

Estudo Matemático do Método SPH para Modelo *Wet-Dam-Break*

Clicia Giovane Alves Pereira

Orientador: Prof. Dr. Messias Meneguette Junior

Co-orientador: Prof. Dr. Carlos Alberto Dutra Fraga Filho

Programa: Matemática Aplicada e Computacional

Presidente Prudente, 29 março 2019

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente

Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional

Estudo Matemático do Método SPH para
Modelo *Wet-Dam-Break*

Clicia Giovane Alves Pereira

Orientador: Prof. Dr. Messias Meneguette Junior

Co-orientador: Prof. Dr. Carlos Alberto Dutra Fraga Filho

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional da Faculdade de Ciências e Tecnologia da UNESP para obtenção do título de Mestre em Matemática Aplicada e Computacional.

Presidente Prudente, 29 Março 2019

P436e Pereira, Clicia Giovane Alves Pereira Alves
 Estudo Matemático do Método SPH para Modelo
Wet-Dam-Break / Clicia Giovane Alves Pereira Alves
Pereira. -- Presidente Prudente, 2019
 84 p.

 Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista
(Unesp), Faculdade de Ciências e Tecnologia, Presidente
Prudente
 Orientador : Messias Meneguette Junior
 Coorientador : Carlos Alberto Dutra Fraga Filho

 1. Smoothed Particle Hydrodynamics. 2. Solução



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

Câmpus de Presidente Prudente

CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

TÍTULO DA DISSERTAÇÃO: ESTUDO MATEMÁTICO DO MÉTODO SPH PARA O MODELO WET-DAM-BREAK

AUTORA: CLICIA GIOVANE ALVES PEREIRA ORIENTADOR:
MESSIAS MENEGUETTE JUNIOR
COORDENADOR: CARLOS ALBERTO DUTRA FRAGA FILHO

Aprovada como parte das exigências para obtenção do Título de Mestra em MATEMÁTICA APLICADA E COMPUTACIONAL, pela Comissão Examinadora:

Prof. Dr. MESSIAS MENEGUETTE JUNIOR
Departamento de Matemática e Computação / Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente

Profa. Dra. VANESSA AVANSINI BOTTA PIRANI
Departamento de Matemática e Computação / Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente

Profa. Dra. ANDRIANA SUSANA LOPES DE OLIVEIRA CAMPANHARO
Departamento de Bioestatística / Instituto de Biociências de Botucatu

Presidente Prudente, 29 de março de 2019

Para minha mãe Elvira

Agradecimentos

Primeiramente agradeço aos meus orientadores Messias Meneguette Junior e Carlos Alberto Dutra Fraga Filho, pela orientação, dedicação e infinita paciência. Com certeza levo de ambos mais que conhecimento acadêmico, levo exemplos de bondade, serenidade e empatia.

Aos professores dos POSMAC, que tanto contribuíram com a minha formação Cássio Machiaveli Oishi, Cristiane Nespoli, Vanessa Avansini Botta Pirani, Gilcilene Sanchez Paulo e em especial a professora Analice Costacurta Brandi sempre tão atenciosa e me auxiliando em momentos que eu precisava viajar pra assistir aula.

Minha gratidão especial ao Fernando Pacanelli Martins, por disponibilizar seu tempo para me auxiliar com os problemas do meu computador e explicar com toda paciência do mundo como usar o Linux.

Aos colegas do POSMAC, Laison, Jéssica, Rodrigo, Letícia, Juan, Karla, Leonardo e Maria Cecília, foram primordiais por sua ajuda com as disciplinas, palavras de apoio, conversas divertidas e comidas calóricas.

As minhas queridas amigas/irmãs do POSMAC Thais, Tânia e Débora, sou muito grata por ter encontrado pessoas tão especiais na minha passagem por Presidente Prudente. Obrigada por todo apoio, horas de estudo e risadas.

Ao professor Adilandri Mércio Lobeiro, pelo incentivo com minha formação desde a graduação. Será sempre pra mim um exemplo de respeito a docência e amor aos alunos.

Ao meu colega de grupo SPH Neylan, obrigado pela parceria nas madrugadas de estudo sempre com seu infinito bom humor e calma inabalável.

Aos meus queridos amigos Samir e Elis que foram minha família em Prudente.

A minha irmã Karen, meu cunhado Fernando e meu padrasto Mauro, por todo incentivo, apoio e compreensão com minha ausência.

Finalmente, a minha mãe Elvira, que nunca mediu esforços e horas de trabalho para que eu e minha irmã pudéssemos estudar. Obrigada mamãe.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

Resumo

Neste trabalho, apresenta-se o método Lagrangiano de partículas livre de malhas, *Smoothed Particle Hydrodynamics* (SPH). Neste método, o domínio do problema é discretizado empregando partículas que possuem propriedades físicas calculadas a partir das propriedades das partículas vizinhas, por meio de uma interpolação, utilizando uma função de suavização. O método foi aplicado para discretizar e adaptar para SPH um modelo de ruptura de barragem sobre um leito úmido conhecido como *Dam-Break in Wet-Bed*. Tal modelo, considerado ideal, é empregado nos testes de desempenho, precisão e confiabilidade de modelos matemáticos para validação de métodos numéricos aplicados a problemas de vertedouros em barragens hidrelétricas e ondas em praias.

Palavras-Chave: *Smoothed Particle Hydrodynamics, wet-bed, dam-break.*

Abstract

In this work, we present the Lagrangian mesh-free method of particles, Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH). In this method, the problem domain is discretized using particles having physical properties calculated from neighboring particles by means of interpolation using a smoothing function. The method was applied to discretize and to adapt the SPH for a model of dam rupture on a wet-bed known as Wet-Dam-Break. This model, considered as ideal, is used in tests of performance, accuracy and reliability of mathematical models for validation of numerical methods applied to spillways problems in hydroelectric dams and waves at beaches.

Keywords: *Smoothed Hydrodynamics Particles, wet-bed, dam-break.*

Lista de Figuras

2.1	Estrutura de fluido baseado em malha em 2D. O campo de velocidade discreta é representada por pontos (KELAGER, 2006).	23
2.2	Malha/células Lagrangiana. As células triangulares da malha se movem com o material (LIU; LIU, 2003).	24
2.3	Estrutura de fluido à base de partículas de Lagrange em 2D. As partículas são representadas por pontos. Os círculos representam o volume de cada partícula (KELAGER, 2006).	25
2.4	Modelo de placas paralelas proposto por Newton para explicar o conceito de viscosidade.	26
3.1	O domínio de suporte da função de suavização W e domínio do problema. O domínio do suporte está localizado dentro do domínio do problema (LIU; LIU, 2003).	32
3.2	O domínio de suporte da função suavizadora W e o domínio do problema. O domínio de suporte se intercepta com o domínio do problema (LIU; LIU, 2003).	33
3.3	Aproximação de partícula usando partículas dentro do domínio de suporte da função de suavização W para a partícula i . O domínio de suporte é circular com um raio de kh (LIU; LIU, 2003).	34
3.4	Aproximação de partículas para uma partícula interior com distribuição regular de partículas em seu domínio de suporte (LIU; LIU, 2003).	56
3.5	Aproximação de partículas para uma partícula cujo domínio de suporte é truncado pelo limite (LIU; LIU, 2003).	56
3.6	Aproximação de partículas para uma partícula com distribuição irregular de partículas em seu domínio de suporte (LIU; LIU, 2003).	57
3.7	O mecanismo do <i>leap-frog</i> . A linha horizontal representa o tempo t , e os índices nas posições r e velocidades \mathbf{v} indicam o tempo específico.	59
4.1	Esboço da interação entre uma partícula de fluido (círculo vazio) e um conjunto de partículas de contorno (círculos inteiros). As partículas de limite são colocadas de maneira escalonada.	64
4.2	Geometria para o caso de teste de quebra de barragem com leito úmido	66
4.3	Teste 1	67
4.4	Teste 2	67
4.5	Teste 1	68
4.6	Teste 3	68
4.7	Teste 1	70
4.8	Teste 4	70
4.9	Teste 1	72
4.10	Filtro de Shepard	72

4.11	Teste experimentais.	73
4.12	Teste 1 no tempo $t = 1.16 s$	73

Lista de Tabelas

4.1	Teste 1.	69
4.2	Teste 2.	69
4.3	Teste 1.	69
4.4	Teste 3.	69
4.5	Teste 1.	69
4.6	Teste 4	69
4.7	Teste 1.	71
4.8	Teste 4	71

Lista de Siglas

EDO: Equações Diferenciais Ordinárias.
EDP: Equações Diferenciais Parciais
DFC: Dinâmica dos Fluidos Computacional
SPH: *Smoothed Particle Hydrodynamics*
MDF: Método de Diferenças Finitas
MEF: Método de Elementos Finitos
MPM: *Meshfree Particle Methods*

Sumário

Resumo	7
Abstract	9
Lista de Figuras	10
Lista de Tabelas	12
Lista de Siglas	15
Capítulos	
1 Introdução	19
2 Abordagem Euleriana e Lagrangiana das Equações de Navier-Stokes	21
2.1 Equações de Navier-Stokes	22
2.1.1 Dinâmica dos Fluidos Eulerianos	23
2.1.2 Dinâmica de Fluidos Lagrangianos	24
2.1.2.1 Método Lagrangiano com Malha	24
2.1.2.2 Método Lagrangiano Sem Malha	24
2.2 Alguns Conceitos de Mecânica dos Fluidos	25
3 Formulação do método <i>Smoothed Particle Hydrodynamics</i>	29
3.1 Ideias Básicas do SPH	29
3.1.1 Representação integral de uma função	30
3.1.2 Representação integral da derivada de uma função	32
3.1.3 Aproximação por partículas	33
3.1.4 Técnica para formulação de derivadas em SPH	37
3.2 Construção das Funções de Suavização	39
3.2.1 Condições a serem satisfeitas	39
3.2.2 Alguns exemplos de funções de suavização	40
3.2.3 Condições para construção de uma função de suavização	42
3.2.3.1 Aproximação para uma função contínua	42
3.2.4 A aproximação das derivadas de uma função de campo	45
3.2.4.1 Primeira Derivada	46
3.2.4.2 Derivada Segunda	49
3.2.5 Consistência da aproximação do núcleo	54
3.2.6 Consistência da aproximação de partículas	55
3.3 Integração	58
3.3.1 O método Leap-Frog	58
3.3.2 Método de Euler Explícito	59

3.3.3	O Método de Verlet	59
4	Quebra de Barragem em um Leito Úmido	61
4.1	Modelagem do Problema e Aproximações SPH	62
4.1.1	Equação do Momento	62
4.1.2	Equação da Continuidade	62
4.1.3	Equação de Estado	63
4.1.4	Movimento das Partículas	63
4.1.5	Passo no Tempo	63
4.1.6	Condições de Borda	63
4.1.7	Núcleo de Suavização	65
4.1.8	Filtro de Shepard	65
4.2	Teste Numéricos Usando o Simulador SPHysics	65
4.2.1	Descrição do Modelo	66
4.2.2	Comparação entre Teste 1 e Teste 2	66
4.2.3	Comparação Teste 1 e Teste 3	66
4.2.4	Comparação Entre o Teste 1 e o Teste 4	69
4.2.5	Comparação Entre o Teste 1 e Teste com Filtro de Shepard	71
4.2.6	Algumas Observações	71
5	Conclusões	75
	Referências	75
	Apêndices	
A	Definições e Teoremas Importantes	81

Introdução

Os escoamentos de fluidos são governados por um conjunto de equações diferenciais parciais acopladas, que são as equações da continuidade (conservação de massa), conservação do momento (segunda Lei de Newton) e conservação da energia (primeira Lei da Termodinâmica) (FORTUNA, 2012). Com exceção de alguns casos simples, não é possível obter uma solução analítica dessas equações e, portanto, deve-se recorrer ao desenvolvimento de simuladores numéricos que forneçam soluções precisas para problemas descritos por esse tipo de equação.

Os métodos numéricos mais difundidos na Dinâmica dos Fluidos Computacional (DFC) são: os métodos que empregam malhas computacionais; os mais conhecidos são método diferenças finitas, volumes finitos e elementos finitos. A principal característica desses métodos consiste na necessidade de uma malha Euleriana ou Lagrangiana, sobre a qual as equações de balanço possam ser discretizadas e a solução obtida por meio de um domínio físico particionado. Tais métodos, embora sejam amplamente estudados e utilizados, tendem a apresentar dificuldades para escoamentos com fronteiras deformáveis ou superfícies livres (LIU; LIU, 2003).

Uma alternativa aos métodos que utilizam malhas para discretizar o domínio é dado pelos métodos Lagrangianos livres de malha (*meshfree*). Tais métodos se adaptam melhor a solução de problemas que apresentam superfícies livres e fronteiras móveis. Estes métodos têm se desenvolvido para simulação computacional para problemas de mecânica dos sólidos e dinâmica dos fluidos. A principal vantagem desse tipo de método é tratar de problemas que envolvem grandes deformações, superfícies livres, captura de interfaces móveis e geometrias complexas. São chamados de métodos de partículas, *Meshfree Particle Methods* (MPM), resolvem o problema físico mediante o uso de um conjunto de partículas que na maioria das vezes representam o fluido. As variáveis, como massa específica, energia, velocidade e pressão são atribuídas a cada partícula (CRESPO, 2008).

Dentro dos métodos MPM existentes, o método conhecido como *Smoothed Particle Hydrodynamics* (SPH) tem se mostrado promissor na resolução de problemas que apresentam grandes deformações, interfaces móveis, fronteiras deformáveis e superfícies livres (MONAGHAN, 1989), (MONAGHAN, 2005), (MARRONE, 2013), (MANENTI et al., 2012). No método SPH, a discretização do domínio do problema é realizada através do emprego de partículas e as equações de balanço são descritas a partir da representação integral de uma função contínua e da aproximação por partículas que é a forma discreta da representação integral (LIU; LIU, 2003), sem a necessidade da existência de uma malha computacional. As partículas carregam informações sobre a massa, a posição, a velocidade, a pressão, dependendo do problema considerado. As propriedades físicas do SPH

são obtidas através de uma média ponderada, pela função núcleo, das propriedades das partículas vizinhas aquela que deseja calcular.

Devido as características atribuídas ao método, especialmente no que tange a superfícies livres e interface móvel, aplica-se neste trabalho a SPH para discretizar um modelo de quebra de barragem em um leito móvel chamado *Dam Break in Wet Bed*. Para tal simulação é necessário obter a solução aproximada de Equações Diferenciais Parciais que descrevem o movimento de um fluido, determinadas a partir da segunda Lei de Newton, chamadas de equações de Navier-Stokes.

Tal problema consistem em tomar um volume de água inicialmente em estado estacionário, pois este volume esta preso por um portão, conforme o portão é retirado o volume de água é liberado sobre um canal úmido, ou seja, sobre uma fina lâmina de água. Este modelo é aplicado principalmente para validar métodos numéricos aplicados a problemas hidráulicos como, por exemplo, canais de vertedouros em usinas hidrelétricas.

O presente trabalho esta dividido em mais quatro capítulos, sendo eles:

- No capítulo 2 são apresentadas as equações de Navier-Stokes na sua forma Lagrangiana e Euleriana. Também faz-se uma breve comparação entre os métodos com malha e os sem malha (meshfree). São pontuados alguns conceitos de mecânica dos fluidos.
- No capítulo 3 é abordada uma descrição do método Smoothed Particle Hydrodynamics. Para exemplificar, o método SPH é usado para aproximar a derivada primeira e a derivada de uma segunda de uma função. Também são descritas três formas de se atualizar o passo no tempo.
- No capítulo 4 expõe-se o modelo de quebra de barragem sobre um leito úmido baseando-se principalmente no artigo de Crespo, Gomez e Dalrymple (2008). A equação de Navier-Stokes é discretizada na forma Lagrangiana por SPH.
- No capítulo 5 faz-se um breve resumo do presente trabalho e apresenta-se possíveis caminhos para a continuidade do estudo do método SPH.

Existem outros problemas cujas soluções podem se beneficiar do SPH como: modelos de sedimentação (XIONG; DENG; WEI, 2011), de erosão hidráulica (KRISTOF et al., 2009) e carregamento de leito móvel (RAN et al., 2015). Tais modelos tem as características já mencionadas como sendo interessantes de serem tratadas pelo SPH, como a modificação nas condições de contorno com o passar do tempo e interface livre.

Embora o método tenha sido amplamente aplicado a diferentes áreas, ainda há muitas questões que precisam ser mais investigadas, principalmente no que tange a análise numérica do método. Alguns autores tem se dedicado a análise teórica do SPH como Fulk (1996) e Monaghan e Kocharyan (1995), no entanto ainda faltam estudos relacionados as propriedades de estabilidade, precisão e convergência do método. A maioria das análises desses parâmetros se baseia numa distribuição uniforme de partículas, no entanto com a evolução do passo no tempo as partículas tornam-se desordenadas e ainda não esta claro como essa desordem nas partículas afetam a precisão da solução (LIU; LIU, 2003).

Há um grande caminho a ser percorrido para que o SPH torne-se tão robusto quanto os métodos clássicos de aproximação numérica com malhas como diferenças finitas e elementos finitos. Isso não deve ser de forma alguma encarado com desânimo, sendo um método relativamente novo, há uma ampla gama de estudos a serem desenvolvidos e muito a se contribuir para tornar o SPH mais avançado e eficiente.

Abordagem Euleriana e Lagrangiana das Equações de Navier-Stokes

Na Dinâmica dos Fluidos, o movimento e transporte de energia e substância são governados por leis da física, como as leis da conservação de massa, da quantidade de movimento e quantidade de energia. Estes três princípios fundamentais de conservação, juntamente com informações adicionais sobre a especificação da natureza do material, condições na fronteira e condições iniciais, determinam completamente o comportamento do sistema de fluido. Tais leis podem ser descritas matematicamente por equações diferenciais, essas equações são apresentadas na literatura como equações de Navier-Stokes.

As equações de Navier-Stokes, apesar de sua importância na descrição de fenômenos físicos como, por exemplo, chuva, lama, derramamento de água, dispersão de fumaça, vapor, ondas oceânicas, dentre outras, possuem alto grau de dificuldade para serem resolvidas analiticamente, sendo necessário o desenvolvimento de métodos numéricos, os quais auxiliam na resolução de equações complexas. Assim, se desenvolveu Dinâmica de Fluidos Computacionais (DFC), que propõe uma nova forma de analisar o comportamento dos fluidos sob o apoio da soluções numéricas usando computadores ou simulações computacionais.

Para resolver numericamente as equações de Navier-Stokes, a geometria envolvida do domínio do problema precisa ser dividida em componentes discretos. As técnicas de discretização podem ser distintas para diferentes métodos numéricos. A discretização geralmente se refere a representar um problema de domínio contínuo com um número finito de componentes, que formam o quadro computacional para a aproximação numérica (LIU; LIU, 2003). O quadro computacional é tradicionalmente uma malha (ou grade), que consiste em uma rede de pontos (ou nós) que aproximam a geometria do domínio do problema, veja Figura 2.1. Outra categoria de métodos são os métodos sem malha (*meshfree*), tal classe de métodos utiliza um conjunto de partículas para discretizar as equações governantes (TAKATA, 2015).

A simulação numérica traduz aspectos importantes de um problema físico para uma forma discreta de representação matemática, recria e resolve o problema em um computador mediante a criação de um algoritmo. Em vez de adotar a prática teórica tradicional de construir camadas de suposições e aproximações, a abordagem numérica moderna trata os problemas originais em todos os seus detalhes sem fazer demasiadas suposições, tornando os resultados mais fiéis na representação de modelos ou situações reais; tais simulações tornaram-se possíveis graças a desenvolvimento de computadores.

2.1 Equações de Navier-Stokes

As quantidades físicas básicas de um fluido isotérmico e viscoso são a velocidade \mathbf{v} , a densidade de massa ρ e a pressão p . As quantidades são consideradas como campos contínuos no fluido. A formulação clássica do movimento de escoamento incompressível ao longo do tempo t é regida pelas equações de Navier-Stokes

$$\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \right) \mathbf{v} = -\nabla p + \mu \nabla \cdot (\nabla \mathbf{v}) + f^{\text{externa}} \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (2.2)$$

onde μ é a viscosidade do fluido, e f^{externa} é a soma das forças externas que atuam sobre o fluido, por exemplo, a gravidade.

Tal formulação de Navier-Stokes do movimento do fluido é baseada em uma estrutura de malha. Isso significa que as quantidades de campo não dependem apenas do tempo, mas também das posições na malha $\mathbf{x}(t)$, que também dependem do tempo. No espaço tridimensional, o vetor de posição é dado por

$$\mathbf{x}(t) = (x(t), y(t), z(t))^T. \quad (2.3)$$

A equação (2.1) que descreve a conservação do momento, basicamente é a segunda Lei de Newton para um fluido. O lado direito representa a soma das forças de campo e de superfície que atuam sobre o fluido, enquanto o lado esquerdo é o produto da densidade de massa e de aceleração. Para um fluido, a densidade de aceleração é a derivada temporal do campo de velocidades. Usando a regra da cadeia no campo de velocidade, considerando o vetor posição (2.3), tem-se

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathbf{v}(t, r(t)) &= \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial t} \\ &= \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x}, \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial y}, \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial z} \right]^T \cdot \left[\frac{\partial x}{\partial t}, \frac{\partial y}{\partial t}, \frac{\partial z}{\partial t} \right]^T \\ &= \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \left[\mathbf{v} \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)^T \right] \mathbf{v} \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla \right) \mathbf{v}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Numa abordagem euleriana, a derivada material fornece a taxa de variação temporal de uma propriedade do fluido à medida que a partícula de fluido (material) passa pelo volume de controle é definida como

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla \phi, \quad (2.5)$$

onde $\mathbf{v} \nabla \phi$ é o termo advectivo, que mede a variação na propriedade da partícula à medida que ele se move pela entrada e depois pela saída do volume de controle; já o termo $\partial \phi / \partial t$ indica a taxa de variação da propriedade da partícula que ocorre dentro do volume de controle e (2.4) justifica como este termo é inserido matematicamente na equação.

A equação (2.2) descreve a conservação da massa para um fluido incompressível e foi originalmente formulada nas equações de Euler (HIBBELE, 2016). Em geral, a equação de conservação de massa para um fluido compressível também é conhecida como equação de continuidade. É a derivada material do campo de densidade, que produz

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0. \quad (2.6)$$

Quando a densidade de massa é constante em todo o fluido, isso implica que $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$ e $\rho \nabla \cdot \mathbf{v} = \nabla \cdot \mathbf{v}$. O fluido é então chamado de incompressível, e termina-se com o campo de velocidade de divergência livre como em (2.2).

2.1.1 Dinâmica dos Fluidos Eulerianos

As equações de Navier-Stokes (2.1) e (2.2) governam o movimento de um fluido euleriano. No entanto, o fluido está composto de células fluidas, alinhadas em uma malha regular, cada uma das quais contém várias moléculas fluidas ou partículas. A Figura 2.1 representa um *layout* de um fluido baseado em malha bidimensional.

As equações de Navier-Stokes desafiam uma solução analítica completa, mas podem ser resolvidas numericamente usando várias etapas para cada componente das equações. A malha fornece uma solução para estimar derivadas usando, por exemplo, o Método de Diferenças Finitas (MDF), que é uma dos métodos com malha mais utilizados e estudados para obtenção soluções aproximadas de equações diferenciais. Para detalhes teóricos e de implementação do MDF sobre o fluido Euleriano, veja (STAM, 1999).

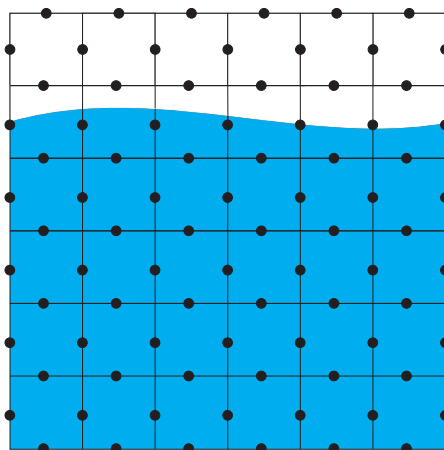


Figura 2.1: Estrutura de fluido baseado em malha em 2D. O campo de velocidade discreta é representada por pontos (KELAGER, 2006).

Embora o método Euleriano forneça uma melhor descrição de algumas das propriedades do fluido, como o campo de densidade de massa e pressão, uma grande desvantagem desse tipo de método é a própria malha. O fluido é forçado a ficar com a malha, simplesmente não pode existir fora do domínio da malha, e assim torna-se um obstáculo deixar o fluido escoar naturalmente e ser fiel a um problema real; por exemplo, quando um recipiente preenchido de fluido se quebra ou o fluido escoar em geometrias complexas e distorcidas. As estruturas de malha adaptativas foram usadas para superar a malha fixa para diferentes fins, um exemplo de tais métodos pode ser visto em (LOSASSO; GIBOU; FEDKIN, 2004), onde um modelo de malha adaptável é introduzido para simular água e fumaça de cigarros. Outra questão levantada em relação a utilização de malhas é sobre seu tamanho, pois dependendo do tipo de problema estudado ela precisará ser refinada, ou seja, envolve uma quantidade de pontos discretos cada vez maior, isso torna o esforço computacional um incômodo considerável.

2.1.2 Dinâmica de Fluidos Lagrangianos

Na seção anterior relatou-se resumidamente uma descrição espacial das equações governantes, denominada descrição Euleriana, tipicamente representada pelo MDF. A descrição Lagrangiana é uma descrição material, por meio dela pode-se resolver as equações governantes empregando métodos com malha e métodos sem malha (*meshfree*).

2.1.2.1 Método Lagrangiano com Malha

Nos métodos lagrangianos, ao contrário dos métodos eulerianos, um sistema de coordenadas móveis é utilizado, assim os elementos de fluido podem mover-se ou deformar-se. Pode-se destacar nos métodos Lagrangianos com malha os seguintes benefícios:

- melhor rastreamento e delineamento em interfaces;
- maior facilidade na aplicação em condições de fronteiras deformáveis;
- as geometrias irregulares ou complicadas podem ser convenientemente tratadas usando uma malha irregular, veja Figura 2.2.

Apesar dessas das vantagens, malhas amplamente distorcidas ou com formatos muito irregulares podem levar a imprecisões numéricas. Um dos métodos mais conhecidos da aplicação de malha lagrangiana é o Método dos Elementos Finitos (MEF), que pode ser consultado em (ZIENKIEWICZ; TAYLOR, 2000).



Figura 2.2: Malha/células Lagrangiana. As células triangulares da malha se movem com o material (LIU; LIU, 2003).

2.1.2.2 Método Lagrangiano Sem Malha

O uso de partículas em vez de uma malha simplifica as equações significativamente. Assumimos que a quantidade de partículas é constante durante a simulação e, mantendo a massa fixa para cada partícula, implica que a conservação de massa é garantida e que (2.2) pode ser omitida. A Figura 2.3 ilustra um *layout* básico de um fluido representado por partículas, aqui mostrado em duas dimensões pela facilidade de visualização.

Na formulação de fluidos lagrangianos, as partículas definem completamente o fluido, o que implica que as partículas se movem com o fluido. Em comparação com a visão euleriana, isso significa que qualquer quantidade de campo agora depende apenas do tempo t . As partículas carregam massa, posição e velocidade. A aceleração para uma partícula de fluido lagrangiano torna-se a derivada do tempo d/dt normal da sua velocidade $\mathbf{v}(t)$. Isso explica por que o termo de advecção de (2.1) não está presente na visão Lagrangiana. Substituindo (2.4) em (2.1) a formulação de Lagrange das equações de Navier-Stokes é dada por

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v} + f^{\text{externa}}, \quad (2.7)$$

que descreve a evolução do fluido ao longo do tempo como a função das forças externas, f^{externa} .

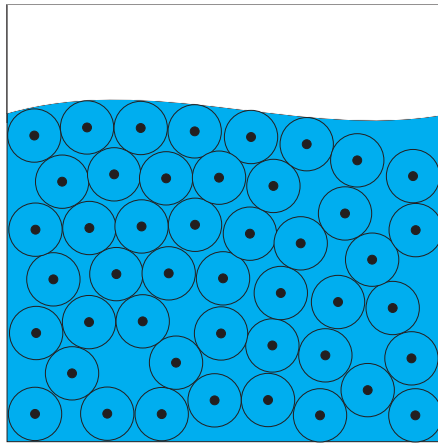


Figura 2.3: Estrutura de fluido à base de partículas de Lagrange em 2D. As partículas são representadas por pontos. Os círculos representam o volume de cada partícula (KELAGER, 2006).

Com a intenção de obter soluções numéricas para a formulação lagrangiana das equações de Navier-Stokes, apresenta-se no próximo capítulo um estudo teórico do método *Smoothed Particle Hydrodynamics*.

2.2 Alguns Conceitos de Mecânica dos Fluidos

Define-se alguns conceitos, que acredita-se que possam auxiliar na leitura e compreensão de termos comumente utilizados na mecânica dos fluidos.

Líquido: é um composto de moléculas que estão mais espalhadas do que aquelas em um sólido. Suas forças intermoleculares são mais fracas, de modo que os líquidos não mantêm sua forma. Em vez disso, eles escoam e tomam a forma de seu recipiente. Por meio de experiências, descobriu-se que um líquido é praticamente incompressível (quase-compressível), ou seja, a densidade de um líquido varia pouco com a pressão. Contudo, ele tem uma ligeira variação, porém, maior com a temperatura. Por exemplo, a água a 4° tem uma densidade $\rho_{\text{água}} = 1000 \text{ kg/m}^3$, enquanto a 100° , $\rho_{\text{água}} = 958,1 \text{ kg/m}^3$ (HIBBELE, 2016).

Fluido: são substâncias que se deformam ou fluem (escoam) continuamente quando sujeitas a uma força de cisalhamento ou tangencial. A deformação do fluido continuará enquanto a força de cisalhamento for aplicada, e quando removida, o fluido manterá sua nova forma, em vez de retornar à sua forma original.

Densidade: a densidade ρ refere-se à massa do fluido que está contida em uma unidade de volume, é dada pela equação

$$\rho = \frac{m}{V},$$

onde m é a massa do fluido e V o volume.

Viscosidade: definida como a resistência ao deslizamento das moléculas do fluido devido à fricção interna, foi introduzida por Isaac Newton, em 1687, através do escoamento de fluidos colocados entre duas placas paralelas de área A , separadas por uma distância h , movimentadas por uma força F , conforme ilustra a Figura 2.4.

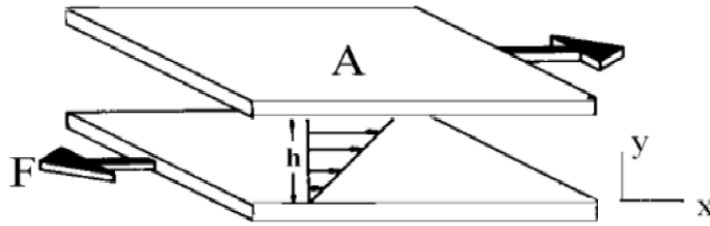


Figura 2.4: Modelo de placas paralelas proposto por Newton para explicar o conceito de viscosidade.

De acordo com o modelo proposto por Newton, a força (F) requerida por unidade de área (A) para manter uma diferença de velocidade entre as placas é

$$\tau = \frac{F}{A}.$$

A taxa de cisalhamento λ , por sua vez, é determinada através de uma expressão matemática, a equação (2.8), que relaciona a diferença das velocidades entre duas partículas vizinhas ou planos vizinhos com a distância entre eles

$$\lambda = \frac{dv}{dy}. \quad (2.8)$$

Para fluidos viscosos ideais, a tensão de cisalhamento é diretamente proporcional à taxa de cisalhamento, onde a constante de proporcionalidade é, por definição, a viscosidade do fluido (μ), conforme explicita a Equação (2.9), também conhecida como Lei de Newton para viscosidade

$$\tau = \mu \frac{dv}{dy} = \mu \lambda. \quad (2.9)$$

Pressão: é definida como a força ΔF que atua na direção normal a uma área ΔA . Se considerarmos o fluido como um meio contínuo, então a área pode se aproximar de zero e, portanto, a pressão torna-se

$$p = \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\Delta F}{\Delta A} = \frac{dF}{dA}.$$

Fluidos newtonianos: são aqueles cuja viscosidade, denominada viscosidade absoluta, é afetada apenas pela temperatura e pressão, não apresentando variações com aumento da taxa ou tensão cisalhamento, ou seja, são fluidos que obedecem a Lei de Newton (2.9) (HIBBELE, 2016). Em um fluido não-newtoniano, quanto maior a viscosidade, maior a resistência do fluido ao escoamento.

Fluidos não-newtonianos: a Lei de Newton para viscosidade, expressa pela (2.9), se restringe para um determinado número de fluidos, pois existem materiais que, sob escoamento dirigido por cisalhamento, apresentam comportamento distinto do previsto por Newton. Segundo Vliet e Lyklema (2007), um fluido é dito não-newtoniano quando a relação entre a tensão e a taxa de cisalhamento não é linear.

Estes fluidos, em geral, encontram-se divididos em três grupos, classificados de acordo com o seu comportamento:

- fluidos independentes do tempo - são aqueles cuja viscosidade depende somente da taxa de cisalhamento;
- fluidos dependentes do tempo - a viscosidade depende não só da taxa, mas também do tempo de cisalhamento;
- fluidos viscoelásticos - apresentam características tanto de sólidos (elasticidade) quanto de líquidos (viscosidade) e exibem uma recuperação elástica parcial após a deformação.

Formulação do método *Smoothed Particle Hydrodynamics*

Neste capítulo, apresenta-se detalhes do método *Smoothed Particle Hydrodynamics* (SPH) como uma forma de se obter a solução aproximada das equações de Navier-Stokes apresentadas no Capítulo 2.

3.1 Ideias Básicas do SPH

Para obter a solução numérica de uma Equação Diferencial Parcial (EDP) é necessário primeiramente discretizar o domínio do problema onde as EDPs são definidas. O próximo passo é aplicar um método que forneça uma aproximação para os valores das funções de campo e suas derivadas em qualquer ponto. A aproximação de função é então aplicada as EDPs para produzir um conjunto de Equações Diferenciais Ordinárias (EDO), em uma forma discretizada, com respeito apenas ao tempo. Este conjunto de EDOs discretizado pode então ser resolvido usando uma das rotinas de integração do método convencional de diferenças finitas.

No método SPH, as seguintes ideias básicas são empregadas (LIU; LIU, 2003):

1. Malha livre (*meshfree*): o domínio do problema é representado por um conjunto de partículas distribuídas arbitrariamente. Não é necessária uma conectividade entre essas partículas.
2. Representação da função integral: o método de representação integral é usado para representar uma aproximação de uma função contínua.
3. Suporte compacto: a aproximação de núcleo é então aproximada usando partículas. Isso é denominado em SPH como aproximação de partículas. Faz-se a substituição da integração na representação da função de campo e suas derivadas com somas sobre todos os correspondentes valores nas partículas vizinhas num domínio local denominado domínio de suporte.
4. Adaptatividade: a aproximação de partículas é realizada a cada passo de tempo e, portanto, o uso das partículas depende da distribuição local atual da partícula.
5. Modelo Lagrangiano: as aproximações de partículas são realizadas para todos os termos relacionados as funções de campo nas EDPs para produzir um conjunto de EDOs em forma discretizada com relação ao tempo.

6. Dinâmico: as EDOs são resolvidas usando um algoritmo de integração explícito.

3.1.1 Representação integral de uma função

A formulação em SPH é dividida em duas etapas principais. A primeira etapa é a representação integral também chamada de aproximação de núcleo (*kernel*) das funções de campo. A segunda é a aproximação de partículas.

Na primeira, integra-se a multiplicação de uma função arbitrária por uma função núcleo de suavização resultando na aproximação do núcleo na forma de representação integral da função (LIU; LIU, 2003). A representação integral da função é então aproximada somando-se os valores das partículas vizinhas mais próximas, o que resulta na aproximação por partículas da função em um ponto discreto.

O conceito de representação integral de uma função $f(\mathbf{x})$ usada no método SPH começa a partir da seguinte identidade

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

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

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

Na equação (3.1), Ω é o volume da integral que contém \mathbf{x} . A equação (3.1) implica que uma função pode ser representada de forma integral. Como a função delta de Dirac é usada, a representação integral na equação (3.1) é exata ou rígida, desde que $f(\mathbf{x})$ seja definida e contínua em Ω .

Se o núcleo da função delta $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ é substituído por uma função de suavização $W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)$, a representação integral de $f(\mathbf{x})$ é dada por

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

onde W é a função de suavização do núcleo ou núcleo de suavização. Na função suavizadora, h é o comprimento de suavização que define a área de influência da função W . Observe que enquanto W não é a função de Dirac, a representação na equação (3.3) só pode ser uma aproximação. Esta é a origem do termo aproximação de núcleo (CORDARO; KAWANO, 2002).

Na convenção SPH, o operador de aproximação de núcleo é marcado pela notação $\langle \rangle$, e, portanto, a equação (3.3) é reescrita como

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

Observe que o sinal de igual é usado na equação (3.4) que é a expressão padrão da aproximação de núcleo de uma função.

A função de suavização W é geralmente escolhida para ser uma função par (LIU; LIU, 2003) e deve satisfazer uma série de condições. A primeira é a condição de normalização que diz que

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

Esta condição também é denominada como condição de unidade, uma vez que a integração da função de suavização produz a unidade.

A segunda condição é a propriedade da função Delta que é observada quando o comprimento de suavização se aproxima de zero

$$\lim_{h \rightarrow 0} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (3.6)$$

A terceira condição é a condição compacta, ou seja,

$$W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) = 0 \quad \text{onde} \quad |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| > kh, \quad (3.7)$$

onde k é uma constante relacionada à função de suavização do ponto em \mathbf{x} , e define a área efetiva (não zero) da função de suavização. Essa área efetiva é chamada de domínio de suporte para a função de suavização do ponto \mathbf{x} (ou o domínio de suporte) desse ponto. Usando essa condição de compactidade, a integração em todo o domínio do problema é localizada como integração sobre o domínio de suporte da função de suavização. Portanto, o domínio de integração Ω pode ser, e usualmente é o mesmo que o domínio de suporte.

Note da equação (3.7) que o domínio de suporte da função de suavização é $|\mathbf{x}' - \mathbf{x}| \leq kh$, os erros na representação integral do SPH podem ser estimados usando a expansão da série de Taylor de $f(\mathbf{x}')$ em torno de \mathbf{x} , onde $f(\mathbf{x})$ é diferenciável. A utilização da equação (3.4) leva à

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

de (3.5), obtém-se

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = f(\mathbf{x}) + f'(\mathbf{x}) \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' + r(h^2), \quad (3.8)$$

onde r representa o erro (ou resíduo). Observe que W é uma função par em relação a \mathbf{x} , portanto $(\mathbf{x}' - \mathbf{x})W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)$ deve ser uma função ímpar (ver apêndice A Teorema 1), portanto, obtém-se

$$\int_{\Omega} (\mathbf{x}' - \mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0. \quad (3.9)$$

Usando as equações (3.5) e (3.9), a equação (3.8) torna-se

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = f(\mathbf{x}) + r(h^2). \quad (3.10)$$

A partir da equação acima, pode-se ver que, no método SPH, a representação integral ou a aproximação do núcleo de uma função é de precisão de ordem dois. No entanto, essa aproximação do núcleo não é necessariamente de precisão de segunda ordem se a função de suavização não for uma função par, ou se a condição de normalização não for satisfeita (FULK, 1996).

3.1.2 Representação integral da derivada de uma função

A representação da derivada espacial $\nabla \cdot f(\mathbf{x})$ é obtida substituindo $f(\mathbf{x})$ por $\nabla \cdot f(\mathbf{x})$ na equação (3.4) tem-se

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} [\nabla \cdot f(\mathbf{x}')] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}', \quad (3.11)$$

onde o divergente na integral é operado em relação a coordenada inicial. Aplicando a propriedade de operadores divergentes

$$(\nabla \cdot f)W = \nabla \cdot (Wf) - (\nabla W) \cdot f,$$

em (3.11), tem-se

$$(\nabla \cdot f(\mathbf{x}))W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) = \nabla \cdot (f(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)) - f(\mathbf{x}') \cdot \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h). \quad (3.12)$$

Da equação (3.11) a seguinte equação é obtida,

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle = \underbrace{\int_{\Omega} \nabla \cdot (f(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)) d\mathbf{x}'}_{*} - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \cdot \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}'. \quad (3.13)$$

A integral (*) no lado direito da equação (3.13) pode ser modificada usando o Teorema da Divergência de Gauss (veja apêndice A Teorema 3) para uma integral sobre a superfície S do domínio de integração, Ω

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle = \underbrace{\int_S f(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) \cdot \mathbf{n} dS}_{**} - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \cdot \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}', \quad (3.14)$$

onde \mathbf{n} é o vetor unitário normal para a superfície S.

Uma vez que a função de suavização W está definida para ter suporte compacto, quando o domínio do suporte está localizado dentro do domínio do problema (Figura 3.1), a integral de superfície (**) no lado direito da equação (3.14) é zero, esta afirmação é justificada por (3.7).

Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas

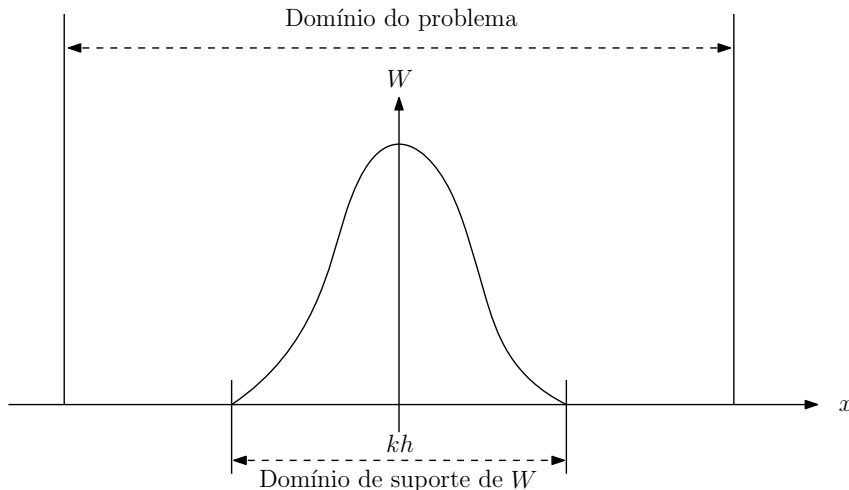


Figura 3.1: O domínio de suporte da função de suavização W e domínio do problema. O domínio do suporte está localizado dentro do domínio do problema (LIU; LIU, 2003).

Se o domínio do suporte se sobrepõe ao domínio do problema (Figura 3.2), a função de suavização W é truncada pelo limite e a integral de superfície não é mais zero. Sob tais circunstâncias, modificações devem ser feitas para remediar os efeitos de fronteira se a integração de superfície for tratada como zero na equação (3.4).

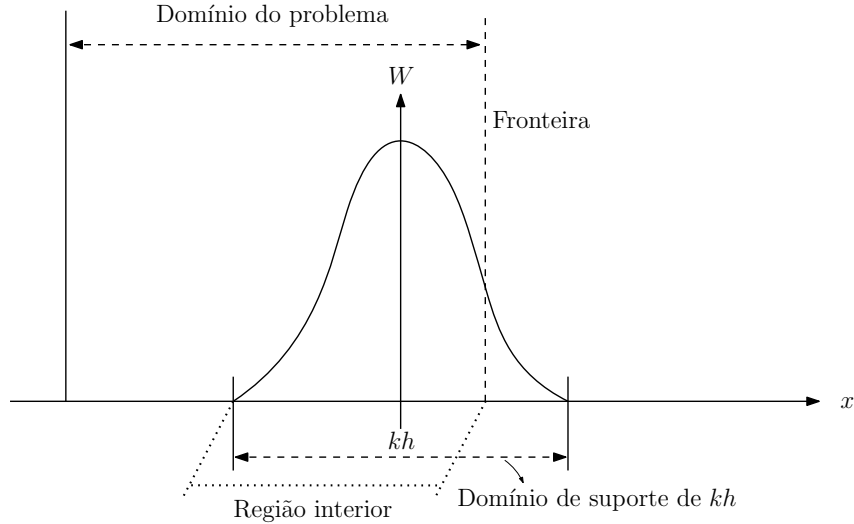


Figura 3.2: O domínio de suporte da função suavizadora W e o domínio do problema. O domínio de suporte se intercepta com o domínio do problema (LIU; LIU, 2003).

Portanto, para aqueles pontos cujo domínio de suporte está dentro do domínio do problema, (3.4) é simplificado da seguinte forma

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle = - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \cdot \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' . \quad (3.15)$$

A representação integral em SPH (3.15) da derivada de uma função de campo permite que o gradiente espacial seja determinado a partir dos valores da função e das derivadas da função de suavização W , em vez das derivadas da própria função (LIU; LIU, 2003).

3.1.3 Aproximação por partículas

No método SPH, todo o sistema é representado por um número finito de partículas que carregam massa individual e ocupam espaço individual. Isto é obtido pela chamada aproximação de partículas, que é a operação que define o método SPH. As representações integrais contínuas relativas à aproximação do núcleo SPH (expressa nas equações (3.4) e (3.15)) podem ser convertidas em formas discretizadas de somatória sobre todas as partículas no domínio de suporte mostrado na Figura 3.3.

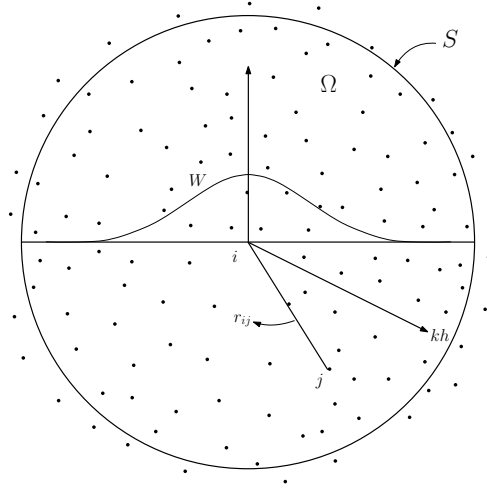


Figura 3.3: Aproximação de partícula usando partículas dentro do domínio de suporte da função de suavização W para a partícula i . O domínio de suporte é circular com um raio de kh (LIU; LIU, 2003).

Se o volume infinitesimal $d\mathbf{x}'$ nas integrações (2.4) e (3.15) no local da partícula j , for substituído pelo volume finito da partícula ΔV_j que está relacionado à massa das partículas m_j por

$$m_j = \Delta V_j \rho_j, \quad (3.16)$$

onde ρ_j é a densidade da partícula $j = (1, 2, \dots, N)$ em que N é o número de partículas dentro do domínio de suporte de partículas j .

A representação integral de SPH integral para $f(\mathbf{x})$ pode ser escrita na seguinte forma discreta de aproximação de partículas

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &= \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \\ &\approx \sum_{j=1}^N f(\mathbf{x}_j) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) \Delta V_j \\ &= \sum_{j=1}^N f(\mathbf{x}_j) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) \frac{1}{\rho_j} (\rho_j \Delta V_j). \end{aligned} \quad (3.17)$$

Substituindo a equação (3.16) em (3.17), tem-se

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

ou ainda,

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h). \quad (3.18)$$

Note que a aproximação de partículas é realizada no segundo passo de (3.17).

Assim, aproximação por partículas para uma função na partícula i pode ser escrita como

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) W_{ij}, \quad (3.19)$$

onde

$$W_{ij} = W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h). \quad (3.20)$$

A equação (3.20) afirma que o valor de uma função na partícula i é aproximado usando a média desses valores da função em todas as partículas no domínio de suporte da partícula i , medido pela função de suavização.

Seguindo o mesmo argumento, a aproximação de partículas para a derivada espacial da função é

$$\begin{aligned} \langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle &= - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \cdot \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \\ \Rightarrow \langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle &\approx - \sum_{j=1}^N f(\mathbf{x}_j) \cdot \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) \Delta V_j \\ \Rightarrow \langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle &= - \sum_{j=1}^N f(\mathbf{x}_j) \frac{1}{\rho_j} \cdot \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) \rho_j \Delta V_j \\ \Rightarrow \langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle &= - \sum_{j=1}^N f(\mathbf{x}_j) \frac{1}{\rho_j} \cdot \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) m_j \\ \Rightarrow \langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle &= - \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) \cdot \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h), \end{aligned} \quad (3.21)$$

onde o gradiente ∇W na equação acima é tomado em relação a partícula j . A aproximação de partículas para uma função na partícula i pode ser escrita como:

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}_i) \rangle = - \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) \cdot \nabla_i W_{ij}, \quad (3.22)$$

onde

$$\nabla_i W_{ij} = \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} = \frac{\mathbf{x}_{ij}}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}}, \quad (3.23)$$

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

A equação (3.22) indica que o valor do gradiente de uma função na partícula i é aproximado usando a média desses valores da função em todas as partículas no domínio de suporte da partícula i medida pelo gradiente da função suavizadora.

Pode-se ver que a aproximação de partículas nas equações (3.19) e (3.22) converte realmente as representações contínuas de uma função e suas derivadas para uma somatória discretizada com base em um conjunto arbitrário de partículas.

Uma característica importante do método SPH é que a aproximação de partículas introduz a massa e a densidade da partícula nas equações. Isso pode ser convenientemente aplicado a problemas hidrodinâmicos em que a densidade é variável. Este fato torna o SPH atrativo para problemas de escoamento na dinâmica dos fluidos (LIU; LIU, 2003).

Em resumo, para uma dada partícula i , o valor de uma função e sua derivada para a partícula i são aproximadas como

$$\langle f(\mathbf{x}_i) \rangle = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) W_{ij}, \quad (3.24)$$

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}_i) \rangle = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) \cdot \nabla_i W_{ij}, \quad (3.25)$$

$$W_{ij} = W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h) = W(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|, h), \quad (3.26)$$

$$\nabla_i W_{ij} = \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} = \frac{\mathbf{x}_{ij}}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}}, \quad (3.27)$$

onde r_{ij} é a distância entre a partícula i e j . Deve-se notar que $\nabla_i W_{ij}$ é tomado em relação a partícula i , então a equação de sinal negativo (3.21) é removida na equação (3.25).

Observação 1 Em relação a (3.26) observe que pela propriedade de simetria $W(x) = W(|\mathbf{x}|)$, tem-se

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

Da equação (3.27) para calcular $\nabla_i W_{ij}$ precisamos usar o conceito de derivada direcional, ver apêndice (A). Primeiro é necessário calcular o vetor unitário U

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{ij} &= \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j \\ \Rightarrow |\mathbf{x}_{ij}| &= r_{ij} \\ \Rightarrow U &= \frac{\mathbf{x}_{ij}}{r_{ij}}, \end{aligned}$$

assim

$$\begin{aligned} \nabla_i W_{ij} &= \nabla W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h) = \nabla(r_{ij}, h) \\ \Rightarrow \nabla_i W_{ij} &= \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j}{r_{ij}} \cdot \nabla W(r_{ij}, h) \\ \Rightarrow \nabla_i W_{ij} &= \frac{\mathbf{x}_{ij}}{r_{ij}} \cdot \frac{\partial W}{\partial r_{ij}}. \end{aligned}$$

Nota-se que, substituindo a função $f(\mathbf{x})$ pela função densidade ρ na equação (3.24)

$$\rho(\mathbf{x}_i) = \sum_{j=1}^N \frac{m(\mathbf{x}_j)}{\rho(\mathbf{x}_j)} \rho(\mathbf{x}_j) W_{ij},$$

ou ainda, fazendo $\rho(\mathbf{x}_j) = \rho_j$, $\rho(\mathbf{x}_i) = \rho_i$ e $m(\mathbf{x}_j) = m_j$, tem-se

$$\rho_i = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} \rho_j W_{ij}.$$

Portanto, a aproximação SPH para a densidade é obtida como

$$\rho_i = \sum_{j=1}^N m_j W_{ij}. \quad (3.28)$$

A equação (3.28) é uma das formas de obtenção de densidade em SPH e é geralmente referida como somatória de aproximação da densidade (KELAGER, 2006).

3.1.4 Técnica para formulação de derivadas em SPH

Ao usar o procedimento descrito nas seções (3.1.2) e (3.1.3) para a aproximação do núcleo e aproximação de partículas, as formulações de SPH para equações diferenciais parciais (EDPs) podem ser sempre derivadas. Usa-se aqui a abordagem de Monaghan (1992) aplicadas as equações (3.24) e (3.25). Para tal aplica-se duas identidades para colocar a densidade dentro do operador de gradiente,

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\rho f) &= \rho \nabla \cdot f + f \cdot \nabla \rho \\ \Rightarrow -\rho \nabla \cdot f &= -\nabla \cdot (\rho f) + f \cdot \nabla \rho \\ \Rightarrow \rho \nabla \cdot f &= \nabla \cdot (\rho f) - f \cdot \nabla \rho, \end{aligned}$$

assim

$$\nabla \cdot f = \frac{1}{\rho} [\nabla \cdot (\rho f) - f \cdot \nabla \rho]. \quad (3.29)$$

Também

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\rho f) &= \rho \nabla \cdot f + f \cdot \nabla \rho \\ \Rightarrow \nabla \cdot \left(\rho \frac{f}{\rho} \right) &= \rho \nabla \cdot \left(\frac{f}{\rho} \right) + \frac{f}{\rho} \cdot \nabla \rho \\ \Rightarrow -\rho \nabla \cdot \left(\frac{f}{\rho} \right) &= -\nabla \cdot \left(\rho \frac{f}{\rho} \right) + \frac{f}{\rho} \cdot \nabla \rho \\ \Rightarrow \rho \nabla \cdot \left(\frac{f}{\rho} \right) &= \nabla \cdot f - \frac{f}{\rho} \cdot \nabla \rho \\ \Rightarrow \rho^2 \nabla \cdot \left(\frac{f}{\rho} \right) &= \rho \nabla \cdot f - f \cdot \nabla \rho \\ \Rightarrow -\rho \nabla \cdot f &= -\rho^2 \nabla \cdot \left(\frac{f}{\rho} \right) - f \cdot \nabla \rho \\ \Rightarrow \rho \nabla \cdot f &= \rho^2 \nabla \cdot \left(\frac{f}{\rho} \right) + f \cdot \nabla \rho \\ \Rightarrow \nabla \cdot f &= \rho \nabla \cdot \left(\frac{f}{\rho} \right) + \frac{f}{\rho} \cdot \nabla \rho, \end{aligned}$$

logo

$$\nabla \cdot f = \rho \left[\nabla \cdot \left(\frac{f}{\rho} \right) + \frac{f}{\rho^2} \cdot \nabla \rho \right]. \quad (3.30)$$

As duas identidades acima podem ser substituídas na integral da equação (3.11). O mesmo procedimento da aproximação de partículas para obter a equação (3.25) é aplicado a cada termo do gradiente no lado direito das equações (3.29) e (3.30). Observe que cada expressão de cada termo gradiente é avaliado na própria partícula, os resultados das equações (3.29) e (3.30) para a divergência de $f(x)$ na partícula i podem ser obtidos. Assim

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

aplicando (3.21), tem-se que

$$\begin{aligned} \nabla \cdot f(\mathbf{x}) &= \frac{1}{\rho} \left[- \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} \rho_j f(\mathbf{x}_j) \cdot \nabla_j W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) - f(\mathbf{x}) \cdot \nabla \rho \right] \\ &= \frac{1}{\rho} \left[- \sum_{j=1}^N m_j f(\mathbf{x}_j) \cdot \nabla_j W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) - f(\mathbf{x}) \cdot \nabla \rho \right]. \end{aligned}$$

Observando a propriedade (2) do apêndice, pode-se escrever

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot f(\mathbf{x}_i) &= \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j=1}^N m_j f(\mathbf{x}_j) \cdot \nabla_i W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h) - f(\mathbf{x}_i) \cdot \nabla \rho_i \right] \\
&= \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j=1}^N m_j f(\mathbf{x}_j) \cdot \nabla_i W_{ij} - f(\mathbf{x}_i) \cdot \nabla \rho_i \right] \\
&= \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j=1}^N m_j f(\mathbf{x}_j) \cdot \nabla_i W_{ij} - f(\mathbf{x}_i) \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} \rho_j \nabla_i W_{ij} \right] \\
&= \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j=1}^N m_j f(\mathbf{x}_j) \cdot \nabla_i W_{ij} - \sum_{j=1}^N m_j f(\mathbf{x}_i) \cdot \nabla_i W_{ij} \right],
\end{aligned}$$

logo

$$\nabla \cdot f(\mathbf{x}_i) = \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j=1}^N m_j (f(\mathbf{x}_j) - f(\mathbf{x}_i)) \cdot \nabla_i W_{ij} \right]. \quad (3.31)$$

De (3.30), é possível notar que

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot f(\mathbf{x}) &= \rho \left[\nabla \cdot \left(\frac{f(\mathbf{x})}{\rho} \right) + \frac{f(\mathbf{x})}{\rho^2} \cdot \nabla \rho \right] \\
&= \rho \left[- \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} \frac{f(\mathbf{x}_j)}{\rho_j} \cdot \nabla_j W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) + \frac{f(\mathbf{x}_j)}{\rho^2} \cdot \nabla \rho \right].
\end{aligned}$$

Aplicando na partícula i , obtêm-se

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot f(\mathbf{x}_i) &= \rho_i \left[\sum_{j=1}^N \frac{m_j}{p_j^2} f(\mathbf{x}_j) \cdot \nabla_i W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h) + \frac{f(\mathbf{x}_i)}{\rho_i^2} \cdot \nabla_i \rho_i \right] \\
&= \rho_i \left[\sum_{j=1}^N \frac{m_j}{p_j^2} f(\mathbf{x}_j) \cdot \nabla_i W_{ij} + \frac{f(\mathbf{x}_i)}{\rho_i^2} \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} \rho_j \nabla_i W_{ij} \right] \\
&= \rho_i \left[\sum_{j=1}^N \frac{m_j}{p_j^2} f(\mathbf{x}_j) \cdot \nabla_i W_{ij} + \frac{f(\mathbf{x}_i)}{\rho_i^2} \sum_{j=1}^N m_j \nabla_i W_{ij} \right],
\end{aligned}$$

conclui-se que

$$\nabla \cdot f(\mathbf{x}_i) = \rho_i \left[\sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{f(\mathbf{x}_j)}{\rho_j^2} + \frac{f(\mathbf{x}_i)}{\rho_i^2} \right) \cdot \nabla_i W_{ij} \right]. \quad (3.32)$$

Uma das boas características para as duas equações acima é que a função de campo $f(\mathbf{x})$ aparece na forma de partículas simétricas.

Além das duas identidades mencionadas acima, algumas outras regras de operação podem ser úteis para derivar as formulações SPH para equações de sistema complexos. Para duas funções arbitrárias das variáveis de campo f_1 e f_2 existem as seguintes regras

$$\langle f_1 + f_2 \rangle = \langle f_1 \rangle + \langle f_2 \rangle \quad (3.33)$$

$$\langle f_1 \cdot f_2 \rangle = \langle f_1 \rangle \cdot \langle f_2 \rangle . \quad (3.34)$$

Portanto, uma aproximação SPH da soma das funções é igual à soma das aproximações SPH da função individual, e uma aproximação SPH de um produto de funções é igual ao produto das aproximações SPH da função individual.

Se f_1 for uma constante indicada por c , devemos ter

$$\langle cf_2 \rangle = c \langle f_2 \rangle . \quad (3.35)$$

As equações (3.33) e (3.35) indicam que o operador de aproximação SPH é um operador linear (CORDARO; KAWANO, 2002). Também nota-se que o operador de aproximação SPH é comutativo, ou seja,

$$\langle f_1 + f_2 \rangle = \langle f_2 + f_1 \rangle , \quad (3.36)$$

e

$$\langle f_1 \cdot f_2 \rangle = \langle f_2 \cdot f_1 \rangle . \quad (3.37)$$

3.2 Construção das Funções de Suavização

É possível notar, pelas demonstrações apresentadas até aqui, que a função de suavização desempenha um papel muito importante nas aproximações SPH, pois determina a precisão da representação da função. Nesta seção, apresenta-se uma abordagem generalizada para construir as funções de suavização para o método SPH. A abordagem usa a forma integral de representação de função com a ajuda da expansão da série Taylor.

Apresenta-se um conjunto de condições para construção de funções de suavização W . Tais condições, além de garantirem a consistência nas aproximações SPH, também descrevem os requisitos de suporte compacto para a função de suavização (FULK, 1996). *A priori*, respeitadas essas condições, pode-se construir funções W que melhorem as aproximações existentes na literatura.

3.2.1 Condições a serem satisfeitas

Um dos problemas centrais para os métodos sem malha é como realizar a aproximação da função com base em um conjunto de nós espalhados de forma arbitrária sem usar uma malha predefinida que forneça a conectividade entre os nós.

Existem outros métodos para aproximação de funções como: representação integral, representação em série e representação diferencial (LIU; LIU, 2003). O método SPH emprega a representação integral usando uma função de suavização que está sendo denotada nesse texto como W . A função W determina o padrão para a aproximação da função, a dimensão do domínio de suporte de partículas e a consistência e, conseqüentemente, a precisão das aproximações de partículas e do núcleo (FULK, 1996).

1. A função de suavização deve ser normalizada (unitária) em relação ao domínio de suporte, ou seja,

$$\int_{\Omega} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) dx' = 1. \quad (3.38)$$

2. A função de suavização deve ser compacta (suporte compacto), isto é,

$$W(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = 0 \quad \text{para} \quad |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| > kh. \quad (3.39)$$

A dimensão do suporte compacto é definida pelo comprimento de suavização h e um fator de escala k , onde h é o comprimento de suavização e k determina a largura da função de suavização especificada. $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \leq kh$ define o domínio de suporte da partícula no ponto \mathbf{x} .

3. $W(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \geq 0$ para qualquer ponto \mathbf{x}' dentro do domínio de suporte da partícula no ponto \mathbf{x} (Positividade).
4. O valor da função de suavização para uma partícula deve diminuir monotonicamente com o aumento da distância da partícula (Decaimento).
5. A função de suavização deve satisfazer a condição da função delta de Dirac à medida que o comprimento de suavização se aproxima de zero (CORDARO; KAWANO, 2002)

$$\lim_{h \rightarrow 0} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') . \quad (3.40)$$

6. A função de suavização deve ser uma função par (Propriedade de simetria).
7. A função de suavização deve ser suficientemente suave.

A primeira propriedade de normalização garante que a integral da função de suavização sobre o domínio de suporte seja unitária.

A segunda propriedade transforma uma aproximação SPH da operação global para uma operação local. Isso levará a um conjunto de matrizes discretas e, portanto, é importante no quesito esforço computacional.

A terceira propriedade afirma que a função de suavização não deve ser negativa no domínio de suporte. Não é matematicamente necessário como um requisito de convergência, mas é importante para assegurar uma representação fisicamente significativa (ou estável) de alguns fenômenos físicos. Algumas funções de suavização usadas na prática são negativas em partes do domínio de suporte. No entanto, em simulações hidrodinâmicas, o valor negativo para a função de suavização pode ter consequências que resultam em alguns parâmetros não físicos, como densidade e energia negativa.

A quarta propriedade é baseada na consideração física que a partícula mais próxima deve ter uma maior influência sobre a partícula em questão. Em outras palavras, com o aumento da distância entre duas partículas interagindo, a força de interação diminui.

A quinta propriedade garante que, à medida que o comprimento de suavização tender a zero, o valor da aproximação aproxima-se do valor da função, isto é, $\langle f(\mathbf{x}) \rangle = f(\mathbf{x})$.

A sexta propriedade significa que partículas com mesma distância, mas diferentes posições devem ter efeito igual em uma dada partícula.

A sétima propriedade visa obter uma melhor aproximação. Para as aproximações de uma função e suas derivadas, a função de suavização precisa ser suficientemente contínua para obter bons resultados (MONAGHAN, 1992).

3.2.2 Alguns exemplos de funções de suavização

Qualquer função que tenha as propriedades (1-7) apresentadas na seção 3.2.1 pode ser empregada como função de suavização em SPH. Para exemplificá-las considera-se r como a distância relativa entre dois pontos \mathbf{x} e \mathbf{x}' , assim $r = \frac{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}{h}$.

- No artigo original de SPH, Lucy (1977) usou a seguinte função como função de suavização

$$W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) = W(r, h) = \alpha_d \begin{cases} (1 + 3r)(1 - r)^3 & r \leq 1 \\ 0 & r > 1, \end{cases} \quad (3.41)$$

onde α_d é $\frac{5}{4h}$, $\frac{5}{\pi h^2}$ e $\frac{105}{16\pi h^3}$ em uma, duas e três dimensões, respectivamente, para que a condição de unidade possa ser satisfeita para todas as três dimensões. Na equação (3.41), r é distância relativa entre dois pontos \mathbf{x} e \mathbf{x}' (partículas).

- Gingold e Monaghan (1997) usaram o seguinte núcleo Gaussiano para simular as estrelas não esféricas

$$W(r, h) = \alpha_d e^{-r^2}, \quad (3.42)$$

onde α_d é $\frac{1}{\pi^{\frac{1}{2}}h}$, $\frac{1}{\pi h^2}$ e $\frac{1}{\pi^{\frac{3}{2}}h^3}$ em um espaço de uma, duas, e três dimensões, respectivamente.

O núcleo Gaussiano é suficientemente suave mesmo para maiores ordens de derivadas, pois é muito estável e precisa, especialmente para partículas desordenadas. No entanto, não é realmente compacto, como teoricamente nunca vai a zero, a menos que r se aproxime do infinito. Por se aproximar de zero muito rapidamente, consideramos praticamente compacto.

- Monaghan e Lattanzio (1985) criaram a seguinte função de suavização com base nas funções de *spline* cúbica conhecidas como função *B-spline*

$$W(r, h) = \alpha_d \times \begin{cases} \frac{2}{3} - r^2 + \frac{1}{2}r^3 & 0 \leq r < 1 \\ \frac{1}{6}(2-r)^3 & 1 \leq r < 2 \\ 0 & r \geq 2. \end{cases} \quad (3.43)$$

Em um espaço de uma, duas ou três dimensões, α_d é $\frac{1}{h}$, $\frac{15}{7\pi h^2}$ e $\frac{3}{2\pi h^3}$ respectivamente. A função *spline* cúbica se assemelha a uma função Gaussiana enquanto possui um suporte compacto mais estreito. No entanto, a derivada segunda da *spline* cúbica é uma função linear por partes e, conseqüentemente, as propriedades de estabilidade podem ser inferiores às de núcleos mais suaves.

- Johnson, Stryk e Beissel (1985) usaram a seguinte função de suavização quadrática para simular o problema de impacto de alta velocidade

$$W(r, h) = \alpha_d \left(\frac{3}{16}r^2 - \frac{3}{4}r + \frac{3}{4} \right) \quad 0 \leq r \leq 2, \quad (3.44)$$

onde em um espaço de uma, duas e três dimensões α_d é $\frac{1}{h}$, $\frac{2}{\pi h^2}$ e $\frac{5}{4\pi h^3}$, respectivamente.

- Monaghan e Lattanzio (1985) publicaram a função de suavização de ordem superior que foi concebida a partir de formas de ordem inferior

$$W(r, h) = \alpha_d \left(\frac{3}{2} - r^2 \right) e^{-r^2} \quad 0 \leq r \leq 2, \quad (3.45)$$

onde α_d é $\frac{1}{\sqrt{\pi}}$ um espaço unidimensional.

Uma desvantagem da função de suavização de alta ordem é que o núcleo é negativo em alguma região do seu domínio de suporte. Isso pode levar a resultados não físicos para problemas hidrodinâmicos (FULK, 1996).

- Morris (1996) introduziu *splines* de ordem superior (quártica e quártica) que se aproximam mais do Gaussiano e mais estável. A *spline* quártica é

$$W(r, h) = \alpha_d \times \begin{cases} (r + 2.5)^4 - 5(r + 1.5)^4 + 10(r + 0.5)^4 & 0 \leq r < 0.5 \\ (2.5 - r)^4 - 5(1.5 - r)^4 & 0.5 \leq r < 1.5 \\ (2.5 - r)^4 & 1.5 \leq r < 2.5 \\ 0 & r > 2.5, \end{cases} \quad (3.46)$$

onde $\alpha_d = \frac{1}{24h}$ em um espaço unidimensional.

A *spline* quártica é

$$W(r, h) = \alpha_d \times \begin{cases} (3 - r)^5 - 6(2 - r)^5 + 15(1 - r)^5 & 0 \leq r < 1 \\ (3 - r)^5 - 6(2 - r)^5 & 1 \leq r < 2 \\ (3 - r)^5 & 2 \leq r < 3 \\ 0 & r > 3, \end{cases} \quad (3.47)$$

onde α_d é $\frac{120}{h}$, $\frac{7}{478\pi h^2}$ e $\frac{3}{359\pi h^3}$ em um espaço uma, duas e três dimensões, respectivamente.

3.2.3 Condições para construção de uma função de suavização

Exemplificou-se na seção 3.2.2 algumas funções de suavização. Agora, apresenta-se um procedimento padrão desenvolvido por Liu e Liu (2003) para encontrar funções de suavização.

Geralmente, uma aproximação numérica deve representar, de forma mais próxima possível, a função contínua correspondente ao problema físico. Pode-se fazer uma analogia do método SPH com o método Euleriano clássico de diferenças finitas onde o conceito de consistência define o quão bem as equações do sistema discretizado modelam as equações diferenciais parciais das leis físicas (FORTUNA, 2012). No Método de Diferenças Finitas (MDF), a interpolação numérica é consistente se tiver a capacidade de representar exatamente, no limite, as equações diferenciais conforme o número dos pontos da malha se aproximam do infinito e o tamanho máximo da malha se aproxima de zero. Por um lado, a consistência é um requisito básico para construir um esquema de diferenças finitas; por outro lado, a consistência é um pré-requisito para a convergência. Isto é devido ao teorema da equivalência de Lax-Richtmyer, que afirma que um esquema consistente de diferenças finitas para uma EDP é convergente se, e somente se, for estável.

Da mesma forma, empregando a expansão da série de Taylor, a análise pode ser realizada sobre quão bem as aproximações de SPH representam as equações físicas no limite, à medida que o espaçamento das partículas se aproxima de zero. Esta análise é realizada através da aproximação do núcleo de SPH para uma função e suas derivadas. A análise mostra que, para aproximar exatamente uma função e suas derivadas, certas condições precisam ser satisfeitas. Estas condições podem, por sua vez, ser usadas para construir as funções de suavização (LIU; LIU; LAM, 2002).

3.2.3.1 Aproximação para uma função contínua

No método SPH, considerando a função de campo f , multiplica-se f pela função de suavização W e, em seguida, integra-se sobre o domínio de suporte Ω de um ponto, podendo aproximar o valor da função de campo nesse ponto usando a seguinte forma de representação integral

$$f(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' . \quad (3.48)$$

Se f for suficientemente suave, aplicando a expansão em série de Taylor de f no ponto \mathbf{x}' na vizinhança de \mathbf{x}

$$f(\mathbf{x} + h) = f(\mathbf{x}) + f'(\mathbf{x})h + \frac{f''(\mathbf{x})}{2!}h^2 + \frac{f'''(\mathbf{x})}{3!}h^3 + \dots$$

Ao considerar $\mathbf{x} + h = \mathbf{x}'$, ou seja, $h = \mathbf{x}' - \mathbf{x}$, tem-se

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}') &= f(\mathbf{x}) + f'(\mathbf{x})(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) + \frac{f''(\mathbf{x})}{2!}(\mathbf{x}' - \mathbf{x})^2 + \frac{f'''(\mathbf{x})}{3!}(\mathbf{x}' - \mathbf{x})^3 + \dots \\ \Rightarrow f(\mathbf{x}') &= \frac{(-1)^0 h^0 f^{(0)}(\mathbf{x})}{0!} \left(\frac{\mathbf{x}' - \mathbf{x}}{h}\right)^0 + \frac{(-1)^1 (-1)^1 h^1 f^{(1)}(\mathbf{x})}{1!} \left(\frac{\mathbf{x}' - \mathbf{x}}{h}\right)^1 + \\ &\quad \frac{(-1)^2 h^2 f^{(2)}(\mathbf{x})}{2!} \left(\frac{\mathbf{x}' - \mathbf{x}}{h}\right)^2 + \dots + \frac{(-1)^n h^n f^{(n)}(\mathbf{x})}{n!} \left(\frac{\mathbf{x}' - \mathbf{x}}{h}\right)^n + \dots \\ \Rightarrow f(\mathbf{x}') &= \frac{(-1)^0 h^0 f^{(0)}(\mathbf{x})}{0!} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h}\right)^0 + \frac{(-1)^1 h^1 f^{(1)}(\mathbf{x})}{1!} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h}\right)^1 + \\ &\quad \frac{(-1)^2 h^2 f^{(2)}(\mathbf{x})}{2!} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h}\right)^2 + \dots + \frac{(-1)^n h^n f^{(n)}(\mathbf{x})}{n!} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h}\right)^n \\ &\quad + r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h}\right). \end{aligned}$$

Portanto,

$$f(\mathbf{x}') = \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k h^k f^{(k)}(\mathbf{x})}{k!} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h}\right)^k + r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h}\right), \quad (3.49)$$

onde $r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h}\right) = \sum_{k=n+1}^{\infty} \frac{(-1)^k h^k f^{(k)}(\mathbf{x})}{k!} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h}\right)^k$ é o resto da expansão em série de Taylor.

Substituindo a equação (3.49) na equação (3.48), tem-se

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &= \int_{\Omega} \left[\sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k h^k f^{(k)}(\mathbf{x})}{k!} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h}\right)^k + r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h}\right) \right] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \\ \Rightarrow f(\mathbf{x}) &= \int_{\Omega} \left[\sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k h^k f^{(k)}(\mathbf{x})}{k!} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h}\right)^k \right] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \\ &\quad + \int_{\Omega} r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h}\right) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \\ \Rightarrow f(\mathbf{x}) &= \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k h^k f^{(k)}(\mathbf{x})}{k!} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h}\right)^k W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' + r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h}\right) \\ \Rightarrow f(\mathbf{x}) &= \sum_{k=0}^n \left(\frac{(-1)^k h^k}{k!} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h}\right)^k W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \right) f^{(k)}(\mathbf{x}) + r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h}\right) \\ \Rightarrow f(\mathbf{x}) &= \sum_{k=0}^n A_k f^{(k)}(\mathbf{x}) + r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h}\right), \end{aligned} \quad (3.50)$$

onde

$$A_k = \frac{(-1)^k h^k}{k!} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^k W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}'. \quad (3.51)$$

Comparando o lado esquerdo com o lado direito da equação (3.50),

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &= \sum_{k=0}^n A_k f^{(k)}(\mathbf{x}) + r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right) \\ 1f^{(0)}(\mathbf{x}) + 0f^{(1)}(\mathbf{x}) + \dots + 0f^{(n)}(\mathbf{x}) &= A_0 f^{(0)}(\mathbf{x}) + A_1 f^{(1)}(\mathbf{x}) + \dots + r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right), \end{aligned}$$

para que $f(\mathbf{x})$ seja aproximado com k -ésima ordem, os coeficiente A_k devem ser comparados aos coeficientes para $f^{(k)}(\mathbf{x})$, assim então

$$\begin{cases} A_0 = 1 \\ A_1 = 0 \\ \vdots \\ A_n = 0 \end{cases} \quad \text{onde } r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right) = 0.$$

Portanto, as seguintes condições para a função de suavização W podem ser obtidas. De (3.51), tem-se

$$A_k = \sum_{k=0}^N \frac{(-1)^k h^k}{k!} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^k W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}'.$$

Daí

$$\begin{cases} k=0 \Rightarrow A_0 = \frac{(-1)^0 h^0}{0!} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^0 W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 1 \\ k=1 \Rightarrow A_1 = \frac{(-1)^1 h^1}{1!} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^1 W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ k=2 \Rightarrow A_2 = \frac{(-1)^2 h^2}{2!} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^2 W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ \vdots \\ k=n \Rightarrow A_n = \frac{(-1)^n h^n}{n!} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^n W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \end{cases}$$

ou seja,

$$\begin{cases} A_0 = \int_{\Omega} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 1 \\ A_1 = -h \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ A_2 = \frac{h^2}{2} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^2 W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ \vdots \\ A_n = \frac{h^n}{n!} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^n W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \end{cases} \quad (3.52)$$

ou ainda,

$$\left\{ \begin{array}{l} A_0 = \int_{\Omega} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 1 \\ A_1 = -\frac{h}{h} \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ A_2 = \frac{h^2}{2h^2} \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ \vdots \\ A_n = \frac{h^n}{h^n n!} \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^n W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0. \end{array} \right.$$

Fazendo simplificações

$$\left\{ \begin{array}{l} A_0 = \int_{\Omega} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 1 \\ A_1 = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ A_2 = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ \vdots \\ A_n = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^n W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0. \end{array} \right.$$

Essas condições podem ser adicionalmente escritas nas seguintes expressões simplificadas em termo dos k -momentos M_k da função de suavização

$$\left\{ \begin{array}{l} M_0 = \int_{\Omega} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 1 \\ M_1 = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ M_2 = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ \vdots \\ M_n = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^n W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0. \end{array} \right. \quad (3.53)$$

Nota-se que a primeira equação em (3.53) é, de fato, a condição de unidade expressa em (3.38) e a segunda equação em (3.53) representa a propriedade simétrica dada na equação (3.40). A satisfação dessas duas condições garante a consistência da primeira ordem para a aproximação do núcleo de SPH para uma função (LIU; LIU, 2003).

3.2.4 A aproximação das derivadas de uma função de campo

Nas equações de Navier-Stokes enunciadas no capítulo 2, pode-se notar que em (2.6) e (2.7) as derivadas são no máximo de segunda ordem. Portanto nas discussões a seguir são dadas as aproximações das derivadas de primeira e segunda ordem de uma função contínua. O mesmo procedimento pode ser adotado para aproximar derivadas de ordem superior.

3.2.4.1 Primeira Derivada

A aproximação da primeira derivada pode ser obtida pela substituição da função $f(\mathbf{x})$ na equação (3.48) pela sua derivada $f'(\mathbf{x})$, ou seja

$$f'(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} f'(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}'. \quad (3.54)$$

Integrando por partes a equação (3.54)

$$\begin{aligned} u &= W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) & v &= f(\mathbf{x}') \\ du &= W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' & dv &= f'(\mathbf{x}')d\mathbf{x}' \end{aligned}$$

obtem -se

$$f'(\mathbf{x}) = \underbrace{f(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)}_{*} - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}')W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}'$$

reescrevendo (*), tem-se

$$f'(\mathbf{x}) = \underbrace{\int_{\Omega} \frac{d}{d\mathbf{x}'} [f(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] d\mathbf{x}'}_{**} - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}')W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}'.$$

Aplicando o Teorema da divergência de Gauss em (**), dada no apêndice A, podemos escrever a equação acima como

$$f'(\mathbf{x}) = \int_S [f(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] \cdot \mathbf{n}dS - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}')W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}', \quad (3.55)$$

onde a primeira integral é sobre a superfície S do domínio de suporte Ω , \mathbf{n} é o vetor normal unitário para a superfície S . Substituindo (3.49) na segunda integral

$$\begin{aligned} f'(\mathbf{x}) &= \int_S [f(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] \cdot \mathbf{n}dS \\ &\quad - \int_{\Omega} \left[\sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k h^k f^{(k)}(\mathbf{x})}{k!} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^k + r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right) \right] W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' \\ &= \int_S [f(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] \cdot \mathbf{n}dS \\ &\quad - \int_{\Omega} \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k h^k f^{(k)}(\mathbf{x})}{k!} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^k W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' \\ &\quad - \int_{\Omega} r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right) W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' \\ &= \int_S [f(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] \cdot \mathbf{n}dS \\ &\quad - \left[\sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k h^k f^{(k)}(\mathbf{x})}{k!} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^k W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' + r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right) \right] \\ &= \int_S [f(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] \cdot \mathbf{n}dS \\ &\quad + \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^{k+1} h^k f^{(k)}(\mathbf{x})}{k!} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^k W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' + r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right), \end{aligned}$$

logo

$$f'(\mathbf{x}) = \underbrace{\int_S [f(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] \cdot \mathbf{n}dS}_{***} + \sum_{k=0}^n A'_k f^{(k)}(\mathbf{x}) + r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right), \quad (3.56)$$

onde

$$A'_k = \frac{(-1)^{k+1}h^k}{k!} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^k W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}'. \quad (3.57)$$

Como a função de suavização W está definida para ter suporte compacto, ou seja $W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)|_S = 0$, quando o domínio de suporte está localizado dentro do domínio do problema a integral (***) é nula, então (3.56) é reescrita como

$$f'(\mathbf{x}) = \sum_{k=0}^n A'_k f^{(k)}(\mathbf{x}) + r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right). \quad (3.58)$$

Comparando a (3.58) com o lado direito da equação (3.57), obtém -se

$$\begin{aligned} f'(\mathbf{x}) &= \sum_{k=0}^n A'_k f^{(k)}(\mathbf{x}) - r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right) \\ \Rightarrow 0f^{(0)}(\mathbf{x}) + 1f^{(1)}(\mathbf{x}) + \dots + 0f^{(n)}(\mathbf{x}) &= A'_0 f^{(0)}(\mathbf{x}) + A'_1 f^{(1)}(\mathbf{x}) + \dots + A'_n f^{(n)}(\mathbf{x}) \\ &\quad + r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right) \end{aligned}$$

então

$$\begin{cases} A'_0 = 0 \\ A'_1 = 1 \\ A'_2 = 0 \\ \vdots \\ A'_n = 0 \end{cases} \quad \text{onde } r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right) = 0.$$

Portanto, as seguintes condições para a função de suavização W podem ser obtidas utilizando-se a (3.57)

$$\begin{cases} k=0 \Rightarrow A'_0 = \frac{(-1)^1 h^0}{0!} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^0 W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ k=1 \Rightarrow A'_1 = \frac{(-1)^2 h^1}{1!} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^1 W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 1 \\ k=2 \Rightarrow A'_2 = \frac{(-1)^3 h^2}{2!} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^2 W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ \vdots \\ k=n \Rightarrow A'_n = \frac{(-1)^{n+1} h^n}{n!} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^n W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \end{cases}$$

ou seja,

$$\left\{ \begin{array}{l} A'_0 = - \int_{\Omega} W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ A'_1 = h \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right) W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 1 \\ A'_2 = - \frac{h^2}{2} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^2 W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ \vdots \\ A'_n = \frac{h^n}{n!} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^n W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0, \end{array} \right. \quad (3.59)$$

ou ainda,

$$\left\{ \begin{array}{l} A'_0 = - \int_{\Omega} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ A'_1 = \frac{h}{h} \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 1 \\ A'_2 = - \frac{h^2}{2h^2} \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ \vdots \\ A'_n = \frac{h^n}{h^n n!} \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^n W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0. \end{array} \right.$$

Fazendo simplificações, tem-se

$$\left\{ \begin{array}{l} A'_0 = \int_{\Omega} W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ A'_1 = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}') W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 1 \\ A'_2 = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ \vdots \\ A'_n = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^n W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0. \end{array} \right.$$

Se as seguintes condições forem satisfeitas, $f'(\mathbf{x})$ pode aproximar-se para n -ésima ordem

$$\left\{ \begin{array}{l} M'_0 = \int_{\Omega} W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ M'_1 = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}') W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 1 \\ M'_2 = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ \vdots \\ M'_n = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^n W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \end{array} \right. \quad (3.60)$$

e

$$W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)|_S = 0. \quad (3.61)$$

A condição (3.61) exige que a função de suavização seja nula na superfície do domínio de suporte para qualquer função arbitrária $f(\mathbf{x})$. A primeira expressão na equação (3.60) é na verdade outra representação para equação (3.61). De fato, tem-se

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

aplicando a integração por partes

$$\begin{aligned} v &= W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) & u &= 1 \\ dv &= W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' & du &= 1'd\mathbf{x}' \end{aligned}$$

assim

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} 1 \cdot W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' &= 1 \cdot W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) - \int_{\Omega} W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)1'd\mathbf{x}' \\ \Rightarrow \int_{\Omega} 1 \cdot W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' &= \int_{\Omega} \frac{d}{dx} [1 \cdot W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] d\mathbf{x}' - \int_{\Omega} W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)1'd\mathbf{x}' \\ \Rightarrow \int_{\Omega} 1 \cdot W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' &= \int_{\Omega} \frac{d}{d\mathbf{x}} [1 \cdot W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] d\mathbf{x}' - 0 \\ \Rightarrow \int_{\Omega} 1 \cdot W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' &= \int_S W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) \cdot \mathbf{n}dS \\ \Rightarrow \int_{\Omega} 1 \cdot W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' &= 0. \end{aligned} \tag{3.62}$$

Nota-se que a equação (3.61) é, de fato, a condição de suporte compacto dada na equação (3.39).

3.2.4.2 Derivada Segunda

A aproximação da segunda derivada pode ser obtida substituindo diretamente a função $f(\mathbf{x})$ em (3.48) pela segunda derivada $f''(\mathbf{x})$, que será

$$f''(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} f''(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' . \tag{3.63}$$

Fazendo a integração por partes

$$\begin{aligned} u &= W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) & v &= f'(\mathbf{x}') \\ du &= W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' & dv &= f''(\mathbf{x}')d\mathbf{x}', \end{aligned}$$

então

$$\begin{aligned} f''(\mathbf{x}) &= f'(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) - \int_{\Omega} f'(\mathbf{x}')W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' \\ \Rightarrow f''(\mathbf{x}) &= \int_{\Omega} \frac{d}{d\mathbf{x}'} [f'(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] d\mathbf{x}' - \int_{\Omega} f'(\mathbf{x}')W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' . \end{aligned}$$

Aplicando o Teorema da divergência de Gauss, dada no apêndice A,

$$f''(\mathbf{x}) = \int_S [f'(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] \cdot \mathbf{n}dS - \underbrace{\int_{\Omega} f'(\mathbf{x}')W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}'}_{*} .$$

Aplicando novamente a integração por partes em(*), obtém-se

$$\begin{aligned} u &= W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) & v &= f(\mathbf{x}') \\ du &= W''(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' & dv &= f'(\mathbf{x}')d\mathbf{x}'. \end{aligned}$$

Fazendo a integração por partes, tem-se

$$\begin{aligned} f''(\mathbf{x}) &= \int_S [f'(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] \cdot \mathbf{n}dS - \left[f(\mathbf{x}')W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) - \int_{\Omega} f(x)W''(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' \right] \\ \Rightarrow f''(\mathbf{x}) &= \int_S [f'(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] \cdot \mathbf{n}dS \\ &\quad - \left[\int_{\Omega} \frac{d}{d\mathbf{x}'} (f(\mathbf{x}')W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)) d\mathbf{x}' - \int_{\Omega} f(\mathbf{x})W''(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' \right] \end{aligned}$$

logo,

$$f''(\mathbf{x}) = \int_S [f'(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] \cdot \mathbf{nd}S - \int_S [f(\mathbf{x}')W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] \cdot \mathbf{nd}S + \underbrace{\int_{\Omega} f(\mathbf{x}')W''(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}'}_{**}. \quad (3.64)$$

Substituindo (3.49) em (**) de (3.64), obtém-se

$$\begin{aligned} f''(\mathbf{x}) &= \int_S [f'(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] \cdot \mathbf{nd}S - \int_S [f(\mathbf{x}')W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] \cdot \mathbf{nd}S + \\ &\int_{\Omega} \left[\sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k h^k f^{(k)}(\mathbf{x})}{k!} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^k + r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right) \right] W''(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' \\ f''(\mathbf{x}) &= \int_S [f'(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] \cdot \mathbf{nd}S - \int_S [f(\mathbf{x}')W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] \cdot \mathbf{nd}S + \\ &\int_{\Omega} \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k h^k f^{(k)}(\mathbf{x})}{k!} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^k W''(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' + \\ &\int_{\Omega} r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right) W''(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' \\ f''(\mathbf{x}) &= \int_S [f'(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] \cdot \mathbf{nd}S - \int_S [f(\mathbf{x}')W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] \cdot \mathbf{nd}S + \\ &\sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k h^k f^{(k)}(\mathbf{x})}{k!} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^k W''(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' + \\ &r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right) \\ f''(\mathbf{x}) &= \int_S [f'(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] \cdot \mathbf{nd}S - \int_S [f(\mathbf{x}')W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] \cdot \mathbf{nd}S + \\ &\sum_{k=0}^n A_k'' f^{(k)}(\mathbf{x}) + r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right), \end{aligned} \quad (3.65)$$

onde

$$A_k'' = \frac{(-1)^k h^k}{k!} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^k W''(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}'. \quad (3.66)$$

Como a função de suavização W esta definida para ter suporte compacto, ou seja $W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)|_S = 0$ e $W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)|_S = 0$,

$$\begin{aligned} f''(\mathbf{x}) &= \int_S f'(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) \cdot \mathbf{nd}S - \int_S f(\mathbf{x}')W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) \cdot \mathbf{nd}S + \sum_{k=0}^n A_k'' f^{(k)}(\mathbf{x}) \\ &+ r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right) \\ \Rightarrow f''(\mathbf{x}) &= \sum_{k=0}^n A_k'' f^{(k)}(\mathbf{x}) + r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right). \end{aligned}$$

Comparando o lado esquerdo da equação (3.65) com o lado direito da equação (3.66)

$$\begin{aligned} f''(\mathbf{x}) &= \sum_{k=0}^n A''_k f^{(k)}(\mathbf{x}) + r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right) \\ 0f^{(0)}(\mathbf{x}) + 0f^{(1)}(\mathbf{x}) + 1f^{(2)}(\mathbf{x}) + \dots + 0f^{(n)}(\mathbf{x}) &= A''_0 f^{(0)}(\mathbf{x}) + A''_1 f^{(1)}(\mathbf{x}) + A''_2 f^{(2)}(\mathbf{x}) + \\ &\dots + A''_n f^{(n)}(\mathbf{x}) + r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right) \end{aligned}$$

então

$$\left\{ \begin{array}{l} A''_0 = 0 \\ A''_1 = 0 \\ A''_2 = 1 \\ \vdots \\ A''_n = 0 \end{array} \right. \quad \text{onde } r_{n+1} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right) = 0.$$

Portanto, as seguintes condições para a função de suavização W podem ser obtidas utilizando-se a (3.66)

$$\left\{ \begin{array}{l} k=0 \Rightarrow A''_0 = \frac{(-1)^0 h^0}{0!} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^0 W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ k=1 \Rightarrow A''_1 = \frac{(-1)^1 h^1}{1!} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^1 W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ k=2 \Rightarrow A''_2 = \frac{(-1)^2 h^2}{2!} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^2 W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 1 \\ \vdots \\ k=n \Rightarrow A''_n = \frac{(-1)^n h^n}{n!} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^n W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0. \end{array} \right.$$

Fazendo as devidas simplificações, pode-se ver que as seguintes equações form satisfeitas, $f''(x)$ pode ser aproximada de n -ésima ordem. Logo,

$$\left\{ \begin{array}{l} M''_0 = \int_{\Omega} W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ M''_1 = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}') W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ M''_2 = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 2 \\ \vdots \\ M''_n = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^n W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0. \end{array} \right. \quad (3.67)$$

Note que

$$W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)|_S = 0, \quad (3.68)$$

e

$$W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)|_S = 0. \quad (3.69)$$

As equações (3.68) e (3.69) determinam que as integrais (3.65) são nulas para uma função arbitrária f e sua primeira derivada f' . A primeira expressão na (3.67) é, na verdade, outra representação da equação (3.69) como pode-se observar a partir da integral

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

fazendo

$$\begin{aligned} dv &= W''(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' & u &= 1 \\ v &= W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) & du &= 1' d\mathbf{x}' \end{aligned}$$

obtemos,

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} W''(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 1 \cdot W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) - \int_{\Omega} W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) 1' d\mathbf{x}' \\ \Rightarrow & \int_{\Omega} W''(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) - 0 \\ \Rightarrow & \int_{\Omega} W''(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = \int_{\Omega} \frac{d}{d\mathbf{x}'} W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \\ \Rightarrow & \int_{\Omega} W''(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = \int_S W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) \cdot \mathbf{n} dS \\ \Rightarrow & \int_{\Omega} W''(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0. \end{aligned}$$

Se as equações (3.68) e (3.69) forem satisfeitas, as equações (3.60) e (3.67) podem ser derivadas das equações (3.53), exceto a primeira expressão na equação (3.60) e as duas primeiras expressões na equação (3.67), usando a seguinte integração por partes

$$\int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^k W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', k) d\mathbf{x}' = -\frac{1}{k+1} \int_{\Omega} [(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+1}]' W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}'. \quad (3.70)$$

De fato, (3.70) é válida, pois

$$\begin{aligned} -\frac{1}{k+1} [(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+1}]' &= -\frac{1}{k+1} \frac{d}{d\mathbf{x}'} [(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+1}] \\ &= -\frac{1}{k+1} (k+1) (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{(k+1)-1} \frac{d}{d\mathbf{x}'} (\mathbf{x} - \mathbf{x}') \\ &= -(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{(k+1)-1} (0 - 1) \\ &= (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^k. \end{aligned}$$

Como

$$\int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^k W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', k) d\mathbf{x}' = -\frac{1}{k+1} \int_{\Omega} [(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+1}]' W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}',$$

utilizando-se do método de integração por partes,

$$\begin{aligned} u &= W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) & dv &= [(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+1}]' d\mathbf{x}' \\ du &= W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' & v &= (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+1}, \end{aligned}$$

tem-se

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^k W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', k) d\mathbf{x}' \\
&= -\frac{1}{k+1} \int_{\Omega} [(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+1}]' W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \\
&= -\frac{1}{k+1} \left[(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+1} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) - \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+1} W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \right] \\
&= -\frac{1}{k+1} [(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+1} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] + \frac{1}{k+1} \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+1} W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \\
&= -\frac{1}{k+1} \int_{\Omega} \frac{d}{d\mathbf{x}'} [(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+1} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] d\mathbf{x}' + \frac{1}{k+1} \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+1} W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \\
&= -\frac{1}{k+1} \int_S [(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+1} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] \cdot \mathbf{n} dS + \frac{1}{k+1} \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+1} W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \\
&= \frac{1}{k+1} \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+1} W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}'.
\end{aligned}$$

Utilizando novamente o recurso da integração por partes

$$\begin{aligned}
u &= W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) & dv &= (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+1} d\mathbf{x}' \\
du &= W''(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' & v &= -\frac{1}{k+2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+2}
\end{aligned}$$

tem-se

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^k W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', k) d\mathbf{x}' \\
&= \frac{1}{k+1} \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+1} W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \\
&= \frac{1}{k+1} \left[-\frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+2}}{k+2} W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) + \int_{\Omega} \frac{1}{k+2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+2} W''(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \right] \\
&= \left(\frac{1}{k+1} \right) \left(\frac{1}{k+2} \right) \left[\int_{\Omega} \frac{1}{d\mathbf{x}'} [-(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+2} W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] d\mathbf{x}' \right. \\
&\quad \left. + \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+2} W''(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \right] \\
&= \left(\frac{1}{k+1} \right) \left(\frac{1}{k+2} \right) \left[\int_S [(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+2} W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) \cdot \mathbf{n}] dS \right. \\
&\quad \left. + \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+2} W''(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \right] \\
&= \left(\frac{1}{k+1} \right) \left(\frac{1}{k+2} \right) \left[\int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+2} W''(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \right].
\end{aligned}$$

Portanto

$$\int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^k W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', k) d\mathbf{x}' = \left(\frac{1}{k+1} \right) \left(\frac{1}{k+2} \right) \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+2} W''(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}'. \quad (3.71)$$

Em resumo, se a função de suavização e suas derivadas devem ser reproduzidas para n -ésima ordem de precisão, a função de suavização deve satisfazer

$$\left\{ \begin{array}{l} M_0 = \int_{\Omega} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 1 \\ M_1 = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ M_2 = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \\ \vdots \\ M_n = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^n W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0 \end{array} \right. \quad (3.72)$$

e

$$\left\{ \begin{array}{l} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)|_S = 0 \\ W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)|_S = 0. \end{array} \right. \quad (3.73)$$

Essas condições podem ser usadas para construir as funções de suavização. Seguindo o mesmo procedimento, as condições para a produção de derivadas de maior ordem de uma função também podem ser obtidas. Em geral, as condições de suporte compacto para a derivada de k -ésima ordem a serem aproximadas da precisão de n -ésima ordem são

$$\left\{ \begin{array}{l} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)|_S = 0 \\ W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)|_S = 0 \\ \vdots \\ W^{k-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)|_S = 0. \end{array} \right. \quad (3.74)$$

Para que a função seja reproduzida para a precisão de zero-ésima ordem, o valor médio da função de suavização sobre o domínio de suporte compacto deve ser unitário. Para que a função seja reproduzida com a precisão de ordem n , os momentos da função de suavização até a n -ésima ordem devem desaparecer.

Para reproduzir a primeira derivada de uma função exatamente, a função de suavização deve ter um suporte compacto. Para que a derivada segunda de uma função seja reproduzida exatamente, a derivada primeira da função de suavização também deve ter suporte compacto sobre o mesmo domínio de suporte. Portanto, os requisitos anteriormente discutidos sobre a função de suavização são, na verdade, a reprodutibilidade das aproximações do núcleo SPH ou as representações integrais para uma função e suas derivadas.

3.2.5 Consistência da aproximação do núcleo

As condições mostradas nas equações (3.72) e (3.73) são obtidas usando a expansão em série de Taylor. Com tais condições satisfeitas, as aproximações de SPH para uma função e sua derivada são consistentes para uma determinada ordem (FULK, 1996).

Considerando a função de campo constante (polinômio de grau zero) $f(\mathbf{x}) = c$ para ser reproduzida exatamente pela aproximação do núcleo SPH, devemos ter

$$f(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} cW(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = c \quad (3.75)$$

ou

$$\int_{\Omega} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 1. \quad (3.76)$$

Nota-se que a condição de normalização (unidade) ou a primeira expressão em (3.72) é, de fato, a condição para a aproximação do núcleo ter a consistência da ordem zero-ésima.

Para uma função linear $f(\mathbf{x}) = c_0 + c_1\mathbf{x}$ a ser reproduzida, devemos ter:

$$f(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} (c_0 + c_1\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' = c_0 + c_1\mathbf{x}, \quad (3.77)$$

que pode ser simplificado usando a equação (3.76) como

$$\int_{\Omega} \mathbf{x}'W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' = \mathbf{x}. \quad (3.78)$$

Multiplicando \mathbf{x} em ambos os lados da equação (3.76), temos a seguinte identidade

$$\int_{\Omega} \mathbf{x}W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' = \mathbf{x}. \quad (3.79)$$

Subtraindo a equação (3.78) da identidade acima leva a

$$\int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' = 0. \quad (3.80)$$

A segunda expressão na equação (3.72) representa a condição para a consistência linear das aproximações do núcleo SPH. Para que a equação (3.80) seja satisfeita, a função de suavização deve ser simétrica para que o primeiro momento possa desaparecer.

Para que os polinômios de ordem superior sejam reproduzidos, conclusões semelhantes podem ser verificadas. Consideremos uma ordem monomial da k -ésima ou simplesmente assumimos $f(\mathbf{x}) = c_k\mathbf{x}^k$, aproximando o valor da função na origem $\mathbf{x} = \mathbf{0}$, fornece

$$f(\mathbf{0}) = \int_{\Omega} c_k\mathbf{x}'^k W(\mathbf{0} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}'. \quad (3.81)$$

Uma expressão mais geral pode ser obtida movendo a origem para um ponto arbitrário \mathbf{x} para obter a aproximação da função sob o novo sistema de coordenadas, o que dá

$$\int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^k W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)d\mathbf{x}' = 0. \quad (3.82)$$

É claro que a equação (3.82) é a mesma que a última expressão na equação (3.72). Portanto, as condições mostradas na equação (3.72) também podem ser consideradas como condições para reproduzir o polinômio da ordem k -ésima.

3.2.6 Consistência da aproximação de partículas

Os conceitos de consistência discutidos na seção 3.2.5 são obtidas da forma contínua de aproximação do núcleo ou representação integral. Eles não garantem consistência para a forma discreta produzida após a aproximação das partículas. Em métodos de partículas sem malha, se as equações discretizadas para as condições mostradas na equação (3.72) não são satisfeitas ocorre a chamada inconsistência de partículas (MORRIS, 1996). As condições de consistência constante e linear (3.76) e (3.80) são

$$\sum_{j=1}^N W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h)\Delta\mathbf{x}_j = 1 \quad (3.83)$$

e

$$\sum_{j=1}^N (\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) \Delta \mathbf{x}_j = 0, \quad (3.84)$$

onde N é o número total de partículas no domínio de suporte para a dada partícula localizada em \mathbf{x} .

As condições de consistência discretizadas nem sempre são satisfeitas. Uma primeira situação a ser considerada são as partículas que estão perto do limite do domínio do problema de modo que o domínio de suporte intercepte com o limite, como mostrado na Figura 3.4.

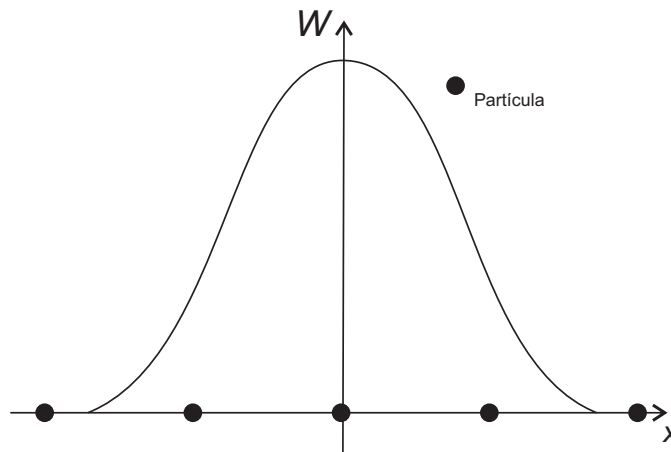


Figura 3.4: Aproximação de partículas para uma partícula interior com distribuição regular de partículas em seu domínio de suporte (LIU; LIU, 2003).

Mesmo para a distribuição regular de partículas, devido à instabilidade nas partículas que contribuem para a somatória discretizada, o lado esquerdo da equação (3.83) é inferior a 1 e o lado esquerdo da equação (3.84) não desaparecerá devido ao truncamento da função de suavização no limite, como mostrado na Figura 3.5.

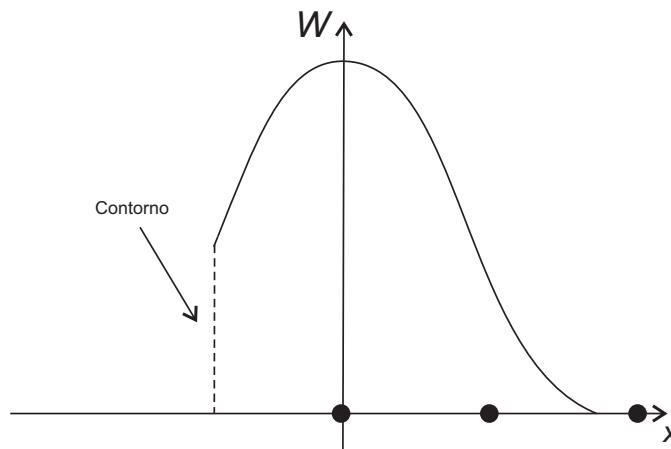


Figura 3.5: Aproximação de partículas para uma partícula cujo domínio de suporte é truncado pelo limite (LIU; LIU, 2003).

Outro caso é observado quando as partículas são distribuídas irregularmente. Nesse caso, mesmo para as partículas interiores cujos domínios de suporte não são truncados, a condição de consistência constante e linear na forma discretizada não será exatamente satisfeita, devido à instabilidade na contribuição de partículas como mostrado na Figura 3.6.

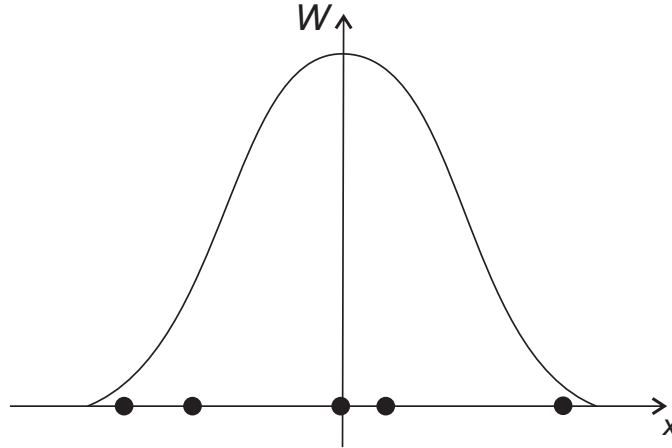


Figura 3.6: Aproximação de partículas para uma partícula com distribuição irregular de partículas em seu domínio de suporte (LIU; LIU, 2003).

Existem diferentes meios para restaurar a condição de consistência para a forma discreta; uma abordagem geral descrita por Liu e Liu (2003). Em uma aproximação de partículas, para obter uma consistência de k -ésima ordem na forma discreta, pode-se escrever a função de suavização da seguinte forma

$$\begin{aligned} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) &= b_0(\mathbf{x}, h) + b_1(\mathbf{x}, h) + \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_j}{h}\right) + b_2(\mathbf{x}, h) \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_j}{h}\right)^2 + \dots \\ &= \sum_{I=0}^k b_I(\mathbf{x}, h) \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_j}{h}\right)^I. \end{aligned} \quad (3.85)$$

Após uma transformação, a forma discretizada da equação (3.72) pode ser escrita como

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{j=1}^N \left[\sum_{I=0}^k b_I \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_j}{h}\right)^I \right] \Delta \mathbf{x}_j = 1 \\ \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_j}{h}\right) \left[\sum_{I=0}^k b_I \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_j}{h}\right)^I \right] \Delta \mathbf{x}_j = 0 \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_j}{h}\right)^k \left[\sum_{I=0}^k b_I \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_j}{h}\right)^I \right] \Delta \mathbf{x}_j = 0, \end{array} \right. \quad (3.86)$$

ou ainda,

$$\begin{cases} \sum_{I=0}^k b_I(\mathbf{x}, h) \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_j}{h} \right)^I \Delta \mathbf{x}_j = 1 \\ \sum_{I=0}^k b_I(\mathbf{x}, h) \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_j}{h} \right)^{I+1} \Delta \mathbf{x}_j = 0 \\ \vdots \\ \sum_{I=0}^k b_I(\mathbf{x}, h) \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_j}{h} \right)^{I+k} \Delta \mathbf{x}_j = 0. \end{cases} \quad (3.87)$$

Permitindo

$$m_k(\mathbf{x}, h) = \left(\sum_{j=1}^N \frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_j}{h} \right)^k \Delta \mathbf{x}_j. \quad (3.88)$$

Os $k + 1$ coeficientes $b_I(\mathbf{x}, h)$ de podem então ser determinados resolvendo a seguinte equação matricial

$$\begin{bmatrix} m_0(\mathbf{x}, h) & m_1(\mathbf{x}, h) & \cdots & m_k(\mathbf{x}, h) \\ m_1(\mathbf{x}, h) & m_2(\mathbf{x}, h) & \cdots & m_{k+1}(\mathbf{x}, h) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_k(\mathbf{x}, h) & m_{k+1}(\mathbf{x}, h) & \cdots & m_{k+k}(\mathbf{x}, h) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0(\mathbf{x}, h) \\ b_1(\mathbf{x}, h) \\ \vdots \\ b_k(\mathbf{x}, h) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.89)$$

ou

$$Mb = I \quad (3.90)$$

onde M é uma matriz de momento, b é um vetor de coeficientes e I é um vetor de constantes.

Depois de determinar os coeficientes, a função de suavização expressa na equação (3.85) pode ser calculada, o que garante a consistência discretizada na k -ésima ordem. Portanto, o processo de restauração da consistência de partículas realmente oferece uma abordagem para construir algum tipo de função de suavização para os métodos SPH (LIU; LIU; LAM, 2002).

3.3 Integração

Para simular o escoamento de um fluido, cada partícula é avançada através do tempo usando um passo de tempo fixo global Δt . Nesta seção, três esquemas de integração diferentes serão descritos brevemente.

3.3.1 O método Leap-Frog

A integração do *leap-frog* (salto-sapo) tem seu nome do fato de que as velocidades “saltarem” sobre as posições, e vice-versa. A Figura 3.7 ilustra o conceito. A estrutura de integração é Euler implícita e produz

$$\mathbf{v}_{t+\frac{1}{2}\Delta t} = \mathbf{v}_{t-\frac{1}{2}\Delta t} + \Delta t \mathbf{a}_t \quad (3.91)$$

$$\mathbf{v}_{t+\Delta t} = \mathbf{x}_t + \Delta t \mathbf{v}_{t+\frac{1}{2}\Delta t}, \quad (3.92)$$

com o deslocamento da velocidade inicial dado por um passo de Euler,

$$\mathbf{v}_{-\frac{1}{2}\Delta t} = \mathbf{v}_0 - \frac{1}{2}\Delta t \mathbf{a}_0. \quad (3.93)$$

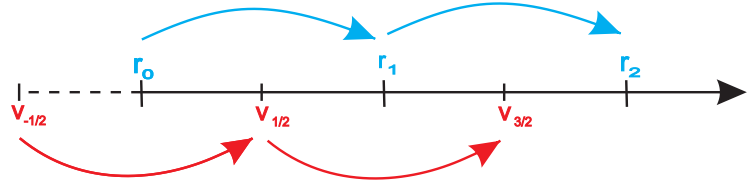


Figura 3.7: O mecanismo do *leap-frog*. A linha horizontal representa o tempo t , e os índices nas posições r e velocidades \mathbf{v} indicam o tempo específico.

A velocidade no tempo t pode ser estimada por uma aproximação de ponto médio,

$$\mathbf{v}_t \approx \frac{\mathbf{v}_{t-\frac{1}{2}\Delta t} + \mathbf{v}_{t+\frac{1}{2}\Delta t}}{2}, \quad (3.94)$$

que é necessário quando as forças de computação no tempo t .

3.3.2 Método de Euler Explícito

O esquema Euler implícito é, na verdade, um método semi-implícito, pois é apenas a atualização de posição que está implícita. O Euler semi-implícito é baseado no esquema Euler explícito, que provavelmente é o método de integração mais comum. Em Euler explícito, a posição e a velocidade são atualizadas por

$$\mathbf{x}_{t+\Delta t} = \mathbf{x}_t + \Delta t \mathbf{v}_t, \quad (3.95)$$

$$\mathbf{v}_{t+\Delta t} = \mathbf{v}_t + \Delta t \mathbf{a}_t. \quad (3.96)$$

O Euler semi-implícito não é mais independente das atualizações de posição e velocidade. A atualização de velocidade é a mesma que (3.96), mas a atualização de posição usa o resultado da atualização de velocidade para prever a nova posição,

$$\mathbf{x}_{t+\Delta t} = \mathbf{x}_t + \Delta t \mathbf{v}_{t+\Delta t}. \quad (3.97)$$

3.3.3 O Método de Verlet

O método de integração Verlet (1967) é originário da dinâmica molecular e é baseado em Euler implícito. A velocidade atual pode ser estimada usando o operador de diferença de primeira ordem dada por

$$\mathbf{v}_t \approx \frac{\mathbf{x}_t + \mathbf{x}_{t-\Delta t}}{\Delta t}. \quad (3.98)$$

Inserindo (3.96) em (3.97) e usando (3.98) como a velocidade atual, a nova posição pode ser determinada como

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{t+\Delta t} &= \mathbf{x}_t + \Delta t [\mathbf{v}_t + \Delta t \mathbf{a}_t] \\ &= \mathbf{x}_t + \Delta t \left[\left(\frac{\mathbf{x}_t + \mathbf{x}_{t-\Delta t}}{\Delta t} \right) + \Delta t \mathbf{a}_t \right] \\ &= 2\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_{t-\Delta t} + \Delta t^2 \mathbf{a}_t. \end{aligned} \quad (3.99)$$

O esquema Verlet é um dos integradores computacionalmente mais rápidos e, geralmente, é muito estável, já que a velocidade é dada de forma implícita e não será sincronizada com a posição. No entanto, as respostas de colisão não são triviais para manipular, pois inclui a modificação de posições em vez de velocidades.

Quebra de Barragem em um Leito Úmido

No Capítulo 2, afirma-se que na abordagem euleriana, os fluidos isotérmicos são descritos por um campo de velocidade \mathbf{v} , o campo de densidade ρ e um campo de pressão P . Sua evolução ao longo do tempo é dada pela equação de continuidade (2.1) e pela conservação do momento (2.2).

Neste capítulo apresenta-se o modelo quebra de barragem em um leito úmido conhecido como *Dam-Break in Wet Bed*. Tal modelo é descrito pelas equações de Navier-Stokes e pode ser usado para desenvolver métodos de solução associados a problemas de barragens em usinas hidrelétricas e ondas em praias como mencionados Crespo, Gomez e Dalrymple (2008) e Jonsson et al. (2015).

Grandes projetos hidrelétricos têm características que dificilmente podem ser descritos de forma precisa e suas soluções são complexas de serem obtidas. Para avaliar as propriedades hidráulicas nesses projetos, modelos físicos de escalas menores são usados para tentar prever como o problema real se comporta.

Desempenho, precisão e confiabilidade de modelos matemáticos, nestes casos, são considerados muito pobres. O estudo hidráulico de uma hidrelétrica é caracterizada por grandes escalas. A geometria é geralmente parcialmente formada pela natureza, isto é, até certo ponto, caótica. Além disso, escoamentos de superfície livre perturbados são frequentemente encontrados, por exemplo, nos escoamentos do canal do vertedouro e nos dissipadores de energia. Isso constitui desafios significativos de simulação matemática. Assim, existe uma necessidade de métodos numéricos computacionalmente robustos e confiáveis para lidar com estes problemas (JONSSON et al., 2015). Tais modelos são apropriados para serem resolvido por SPH, devido as próprias características do método, que se adapta bem a superfícies livres e fronteiras complexas (MONAGHAN, 1989), (MARRONE, 2013). No método SPH, o domínio fluido é representado por um conjunto de partículas não conectadas que possuem propriedades individuais do material, como densidade, velocidade e pressão. Além de representar o domínio do problema e atuar como portadores de informações, as partículas também atuam como o quadro computacional para as aproximações de função de campo. À medida que as partículas se movem com o fluido, suas propriedades de material mudam em função do tempo e da coordenada espacial devido às interações com as partículas vizinhas.

O problema ideal de quebra de barragem, onde um dado volume de água inicialmente estacionária é liberado em um leito de canal seco por uma remoção súbita de um portão, é um problema bem estudado (CRESPO; GOMEZ; DALRYMPLE, 2008). Após a remoção

do portão, um impulso se propaga a montante e uma onda de quebra de barragem se move rapidamente a jusante. Neste trabalho, estuda-se um problema sobre esse mesmo contexto. Insere-se uma nova condição inicial pra o problema, a onda de ruptura da barragem se propaga sobre um leito úmido (lâmina de água), que pode ser pensado como uma camada de fluido inicial em repouso, o escoamento se tornará consideravelmente diferente, como podemos observar no tralho de Janosi, Jan e Szabo (2004), que faz estudos experimentais e comparativos do *Dum-Break in Wet-Bed*.

4.1 Modelagem do Problema e Aproximações SPH

Nas próximas seções descreve-se as equações que modelam a quebra de barragem sobre um leito úmido. Aproximações SPH para o divergente, o gradiente e o laplaciano que fazem parte da equação de Navier-Stokes são apresentadas e utilizadas para obter as soluções numéricas para o modelo *Wet Bed*. O índice i é usado para denotar a propriedade da partícula fixa, como por exemplo, pressão, densidade, velocidade e j denota as mesmas propriedades para as partículas vizinhas.

4.1.1 Equação do Momento

A equação da conservação do momento acrescida da viscosidade artificial proposta por Monaghan (1992) foi utilizada devido a sua simplicidade. Na notação SPH, a equação momento pode ser escrita como

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_b \left(\frac{P_j}{\rho_j^2} + \frac{P_i}{\rho_i^2} + \prod_{ij} \right) \nabla_i W_{ij} + \mathbf{g}, \quad (4.1)$$

onde \mathbf{g} é a aceleração gravitacional que corresponde a uma força externa atuando no fluido e o termo da viscosidade artificial dado por

$$\left\{ \begin{array}{ll} \prod_{ij} = \frac{\alpha \bar{c}_{ij} \mu_{ij} + \beta \mu_{ij}^2}{\bar{\rho}_{ij}} & \text{se } \mathbf{v}_{ij} \mathbf{x}_{ij} < 0 \\ 0 & \text{se } \mathbf{v}_{ij} \mathbf{x}_{ij} > 0, \end{array} \right. \quad (4.2)$$

com $\mu_{ij} = h \mathbf{v}_{ij} \mathbf{x}_{ij} / \mathbf{x}_{ij}^2 + \nu^2$ onde $\mathbf{x}_{ij} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$ e $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$, se \mathbf{x}_k e \mathbf{v}_k a posição e a velocidade correspondentes a partícula k (i ou j), $\bar{c}_{ij} = c_i + c_j / 2$, $\nu^2 = 0.01 h^2$ é um fator que previne divergências numéricas quando duas partículas se aproximam. Os parâmetros α e β podem variar de acordo com o problema. Em Monaghan (1992), β é considerado zero. A aplicação nas simulações tem como objetivo evitar instabilidades numéricas, bem como a interpenetração entre as partículas (FILHO, 2014). Da equação (4.1) obtém-se a aceleração da partícula fixa.

4.1.2 Equação da Continuidade

No SPH, as equações assumem que a massa e a densidades para todas as partículas são conhecidas antes da aplicação do método. A massa das partículas é uma constante que pode ser modificada, mas densidade é um campo contínuo do fluxo que deve ser calculado. Assim, na partícula i , a densidade ρ é aproximada por

$$\frac{d\rho_i}{dt} = \sum_j m_j \mathbf{v}_{ij} \nabla W_{ij}, \quad (4.3)$$

onde $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i$, em vez de usar uma soma ponderada de termos de massa

$$\rho_i = \sum_j m_j W_{ij}, \quad (4.4)$$

descrita em Monaghan (1994), o que leva a uma diminuição da densidade artificial perto das interfaces de fluido (CRESPO; GOMEZ; DALRYMPLE, 2008).

4.1.3 Equação de Estado

Dentro da teoria formal do método SPH, o fluido é tratado como fracamente compressível (ou quase-compressível). Isso facilita o uso de uma equação do estado para determinar a pressão do fluido em vez de resolver outra equação diferencial (CRESPO; GOMES-GESTEIRA; DALRYMPLE, 2007). Uma descrição completa dessa ideia de como tratar o fluido como quase compressível é mostrada em Monaghan (1994).

A equação de Tait é usada principalmente em simulações que envolvem fluidos que impõe variações de densidade baixa, considera-se que um fluido como a água é quase-compressível (MONAGHAN, 2005). É somente necessário que a velocidade do som, dada por $c^2 = dp/d\rho$, seja suficientemente grande para que as flutuações da densidade sejam insignificantes (MONAGHAN, 1994).

Assumiu-se que a relação entre pressão e densidade segue a equação de Tait dada por

$$P = B \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right], \quad (4.5)$$

onde $\gamma = 7$ e $B = c_0^2 \rho / \gamma$, sendo $\rho_0 = 1000 \text{ Kg/m}^3$ a densidade de referência e $c_0 = c / \rho_0$ a velocidade do som na densidade de referência.

4.1.4 Movimento das Partículas

MONAGHAN (1989) utilizou uma técnica conhecida como XSPH (*eXtend Smoothed Particle Hydrodynamics*) nos escoamentos envolvendo superfícies livres com altas velocidades, de modo a mantê-las ordenadas e também para corrigir uma possível interpenetração entre as partículas. O XSPH consiste em calcular uma média, ponderada pela função núcleo, das velocidades de cada partícula através desse valor médio multiplicado por um parâmetro constante $\epsilon \in [0, 1]$.

Assim, as partículas são movidas usando a variante XSPH para MONAGHAN (1989)

$$\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \mathbf{v}_i + \epsilon \sum_j \frac{m_j}{\rho_{ij}} \mathbf{v}_{ij} W_{ij}, \quad (4.6)$$

onde $\epsilon = 0.5$, $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i$ e $\rho_{ij} = (\rho_i + \rho_j) / 2$.

4.1.5 Passo no Tempo

Métodos de integração numérica são usados para a atualização das propriedades das partículas no tempo (posição, velocidade entre outras). Neste trabalho emprega-se o método predictor-corrector que está detalhado em Crespo (2008).

4.1.6 Condições de Borda

As condições de contorno não aparecem de maneira natural no formalismo do SPH. Quando uma partícula se aproxima de uma fronteira sólida, somente as partículas localizadas dentro do sistema intervêm sem qualquer interação com o lado de fora. Essa

contribuição pode gerar efeitos irreais, devido à natureza diferente das variáveis a serem resolvidas, uma vez que algumas, como a velocidade, tendem a zero quando se aproximam das fronteiras, enquanto outras, como a densidade, não. As diferentes soluções para evitar problemas de contorno consistem na criação de várias partículas virtuais que caracterizam os limites do sistema. As condições de contorno que podem ser aplicadas ao método SPH são classificadas como: geométricas, repulsivas, dinâmicas e semi-analíticas (FILHO, 2014).

Neste trabalho, foram utilizadas condições de contorno do tipo dinâmicas. Partículas de contorno com essa característica verificam as mesmas equações de continuidade e de estado que as partículas fluidas, mas sua posição permanece inalterada ou se movimentam de acordo com alguma função imposta como simuladores de ondas ou movimento de comportas. Uma vantagem interessante dessas partículas é sua simplicidade computacional, uma vez que elas podem ser calculadas dentro dos mesmos laços como partículas de fluido com uma considerável economia de tempo computacional. Essas partículas foram apresentadas primeiramente em (DALRYMPLE; KNIO, 2001) e utilizadas para estudos de ondas que quebram em um convés plano (CRESPO, 2008).

Devido à geometria particular do *Wet-Bed* duas condições de contorno diferentes devem ser consideradas: partículas fixas no contorno e partículas no portão. Todas elas são tratadas como partículas dinâmicas (DALRYMPLE; KNIO, 2001), (CRESPO; GOMES-GESTEIRA; DALRYMPLE, 2007).

Para imitar o contorno em formato de “caixa” retangular onde se dá a simulação, duas linhas de partículas fixas são inseridas na direção horizontal dx e uma linha de partículas fixas na direção vertical dz , formando uma grade escalonada com $dx = dz = 0,005\text{ m}$ e velocidade inicial zero. Sua posição e sua velocidade permanecem inalteradas durante um experimento numérico.

As partículas do portão são inicialmente ($t = 0$) colocadas numa fila com espaçamento $(dx/2, dz/2)$ para prevenir a penetração das partículas do fluido que estão “dentro” dos contornos, (figura 4.1). A velocidade e a posição dessas partículas são impostas externamente para imitar o movimento experimental do portão, ou seja, $\mathbf{v}_x = 0,0\text{ m/s}$ e $\mathbf{v}_z = a\text{ m/s}$, onde t é o tempo e a a velocidade de abertura do portão. Serão feitos alguns experimentos numéricos para verificar a influencia da velocidade do portão nas simulações.

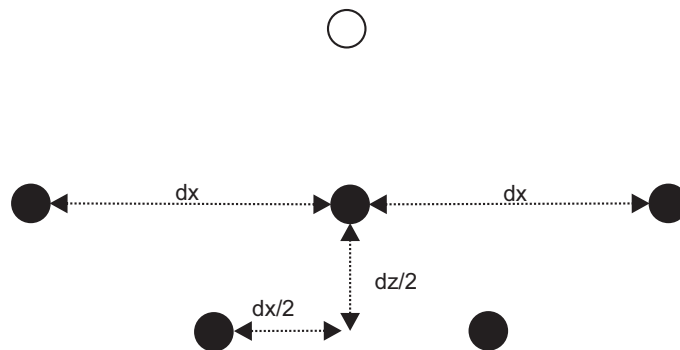


Figura 4.1: Esboço da interação entre uma partícula de fluido (círculo vazio) e um conjunto de partículas de contorno (círculos inteiros). As partículas de limite são colocadas de maneira escalonada.

4.1.7 Núcleo de Suavização

A definição da função núcleo não é única pois depende, principalmente, da experiência dos diferentes pesquisadores (MONAGHAN, 1992), (LIU; LIU, 2003). Seguindo as restrições matemáticas descritas na Seção (3.2.1).

$$W_{ij} = \frac{1}{\pi h^3} \begin{cases} 1 - \frac{3}{2}q^2 + \frac{3}{4}q^3 & \text{se } 0 \leq q < 1 \\ \frac{1}{4}(2 - q)^3 & \text{se } 1 \leq q \leq 2 \\ 0 & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (4.7)$$

onde $q = r/h$; r é a distância entre as partículas i e j ; e h é o comprimento de suavização em SPH e uma medida do suporte compacto. Outros núcleos, como os descritos em Liu e Liu (2003), podem ser usados com resultados semelhantes.

4.1.8 Filtro de Shepard

Enquanto a dinâmica das simulações de SPH é geralmente realista, o campo de pressão das partículas exibe grandes oscilações. Esforços para superar este problema se concentraram em várias abordagens, incluindo a correção do núcleo (FILHO, 2014). Um dos mais simples e computacionalmente menos penosos é realizar um filtro sobre a densidade das partículas e reatribuir uma densidade a cada partícula (CRESPO, 2008).

Se a partícula em consideração i estiver próxima de uma camada limite ou da superfície da água, a função núcleo W sofre a falta de partículas, e uma função núcleo \tilde{W} corrigida deve ser considerada. Assim, a densidade das partículas pode ser reinicializada. O procedimento a seguir é aplicado a cada 30 etapas de tempo, como sugerido por Crespo (2008)

$$\bar{\rho}_i = \sum_j \rho_j \tilde{W}_{ij} \frac{m_j}{\rho_j} = \sum_j m_j \tilde{W}_{ij}, \quad (4.8)$$

onde o núcleo foi corrigido usando uma correção de ordem zero

$$\tilde{W}_{ij} = \frac{W_{ij} \frac{m_j}{\rho_j}}{\sum_j W_{ij} \frac{m_j}{\rho_j}}. \quad (4.9)$$

Para mais detalhes a respeito do filtro de Shepard consulte Filho (2014).

4.2 Teste Numéricos Usando o Simulador SPHysics

Para simular o problema de quebra de barragem em leito úmido utilizou-se da código SPHysics 2D (duas dimensões x e z) versão v2.2.1. SPHysics é uma plataforma de códigos de Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas (SPH) inspirada na formulação de Monaghan (1992) e desenvolvida em conjunto por pesquisadores das Universidades Johns Hopkins (EUA), Vigo (Espanha), Manchester (Reino Unido) e de Roma La Sapienza (Itália).

Esta plataforma foi criada ao longo de vários anos, principalmente para estudar fenômenos de escoamento de superfície livre onde os métodos Eulerianos podem ser difíceis de serem aplicados, como ondas e impacto de quebras de barragens em estruturas marítimas. Pode ser acessado de forma livre em <https://wiki.manchester.ac.uk/sphysics/index.php/SPHYSICS_Home_Page>. Além do modelo apresentado neste trabalho, a versão do SPHysics 2D é capaz de simular os seguintes modelos: ondas sobre um leito inclinado que imitam uma praia; corpos flutuantes em ondas; ondas em praias com obstáculos em formato de cunha e trapézio.

4.2.1 Descrição do Modelo

A água é inicialmente armazenada em um tanque e liberada através de um portão para uma canal retangular pré-preenchido. A geometria são ilustrados pela Figura 4.2. No trabalho experimental de Janosi, Jan e Szabo (2004) várias opções de profundidades de campos e canais foram considerados. Neste trabalho, consideramos apenas uma combinação de profundidade do tanque e canal.

Estamos interessados em observar o comportamento do fluido nos primeiros passos de tempo, onde ocorre interação inicial entre os dois fluidos. Todas as partículas do problema são consideradas partículas de água, no entanto foi inserida uma variação nas cores para tornar a observação mais fácil. As partículas em vermelho representam o contorno, as pretas o portão, as azuis a água no tanque e as verdes a água no canal.

Descreve-se alguns teste comparativos nas próximas seções.

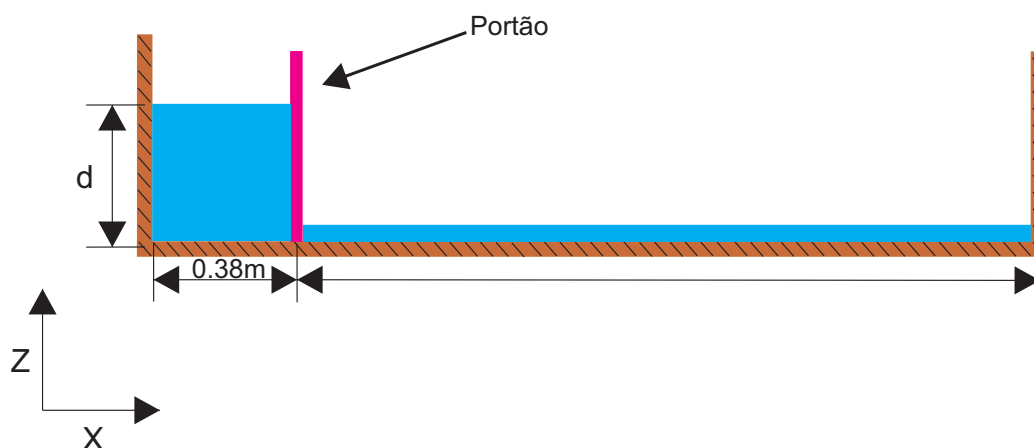


Figura 4.2: Geometria para o caso de teste de quebra de barragem com leito úmido

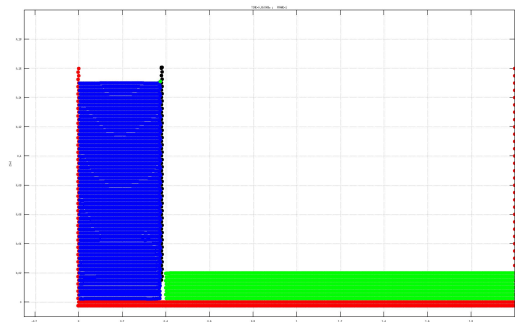
4.2.2 Comparação entre Teste 1 e Teste 2

Inserimos os seguintes dados:

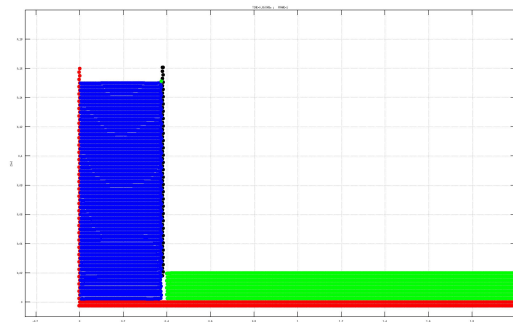
Entre as Tabelas 4.1 e 4.2 há apenas a mudança na velocidade inicial do portão, no passo de tempo $t = 0,160150$ s, pode ser observado nas Figuras 4.3 e 4.4 que as partículas do tanque se “desgrudam” de forma mais rápida do portão. Estes testes foram realizados com o objetivo de verificar a influência da velocidade inicial do portão na interação inicial entre o fluido do canal e o fluido do tanque.

4.2.3 Comparação Teste 1 e Teste 3

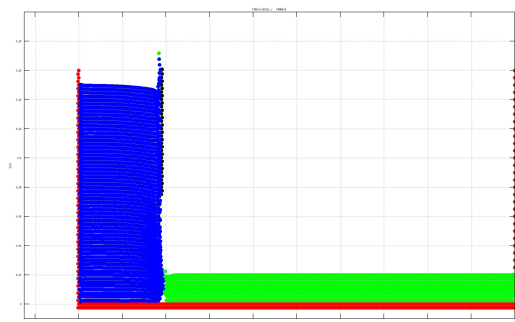
Aqui compara-se as Tabelas 4.3 e 4.4 novamente somente alterando a velocidade do portão. Observa-se pelas Figuras 4.5 e 4.6 que há apenas uma aderência das partículas ao portão quando este é retirado de forma mais lenta.



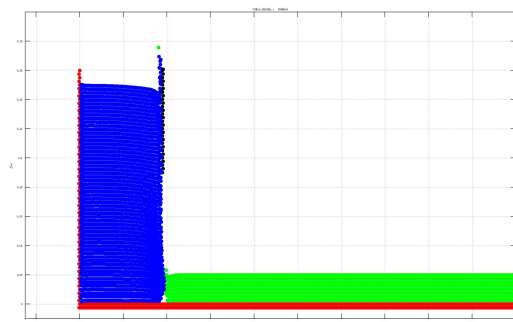
(a) $t = 0,010097$ s



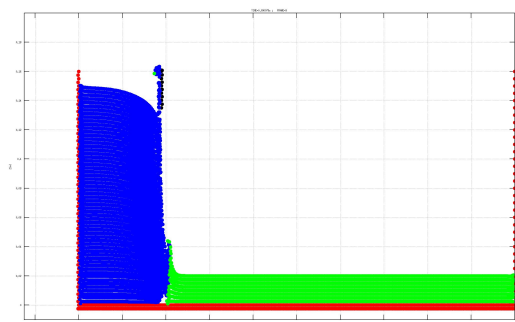
(a) $t = 0,010097$ s



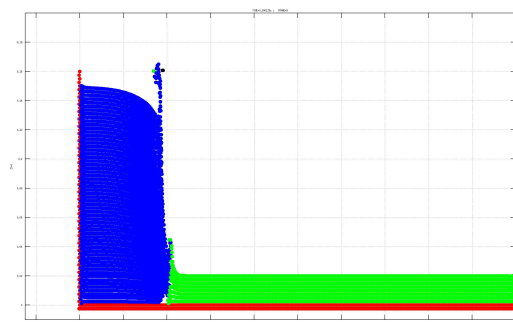
(b) $t = 0,050135$ s



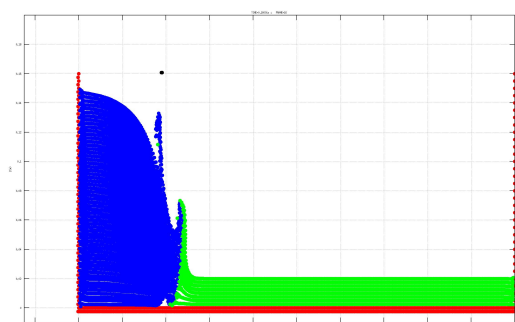
(b) $t = 0,050135$ s



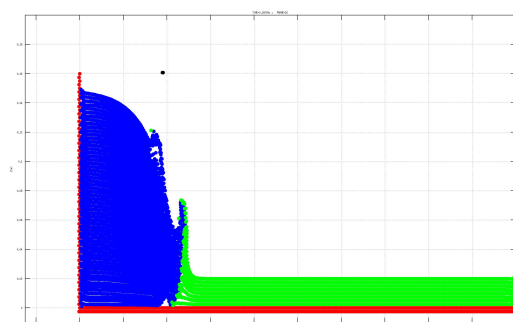
(c) $t = 0,090077$ s



(c) $t = 0,090077$ s



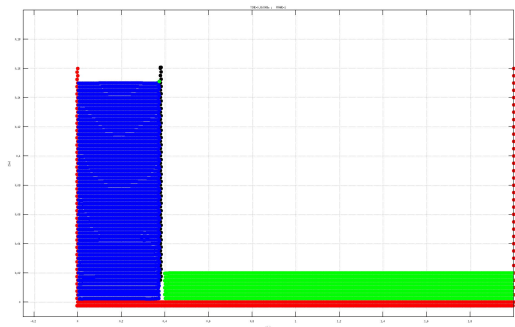
(d) $t = 0,160150$ s



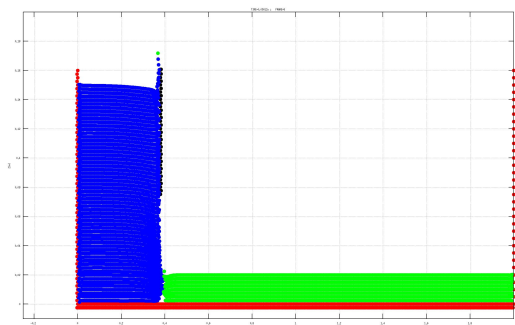
(d) $t = 0,160150$ s

Figura 4.3: Teste 1

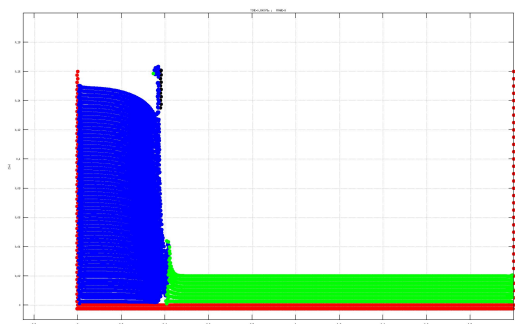
Figura 4.4: Teste 2



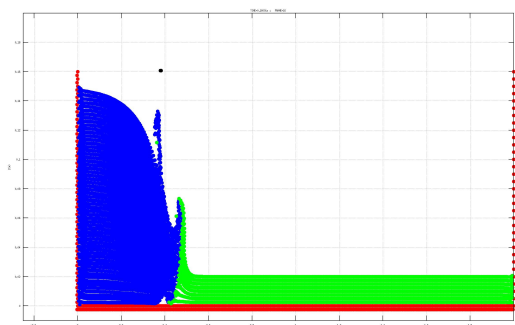
(a) $t = 0,010097$ s



(b) $t = 0,050135$ s

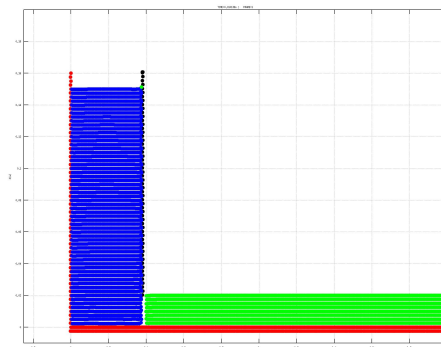


(c) $t = 0,090077$ s

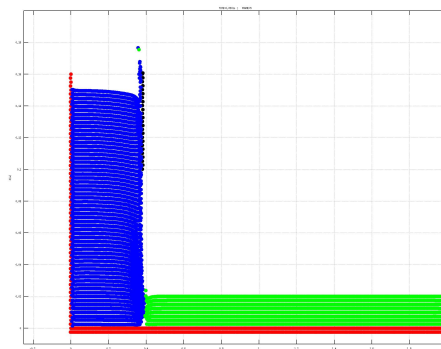


(d) $t = 0,160150$ s

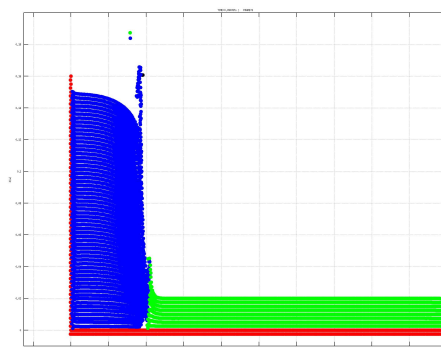
Figura 4.5: Teste 1



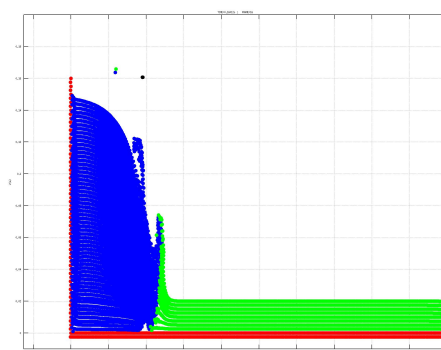
(a) $t = 0,010097$ s



(b) $t = 0,050135$ s



(c) $t = 0,090077$ s



(d) $t = 0,160150$ s

Figura 4.6: Teste 3

Descrição	Dados
Profundidade do tanque	0,16m
Profundidade do canal	0,018m
Comprimento do tanque	0,38m
Comprimento do canal	1,62m
Densidade inicial ρ_0	1000 kg/m ³
Filtro de Shepard	Não
Viscosidade Artificial	Sim
Velocidade do portão	1.5m/s ²

Tabela 4.1: Teste 1.

Descrição	Dados
Profundidade do tanque	0,16m
Profundidade do canal	0,018m
Comprimento do tanque	0,38m
Comprimento do canal	1,62m
Densidade inicial ρ_0	1000 kg/m ³
Filtro de Shepard	Não
Viscosidade Artificial	Sim
Velocidade do portão	1.8m/s ²

Tabela 4.2: Teste 2.

Descrição	Dados
Profundidade do tanque	0,16m
Profundidade do canal	0,018m
Comprimento do tanque	0,38m
Comprimento do canal	1,62m
Densidade inicial ρ_0	1000 kg/m ³
Filtro de Shepard	Não
Viscosidade Artificial	Sim
Velocidade do portão	1.5m/s ²

Tabela 4.3: Teste 1.

Descrição	Dados
Profundidade do tanque	0,16m
Profundidade do canal	0,018m
Comprimento do tanque	0,38m
Comprimento do canal	1,62m
Densidade inicial ρ_0	1000 kg/m ³
Filtro de Shepard	Não
Viscosidade Artificial	Sim
Velocidade do portão	2.0m/s ²

Tabela 4.4: Teste 3.

4.2.4 Comparação Entre o Teste 1 e o Teste 4

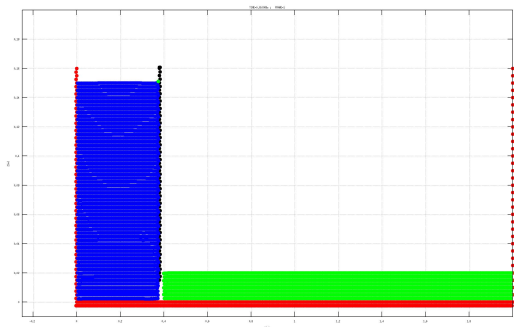
Descrição	Dados
Profundidade do tanque	0,16m
Profundidade do canal	0,018m
Comprimento do tanque	0,38m
Comprimento do canal	1,62m
Densidade inicial ρ_0	1000 kg/m ³
Filtro de Shepard	Não
Viscosidade Artificial	Sim
Velocidade do portão	1.5m/s ²

Tabela 4.5: Teste 1.

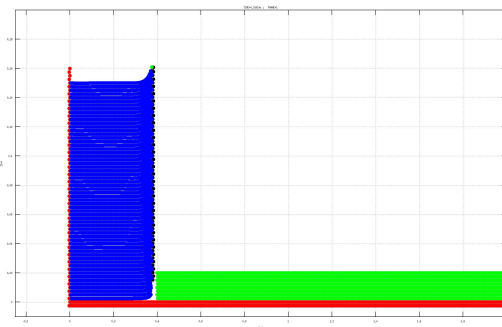
Descrição	Dados
Profundidade do tanque	0,16m
Profundidade do canal	0,018m
Comprimento do tanque	0,38m
Comprimento do canal	1,62m
Densidade inicial ρ_0	1000 kg/m ³
Filtro de Shepard	Não
Viscosidade Artificial	Não
Velocidade do portão	1.5m/s ²

Tabela 4.6: Teste 4

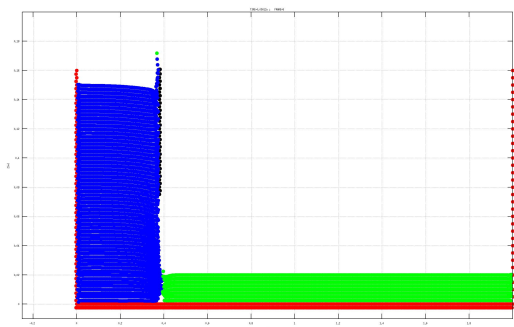
Aqui retiramos a viscosidade artificial, ou seja, $\mu = 0$ na equação (4.2). Como pode ser observado a Figura 4.8 as partículas agem como se aderissem ao portão e saem do sistema, pode-se verificar a importância da viscosidade artificial para manter a simulação numérica.



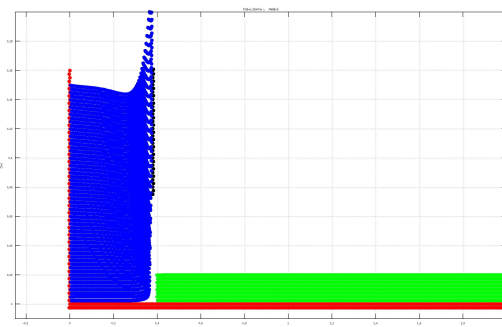
(a) $t = 0,010097$ s



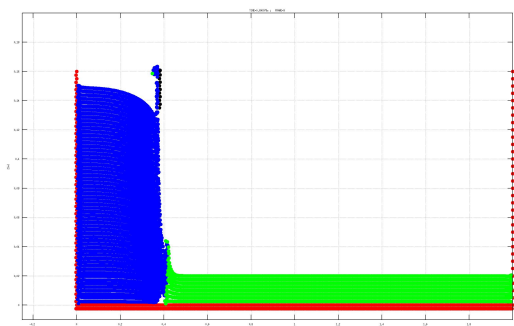
(a) $t = 0,010097$ s



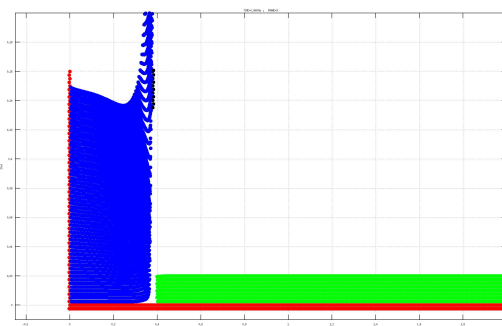
(b) $t = 0,050135$ s



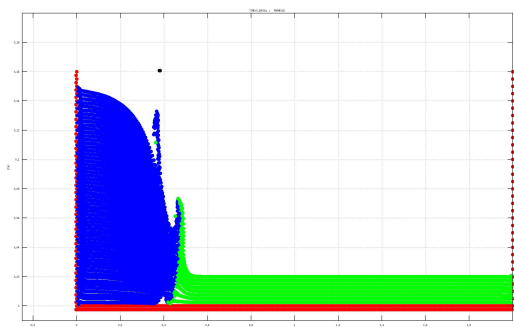
(b) $t = 0,050135$ s



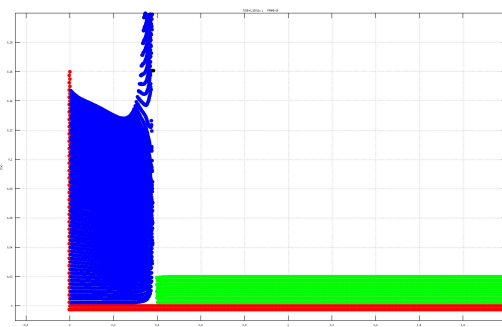
(c) $t = 0,090077$ s



(c) $t = 0,090077$ s



(d) $t = 0,160150$ s



(d) $t = 0,160150$ s

Figura 4.7: Teste 1

Figura 4.8: Teste 4

4.2.5 Comparação Entre o Teste 1 e Teste com Filtro de Shepard

Descrição	Dados
Profundidade do tanque	0,16m
Profundidade do canal	0,018m
Comprimento do tanque	0,38m
Comprimento do canal	1,62m
Densidade inicial ρ_0	1000 kg/m ³
Filtro de Shepard	Não
Viscosidade Artificial	Sim
Velocidade do portão	1.5m/s ²

Tabela 4.7: Teste 1.

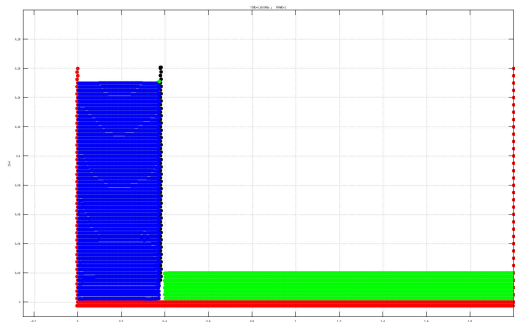
Descrição	Dados
Profundidade do tanque	0,16m
Profundidade do canal	0,018m
Comprimento do tanque	0,38m
Comprimento do canal	1,62m
Densidade inicial ρ_0	1000 kg/m ³
Filtro de Shepard	Sim
Viscosidade Artificial	Sim
Velocidade do portão	1.5m/s ²

Tabela 4.8: Teste 4

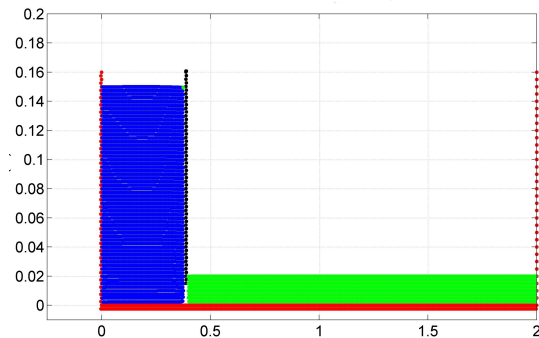
No último teste, acrescenta-se o filtro de Shepard à simulação, pode-se observar pela Figura 4.10 que as partículas não mais se aderem ao portão, o que condiz melhor com o problema real.

4.2.6 Algumas Observações

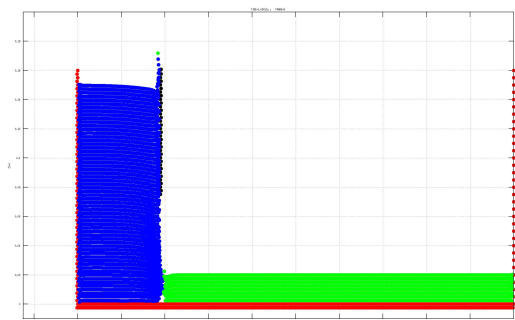
O SPH foi capaz de reproduzir a interação entre a interface do fluido no tanque e o fluido no canal. Assim como no trabalho de Crespo, Gomez e Dalrymple (2008) o modelo não foi capaz de reproduzir a mistura entre a água no tanque e a água no canal como observado nos experimentos Janosi, Jan e Szabo (2004), que pode ser observado na Figura 4.11. Um dos motivos pode ser meramente de registro experimental, visto que os passos iniciais no tempo não foram divulgados pelo autor. No entanto na simulação para o Teste 1 para um passo no tempo maior, pode ser visto na Figura 4.12 que essa mistura não ocorre, então supõe-se que o modelo deve ser ajustado ou modificado para que essa mistura entre os fluidos possa ser capturada.



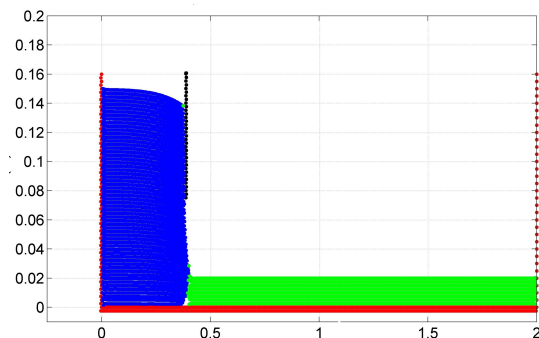
(a) $t = 0,010097$ s



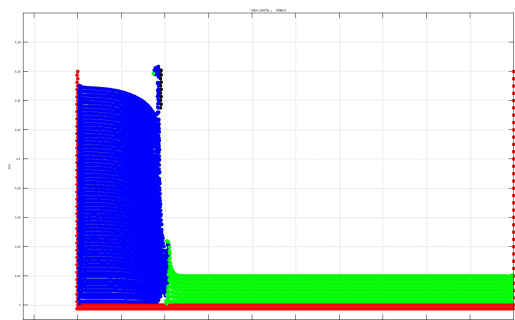
(a) $t = 0,010097$ s



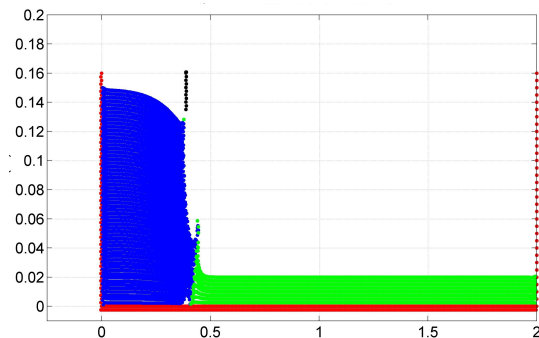
(b) $t = 0,050135$ s



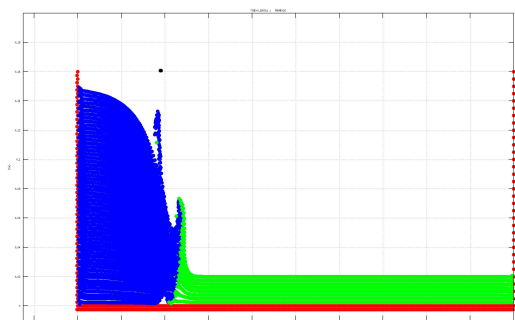
(b) $t = 0,050135$ s



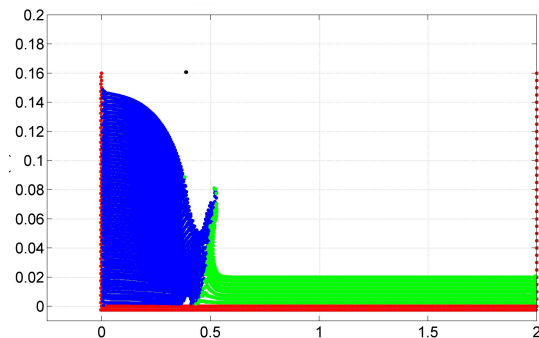
(c) $t = 0,090077$ s



(c) $t = 0,090077$ s



(d) $t = 0,160150$ s



(d) $t = 0,160150$ s

Figura 4.9: Teste 1

Figura 4.10: Filtro de Shepard

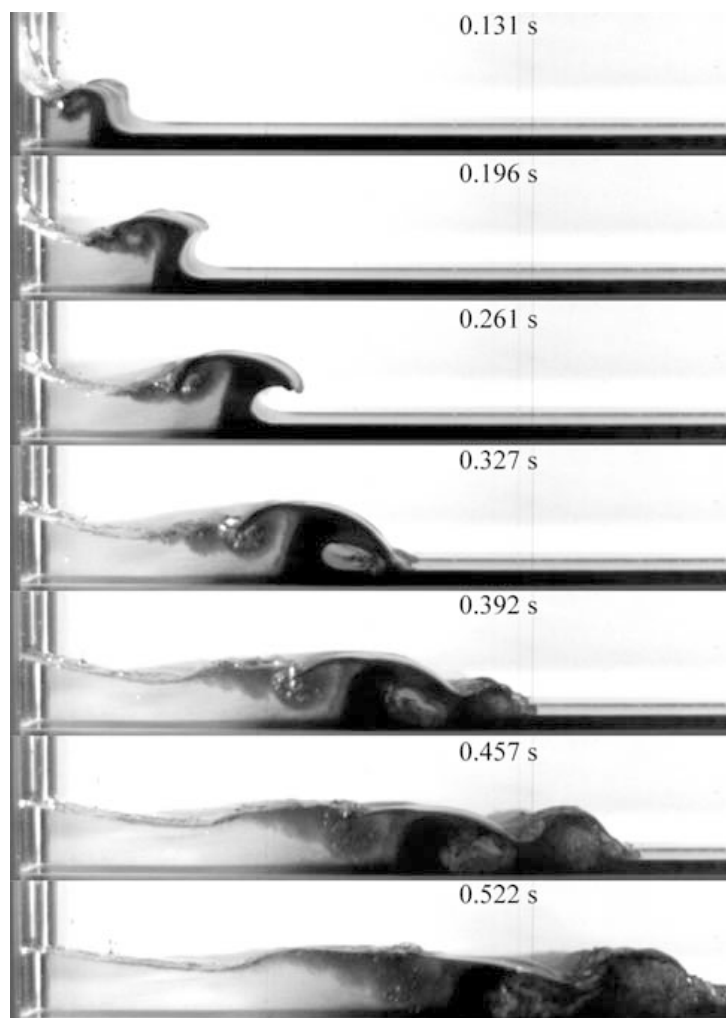
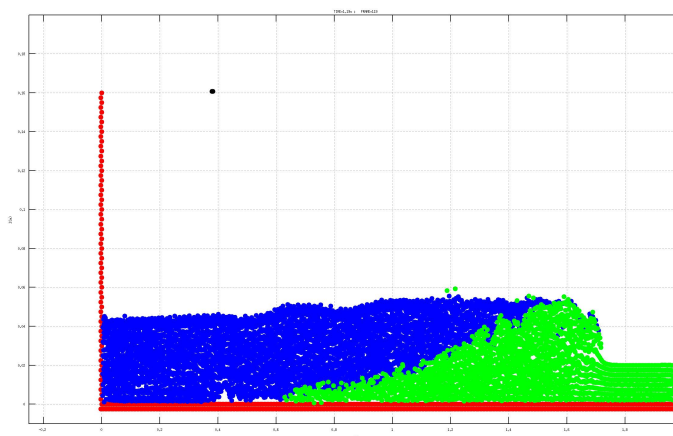


Figura 4.11: Teste experimentais.

Figura 4.12: Teste 1 no tempo $t = 1.16$ s.

Conclusões

Neste trabalho foi apresentado um método baseado em partículas, livre de malha, denominado *Smoothed Hydrodynamics Particle*. A partir do estudo matemático do método foram discretizadas as equações de Navier-Stokes que descrevem o movimento dos fluidos aplicado a um modelo *Dam Break in Wet-Bed*.

Utilizou-se para as simulações numéricas o código SPHYSICS2D , destinado a simulações numéricas de escoamentos de fluidos newtonianos quase-compressíveis aplicando o método SPH.

Foram feitas algumas comparações geométricas a respeito do comportamento do fluido com variação parâmetros como velocidade de portão, viscosidade artificial e utilização do filtro de Shepard. Observou-se que a combinação de inclusão de viscosidade artificial e filtro de Shepard aproxima melhor o comportamento real do fluido do ponto de vista geométrico.

Como trabalhos futuros sugere-se a mudança nas condições de contorno dinâmicas para condições de contorno físicas descritas por Filho (2017). Este tipo de fronteira é mais fiel a um modelo real de canal, devido as condições de contorno serem dadas por planos e não por partículas de fluido. Estas fronteira já foram aplicadas ao *Dam-Break* em leito seco apresentando bons resultados.

Outra possibilidade seria inserir um leito seco móvel e analisar o arrasto do leito como descrito por Ran et al. (2015). Este seria um primeiro passo para o estudo de erosões hidráulicas.

Referências

- CORDARO, P. D.; KAWANO, A. *ODelta de Dirac: Uma Introdução a Teoria das Distribuições para a Engenharia*. 1. ed. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2002. 70 p.
- CRESPO, A.; GOMES-GESTEIRA, M.; DALRYMPLE, R. A. Boundary Conditions Generated by Dynamic Particles in SPH Methods. *Tech Science Press*, n. 5, p. 173–184, 2007.
- CRESPO, A. J. C. *Application oh the Smoothed Hydrodynamics Particle Model SPHysics to Free Surface Hydrodynamics*. Dissertação (Tese de Doutorado) — Universidade de Vigo, 2008.
- CRESPO, A. J. C.; GOMEZ, M.; DALRYMPLE. Modeling Dam Break Behavior Over a Wet Bed by a SPH Technique. *Ocean Engineering*, n. 137, p. 313–320, 2008.
- DALRYMPLE, R.; KNIO, O. Smoothed Hydrodynamics Particle Modelling of Water Waves. *Coastal Dynamics*, n. 1, p. 779–787, 2001.
- FILHO, C. A. D. F. *Estudo da Fase Gravitacional-Inercial do Espalhamento de Óleo em Mar Calmo Empregando o Método Lagrangiano de Partículas Smoothed Particle Hydrodynamics*. Dissertação (Tese de Doutorado) — Universidade Federal do Espírito Santo, 2014.
- FILHO, C. A. D. F. An Algorithmic Implementation of Physical Reflective Boundary Conditions in Particle Methods: Collision Detection and Desponse. *Physics of Fluids*, n. 29, p. 219–229, 2017.
- FORTUNA, A. O. *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos*. 2. ed. São Paulo: Editora Universidade de São Paulo, 2012. 552 p.
- FULK, D. *A Numerical Analysis of Smoothed Particle Hydrodynamics*. Dissertação (Tese de Doutorado) — Air Force Institute of Technology, 1996.
- GINGOLD, J.; MONAGHAN, J. Smoothed Particle Hydrodynamics: Theory and Application to Non-Spherical Stars. *Mandinghey Road Cambridge*, n. 181, p. 375–389, 1997.
- HIBBELE, R. C. *Mecânica dos Fluidos*. 1. ed. [S.l.]: Pearson, 2016. 518 p.
- JANOSI, I. M.; JAN, D.; SZABO, G. Turbulent Drag Reduction in Dam-Break Flows. *Experiments in Fluids*, n. 37, p. 219–229, 2004.
- JOHNSON, G. R.; STRYK, R.; BEISSEL, S. SPH for High Velocity Impact Computations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, n. 139, p. 347–373, 1985.

- JONSSON, P. et al. Modelling Dam Break Evolution over a Wet Bed with Smoothed Particle Hydrodynamics: A Parameter Study. *Scientific Research Publishing Inc*, n. 7, p. 248–260, 2015.
- KELAGER, M. *Lagrangian Fluid Dynamics Using Smoothed Particle Hydrodynamics*. 1. ed. Copenhagen: Universiade de Copenhagen, 2006.
- KRISTOF, P. et al. Hydraulic Erosion Using Smoothed Particle Hydrodynamics. *Eurographics Association and Blackwell Publishing Ltd*, n. 28, 2009.
- LIU, G.; LIU, M.; LAM, K. Y. Constructing Smoothing Functions in Smoothed Particle Hydrodynamics with Applications. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, n. 155, p. 263–284, 2002.
- LIU, M.; LIU, G. *Smoothed Particle Hydrodynamics: a Meshfree Particle Method*. 1. ed. Singapore: Wold Scientific Publishing, 2003. 262 p.
- LOSASSO, F.; GIBOU, F.; FEDKIN, R. Simulating Water and Smoke with an Octree Data Structure. *In proceedings of SIGGRAPH*, p. 457–462, 2004.
- LUCY, L. A Numerical Approach to the Testing of the Fission Hypothesis. *Astromical Journal*, v. 82, p. 1013–1024, 1977.
- MANENTI, S. et al. SPH Simulation of Sediment Flushing Induced by a Rapid Water Flow. *Journal of Hydraulic Engineering*, n. 238, p. 272–284, 2012.
- MARRONE, S. An Accourat SPH Modeling of Viscous Flows Around Bodies at Low and Moderate Reynolds Numbers. *Journal of Computational Physics*, n. 245, p. 456–475, 2013.
- MONAGHAN, J. Smoothed Particle Hydrodynamics. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, v. 30, n. 1, p. 543–574, 1992.
- MONAGHAN, J. Smoothed Particle Hydrodynamics. *Reports on Progress In Physics*, Institute of Physics, v. 68, p. 1703–1759, 2005.
- MONAGHAN, J.; KOCHARYAN, A. SPH Simulation of Multi-Phase Flow. *Computer Physics Communications*, n. 285, p. 225–235, 1995.
- MONAGHAN, J.; LATTANZIO, J. A Refined Particle Method for Astrophysical Problems. *Astronomy and Astrophysics*, n. 149, p. 135–143, 1985.
- MONAGHAN, J. J. On the Problem of Penetration in Particle Methods. *Journal of Computational Physics*, n. 82, p. 1–15, 1989.
- MONAGHAN, J. J. Simulation Free Surface Flows with SPH. *Journal of Computational Physics*, n. 110, p. 399–406, 1994.
- MORRIS, J. P. *Analysis of Smoothed Particle Hydrodynamics with Applications*. Dissertação (Tese de Doutorado) — Monash University, 1996.
- RAN, Q. et al. Incompressible SPH Scour Model for Movable Bed Dam Break Flows. *Advances in Water Resources*, n. 82, p. 39–50, 2015.
- STAM, J. Stable Fluids. ACM Press/Addison-Wesley Publishing Co., New York, NY, USA, p. 121–128, 1999.

TAKATA, A. S. *Aspéctos Teóricos-Numéricos dos Métdos SPH e MPS*. Dissertação (Dissertação de Mestrado) — Unesp Presidente Prudente, 2015.

VERLET, L. Computer Experiments on Classical Fluids: Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules. *Physics Review*, American Physical Society, v. 159, p. 98–103, 1967.

VLIET, T. V.; LYKLEMA, H. Rheology. *Fundamentals of Interface and Colloid Science*, v. 4, n. 88, p. 1 – 6, 2007.

XIONG, Q.; DENG, L.; WEI, W. SPH Method for Two-Fluid Modeling of Particle Fluidfluidization. *Chemical Engineering Science*, n. 66, 2011.

ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R. L. *The Finite Element Method*. 5th ed. ed. [S.l.]: Butterworth-Heinemann, 2000. Volume 3.

Definições e Teoremas Importantes

Observação 2 *Algumas observações sobre funções pares e ímpares:*

1. Se $W(\mathbf{x})$ é par, então $W(-\mathbf{x}) = W(\mathbf{x})$. Se $W(\mathbf{x})$ é ímpar, então $W(-\mathbf{x}) = -W(\mathbf{x})$.
2. O produto de duas funções com paridade distinta é uma função ímpar.
3. Escolhendo W como sendo uma função par, então $(\mathbf{x}' - \mathbf{x})W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)$ é ímpar se, e somente se, $(\mathbf{x}' - \mathbf{x})$ é ímpar.

Teorema 1 (Integrais de Funções Simétricas) *Suponha que f é contínua em $[-a, a]$*

a) se f é par, então $\int_0^a f(\mathbf{x})d\mathbf{x} = 2 \int_0^a f(\mathbf{x})d\mathbf{x}$;

b) se f é ímpar $\int_{-a}^a f(\mathbf{x})d\mathbf{x} = 0$.

Definição 1 (Função vetorial) *Uma função vetorial de \mathbb{R}^n em \mathbb{R}^m*

$$f : \quad \Omega \subset \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m$$

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) \quad \longmapsto \quad \mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_m) = (f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x)) \quad (\text{A.1})$$

a cada ponto $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ em $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ com n coordenadas associa o ponto $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_m)$.

Podemos pensar que uma função vetorial dada em (1) é uma maneira de agrupar ou representar m **funções escalares** definidas em Ω , ou seja,

$$\left\{ \begin{array}{l} f_1 : \quad \Omega \subset \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m \\ \quad \mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) \quad \longmapsto \quad y_1 = f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \\ f_2 : \quad \Omega \subset \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m \\ \quad \mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) \quad \longmapsto \quad y_2 = f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \\ \vdots \\ f_m : \quad \Omega \subset \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m \\ \quad \mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) \quad \longmapsto \quad y_m = f_m(x_1, x_2, \dots, x_n). \end{array} \right.$$

Definição 2 (Vetor Gradiente) Considere a função escalar $f : \Omega \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ de classe C^1 e \mathbf{x} um ponto do domínio de Ω de f . O vetor gradiente de f no ponto \mathbf{x} é o vetor

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right). \quad (\text{A.2})$$

Definição 3 (Campo Gradiente) O campo gradiente de $f : \Omega \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$

$$\begin{aligned} \nabla f : \quad \Omega \subset \mathbb{R}^n &\rightarrow \mathbb{R}^m \\ \mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) &\mapsto \nabla f(\mathbf{x}) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Definição 4 A bola aberta de centro num ponto $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$ e raio $r > 0$ é o conjunto dos pontos $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ cuja distância ao ponto \mathbf{a} é menor do que r . Usando a notação $B(\mathbf{a}; r)$ para indicar esse conjunto. Assim

$$B(\mathbf{a}; r) = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n; |\mathbf{x} - \mathbf{a}| < r \}.$$

Definição 5 (Divergente) Seja F um campo vetorial numa bola aberta $B \in \mathbb{R}^3$.

$$\begin{aligned} F : \quad B \subset \mathbb{R}^3 &\rightarrow \mathbb{R}^3 \\ (x_1, x_2, x_3) &\mapsto F(x_1, x_2, x_3) = (M(x_1, x_2, x_3), N(x_1, x_2, x_3), R(x_1, x_2, x_3)). \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Então o divergente de F denotado por $\text{div}(f) = \nabla \cdot F$ será definido por

$$\nabla \cdot F(x_1, x_2, x_3) = \frac{\partial M}{\partial x_1} + \frac{\partial N}{\partial x_2} + \frac{\partial R}{\partial x_3}$$

se as derivadas parciais existirem.

Observação 3 Fique atento:

1. O gradiente só pode ser aplicado a uma função escalar, pois está definido $f : \Omega \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$.
2. O divergente só pode ser aplicado a uma função vetorial, pois está definido em $f : \Omega \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$.
3. Cuidado para não confundir ∇f (gradiente) com $\nabla \cdot f$ (divergente).

Definição 6 (Laplaciano) O operador Laplaciano, denotado por ∇^2 , no espaço euclidiano n -dimensional é definido como o divergente do gradiente, ou seja

$$\nabla^2 \phi = \nabla \cdot (\nabla \phi) = \text{div}(\text{grad}(\phi)).$$

Equivalentemente, o Laplaciano é a soma de todas de todas as derivadas parciais de segunda ordem. Assim, seja $\phi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, assim o Laplaciano é definido como

$$\nabla^2 \phi = \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i^2}.$$

Considerando o caso particular em \mathbb{R}^3 definido em (5), onde as componentes são denotadas por (x_1, x_2, x_3) , temos

$$\nabla^2\phi = \nabla \cdot (\nabla\phi) = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}i + \frac{\partial}{\partial x_2}j + \frac{\partial}{\partial x_3}k \right) \cdot \left(\frac{\partial\phi}{\partial x_1}, \frac{\partial\phi}{\partial x_2}, \frac{\partial\phi}{\partial x_3} \right).$$

Portanto

$$\nabla^2\phi = \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial x_3^2} \right).$$

Proposição 1 *Propriedades do operador Laplaciano:*

1. O Laplaciano é um operador linear

$$\nabla^2(\alpha f(\mathbf{x}) + \beta g(\mathbf{x})) = \alpha \nabla^2 f(\mathbf{x}) + \beta \nabla^2 g(\mathbf{x}),$$

onde α e β são escalares.

2. A regra do produto

$$\nabla^2(fg) = (\nabla^2 f)g + 2(\nabla f)(\nabla g) + f(\nabla^2 g).$$

Proposição 2 *Sejam u e v dois vetores do \mathbb{R}^n e W uma função escalar em \mathbb{R}^n , então*

$$\nabla_{\mathbf{x}}W(\mathbf{x} - \mathbf{u}) = -\nabla_{\mathbf{u}}W(\mathbf{x} - \mathbf{u}).$$

De fato, aplicando a propriedade de simetria $W(\mathbf{x} - \mathbf{u}) = |\mathbf{x} - \mathbf{u}|$

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{u}}W(\mathbf{x} - \mathbf{u}) &= |\mathbf{x} - \mathbf{u}| \\ &= \sqrt{(\mathbf{x} - \mathbf{u})(\mathbf{x} - \mathbf{u})} \\ &= \sqrt{\mathbf{x}^2 - 2\mathbf{u}\mathbf{x} + \mathbf{u}^2} \\ &= (\mathbf{x}^2 - 2\mathbf{u}\mathbf{x} + \mathbf{u}^2)^{\frac{1}{2}} \\ &= \frac{1}{2}(\mathbf{x}^2 - 2\mathbf{u}\mathbf{x} + \mathbf{u}^2)^{-\frac{1}{2}}(-2\mathbf{x} + 2\mathbf{u}) \\ &= \frac{\mathbf{u} - \mathbf{x}}{\sqrt{\mathbf{x}^2 - 2\mathbf{u}\mathbf{x} + \mathbf{u}^2}}, \end{aligned} \tag{A.5}$$

e

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{x}}W(\mathbf{x} - \mathbf{u}) &= |\mathbf{x} - \mathbf{u}| \\ &= \sqrt{(\mathbf{x} - \mathbf{u})(\mathbf{x} - \mathbf{u})} \\ &= \sqrt{\mathbf{x}^2 - 2\mathbf{u}\mathbf{x} + \mathbf{u}^2} \\ &= (\mathbf{x}^2 - 2\mathbf{u}\mathbf{x} + \mathbf{u}^2)^{\frac{1}{2}} \\ &= \frac{1}{2}(\mathbf{x}^2 - 2\mathbf{u}\mathbf{x} + \mathbf{u}^2)^{-\frac{1}{2}}(2\mathbf{x} - 2\mathbf{u}) \\ &= \frac{\mathbf{x} - \mathbf{u}}{\sqrt{\mathbf{x}^2 - 2\mathbf{u}\mathbf{x} + \mathbf{u}^2}}. \end{aligned} \tag{A.6}$$

Portanto $\nabla_{\mathbf{x}}W(\mathbf{x} - \mathbf{u}) = -\nabla_{\mathbf{u}}W(\mathbf{x} - \mathbf{u})$.

Teorema 2 (Derivada Direcional) *Sejam $f : \Omega \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de classe C^1 definida em um subconjunto Ω de \mathbb{R}^n , \mathbf{x} um ponto interior de Ω e $\mathbf{v} = \mathbf{v}(v_1, v_2, \dots, v_n)$ um vetor do \mathbb{R}^n . Então*

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}}(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{v} = \frac{\partial f}{\partial x_1}v_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2}v_2 + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_n}v_n,$$

isto é a derivada direcional de f em relação a \mathbf{x} na direção \mathbf{v} , que pode ser descrita como o produto interno entre o vetor gradiente $\nabla f(\mathbf{x})$ e o vetor \mathbf{v} .

Teorema 3 (Divergência de Gauss) *Sejam M , N e R funções de três variáveis x_1 , x_2 e x_3 tais que suas derivadas parciais de primeira ordem são contínuas numa bola aberta $B \in \mathbb{R}^3$. Seja S uma superfície seccionalmente suave contida em B e Ω a região em \mathbb{R}^3 limitada por B . Se $F(x_1, x_2, x_3) = M(x_1, x_2, x_3)i + N(x_1, x_2, x_3)j + R(x_1, x_2, x_3)k$ e $\mathbf{n} = \cos \alpha i + \cos \beta j + \cos \varphi k$ for um vetor normal exterior unitário de S , então*

$$\iint_S F \mathbf{n} ds = \iiint_{\Omega} \operatorname{div} F dv.$$