poiseuille (dutos cilíndricos). Feito isso, pode-se também tentar simulações de fluidos viscoelásticos ou ainda fluxos heterogêneos, com misturas de substâncias fluidas ou corpos sólidos dissolvidas no fluido.

No âmbito computacional, pode-se destacar que a otimização dos códigos implementados é uma boa contribuição a ser feita, o que melhoraria o desempenho computacional e o tempo de simulação. Uma nova programação feita em placa

de vídeo ou em linguagens mais robustas como C++, para uma avaliação do desempenho da máquina e do tempo de simulação, também seriam contribuições interessantes ao presente trabalho, o que acarretaria uma possível simulação de escoamento em tempo real.

REFERÊNCIAS

- ANDERSON JR., J. D. Computational Fluid Dynamics the basics with aplications. USA: McGraw-Hill Inc., 1995.
- AZEVEDO, L. R. d. Estudo e implementação utilizando GPU computing do método mSPH. 2013. Dissertação (Mestrado em Matemática) UFRJ, Brasil, 2013.
- BODOIA, J. R.; OSTERLE, J. F. Finite difference analysis of plane Poiseuille and Couette flow developments. **Applied Scientific Research, Section A**, Netherlands, v. 10, p. 265–276, 1961.
- BUENO, H. P. Álgebra Linear; um segundo curso. Brasil: SBM, 2006.
- CARMO, F. P. A equação de Poisson e a decomposição de Helmholtz-Hodge com operadores SPH. 2008. Tese (Doutorado em Ciência da Computação) — Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
- CHATTERJEE, A. An introduction to the proper orthogonal decomposition. Current Science, India, v. 78(7), p. 808–817, 2000.
- CLEARY, P. W.; MONAGHAN, J. J. Conduction Modelling Using Smoothed Particle Hydrodynamics. Journal of Computational Physics, San Diego, CA, USA, v. 148(1), p. 227–264, 1999.
- COLIN, F.; EGLI, R.; LIN, F. Y. Computing a null divergence velocity field using smoothed particle hydrodynamics. **Journal of Computational Physics**, San Diego, CA, USA, v. 217, p. 680–692, 2006.
- FOX, R. W.; MCDONALD, A. T.; PRITCHARD, P. J. Introdução à mecânica dos fluidos. USA: LTC, 2004.

- FULK, D. A.; QUINN, D. W. An Analysis of 1-D Smoothed Particle Hydrodynamics Kernels. **Journal of Computation Physics**, San Diego, CA, USA, v. 126, p. 165 180, 1996.
- GINGOLD, R. A.; MONAGHAN, J. Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars. **Mon. Not. R. Astron. Soc.**, Cambridge, England, v. 181, p. 375–389, 1977.
- HICKS, D. L.; LIEBROCK, L. M. Lanczo's generalized derivative: insights and applications. **Applied Mathematics and Computations**, USA, v. 112, p. 63 73, 2000.
- HOLMES, D. W.; WILLIAMS, J. R.; TILKE, P. Smooth particle hydrodynamics simulations of low Reynolds number flows through porous media. **International Journal for Numerical and Analytical methods in Geomechanics**, MIT, USA, v. 00, p. 1–6, 2000.
- KUNISCH, K.; VOLKWEIN, S. Control of the Burgers equation by a reducedorder approach using proper orthogonal decomposition. **Journal of Optimization Theory and Applications**, Austria, v. 102.2, p. 345–371, 1999.
- LAX, p. D.; RITCHMYER, R. D. Survey of the Stability of Linear Finite Difference Equations. Communications on pure and applied mathematics, [S.l.], v. ix, p. 267 293, 1956.
- LEWINER, T. et al. Simulação de fluidos sem malha: uma introdução ao método sph. Brasil: PUC-RJ, 2009.
- LIANG, Y. C. et al. Proper Orthogonal Decomposition and its applications Part I: theory. **Journal of Sound and Vibration**, China, v. 252(3), p. 527 544, 2002.
- LIMA, E. L. **Análise Real Vol.1. Funções de uma Variável**. Brasil: IMPA, 2012.

- LIU, G. R.; LIU, M. Smoothed Particle Hydrodynamics, a meshfree particle method. Singapore: World Scientific Publishing, 2003.
- LIU, M. B.; LIU, G. R.; LAM, K. Y. Constructing smoothing functions in smoothed particle hydrodynamics with applications. **Journal of Computational** and **Applied Mathematics**, Singapore, v. 155, p. 263 284, 2002.
- LOBOVSKY, L.; VIMMR, J. Smoothed particle hydrodynamics and finite volume modelling of incompressible fluid flow. **Mathematics and Computers in Simulation**, Czech Republic, v. 76, p. 124 131, 2007.
- LUCY, L. B. Numerical approach to testing the fission hypothesis. **Applied Mathematical Modelling**, UK, v. 82, p. 1013 1024, 1977.
- LUO, Z. et al. A reduced-order finite difference extrapolation algorithm based on POD technique for the non-stationary Navier–Stokes equations. **Astronomical Journal**, China, v. 37, p. 5464–5473, 2013.
- MEDEIROS, L. A.; MELLO, E. A. A integral de Lebesgue. Brasil: IM-UFRJ, 2011.
- MEDEIROS, L. A.; MIRANDA, M. M. Introdução aos espaços de Sobolev e às Equações Diferenciais Parciais. Brasil: IM-UFRJ, 2011.
- MONAGHAN, J. J.; LATTANZIO, J. C. A refined particle method for astrophysical problems. **Astron. Astrophys**, Germany, v. 149, p. 135 143, 1985.
- MONAGHAN, J. J. On the problem of penetration in particle methods. **Journal** of Computational Physics, San Diego, CA, USA, v. 82(1), p. 1–15, 1989.
- MONAGHAN, J. J. Smoothed Particle Hydrodynamics. **Annual Review of Astronomy and Astrophysics**, Australia, v. 30, p. 543–74, 1992.
- MONAGHAN, J. J. Simulating free surface flows with SPH. **Journal of Computational Physics**, San Diego, CA, USA, v. 110, p. 399–406, 1994.

- MORRIS, J. P.; FOX, P. J.; ZHU, Y. Modeling Low Reynolds Number Incompressible Flows Using SPH. **Journal of Computational Physics**, San Diego, CA, USA, v. 136, p. 214 226, 1997.
- MüLLER, M.; CHARYPAR; D. GROSS, M. Particle-Based fluid simulation for interactive applications. **ETHZ**, **SIGGRAPH Symposium on Computer Animation**, Switzerland, p. 154 159, 2003.
- NOBLE, B.; DANIEL, J. W. **Álgebra Linear Aplicada**. Brasil: Prentice-Hall do Brasil 2a edição, 1986.
- NUSSENZVEIG, H. M. Curso de Física Básica 2 Fluidos, escilações e ondas, Calor. Brasil: Editora Blucher, 4 edição, 2002. v. 2.
- RINCON, M. A.; LIU, I. S. Introdução ao método de elementos finitos Computação e Análise de Equações Diferenciais Parciais. Brasil: IM-UFRJ, 2012.
- SCHLICHTING, H. Boundary layer theory. [S.l.]: McGraw-Hill Book Co., 1955.
- SHAMES, I. H. **Mecânica dos fluidos**. [S.l.]: Editora Edgard Blucher, 1973. v. 1-2.
- SIGALOTTI, L. D. G. et al. SPH simulations of time-dependent Poiseuille flow at low Reynolds number. **Journal of Computational Physics**, San Diego, CA, USA, v. 191, p. 622 638, 2003.
- TAKEDA, H.; MIYAMA, S. H.; SEKIYA, M. Numerical Simulation of Viscous Flow by Smoothed Particle Hydrodynamics. **Progress of Theoretical Physics**, Japan, v. 92, p. 939 960, 1994.
- TOKATY, G. A. A history and philosophy of fluid mechanics. [S.l.]: Dover Publications, Inc., 1994.