



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
"JÚLIO DE MESQUITA FILHO"
Faculdade de Ciências e Tecnologia
Câmpus de Presidente Prudente

Análise de Aspectos Fundamentais de Métodos de Partículas

Luciano Pereira da Silva

Orientador: Prof. Dr. Messias Meneguette Junior

Programa: Matemática Aplicada e Computacional

Presidente Prudente,
Abril, 2017

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente

Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional

Análise de Aspectos Fundamentais de Métodos de Partículas

Luciano Pereira da Silva

Orientador: Prof. Dr. Messias Meneguette Junior

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Matemática Aplicada e Computacional da Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho como requisito parcial para obtenção do Título de Mestre em Matemática Aplicada e Computacional.

Presidente Prudente,

Abril, 2017

Dedico esse trabalho à minha querida irmã Elessandra (in memoriam), que em momento algum deixará de viver em meu coração e sempre estará presente em minhas memórias. Não houve um dia sequer em que não lutasse para concluir esse tão sonhado projeto de vida, e todo meu esforço não foi em vão. Esse título é nosso Tata. A saudade permanecerá até o dia de nosso reencontro, te amo.

FICHA CATALOGRÁFICA

S581a Silva, Luciano Pereira da.
Análise de aspectos fundamentais de métodos de partículas / Luciano
Pereira da Silva. - Presidente Prudente : [s.n.], 2017
100 f.

Orientador: Messias Meneguette Junior
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista, Faculdade de
Ciências e Tecnologia
Inclui bibliografia

1. SPH. 2. Desordem das partículas. 3. Equação de Poisson. I.
Meneguette Junior, Messias. II. Universidade Estadual Paulista. Faculdade de
Ciências e Tecnologia. III. Título.

CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

TÍTULO DA DISSERTAÇÃO: Análise de Aspectos Fundamentais de Métodos de Partículas

AUTOR: LUCIANO PEREIRA DA SILVA

ORIENTADOR: MESSIAS MENEGUETTE JUNIOR

Aprovado como parte das exigências para obtenção do Título de Mestre 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. ADRIANA LUIZA DO PRADO

Departamento de Matemática / Universidade Federal do Paraná



Profa. Dra. ANALICE COSTACURTA BRANDI

Departamento de Matemática e Computação / Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente

Presidente Prudente, 10 de abril de 2017

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus, pela força, saúde e misericórdia.

Aos meus pais Julio e Cleunice, que nunca deixaram de me apoiar em todas as minhas decisões e bravamente lutaram para que nada me faltasse durante os estudos.

Aos meus irmãos que cuidaram de meus pais em todo o tempo que estive ausente, especialmente à minha cunhada Luzia.

Aos meus sobrinhos Priscila, Gabriele, Eduardo e Beatriz.

Aos meus avós, Carmelita e Oriosvaldo.

A toda família, em especial ao meu tio Orlando (“tio Nande”), que foi de uma generosidade ímpar, me proporcionando luz em meio a tanta escuridão, me apoiando como um verdadeiro Pai. Te amo tio.

Ao meu amigo e responsável por todo encorajamento, Petrônio Montezuma. Certamente sem ele esse sonho seria muito mais difícil de se tornar realidade.

Aos meus amigos e companheiros de trabalho da UTFPR de Campo Mourão.

Ao meu amigo de graduação Denis Ricardo. Só Deus para retribuir tudo o que ele fez por mim. Você mora em meu coração.

A minha amiga de mestrado Ellen Gervazoni e sua família, nosso contato transcendeu a amizade, você foi minha confidente, um anjo que intercedeu por mim em todos os momentos difíceis.

Ao Prof. Dr. Messias Meneguetti Júnior pela orientação, paciência, cafezinhos, e principalmente por acreditar que eu seria capaz de superar todos os obstáculos que a vida colocou a minha frente.

A todos os professores que tive durante o Mestrado. Em especial a professora Vanessa.

As professoras Cristiane Nespoli e Gilcilene Sanchez, pelo carinho e sensibilidade.

A professora Analice, por todo carinho que sempre teve por mim, e pelas correções dos trabalhos publicados.

Ao conselho, coordenação e amigos do PosMAC.

Aos meus pais Prudentinos, Vlademir e Dora Lina Loma, que durante dois anos foram juntamente com seus filhos e netos, a minha família.

Aos meus amigos e companheiros de lar, Eder José e Victor Rodrigues.

Aos meus grandes amigos: Adriana Kawabata, Pedro Catella, Juliana Marcatto, Marcio Barros, João Eduardo, Monique Lipe, Margarete Betio, Maria Lúcia Aponi e Roberto Cavali por todo carinho compreensão e amor.

As novas amigas: Mírian Vidotto e Katia Barreto por me ajudarem a superar o luto longe de casa e de minha família.

A minha grande amiga/irmã, guerreira, e fonte de inspiração, Sara Coelho da Silva.

A mim, pela coragem, determinação, persistência e muitas horas de estudo.

A CAPES pelo apoio financeiro.

Labor improbus omnia vincit.

*“O futuro tem muitos nomes.
Para os fracos é o inalcançável.
Para os medrosos, o desconhecido.
Para os valentes, a oportunidade.”*
Victor Hugo

Resumo

Atualmente, devido ao grande avanço tecnológico, o uso dos métodos de partículas (Meshfree Particle Methods), vem ganhando espaço nas simulações numéricas de escoamentos. O marco inicial foi o método Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) que se mostrou bastante eficiente para problemas de escoamento compressível, mas nem tanto para escoamento incompressível. Rapidamente surgiram estratégias para problemas incompressíveis, como o Incompressible Smoothed Particle Hydrodynamics (ISPH) e o Moving Particle Semi-Implicit (MPS): em ambos os métodos a pressão é atualizada por uma equação de Poisson. Assim, para se obter uma boa aproximação das equações de Navier-Stokes é necessário resolver bem a equação de Poisson. Os métodos de partículas (MPM) estão sendo usados nas mais diversas áreas e seu desenvolvimento e adequação são objetos de pesquisas no momento. O estudo desta dissertação visa uma análise comparativa dos aspectos teóricos do SPH: abordagem euleriana e lagrangiana; o formalismo, que tem como base a representação integral de uma função; discretização por duas aproximações fundamentais que são da função núcleo e por partículas e as respectivas consistências; tratamento de fronteiras e, também, um estudo detalhado sobre a influência da desordem das partículas, preocupação esta bastante recente na literatura e cujo entendimento não está ainda bem sistematizado. Um estudo comparativo, será efetuado por meio da equação de Poisson, que é objeto principal desta dissertação. A análise será feita inicialmente com as partículas fixas, uniformemente distribuídas e comparadas com distribuições perturbadas sem correção de auto ajuste. Além disso, foram desenvolvidos os códigos em *Matlab*[®] para a geração das soluções numéricas utilizando partículas desordenadas.

Palavras-Chave: *Simulação, Método de partículas, Smoothed Particle Hydrodynamics, Desordem das partículas, Consistência, Equação de Poisson.*

Abstract

Currently, due to technological advances, the use of meshfree particle methods has high importance in flow numerical simulations. The milestone was the Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) method, which proved quite efficient for problems of compressible flow, but less so for incompressible one. Quickly emerged strategies for incompressible problems, such as Incompressible Smoothed Particle Hydrodynamics (ISPH) and Moving Particle Semi-Implicit (MPS): in both methods the pressure is updated by a Poisson equation. Thus, to obtain a good approximation of the Navier-Stokes equations it is necessary to solve the Poisson equation. Meshfree Particle Methods (MPM) are being used in several areas and their development and adaptation are research matter at the moment. This study will provide a solid expertise in MPM, since it seeks a comparative analysis of theoretical aspects of MPM: Eulerian and Lagrangian approaches; formalism of MPMs that is based on integral representation of a function; discretization by two fundamental approximations that are of the kernel and by particles as well as the respective consistencies; boundary treatment and also a detailed study on the influence of particle disorder, a concern that is quite recent in the literature and whose understanding is not yet well systematized. A comparative study will be carried out through the Poisson equation, which is the main object of this dissertation. The analysis will be done initially with the fixed particles, uniformly distributed and compared with disturbed distributions without correction of self-adjustment. In addition, the codes in *Matlab*[®] were developed for the generation of numerical solutions using disordered particles.

Keywords: *Simulation, Meshfree Particle Method, Smoothed Particle Hydrodynamics, Particle Disorder, Consistency, Poisson Equation.*

Lista de Figuras

1.1	Escoamento de partículas com volume fixo.	20
2.1	Domínio de influência sobre uma partícula por meio da função núcleo.	23
2.2	A função núcleo (2.6) e suas duas primeiras derivadas.	26
2.3	A função gaussiana (2.7) e suas duas primeiras derivadas.	27
2.4	A função <i>spline</i> cúbica (2.8) e suas duas primeiras derivadas.	28
2.5	A função <i>spline</i> quártica (2.9) e suas duas primeiras derivadas.	29
2.6	A função <i>spline</i> quártica (2.10) e suas duas primeiras derivadas.	30
2.7	A função núcleo <i>new</i> quártico (2.11) e suas duas primeiras derivadas.	30
2.8	A função duplo cosseno (2.12) proposta por Yang (2014) e suas duas primeiras derivadas.	31
4.1	Distribuição de 225 partículas no domínio com distância uniforme entre elas. . .	39
4.2	Perturbação canônica de partículas com distância irregular, randômica e limitada por um raio R.	40
4.3	Distribuição de 225 partículas perturbadas no domínio.	40
4.4	Comparação entre as partículas uniformemente distribuídas e suas posições após aplicada a perturbação canônica.	41
4.5	Distribuição de 225 partículas de forma caótica no domínio.	41
4.6	Recrutamento de partículas influentes utilizando malha uniforme e distribuição caótica.	42
4.7	Esquema de partículas fantasmas do tipo I e tipo II.	44
4.8	Ampliação do esquema de partículas fantasmas do tipo I e II da Figura (4.7). . .	44
4.9	Esquema de partículas <i>dummy</i>	45
4.10	Esquema de partículas <i>dummy</i> nas quinas (a) externa, e (b) interna.	45
5.1	Representação de uma função núcleo com diferentes distribuições de partículas e truncamento na fronteira. Fonte [24]	51
6.1	Esquema de desordem ou perturbação canônica de partículas com $\Delta x = \Delta y$. . .	54
6.2	Análise da estimativa do erro global de G_0 para campo constante via parâmetro h . . .	58
6.3	Análise da estimativa do erro global de G_+ para campo constante via parâmetro h . . .	59
6.4	Comparação do erro global entre G_0 e G_+ para campo constante via parâmetro h . . .	59
6.5	Comparação da estimativa do erro global entre G_0 e G_+ para campo constante via parâmetro η	59
6.6	Análise do erro global de G_0 para campo linear via parâmetro h	60
6.7	Análise do erro global de G_+ para campo linear via parâmetro h	61
6.8	Análise do erro global de G_- para campo linear via parâmetro h	61
6.9	Comparação da estimativa do erro global entre G_0 , G_+ e G_- para campo linear via parâmetro h	61

6.10	Comparação da estimativa do erro global entre G_0 , G_+ e G_- para campo linear via parâmetro η	62
6.11	Análise da estimativa do erro global de MCG para campo linear via parâmetro h	64
6.12	Análise da estimativa do erro global de MEA para campo linear via parâmetro h	64
6.13	Comparação da estimativa do erro global entre MCG e MEA para campo linear via parâmetro η	64
7.0	Aproximações para a função linear $f(x, y) = x + y$	75
7.0	Aproximações para a função linear $f(x, y) = x + y$ com $\eta = 0.0001$	76
7.0	Aproximações para a função linear $f(x, y) = x + y$ com $\eta = 0.3215$	77
7.1	Aproximações para a função $f(x) = \text{sen}(6x)$	80
7.2	Aproximações para a função $f(x) = \text{sen}(6x)$ com perturbação $\eta = 0.3215$	80
8.1	Aproximação para a equação (8.7) com função núcleo <i>new</i> quártico e tratamento normal de fronteira.	86
8.2	Aproximação para a equação (8.7) com função núcleo <i>new</i> quártico e tratamento normal de fronteira.	87
8.3	Aproximação para a equação (8.8) com função núcleo <i>new</i> quártico, 6400 partículas e tratamento normal de fronteira.	89
8.4	Aproximação para a equação (8.8) com função núcleo <i>new</i> quártico, 6400 partículas e tratamento de fronteira por partículas fantasmas do tipo I e II.	90
8.5	Aproximação para a equação (8.8) com função núcleo <i>new</i> quártico, 6400 partículas e tratamento de fronteira por partículas <i>dummy</i>	91
8.6	Aproximação para a equação (8.9) com tratamento de fronteira por partículas <i>dummy</i>	93
8.7	Aproximação para a equação (8.9) com perturbação $\eta = 0.3215$ e tratamento de fronteira por partículas <i>dummy</i>	94
8.8	Aproximação para a equação (8.9) com perturbação $\eta = 0.4999$ e tratamento de fronteira por partículas <i>dummy</i>	95
A.1	Interface do programa Smoothed Particle Hydrodynamics Test.	101

Lista de Tabelas

7.1	Resultados obtidos na aproximação para $f(x) = 1$ com $h = 1.5\Delta v$	72
7.2	Resultados obtidos na aproximação para $f(x) = 1$ com $h = 1.2k\Delta v$	73
7.3	Resultados obtidos na aproximação para $f(x) = x$ com $h = 1.2k\Delta v$	73
7.4	Erros de aproximação da função linear $f(x, y) = x + y$ livre de fronteira. . .	74
7.5	Erros de aproximação da função linear $f(x, y) = x + y$ com fronteira. . . .	74
7.6	Erros de aproximação da função linear $f(x, y) = x + y$ com $\eta = 0.0001$. . .	75
7.7	Erros de aproximação da função linear $f(x, y) = x + y$ com $\eta = 0.3215$. . .	76
7.8	Erros de aproximação da função linear $f(x) = \text{sen}(6x)$	80
8.1	Erros de aproximação da equação (8.7) com variação da razão $\frac{h}{\Delta x}$	85
8.2	Erros de aproximação da equação (8.7) com variação da razão $\frac{h}{\Delta x}$ e $\eta = 0.3215$	86
8.3	Erros de aproximação da equação (8.7) com variação da razão $\frac{h}{\Delta x}$ e $\eta = 0.4999$	86
8.4	Erros de aproximação da equação (8.7) com variação do número de partículas com $\eta = 0$	87
8.5	Erros de aproximação da equação (8.7) com variação do número de partículas com $\eta = 0.3215$	87
8.6	Erros de aproximação da equação (8.7) com variação do número de partículas com $\eta = 0.4999$	87
8.7	Erros de aproximação da equação (8.8) com tratamento normal de fronteira. . . .	88
8.8	Erros de aproximação da equação (8.8) com tratamento de fronteira por partículas fantasmas do tipo I e II.	89
8.9	Erros de aproximação da equação (8.8) com tratamento de fronteira por partículas fantasmas <i>dummy</i>	90
8.10	Erros de aproximação da equação (8.9) com tratamento de fronteira por partículas fantasmas <i>dummy</i>	95
8.11	Síntese dos resultados obtidos na pesquisa.	97

Lista de Siglas

CSPM: *Corrective Smoothed Particle Method.*

FPM: *Finite Particle Method.*

ISPH: *Incompressible Smoothed Particle Hydrodynamics.*

MDF: Método de Diferenças Finitas.

MCG: *Monaghan-Cleary-Gingold.*

MEA: *Formulation Morris et al..*

MEF: Métodos de Elementos Finitos.

MPM: *Meshfree Particle Method.*

MPS: *Moving Particle Semi-Implicit.*

SPH: *Smoothed Particle Hydrodynamics.*

Sumário

Resumo	5
Abstract	7
Lista de Figuras	8
Lista de Tabelas	10
Lista de Siglas	13
Capítulos	
1 Introdução	19
2 Estruturação Básica para o SPH	21
2.1 Representação integral de uma função	21
2.2 Aproximação utilizando partículas	22
2.3 Função núcleo	22
2.3.1 Propriedades da Função Núcleo	23
2.4 Função núcleo SPH: definição e modelos	25
2.4.1 Modelos clássicos de funções núcleo SPH	25
3 <i>Smoothed Particle Hydrodynamics</i>	33
3.1 O método SPH	33
3.2 Operadores SPH	33
3.2.1 Operador divergente	34
3.2.2 Operador gradiente	34
3.2.3 Operador laplaciano	35
4 Conceção Numérica das Partículas do Método SPH	39
4.1 Modelos de distribuição das partículas	39
4.1.1 Distribuição uniforme	39
4.1.2 Distribuição perturbada	40
4.1.3 Distribuição caótica	41
4.2 Recrutamento de partículas no suporte compacto	41
4.2.1 Recrutamento de partículas influentes por força bruta	42
4.2.2 Recrutamento de partículas influentes por malha uniforme	42
4.3 Tratamento de fronteira	43
4.3.1 O tratamento de fronteira por partículas fantasmas	43
4.3.2 Partículas <i>dummy</i>	44
4.4 Estrutura do código para aproximação do operador gradiente	45

5	Consistência do Núcleo SPH: análise com distribuição uniforme das partículas	47
5.1	Aproximação de uma função	47
5.1.1	Aproximação das derivadas de uma função	48
5.2	Consistência da aproximação por partículas	50
6	Influência da Desordem das Partículas e do Comprimento de Suavização Sobre os Operadores SPH	53
6.1	Desordem canônica de partículas	53
6.2	Modelo de malha para testes numéricos	54
6.3	Avaliação da consistência	54
6.3.1	Definição	54
6.3.2	Funções erro	55
6.3.3	Resultados de testes da consistência	55
6.4	Avaliação do operador gradiente SPH	55
6.4.1	Tipos de Gradiente	56
6.4.2	Função da condição de consistência C_0^1 na estimativa do gradiente .	56
6.4.3	Tipos de Campos	56
6.4.4	Funções Erro	57
6.4.5	Resultados	57
6.5	Avaliação do operador laplaciano SPH	62
6.5.1	Tipos de laplaciano	62
6.5.2	Tipos de campos	63
6.5.3	Função erro	63
6.5.4	Resultados	63
7	O Problema de Inconsistência das Partículas no Método SPH	67
7.1	Partícula inconsistente	68
7.2	Restauração da consistência das partículas	68
7.2.1	Abordagem CSPM	68
7.2.2	Abordagem FPM	70
7.3	Resultados numéricos	72
7.3.1	Zero ordem de consistência (C^0)	72
7.3.2	Primeira ordem de consistência (C^1)	73
7.4	Um método SPH de alta ordem via função núcleo inversa	77
7.4.1	O método SPH inverso	77
7.4.2	Uma adaptação do método SPH inverso com a função núcleo <i>Dome-shaped</i> modificada	79
7.4.3	Resultados numéricos com o método SPH inverso	80
8	A Equação de <i>Poisson</i>	83
8.1	Discretização SPH para a equação de <i>Poisson</i>	83
8.2	Aplicações	84
8.2.1	A equação de <i>Poisson</i> com condições <i>Dirichlet</i> de fronteira	84
8.2.2	A equação de <i>Poisson</i> com condições mistas de fronteira	91
	Apêndices	
A	Smoothed Particle Hydrodynamics Test - SPHT	99
A.1	Iniciando o programa SPHT	99
A.2	A modificação do programa SPHT	101

Introdução

Atualmente, devido ao grande avanço tecnológico o uso dos métodos de partículas vem ganhando espaço nas simulações de escoamento de fluido. O primeiro método de partículas desenvolvido foi o *Smoothed Particle Hydrodynamics* (SPH) para simular problemas astrofísicos. Desde então tem sido estudado e melhorado para ser aplicado em uma variedade de problemas, incluindo as equações de Navier-Stokes.

O presente trabalho tem por objetivo construir as bases para investigar a consistência do método SPH que, como sabido, ao ser aplicado necessita de aproximações para os operadores Gradiente, Divergente e Laplaciano. A utilização do método das partículas para modelar problemas matemáticos acontece em praticamente todas as áreas, mas sua análise continua sendo objeto de estudos em crescente atividade na comunidade acadêmica [6, 1]. Na prática há movimentação das partículas, mas a análise da consistência é feita para problemas testes considerando partículas fixas.

O diferencial proposto é a utilização de partículas fixas mas desordenadas, ou seja, que estão espacialmente dispostas de forma randômica, e não mais uniformemente distribuídas. Deverão ser efetuados vários testes visando verificar a influência de uma dada desordem, o comprimento de suavização e um número crescente de partículas, para os operadores SPH. No trabalho, considera-se primeiramente a desordem canônica, conforme [6], que especifica uma reconfiguração de partículas uniformemente distribuídas por meio de uma perturbação leve que muda randomicamente a posição de cada uma das partículas. Um caso não abordado na literatura é o de uma distribuição randômica, que denomina-se por caótica, ou seja, a desordem advém de posições geradas aleatoriamente; comparações são efetuadas com a canônica para um mesmo número de partículas. Os testes de consistência são então realizados.

A consistência é comumente estudada por meio de uma distribuição uniforme das partículas, de certa forma, equivalente a uma malha regular. Na prática dificilmente isso acontece. Assim, considera-se neste estudo uma distribuição randômica, ou, em outras palavras, nos perguntamos, de que maneira uma desordem, por exemplo, representada por uma perturbação na regularidade das partículas, influencia a precisão do método? Dessa forma, a consistência é estudada como a capacidade do método em resolver um problema com solução polinomial, de forma a recuperar a j -ésima derivada do polinômio de i -ésima ordem e rotulado de C_i^j . Note que a recuperação do polinômio não garante que suas derivadas também sejam recuperadas. Portanto, é preciso levar em conta a consistência para as derivadas também.

São quatro as condições de consistência, C_0^0 , C_0^1 , C_1^0 e C_1^1 sendo que cada condição de consistência C_i^j é quantificada por uma função de erro local em cada partícula, conforme [6]. De forma geral, como metodologia, são usadas ideias de [1] para considerar (medir)

a desordem das partículas e então [6] para verificar a influência da desordem e quais as restrições exigidas para a consistência.

Para iniciar a formalização do método SPH, primeiramente destaca-se duas diferentes abordagens que especificam as características do processo de simulação computacional.

Os métodos de partículas utilizam abordagem Lagrangeana, então a seguir uma breve descrição será feita. Nota-se que as quantidades físicas associadas aos elementos de fluido variam ao longo do tempo. Seguindo por exemplo [24], essas variações podem ser descritas da seguinte forma:

Descrição Euleriana: ao invés de acompanhar o movimento ao longo do escoamento, considera-se um conjunto de posições fixas \mathbf{x}_i no espaço como se fossem partículas e, em seguida calcula-se as variações das quantidades físicas do fluido sempre nessas posições (veja a Figura 1.1(a)). A posição de uma partícula \mathbf{x}_i é chamada de coordenada espacial.

Descrição Lagrangeana: o fluido é representado por uma coleção de partículas de fluido onde cada partícula se locomove com o escoamento, veja a Figura 1.1(b).

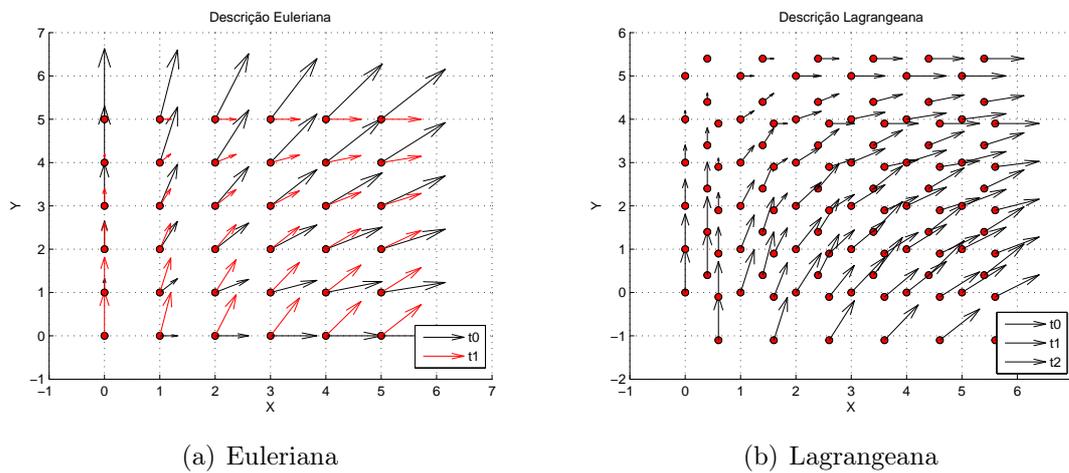


Figura 1.1: Escoamento de partículas com volume fixo.

Na Figura 1.1 (a) a partícula fluido permanece fixa enquanto o escoamento passa por ela, por outro lado em (b) a partícula fluido se movimentando acompanhando o escoamento.

Dessa forma, formaliza-se a seguir o método SPH e considera-se a descrição Lagrangeana, de modo a especificar uma nova configuração das partículas na discretização do domínio. Para isso, utiliza-se partículas desordenadamente distribuídas e procura-se determinar quais as influências dessa desordenação ao aproximar os operadores SPH e a equação de *Poisson*, principal motivação desta pesquisa. Sendo assim, amplia-se as análises iniciadas por [30] e propõem-se novas estratégias com a finalidade de melhorar a consistência da aproximação por partículas.

Estruturação Básica para o SPH

Nesse capítulo apresenta-se a formulação do método SPH em duas etapas. A primeira trata-se da representação integral de uma função arbitrária, e para isso, utiliza-se conceitos de convolução entre função e a distribuição Delta de Dirac. A segunda diz respeito à aproximação por partículas. Por fim, define-se as características necessárias para que uma função seja reconhecida como um núcleo SPH.

2.1 Representação integral de uma função

A representação integral da função é aproximada pela soma dos valores das partículas vizinhas mais próximas. Assim, a ideia de discretização então considera um conjunto de partículas para a representação do meio. Para viabilizar isto, é necessário uma aproximação para a função Delta de Dirac, que é denominada núcleo. O conceito de representação integral de uma função $f(\mathbf{x})$ utilizado no método SPH começa a partir da seguinte identidade .

$$f(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}')\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')d\mathbf{x}', \quad (2.1)$$

onde $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^m$ definida num domínio aberto $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ tal que $\mathbf{x} \in \Omega$, e f é contínua em Ω . Essa representação é feita através da convolução de f com a distribuição Delta de Dirac, dada por

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

A equação (2.1) permite que uma função f contínua em Ω possa ser representada em uma forma integral conforme relatado em [14], desde que a distribuição Delta de Dirac seja utilizada, definindo assim a chamada representação integral da função.

Substituindo a Delta de Dirac por uma função núcleo $W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h)$ centrada no ponto \mathbf{x} , a chamada representação integral da função f passará a ser:

$$f(\mathbf{x}) \cong \int_{\Omega} f(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h)d\mathbf{x}', \quad (2.2)$$

sendo $W : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ e h o comprimento de suavização (*smoothing length*) que estabelece a maior distância permitida entre as partículas \mathbf{x} e \mathbf{x}' . Em geral h surge multiplicado por

um escalar k não-negativo. Se k for nulo, garante-se a existência de uma única partícula dentro do suporte compacto, neste caso, a própria partícula de coordenadas \mathbf{x} .

A notação $\langle \rangle$ será convenientemente adotada para representar a aproximação para a função. Dessa forma, a equação (2.2) é reescrita na seguinte forma:

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}'. \quad (2.3)$$

Sendo assim, ao adotar tal notação define-se uma aproximação para f por meio da representação integral da função, e para isso utiliza-se como base uma função núcleo W suficientemente suave. As características de W serão definidas posteriormente.

2.2 Aproximação utilizando partículas

Assumindo que o meio é discreto, ou seja, formado por um número finito de partículas que possuem massa e ocupam um volume no espaço, a integral da equação (2.3) aplicada em um ponto do domínio pode ser dada por meio de um somatório sobre as partículas que se encontram contidas no domínio.

Uma propriedade exigida da função núcleo é que tenha um suporte compacto, então a aproximação é feita apenas sobre a sub região referente ao suporte do núcleo. Define-se o suporte compacto da função núcleo ao conjunto V_i centrado em \mathbf{x}_i , onde:

$$V_i = \{\mathbf{x}_j, \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| \leq kh\},$$

sendo $V_i \subset \Omega$, k um fator de escala e $j = 1 \dots N_i$, onde N_i representa o número de partículas que satisfazem a restrição $\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| \leq kh$.

Percebe-se facilmente que não há restrição alguma para o caso $i = j$, ou seja, a partícula \mathbf{x}_i estará contida em todo suporte compacto V_i .

Considerando um meio compacto de partículas, ao substituir o volume infinitesimal $d\mathbf{x}'$ da equação (2.3) na posição da j -ésima partícula pelo volume Δv_j ocupado pela partícula \mathbf{x}_j , obtém-se:

$$\langle f(\mathbf{x}_i) \rangle = \sum_{j=1}^{N_i} f(\mathbf{x}_j) W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j; h) \Delta v_j. \quad (2.4)$$

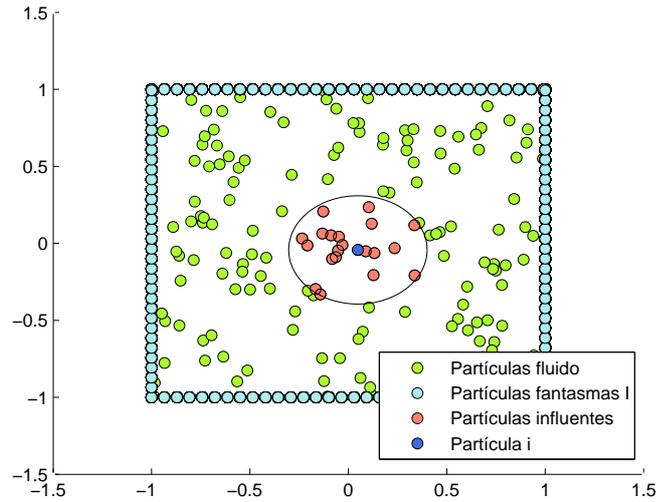
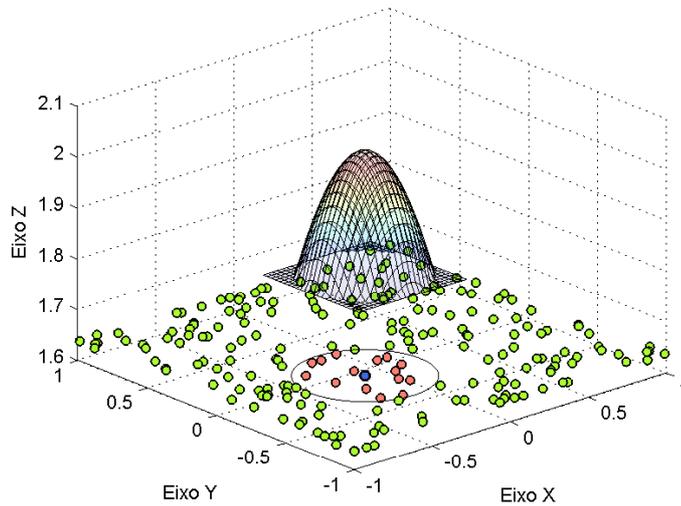
Sabendo que o volume da partícula Δv_j pode ser representado pela razão entre a massa m_j e a densidade ρ_j , a equação (2.4) pode ser reescrita com tal substituição:

$$\langle f(\mathbf{x}_i) \rangle = \sum_{j=1}^{N_i} f(\mathbf{x}_j) W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j; h) \frac{m_j}{\rho_j}. \quad (2.5)$$

Dessa forma, a equação (2.5) gera uma aproximação para f em cada um dos pontos do domínio discretizado por meio de um conjunto de partículas isoladamente recrutadas no suporte compacto da função núcleo.

2.3 Função núcleo

Extremamente importante para o SPH, a função núcleo W atua como um mecanismo de definição do domínio de influência sobre uma partícula i , definindo o conjunto de partículas que efetivamente influenciarão na aproximação de f na posição da partícula \mathbf{x}_i .

(a) Domínio de influência da partícula i .

(b) Suporte da função núcleo sobre o domínio de influência.

Figura 2.1: Domínio de influência sobre uma partícula por meio da função núcleo.

A Figura 2.1 (a) destaca em vermelho todas as partículas \mathbf{x}_j que satisfizeram a restrição $\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| \leq kh$, onde kh é o raio da circunferência centrada em \mathbf{x}_i .

Conforme mencionado anteriormente, a partícula \mathbf{x}_i mostrada em azul na mesma figura, também está contida no suporte compacto definido por V_i , com isso, ela participará do cálculo que gerará uma aproximação para f na posição da própria partícula \mathbf{x}_i .

2.3.1 Propriedades da Função Núcleo

Apresenta-se na literatura uma diversidade de funções núcleo SPH, entretanto é de suma importância conhecer as propriedades fundamentais para que uma função possa ser reconhecida como um núcleo SPH, ou ainda, as especificidades para se construir tal função. As principais propriedades são apresentadas abaixo, vide por exemplo [14, 24, 31].

1. O núcleo SPH deve ser **suficientemente suave**

$$W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h) \in C^k, \quad k > 1.$$

A finalidade dessa propriedade é melhorar a aproximação da função e de suas derivadas. Sendo contínua, a função núcleo garante bons resultados, e segundo [17, 5] não será sensível à distribuição perturbada das partículas, os erros gerados na aproximação serão pequenos, desde que a perturbação imposta às partículas não sejam muito severas. Note que esta afirmação não é válida para um modelo de distribuição caótica das partículas.

2. O núcleo SPH deve ser **normalizado**

$$\int_{\Omega} W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h) d\mathbf{x} = 1.$$

Essa propriedade garante um resultado unitário ao integrar a função núcleo sob o domínio do suporte compacto. Propriedade herdada da função Delta de Dirac.

3. O núcleo SPH deve ter **suporte compacto**

$$W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, kh) = 0 \quad \text{quando} \quad \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| > kh,$$

sendo k um fator de escala. Essa propriedade transforma a aproximação de f , tida como uma operação global em uma local.

4. O núcleo SPH deve ser **positivo**

$$W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h) \geq 0.$$

A propriedade mostra que a função núcleo deve ser não negativa sob influência da região limitada pelo suporte compacto. Não necessária para a convergência, mas de suma importância para aproximações coerentes com as propriedades físicas envolvidas no problema. Sendo não negativa, a função evita, por exemplo, valores negativos para a densidade [24].

5. O núcleo SPH deve ser **decrecente**

$$W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_1, h) < W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_2, h), \quad \text{se} \quad \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_1\| > \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_2\|.$$

Essa propriedade garante que as partículas \mathbf{x}_j mais próximas da partícula \mathbf{x}_i exercem maior influência do que as partículas mais afastadas.

6. O núcleo SPH deve ser **simétrico radial**

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

A simetria dessa propriedade determina que partículas \mathbf{x}_j em diferentes posições mas com a mesma distância da partícula \mathbf{x}_i tenham a mesma influência.

7. O núcleo SPH deve satisfazer a distribuição Delta de Dirac quando $h \rightarrow 0$, ou seja:

$$\lim_{h \rightarrow 0} W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h) = \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j).$$

Por fim, essa propriedade determina que, a medida que o comprimento de suavização tende a zero, o valor aproximado se torna cada vez mais próximo do valor exato da função, ou seja, $\langle f(\mathbf{x}) \rangle \rightarrow f(\mathbf{x})$.

2.4 Função núcleo SPH: definição e modelos

O núcleo SPH é de extrema importância, pois não somente determina o padrão da aproximação, como também define a dimensão do suporte das partículas, determina a consistência e, a precisão de ambas as aproximações: integral e por partículas.

Adota-se como modelo de núcleo SPH a função definida da seguinte forma:

$$W(\phi) = \frac{\alpha_n}{h^n} w(\phi),$$

onde

$$\phi_{ij} = \frac{r_{ij}}{h} = \frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|}{h}.$$

A variável r representa a distância entre duas partículas, h o comprimento de suavização (fixo), w é uma função definida sobre \mathbb{R}^+ , suficientemente suave e α_n uma constante de normalização específica para uma, duas ou três dimensões, ou seja, $n = 1, 2, 3$, (ver [31]).

Para $n = 1$, a derivada primeira da função núcleo é expressa da seguinte forma:

$$W'(\phi) = \frac{\alpha_n}{h^2} w'(\phi).$$

De maneira análoga ao caso anterior, as derivadas de ordem superiores podem ser obtidas por meio da seguinte relação:

$$W^{(k)}(\phi) = \frac{\alpha_n}{h^{n+k}} w^{(k)}(\phi).$$

Para o caso bidimensional ($n = 2$) ou tridimensional ($n = 3$) procede-se da mesma forma.

O gradiente da função núcleo, sendo assim $\nabla W(\phi)$ passa a ser expresso:

$$\nabla W(\phi) = \frac{\alpha_n}{h^n} \frac{\partial w(\phi)}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\alpha_n}{h^n} \frac{dw(\phi)}{dr} \frac{1}{h} \frac{\partial r}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\alpha_n}{h^{n+1}} w'(\phi) \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j}{r_{ij}}.$$

2.4.1 Modelos clássicos de funções núcleo SPH

Diferentes núcleos SPH são encontrados na literatura, todos com a mesma finalidade. Apresenta-se os modelos mais clássicos mostrados em [14] e um modelo proposto por Yang [32].

Lucy em 1977 [15] apresentou em seu artigo a seguinte função núcleo:

$$W(\phi) = \frac{\alpha_n}{h^n} \begin{cases} (1 + 3\phi)(1 - \phi)^3 & 0 \leq \phi < 1 \\ 0 & \phi \geq 1 \end{cases} \quad (2.6)$$

sendo as constantes de normalização iguais a:

$$\alpha_1 = 5/4; \quad \alpha_2 = 5/\pi \text{ e } \alpha_3 = 105/16,$$

em uma, duas e três dimensões respectivamente. A primeira e segunda derivadas são, respectivamente:

$$W'(\phi) = \frac{\alpha_n}{h^{n+1}} \begin{cases} -12\phi(\phi - 1)^2 & 0 \leq \phi < 1 \\ 0 & \phi \geq 1 \end{cases}$$

e

$$W''(\phi) = \frac{\alpha_n}{h^{n+2}} \begin{cases} -36\phi^2 + 48\phi - 12 & 0 \leq \phi < 1 \\ 0 & \phi \geq 1 \end{cases}.$$

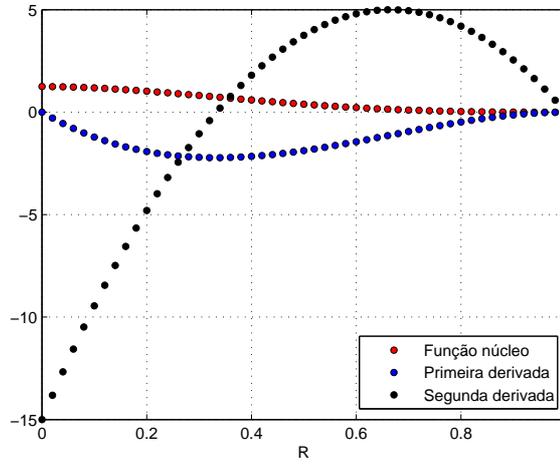


Figura 2.2: A função núcleo (2.6) e suas duas primeiras derivadas.

Monaghan em 1992 [17] também apresentou uma função em um de seus trabalhos, a chamada gaussiana, definida por:

$$W(\phi) = \frac{\alpha_n}{h^n} e^{-\phi^2}. \quad (2.7)$$

As constantes de normalização são dadas por:

$$\alpha_1 = 1/\pi^{1/2}; \quad \alpha_2 = 1/\pi \text{ e } \alpha_3 = 1/\pi^{3/2}.$$

A primeira e segunda derivadas são, respectivamente:

$$W'(\phi) = \frac{\alpha_n}{h^{n+1}} (-2\phi e^{-\phi^2})$$

e

$$W''(\phi) = \frac{\alpha_n}{h^{n+2}} (-2e^{-\phi^2} + 4\phi^2 e^{-\phi^2}).$$

Note que a função gaussiana não tem suporte compacto, mas se aproxima rapidamente de zero a medida que a distância entre duas partículas é maior. Conforme relatado em [14], essa função costuma apresentar bons resultados quando há um número pequeno de partículas no domínio de influência, o que caracteriza uma maior distância entre elas.

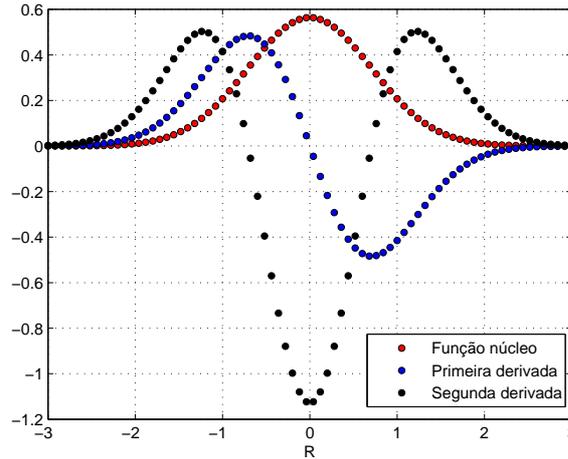


Figura 2.3: A função gaussiana (2.7) e suas duas primeiras derivadas.

Outros núcleos muito importantes para o SPH são as *splines*, uma distinta classe de funções. Essa classe é bastante influente e usualmente aplicada. Suas funções são dadas por: *spline* cúbica, proposta por Monaghan e Lattanzio em (1985) [20].

$$W(\phi) = \frac{\alpha_n}{h^n} \begin{cases} 1 - \frac{3}{2}\phi^2 + \frac{3}{4}\phi^3 & 0 \leq \phi < 1 \\ \frac{1}{4}(2 - \phi)^3 & 1 \leq \phi < 2 \\ 0 & \phi \geq 2 \end{cases} . \quad (2.8)$$

As constantes de normalização são iguais a:

$$\alpha_1 = 2/3; \quad \alpha_2 = 10/7\pi \text{ e } \alpha_3 = 1/\pi,$$

sendo suas primeira e segunda derivadas, respectivamente:

$$W'(\phi) = \frac{\alpha_n}{h^{n+1}} \begin{cases} -3\phi + \frac{9}{4}\phi^2 & 0 \leq \phi < 1 \\ -\frac{3}{4}(2 - \phi)^2 & 1 \leq \phi < 2 \\ 0 & \phi \geq 2 \end{cases}$$

e

$$W''(\phi) = \frac{\alpha_n}{h^{n+2}} \begin{cases} -3 + \frac{9}{2}\phi & 0 \leq \phi < 1 \\ \frac{3}{2}(2 - \phi) & 1 \leq \phi < 2 \\ 0 & \phi \geq 2 \end{cases} .$$

A *spline* cúbica é usualmente apresentada na literatura SPH por conter características muito semelhantes a gaussiana e possuir suporte compacto. Entretanto, a segunda derivada é uma função linear por partes, que pode resultar em uma desvantagem em relação aos núcleos suficientemente suaves.

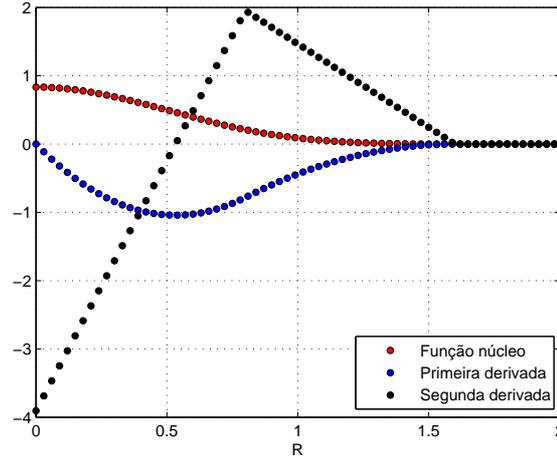


Figura 2.4: A função *spline* cúbica (2.8) e suas duas primeiras derivadas.

Spline quártica, proposta por Morris (1994) [22] com a finalidade de se aproximar ainda mais do núcleo gaussiano.

$$W(\phi) = \frac{\alpha_n}{h^n} \begin{cases} (2.5 - \phi)^4 - 5(1.5 - \phi)^4 + 10(0.5 - \phi)^4 & 0 \leq \phi < 0.5 \\ (2.5 - \phi)^4 - 5(1.5 - \phi)^4 & 0.5 \leq \phi < 1.5 \\ (2.5 - \phi)^4 & 1.5 \leq \phi < 2.5 \\ 0 & \phi \geq 2.5 \end{cases}, \quad (2.9)$$

sendo as constantes de normalização iguais a:

$$\alpha_1 = 1/24; \quad \alpha_2 = 96/1199\pi \text{ e } \alpha_3 = 1/20\pi,$$

com suas primeira e segunda derivadas, respectivamente:

$$W'(\phi) = -4 \frac{\alpha_n}{h^{n+1}} \begin{cases} (2.5 - \phi)^3 - 5(1.5 - \phi)^3 + 10(0.5 - \phi)^3 & 0 \leq \phi < 0.5 \\ (2.5 - \phi)^3 - 5(1.5 - \phi)^3 & 0.5 \leq \phi < 1.5 \\ (2.5 - \phi)^3 & 1.5 \leq \phi < 2.5 \\ 0 & \phi \geq 2.5 \end{cases}$$

e

$$W''(\phi) = 12 \frac{\alpha_n}{h^{n+2}} \begin{cases} (2.5 - \phi)^2 - 5(1.5 - \phi)^2 + 10(0.5 - \phi)^2 & 0 \leq \phi < 0.5 \\ (2.5 - \phi)^2 - 5(1.5 - \phi)^2 & 0.5 \leq \phi < 1.5 \\ (2.5 - \phi)^2 & 1.5 \leq \phi < 2.5 \\ 0 & \phi \geq 2.5 \end{cases}.$$

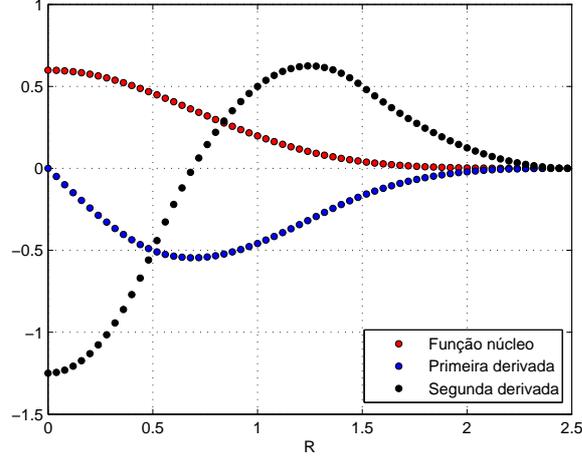


Figura 2.5: A função *spline* quártica (2.9) e suas duas primeiras derivadas.

Spline quártica, proposta por Morris (1996) [23], possui a mesma finalidade da *spline* quártica.

$$W(\phi) = \frac{\alpha_n}{h^n} \begin{cases} (3 - \phi)^5 - 6(2 - \phi)^5 + 15(1 - \phi)^5 & 0 \leq \phi < 1 \\ (3 - \phi)^5 - 6(2 - \phi)^5 & 1 \leq \phi < 2 \\ (3 - \phi)^5 & 2 \leq \phi < 3 \\ 0 & \phi \geq 3 \end{cases} . \quad (2.10)$$

As constantes de normalização dadas por:

$$\alpha_1 = 1/120; \quad \alpha_2 = 7/478\pi \text{ e } \alpha_3 = 1/120\pi,$$

sendo suas primeira e segunda derivadas, respectivamente:

$$W'(\phi) = -5 \frac{\alpha_n}{h^{n+1}} \begin{cases} (3 - \phi)^4 - 6(2 - \phi)^4 + 15(1 - \phi)^4 & 0 \leq \phi < 1 \\ (3 - \phi)^4 - 6(2 - \phi)^4 & 1 \leq \phi < 2 \\ (3 - \phi)^4 & 2 \leq \phi < 3 \\ 0 & \phi \geq 3 \end{cases}$$

e

$$W''(\phi) = 20 \frac{\alpha_n}{h^{n+2}} \begin{cases} (3 - \phi)^3 - 6(2 - \phi)^3 + 15(1 - \phi)^3 & 0 \leq \phi < 1 \\ (3 - \phi)^3 - 6(2 - \phi)^3 & 1 \leq \phi < 2 \\ (3 - \phi)^3 & 2 \leq \phi < 3 \\ 0 & \phi \geq 3 \end{cases} .$$

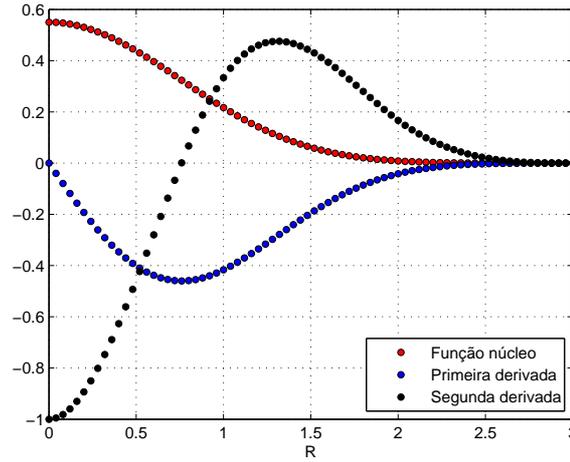


Figura 2.6: A função *spline* quíntica (2.10) e suas duas primeiras derivadas.

Uma pequena alteração proposta por Liu, Liu e Lam (2003) [12] no núcleo (2.6), assegurou resultados mais precisos. A função modificada agora possui uma ordem maior, passando de terceira para quarta ordem.

$$W(\phi) = \frac{\alpha_n}{h^n} \begin{cases} \frac{2}{3} - \frac{9}{8}\phi^2 + \frac{19}{24}\phi^3 - \frac{5}{32}\phi^4 & 0 \leq \phi < 2 \\ 0 & \phi \geq 2 \end{cases} \quad (2.11)$$

e as constantes de normalização são dadas por:

$$\alpha_1 = 1; \quad \alpha_2 = 15/7\pi \text{ e } \alpha_3 = 315/208\pi,$$

sendo suas primeira e segunda derivadas, respectivamente são:

$$W'(\phi) = \frac{\alpha_n}{h^{n+1}} \begin{cases} -\frac{9}{4}\phi + \frac{19}{8}\phi^2 - \frac{5}{8}\phi^3 & 0 \leq \phi < 2 \\ 0 & \phi \geq 2 \end{cases}$$

e

$$W''(\phi) = \frac{\alpha_n}{h^{n+2}} \begin{cases} -\frac{9}{4} + \frac{19}{4}\phi - \frac{15}{8}\phi^2 & 0 \leq \phi < 2 \\ 0 & \phi \geq 2 \end{cases}.$$

Para os autores, a *spline* quártica têm apresentado resultados mais precisos que a *spline* cúbica, mas possui uma desvantagem, a derivada segunda não é nula na fronteira do suporte compacto.

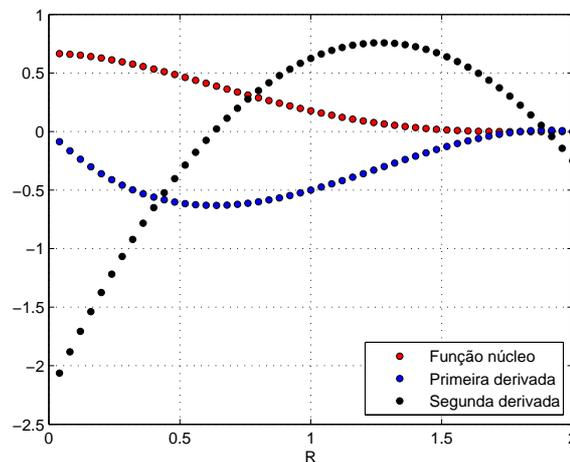


Figura 2.7: A função núcleo *new* quártica (2.11) e suas duas primeiras derivadas.

2.4.1.1 Função duplo cosseno: a trigonometria a favor da simetria

Outras funções núcleo são apresentadas pela literatura, entretanto, destaca-se a função duplo cosseno (*Double Cosine*), proposta por Yang (2014) [32]. Sua principal característica é utilizar a trigonometria para garantir a simetria dentro do suporte compacto. Cumprindo perfeitamente todas as propriedades listadas anteriormente, acredita-se que a duplo cosseno ganhe um espaço de destaque na literatura SPH.

A função duplo cosseno é expressa da seguinte forma:

$$W(\phi) = \alpha_n \begin{cases} 4 \cos\left(\frac{\pi}{k}\phi\right) + \cos\left(\frac{2\pi}{k}\phi\right) + 3 & 0 \leq \phi \leq k \\ 0 & k < \phi \end{cases} \quad (2.12)$$

sendo k um fator escala e, as constantes de normalização iguais a:

$$\alpha_1 = 1/(6kh); \quad \alpha_2 = \pi/[(3\pi^2 - 16)(kh)^2] \text{ e } \alpha_3 = \pi/[(4\pi^2 - 30)(kh)^3].$$

As derivadas primeira e segunda são dadas, respectivamente por:

$$W'(\phi) = \alpha_n \begin{cases} -4\frac{\pi}{k} \sin\left(\frac{\pi}{k}\phi\right) - 2\frac{\pi}{k} \sin\left(\frac{2\pi}{k}\phi\right) & 0 \leq \phi \leq k \\ 0 & k < \phi \end{cases}$$

e

$$W''(\phi) = \alpha_n \begin{cases} -4\frac{\pi^2}{k^2} \cos\left(\frac{\pi}{k}\phi\right) - 4\frac{\pi^2}{k^2} \cos\left(\frac{2\pi}{k}\phi\right) & 0 \leq \phi \leq k \\ 0 & k < \phi \end{cases}.$$

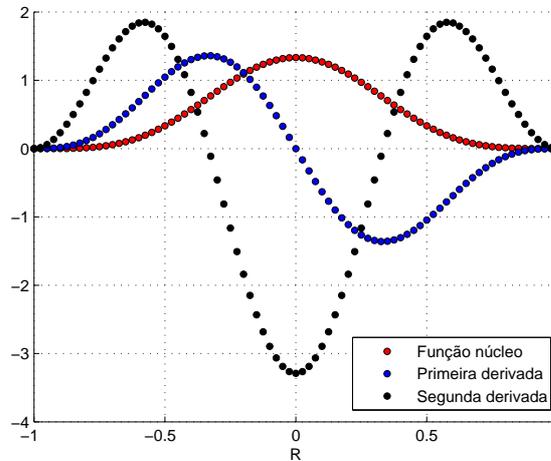


Figura 2.8: A função duplo cosseno (2.12) proposta por Yang (2014) e suas duas primeiras derivadas.

Alguns testes numéricos para verificação da precisão com as funções núcleo apresentadas utilizando partículas fixas e uniformemente espaçadas podem ser encontrados em [30], exceto para a função Duplo Cosseno. Executa-se neste trabalho outros testes numéricos adotando o modelo de perturbação canônica, então determina-se o modelo de função núcleo que apresenta os melhores resultados para os problemas investigados. Os testes podem ser encontrados na seção 8.2.

Smoothed Particle Hydrodynamics

3.1 O método SPH

Desde sua introdução para resolver problemas astrofísicos em um espaço aberto tridimensional em 1977, conforme relatos em [7, 15], o SPH tornou-se frequentemente estudado para ser aplicado em uma variedade de problemas incluindo as equações de Navier-Stokes.

De acordo com [24], a discretização no método SPH é concebida por meio de um conjunto de partículas, definidas como pontos do espaço, às quais estão associadas outras propriedades individuais relacionadas à física do fenômeno simulado, tais como temperatura, densidade, massa, etc.

No método SPH, o estado de um sistema é totalmente representado por um conjunto de partículas, isto é, além de representar o objeto da simulação (fluido, sólido ou gasoso) mostrando as propriedades físicas, as partículas também são utilizadas como a estrutura computacional para calcular as aproximações necessárias para obter uma solução numérica para o problema. De acordo com [14], destaca-se que o SPH tem vantagens, por exemplo, boa captura de superfície livre ou interface entre dois fluidos, tarefa esta bastante difícil para os métodos que utilizam malhas [14].

O SPH foi originalmente construído para simulação de escoamentos de fluidos compressíveis, e portanto insatisfatório para fluidos incompressíveis. Tendo em vista essa lacuna, o método foi sendo aperfeiçoado para que pudesse ser aplicado à esses casos. A primeira medida adotada por em [18] foi considerar fluidos quase-incompressíveis, dessa forma, o método foi denominado de WCSPH (*Weakly Compressible Smoothed Particle Hydrodynamics*). Uma outra medida adotada por [4] baseia-se no método da projeção, onde o cálculo da pressão é realizado através de uma equação de Poisson, com isso considera-se fixa a densidade das partículas. À esse método deram-no o nome de ISPH (*Incompressible Smoothed Particle Hydrodynamics*).

3.2 Operadores SPH

Tendo em vista a motivação de aplicar o método SPH para obter uma solução numérica aproximada para as equações de Navier-Stokes, torna-se uma tarefa indispensável a obtenção de uma aproximação numérica para os operadores divergente, gradiente e laplaciano. Nesse sentido, apresenta-se o método SPH para tais aproximações, conforme [25, 30]. Essa apresentação nem sempre é bastante detalhada na literatura SPH.

3.2.1 Operador divergente

Uma primeira aproximação para o divergente de uma função f será chamada de **operador divergente SPH I**, e pode ser expressa da seguinte forma discreta:

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}_i) \rangle = - \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) \cdot \nabla_j W_{ij}, \quad (3.1)$$

sendo $W_{ij} = W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j; h)$.

Veja que na equação (3.1) o gradiente do núcleo ∇W está em relação a partícula j , então usando a propriedade de simetria no núcleo tem-se:

$$\nabla_i W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j; h) = \frac{\mathbf{x}_{ij}}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} = - \left(- \frac{\mathbf{x}_{ij}}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} \right) = - \nabla_j W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j; h),$$

sendo $\mathbf{x}_{ij} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$ e $r_{ij} = \|\mathbf{x}_{ij}\|$. Portanto, a equação (3.1) pode ser reescrita como:

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}_i) \rangle = \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) \cdot \nabla_i W_{ij}. \quad (3.2)$$

Tendo como base as identidades abaixo, Monaghan [19] define duas novas aproximações para o operador divergente.

$$\nabla \cdot (\rho f) = \rho \nabla \cdot f + f \cdot \nabla \rho, \quad (3.3)$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{f}{\rho} \right) = \frac{\rho \nabla \cdot f - f \cdot \nabla \rho}{\rho^2}. \quad (3.4)$$

Estas duas identidades podem ser reescritas como:

$$\nabla \cdot f = \frac{1}{\rho} [\nabla \cdot (\rho f) - f \cdot \nabla \rho] \quad (3.5)$$

$$\nabla \cdot f = \rho \left[\nabla \cdot \left(\frac{f}{\rho} \right) + \frac{f}{\rho^2} \cdot \nabla \rho \right]. \quad (3.6)$$

E sua forma discreta pode ser representada por:

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}_i) \rangle = \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j \in V_i} m_j (f(\mathbf{x}_j) - f(\mathbf{x}_i)) \cdot \nabla_i W_{ij} \right], \quad (3.7)$$

e

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}_i) \rangle = \rho_i \left[\sum_{j \in V_i} m_j \left(\frac{f(\mathbf{x}_j)}{\rho_j^2} + \frac{f(\mathbf{x}_i)}{\rho_i^2} \right) \cdot \nabla_i W_{ij} \right]. \quad (3.8)$$

A equação (3.7) será chamada de **operador divergente SPH II** e a equação (3.8) de **operador divergente SPH III**. Uma característica desses dois operadores discretos é que a interação entre partículas aparecem explicitamente.

3.2.2 Operador gradiente

Uma primeira aproximação para o gradiente de uma função f será chamada de **operador gradiente SPH I**, e pode ser expressa da seguinte forma discreta:

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}_i) \rangle = \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) \nabla_i W_{ij}. \quad (3.9)$$

De maneira análoga ao caso do operador divergente tem-se as seguintes identidades.

$$\begin{aligned}\nabla f &= \frac{1}{\rho}[\nabla(\rho f) - f\nabla\rho], \\ \nabla f &= \rho \left[\nabla \left(\frac{f}{\rho} \right) + \frac{f}{\rho^2} \nabla\rho \right].\end{aligned}$$

Reescrevendo-as na forma discreta, obtêm-se os seguintes operadores gradiente:

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}_i) \rangle = \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j \in V_i} m_j (f(\mathbf{x}_j) - f(\mathbf{x}_i)) \nabla_i W_{ij} \right], \quad (3.10)$$

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}_i) \rangle = \rho_i \left[\sum_{j \in V_i} m_j \left(\frac{f(\mathbf{x}_j)}{\rho_j^2} + \frac{f(\mathbf{x}_i)}{\rho_i^2} \right) \nabla_i W_{ij} \right]. \quad (3.11)$$

A equação (3.10) será chamada de **operador gradiente SPH II** e a equação (3.11) de **operador gradiente SPH III**.

Nota: os operadores divergente e gradiente SPH I, II e III podem ser chamados de operadores SPH básico, diferença e simétrico, respectivamente.

3.2.3 Operador laplaciano

Uma primeira aproximação para o laplaciano de uma função f será chamada de **operador laplaciano SPH I**, e pode ser expressa da seguinte forma discreta:

$$\langle \nabla^2 f(\mathbf{x}) \rangle = \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) \nabla_i^2 W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j; h). \quad (3.12)$$

Lembre-se que o operador laplaciano no espaço euclidiano é o divergente do gradiente ($\nabla^2 = \nabla \cdot (\nabla f)$), com isso dada uma propriedade escalar p na partícula, define-se uma nova propriedade $g = \nabla p$ dada pelo gradiente da propriedade p . Para isso utiliza-se um dos operadores gradiente SPH. Em seguida, utiliza-se um dos operadores divergente SPH e obtêm-se uma aproximação para $\nabla \cdot g$. O resultado obtido após essas duas aproximações é uma aproximação para o laplaciano, conforme mostrado abaixo:

$$\nabla \cdot g = \nabla \cdot \nabla p = \Delta p. \quad (3.13)$$

Pode-se usar, como exemplo, os operadores gradiente e divergente SPH (3.10) e (3.7). Desta forma, obtêm-se o seguinte **operador laplaciano SPH II** dado pela seguinte expressão:

$$\langle \nabla^2 f(\mathbf{x}_i) \rangle = \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j \in V_i} m_j (\nabla f(\mathbf{x}_j) - (\nabla f(\mathbf{x}_i))) \cdot \nabla_i W_{ij} \right] \quad (3.14)$$

sendo,

$$(\nabla f(\mathbf{x}_k)) = \frac{1}{\rho_k} \left[\sum_{l \in V_k} m_l (f(\mathbf{x}_l) - f(\mathbf{x}_k)) \nabla_k W_{kl} \right].$$

A desvantagem dessas aproximações está na necessidade de realizar, para cada partícula, dois somatórios para obter a aproximação do operador laplaciano, tornando o processo computacional muito caro. Uma forma de contornar essa limitação é usar aproximação baseada na série de Taylor. Para uma função $f(\mathbf{x})$, sendo $\mathbf{x} = (x, y)$, a série de Taylor, até os termos de segunda ordem, sobre um ponto $\mathbf{x} = (a, b)$, é dada por:

$$\begin{aligned}
f(x, y) &= f(a, b) + (x - a) \frac{\partial f}{\partial x}(a, b) + (y - b) \frac{\partial f}{\partial y}(a, b) \\
&+ \frac{1}{2} \left((x - a)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(a, b) + (y - b)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(a, b) \right) \\
&+ (x - a)(y - b) \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(a, b) + O(\|\mathbf{x}' - \mathbf{x}\|^3).
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Da equação (3.15), desprezando os termos superiores aos de segunda ordem, obtém-se uma aproximação para f :

$$\begin{aligned}
f(x, y) &= f(a, b) + (x - a) \frac{\partial f}{\partial x}(a, b) + (y - b) \frac{\partial f}{\partial y}(a, b) \\
&+ \frac{1}{2} \left((x - a)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(a, b) + (y - b)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(a, b) \right) \\
&+ (x - a)(y - b) \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(a, b).
\end{aligned} \tag{3.16}$$

Por meio da aplicação das propriedades de normalização e simetria do núcleo W , Monaghan e Cleary [21] mostraram alguns resultados em um de seus trabalhos:

$$\int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}') \frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|^2} \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}' = 0$$

e

$$\int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')_i (\mathbf{x} - \mathbf{x}')_j \frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|^2} \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}' = \delta_{ij},$$

sendo δ_{ij} o *Delta de Kronecher*, definido por:

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

Ao efetuar a multiplicação entre

$$\langle \nabla^2 f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \nabla^2 W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}'$$

e

$$\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|^2} \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h),$$

e logo após, integrando-a e aplicando os resultados de Monaghan e Cleary, obtém-se o seguinte operador laplaciano:

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}) = 2 \int_{\Omega} \frac{f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}')}{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|^2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}') \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}'. \tag{3.17}$$

A equação (3.17) será chamada de **operador laplaciano SPH III**, sendo a sua forma discreta dada pela seguinte expressão:

$$\langle \nabla^2 f(\mathbf{x}_i) \rangle = 2 \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} \frac{f(\mathbf{x}_i) - f(\mathbf{x}_j)}{r_{ij}^2} \mathbf{x}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij}. \tag{3.18}$$

Uma das vantagens dessa aproximação é o cálculo direto do operador laplaciano, isto é, não há necessidade de calcular outras aproximações.

Concepção Numérica das Partículas do Método SPH

4.1 Modelos de distribuição das partículas

As partículas podem ser distribuídas sob diferentes formas dentro do domínio do problema. Nesse trabalho, apresentar-se-á três modelos distintos de distribuição.

4.1.1 Distribuição uniforme

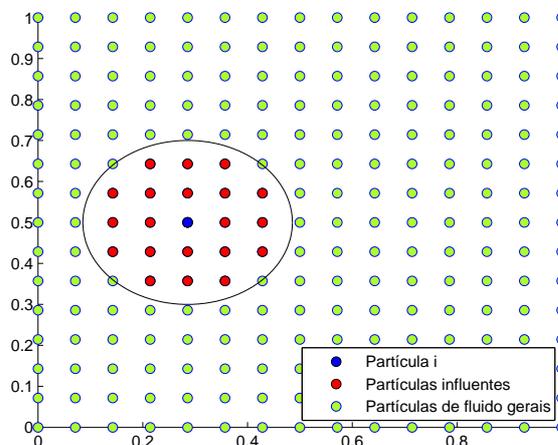


Figura 4.1: Distribuição de 225 partículas no domínio com distância uniforme entre elas.

Observa-se na Figura 4.1 três tipos de partículas: verdes, vermelhas e azul. As verdes compõem o conjunto geral de partículas distribuídas uniformemente no domínio. As vermelhas, chamadas de \mathbf{x}_j na definição, são as partículas contidas no suporte compacto da partícula \mathbf{x}_i , mostrada em azul. As partículas vermelhas e azul são as únicas utilizadas no cálculo de aproximação da f na posição \mathbf{x}_i . Este cálculo é repetido até que todas as partículas do domínio tenham exercido a função de \mathbf{x}_i , concluindo essas operações obtém-se uma aproximação para f . Para os casos onde há movimento das partículas, o recrutamento das partículas no suporte compacto precisa ser feito ao longo de todo o processo de simulação para cada instante de tempo. Quando as partículas estão fixas, o recrutamento é realizado uma única vez.

4.1.2 Distribuição perturbada

Com base em uma distribuição uniforme, define-se um modelo de perturbação canônica [6] sob influência de um raio R , da seguinte forma:

$$R = \eta \Delta x, \quad (4.1)$$

onde $\eta \in [0, 0.5[$ e Δx é a distância uniforme entre as partículas não perturbadas.

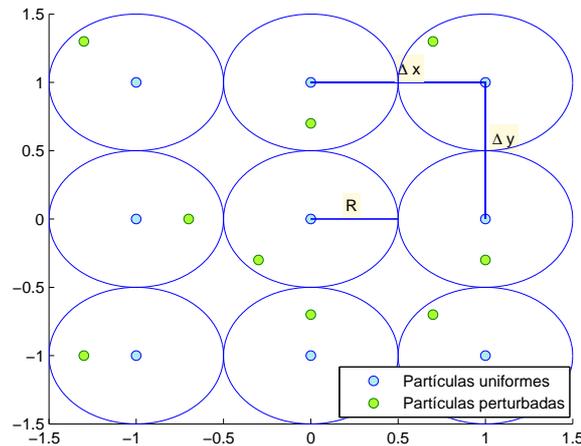


Figura 4.2: Perturbação canônica de partículas com distância irregular, randômica e limitada por um raio R .

Dessa forma, a distribuição perturbada consiste em transladar em qualquer direção e sentido as partículas uniformemente distribuídas para posições geradas de modo randômico, de tal forma que permaneçam contidas na região limitada pela circunferência de raio R , conforme mostrado na Figura 4.2.

Uma característica importante desse método de distribuição das partículas é o tamanho de R . Sendo ele constituído pelo produto $\eta \Delta x$, isso impede que aconteça uma sobreposição ou colisão entre duas partículas vizinhas.

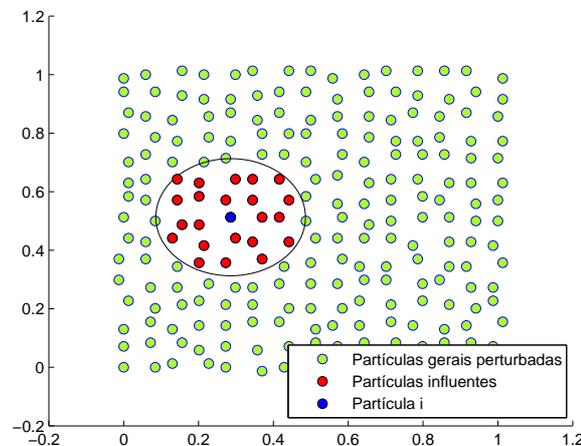


Figura 4.3: Distribuição de 225 partículas perturbadas no domínio.

A Figura 4.3 mostra uma distribuição com distância irregular, randômica e limitada por um raio R , conforme Figura 4.2.

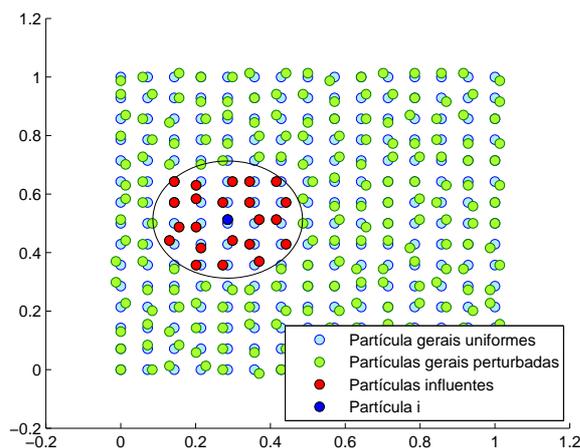


Figura 4.4: Comparação entre as partículas uniformemente distribuídas e suas posições após aplicada a perturbação canônica.

Observa-se na Figura 4.4 que há dois tipos de partículas gerais: uniformes e as perturbadas. Essa representação tem a finalidade de evidenciar a perturbação realizada sobre as partículas uniformes, e deixar claro que apenas as perturbadas estão sendo utilizadas no cálculo da aproximação.

4.1.3 Distribuição caótica

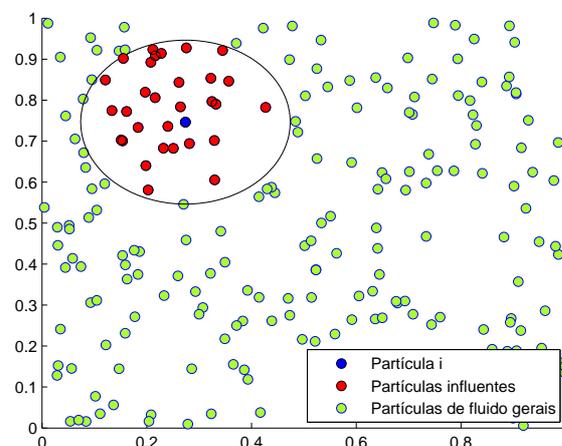


Figura 4.5: Distribuição de 225 partículas de forma caótica no domínio.

Justamente por receber esse nome, o método caótico de distribuição das partículas é o mais realista e, por sua vez, agressivo. Sua distribuição de partículas é independente, podendo ocasionar acúmulo em determinadas regiões e, espaços vazios ou com poucas partículas em outras. A única garantia que se tem é, todas as partículas estarão dispostas dentro do domínio.

4.2 Recrutamento de partículas no suporte compacto

Uma característica do SPH é o domínio de influência que a função núcleo determina, também chamado de suporte compacto da partícula x_i . Este suporte compacto possui um

número finito de partículas, que podem ser denominadas partículas influentes ou vizinhas. São fundamentais na aproximação de f numa determinada posição \mathbf{x}_i .

Os métodos *meshfree* são caracterizados pelo movimento das partículas dentro do domínio em função do tempo, condição essa favorável à mudanças nos suportes compactos, ou seja, o conjunto de partículas influentes pode variar em cada instante de tempo. Dessa forma, surge uma preocupação com a forma de recrutamento das partículas influentes. Destaca-se duas formas de tratamento desse caso, a primeira delas é o recrutamento por força bruta e a segunda será por malha uniforme.

4.2.1 Recrutamento de partículas influentes por força bruta

Esse processo de recrutamento por força bruta consiste em calcular a distância entre a partícula \mathbf{x}_i e todas as outras contidas no domínio. Conforme já mencionado, toda partícula exercerá a função de \mathbf{x}_i em um determinado momento, sendo assim, esta estratégia de recrutamento é computacionalmente cara, tendo uma complexidade de $O(N^2)$, onde N é o número de partículas inseridas em cada direção no domínio (total de partículas é N^2), independente do método de distribuição.

4.2.2 Recrutamento de partículas influentes por malha uniforme

Um método mais adequado que o anterior, consiste em associar uma malha uniforme ao domínio do problema, a distância entre os nós possuem tamanho kh devido ao raio do suporte compacto, isso torna as células quadradas. Dessa forma, percebe-se que as partículas influentes estarão obrigatoriamente na mesma célula ocupada pela partícula \mathbf{x}_i ou nas células imediatamente vizinhas, conforme mostrado na Figura 4.6. Por conseguinte, o recrutamento das partículas que possuem uma distância menor ou igual a kh está condicionada ao cálculo da distância entre \mathbf{x}_i e suas vizinhas pertencentes as 3^n células, onde n é a dimensão do espaço. O recrutamento por malha uniforme tem complexidade $O(N)$ sendo muito empregado nos casos onde h é constante em toda a simulação [24].

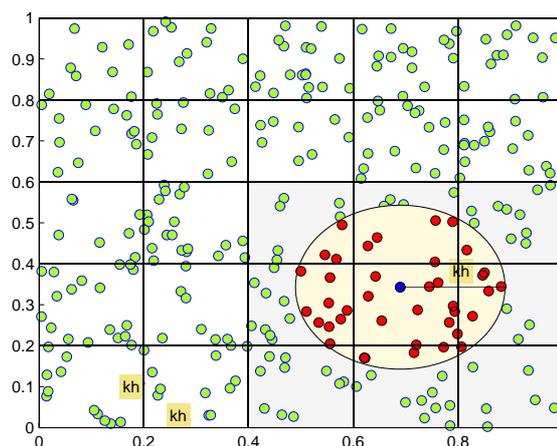


Figura 4.6: Recrutamento de partículas influentes utilizando malha uniforme e distribuição caótica.

A área em cinza representa o espaço onde será realizado o recrutamento. As partículas vermelhas representam o resultado da busca.

4.3 Tratamento de fronteira

A disposição das partículas na região de fronteira é um fator de suma importância para o método SPH, a pergunta que se faz é: há partículas suficientes bem próximas a fronteira? No momento do recrutamento, somente as partículas internas à fronteira serão capturadas, pois considera-se influentes no suporte compacto apenas as partículas com essas características. Nos casos de distribuição uniforme, perturbada e caótica das partículas, não há nenhum tipo de inserção externa ou coincidentemente sobre a fronteira. Nesse contexto, cria-se uma forma de tratamento para que o método possa atender as especificidades dos mais variados tipos de simulações, principalmente onde haja propriedades físicas não nulas nessa região, por exemplo. Para esses casos, denominam-se: tratamento de fronteira por partículas fantasmas e tratamento de fronteira por partículas *dummy*.

4.3.1 O tratamento de fronteira por partículas fantasmas

O tratamento de fronteira por partículas fantasmas consiste em introduzir partículas na região externa e exatamente sobre a fronteira. São dois os tipos de partículas fantasmas, as partículas fantasmas do tipo I, introduzidas por Monaghan [18] e as partículas fantasmas do tipo II, introduzidas por Libersky e Petscheck [11].

As partículas fantasmas do tipo I atuam com força de repulsão sobre as partículas internas do domínio quando elas se aproximam da fronteira. Elas são inseridas sobre a fronteira e participam das aproximações das partículas internas do domínio. Entretanto a posição e as propriedades físicas permanecem fixas no processo de simulação. Sua principal função é impedir que as partículas internas penetrem a fronteira. A força de repulsão sobre uma partícula interna \mathbf{x}_i e uma partícula fantasma do tipo I \mathbf{x}_g é originada pela seguinte expressão:

$$\Gamma_{ig} = \begin{cases} D \left[\left(\frac{r_0}{r_{ig}} \right)^{n_1} - \left(\frac{r_0}{r_{ig}} \right)^{n_2} \right] \frac{\mathbf{x}_{ig}}{r_{ig}^2}, & \frac{r_0}{r_{ig}} \leq 1 \\ 0, & \frac{r_0}{r_{ig}} > 1 \end{cases},$$

sendo $\mathbf{x}_{ig} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_g$, $r_{ig} = \|\mathbf{x}_{ig}\|$. Os parâmetros n_1 e n_2 são usualmente adotados como 12 e 4 respectivamente e D é um parâmetro vinculado ao problema e deve possuir a mesma ordem de grandeza do quadrado da maior velocidade esperada no escoamento. O parâmetro r_0 é o raio de interação de uma partícula fantasma do tipo I com as partículas do interior, convencionalmente estabelecido como um valor próximo a distância inicial entre as partículas interiores.

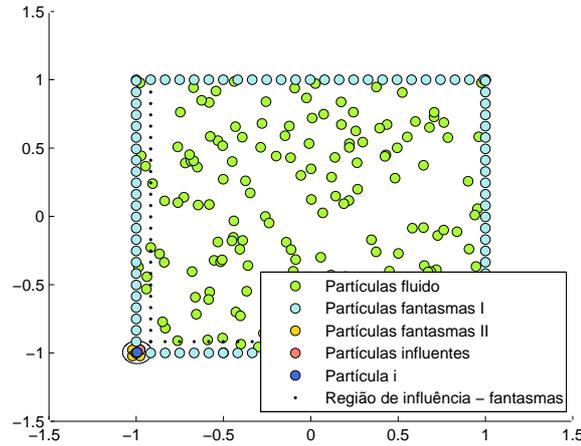


Figura 4.7: Esquema de partículas fantasmas do tipo I e tipo II.

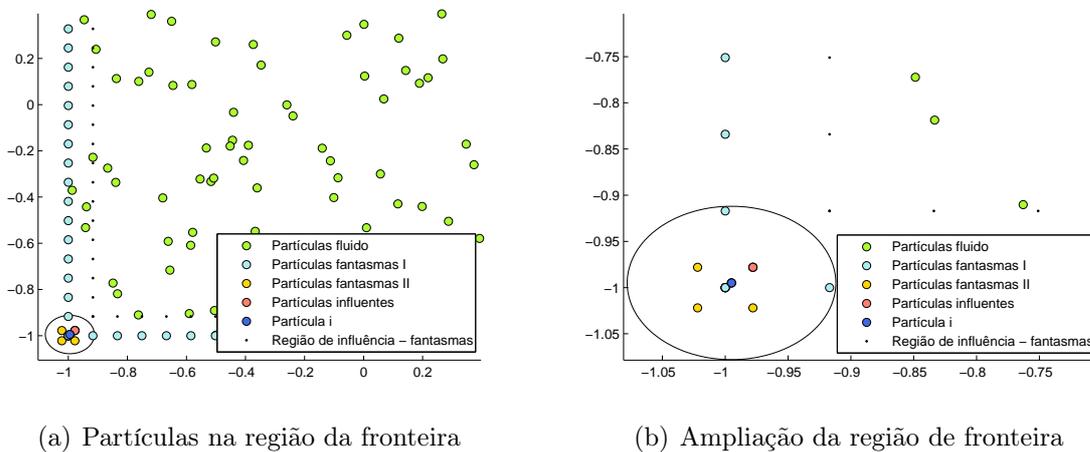


Figura 4.8: Ampliação do esquema de partículas fantasmas do tipo I e II da Figura (4.7).

As partículas fantasmas do tipo II, por sua vez, também não evoluem ao longo do processo de simulação. Sua lei de formação constitui-se da seguinte forma: para cada partícula \mathbf{x}_i localizada dentro de uma faixa de largura κh , a partir da fronteira, uma partícula fantasma é colocada simetricamente em relação a própria fronteira na parte externa do domínio. Elas têm a mesma densidade e pressão que as partículas internas correspondentes, mas velocidade é oposta. As partículas fantasmas do tipo II podem ser aplicadas tanto para tratar fronteiras sólidas como para superfícies livres.

4.3.2 Partículas *dummy*

O tratamento de fronteira por meio de partículas *dummy* se dá pela imposição de camadas de partículas fixas, sendo a primeira localizada exatamente sobre a fronteira, e as demais igualmente espaçadas conforme as características estabelecidas pelo problema. A partir disso, define-se os valores da pressão e velocidade nas partículas *dummy* fixadas sobre a fronteira e, replicadas para as demais partículas *dummy*. Observa-se na Figura 4.9 a aplicação, na parte superior, desse tratamento proposto por Koshizuka e Oka [8].

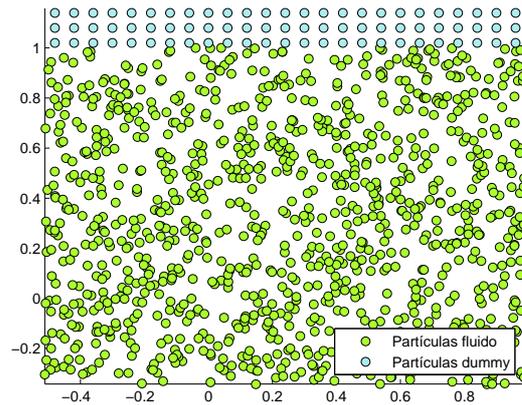


Figura 4.9: Esquema de partículas *dummy*.

Há algumas especificidades de tratamento para casos onde existam quinas na geometria do domínio. Quando as partículas fluido encontram-se internas a quina, as propriedades das partículas *dummy* que estão sobre a quina são repetidas às partículas *dummy* na região da quina, (veja a Figura 4.10(a)). No entanto, quando as partículas fluido encontram-se na parte externa da quina, as partículas *dummy* que estão na diagonal relativa à partícula *dummy* de quina tem valor definido como a média das quatro partículas vizinhas, conforme mostra a figura 4.10(b).

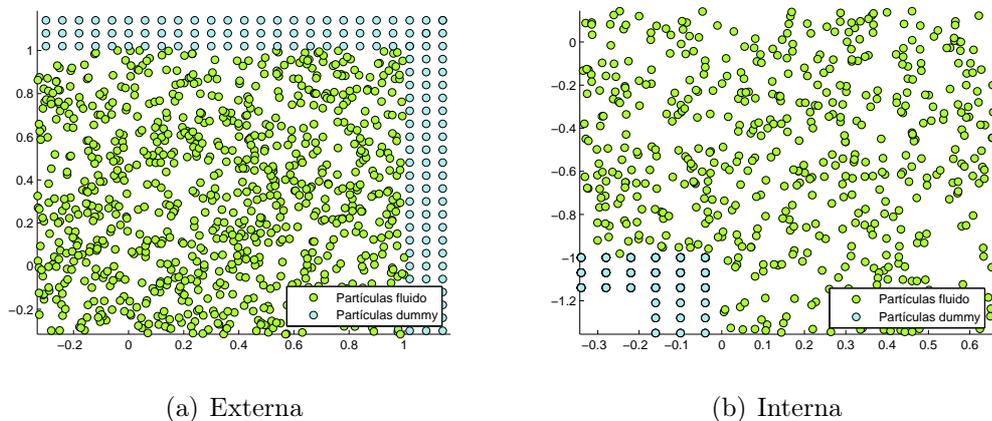


Figura 4.10: Esquema de partículas *dummy* nas quinas (a) externa, e (b) interna.

4.4 Estrutura do código para aproximação do operador gradiente

1. Construção do preâmbulo: nele declara-se todas as informações, tais como valores de alguns parâmetros e escolha de *cases*.
2. Escolha de um modelo de função núcleo.
3. Escolha do *case* que determina o modelo de discretização. Entre as opções estão: discretização uniforme, discretização perturbada e discretização caótica.
4. Escolha do *case* que determina o modelo de operador gradiente que será utilizado nas aproximações, sendo eles, operador **SPH I**, **SPH II** e **SPH III**.

5. Escolha do modelo de campo (constante, linear, quadrático, etc).

Apenas para a discretização perturbada:

- (a) Criação dos vetores com as posições das coordenadas x e y obtidas por meio de uma discretização uniforme.
- (b) Desordenação dos vetores da etapa anterior por meio do modelo de perturbação canônica. De maneira geral, o processo consiste em transladar as partículas para outras posições geradas randomicamente mas com uma limitação, conforme a definição do modelo.
- (c) Armazenamento em vetores (ou matriz) das novas coordenadas das partículas perturbadas.

Apenas para a discretização caótica:

- (a) Criação dos vetores com as posições das coordenadas x e y obtidas por meio de valores randômicos e sem lei de formação.
6. Cálculo e armazenamento da distância entre uma partícula e todas as outras. Processo realizado por modelo de força bruta com esforço computacional de ordem $O(N^2)$, onde N é o número de partículas.
 7. Recrutamento das partículas nos respectivos N suportes compactos. Esse recrutamento armazena a posição das partículas em duas matrizes de ordem N^2 .
 8. Cálculo da distância entre as partículas sobre a fronteira e das internas ao domínio.
 9. Recrutamento das partículas que distam da fronteira no máximo kh .
 10. Recrutamento das partículas que distam dos quatro cantos (domínio quadrado) no máximo kh .
 11. Criação e armazenamento das partículas fantasmas do tipo II para as partículas recrutadas nas duas últimas etapas.
 12. Criação das matrizes “Completas” para cada direção (suas linhas trazem as posições das partículas recrutadas pelo suporte compacto e também as fantasmas do tipo II).
 13. Criação do vetor que contém o número de partículas de cada uma das linhas da matriz “Completa”.
 14. Cálculo da solução exata.
 15. Cálculo da solução aproximada para o operador gradiente **SPH I**, **SPH II** ou **SPH III**, conforme selecionado no preâmbulo.
 16. Organização dos resultados para plotagem gráfica.
 17. Cálculo das condições de consistência.
 18. Cálculo dos erros locais.
 19. Cálculo do erro global.

Consistência do Núcleo SPH: análise com distribuição uniforme das partículas

Tradicionalmente no método de diferenças finitas (MDF), o conceito de consistência estabelece o quanto um sistema de equações discretas se aproxima das equações diferenciais que modelam o problema em questão. De acordo com [24], num problema consistente a existência de estabilidade é uma condição necessária e suficiente para que haja convergência do sistema linear.

De maneira semelhante, a série de Taylor pode ser utilizada para analisar as aproximações SPH. Primeiramente, a análise é considerada sobre as aproximações contínuas do método SPH, oriundas das representações integrais de uma função e suas derivadas. Em seguida, define-se quais propriedades devem ser satisfeitas para que o núcleo SPH seja consistente, de tal forma que as aproximações tenham certa ordem de precisão.

5.1 Aproximação de uma função

Seja f uma função, a convolução entre ela e o núcleo W define a representação integral da função f :

$$f(\mathbf{x}) \cong \int_{\Omega} f(\mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h)d\mathbf{x}'. \quad (5.1)$$

Supondo que f seja suficientemente derivável, podemos expandir $f(x)$ em série de Taylor ao redor do ponto \mathbf{x}

$$f(\mathbf{x}') = \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k h^k f^{(k)}(\mathbf{x})}{k!} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^k + O \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^{n+1}, \quad (5.2)$$

de onde, substituindo essa série de Taylor (5.2) na representação integral (5.1), obtêm-se

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k h^k f^{(k)}(\mathbf{x})}{k!} \int_{\Omega} \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^k W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h)dx' + O \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{h} \right)^{n+1}. \quad (5.3)$$

Comparando os dois lados da igualdade (5.3), pode-se dizer que a representação integral de f é uma aproximação de ordem n , se as condições abaixo forem cumpridas.

$$\left\{ \begin{array}{l} M_0 = \int_{\Omega} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}' = 1 \\ M_1 = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}' = 0 \\ M_2 = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}' = 0 \\ \vdots \\ M_n = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^n W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}' = 0 \end{array} \right. \quad (5.4)$$

Os termos M_n são chamados de momentos do núcleo. Note que na equação (5.4) o momento M_0 é a propriedade de normalização e o M_1 é uma propriedade de núcleos simétricos. Se os dois primeiros momentos são cumpridos, então garante-se que $f(\mathbf{x})$ é recuperada com ordem 1.

5.1.1 Aproximação das derivadas de uma função

Por conveniência, discute-se aqui as aproximações da primeira e segunda derivadas de uma função. Mas esta abordagem não impede que haja uma extensão para derivadas de ordens superiores.

5.1.1.1 Primeira derivada

De maneira análoga, pode-se fazer uma análise da representação integral da primeira derivada de f :

$$f'(\mathbf{x}) \cong \int_S f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) \cdot \mathbf{n} dS - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}'. \quad (5.5)$$

Sendo assim, no primeiro termo do lado direito da equação (5.5) obtêm uma integral de superfície, sendo $S = \partial\Omega$ a superfície e \mathbf{n} o vetor normal unitário a superfície S .

Os momentos da derivada do núcleo são dados por \overline{M}_k e se as relações (5.6) e (5.7) são satisfeitas, então $f'(\mathbf{x})$ é recuperada com ordem n .

$$\left\{ \begin{array}{l} \overline{M}_0 = \int_{\Omega} W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}' = 0 \\ \overline{M}_1 = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}') W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}' = 1 \\ \overline{M}_2 = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}' = 0 \\ \vdots \\ \overline{M}_n = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^n W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}' = 0 \end{array} \right. \quad (5.6)$$

e

$$W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h)|_S = 0. \quad (5.7)$$

A restrição (5.7) implica que a integral de superfície é nula para qualquer função arbitrária.

$$\int_S f(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) \cdot \mathbf{n} dS = 0.$$

A primeira expressão da equação (5.6) é na verdade uma outra forma da representação de (5.7) como observa-se em seguida.

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (1)W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h)d\mathbf{x}' &= \int_S 1W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) \cdot \mathbf{nd}S - \int_{\Omega} (1)W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h)d\mathbf{x}' \\ \Rightarrow \int_{\Omega} (1)W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h)d\mathbf{x}' &= \int_S 1W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) \cdot \mathbf{nd}S = 0. \end{aligned}$$

As demais relações podem ser escrita sob a forma:

$$\overline{M}_k = kM_{k-1} \quad \text{para } k = 1, 2, \dots, n.$$

De fato,

$$\begin{aligned} M_k &= \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^k W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h)d\mathbf{x}' = -\frac{1}{(k+1)} \int_{\Omega} [(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+1}]' W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h)d\mathbf{x}' \\ &= -\frac{1}{(k+1)} \int_S (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+1} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) \cdot \mathbf{nd}S \\ &\quad + \frac{1}{(k+1)} \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^{k+1} W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h)d\mathbf{x}' = \frac{1}{k+1} \overline{M}_{k+1}. \end{aligned}$$

Desse modo pode-se verificar as demais relações. Sabendo que a condição M_0 é satisfeita tem-se \overline{M}_1 também satisfeita. Assim, pode-se concluir que $f'(\mathbf{x})$ é recuperada com ordem 1.

5.1.1.2 Segunda derivada

De maneira análoga, pode-se fazer uma análise da representação integral da segunda derivada de f :

$$f''(\mathbf{x}) \cong \int_S f'(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) \cdot \mathbf{nd}S - \int_{\Omega} f'(\mathbf{x}') W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h)d\mathbf{x}'. \quad (5.8)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \overline{M}_0 = \int_{\Omega} W''(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h)d\mathbf{x}' = 0 \\ \overline{M}_1 = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}') W''(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h)d\mathbf{x}' = 0 \\ \overline{M}_2 = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 W''(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h)d\mathbf{x}' = 2, \\ \vdots \\ \overline{M}_n = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^n W''(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h)d\mathbf{x}' = 0 \end{array} \right. \quad (5.9)$$

$$W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h)|_S = 0 \quad (5.10)$$

e

$$W'(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h)|_S = 0 \quad (5.11)$$

Portanto, pode-se verificar as demais relações através da equação (5.11). Os momentos \overline{M}_0 , \overline{M}_1 e \overline{M}_2 são cumpridos, conclui-se então que $f''(\mathbf{x})$ é recuperada com ordem 2.

Dessa forma, percebe-se que uma ordem n de precisão para a função e suas duas primeiras derivadas só será atingida se a função núcleo satisfizer as equações (5.4), (5.6) e (5.9).

Contudo, para garantir a convergência, uma função discretizada usando o método de diferenças finitas deve satisfazer um determinado grau de consistência. Sabe-se que o grau de consistência é constituído pela maior ordem polinomial exatamente reproduzida ao se utilizar uma função base [10]. A representação integral reproduz fielmente polinômios de grau menor ou igual a n desde que os momentos (5.4) sejam cumpridos pela função núcleo [14].

5.2 Consistência da aproximação por partículas

Viu-se anteriormente o conceito de consistência para as representações integrais. No entanto, essa consistência não pode ser assumida pelo método SPH devido ao segundo passo de sua estruturação: a aproximação por partículas.

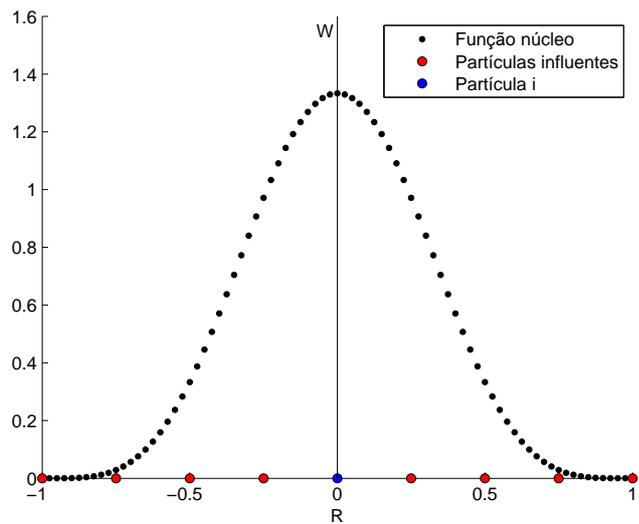
O problema caracteriza-se pelo fato de que as aproximações dos momentos M_n da equação (5.9) não são cumpridos em métodos de partículas [23, 2]. Esse problema é denominado como: inconsistência de partículas. A forma discreta da equação (5.4) é dada por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{j=1}^N W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j; h) \Delta v_j = 1 \\ \sum_{j=1}^N (\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j; h) \Delta v_j = 0 \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^N (\mathbf{x} - \mathbf{x}_j)^n W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j; h) \Delta v_j = 0 \end{array} \right. \quad (5.12)$$

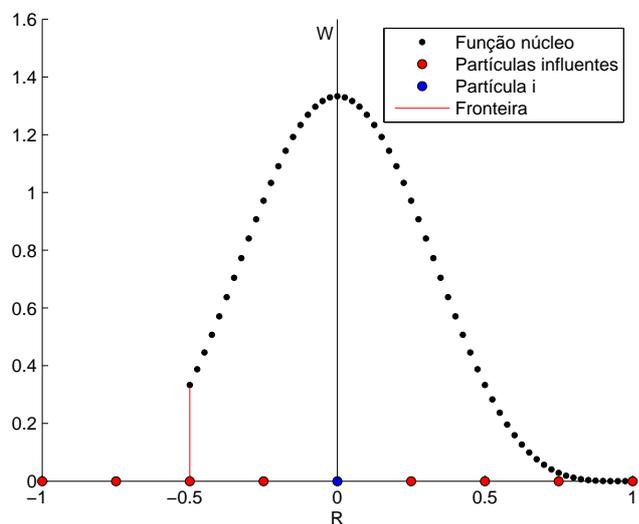
sendo N o número de partículas que pertencem ao suporte compacto da partícula localizada em \mathbf{x} .

As condições de consistência podem nem sempre ser cumpridas, isso ocorre quando não há distribuição uniforme das partículas, Figura 5.1(a), havendo também truncamento da função núcleo na fronteira, a simetria de W bem como das partículas é prejudicada, assim, verifica-se pelas equações 5.12, a consistência por partículas. Um exemplo simples do truncamento da função núcleo na fronteira do domínio pode ser observado na Figura 5.1(b), independente do modelo de distribuição das partículas. Nesses casos, apenas há influência das partículas que estão dentro do domínio do problema e contidas no suporte, um típico modelo que caracterizaria a inserção de partículas fantasmas, logo a primeira expressão da equação (5.12) difere de 1, e as demais expressões da equação não são nulas, consequência do truncamento da função núcleo na fronteira.

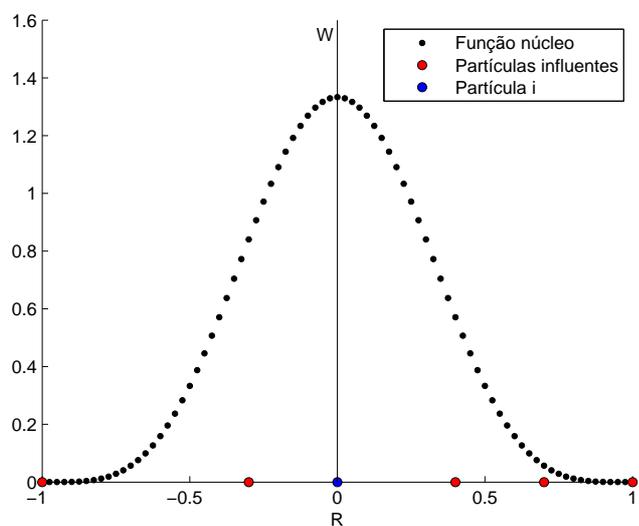
Há também o caso em que as partículas são distribuídas de maneira não uniforme. Assim, até as partículas cujo o suporte compacto não intercepta a fronteira, poderiam não cumprir as condições de consistência, Figura 5.1(c).



(a)



(b)



(c)

Figura 5.1: Representação de uma função núcleo com diferentes distribuições de partículas e truncamento na fronteira. Fonte [24]

Conforme as legendas da Figura 5.1, em (a) encontra-se as partículas pertencentes ao suporte compacto com distribuição uniforme; (b) destaca o caso de colisão entre o suporte compacto e a fronteira do problema; (c) as partículas distribuídas de maneira perturbada ou caótica dentro do suporte.

Há diversas maneiras de tentar obter as condições de consistência para o modelo discreto. Liu, Liu e Lam [12] descrevem um algoritmo para a construção de núcleo polinomial de grau n , sendo ele

$$\begin{aligned}
 W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) &= b_0(\mathbf{x}, h) + b_1(\mathbf{x}, h) \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_j}{h} \right) + b_2(\mathbf{x}, h) \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_j}{h} \right)^2 + \dots \\
 \Rightarrow W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) &= \sum_{I=0}^k b_I(\mathbf{x}, h) \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_j}{h} \right)^I.
 \end{aligned} \tag{5.13}$$

de forma que as condições de consistência discretas para uma aproximação de ordem n (equação (5.12)) sejam cumpridas.

Após algumas manipulações, a equação (5.12) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\begin{cases}
 \sum_{j=1}^N \left[\sum_{I=0}^k b_I(\mathbf{x}, h) \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_j}{h} \right)^I \right] \Delta v_j = 1 \\
 \sum_{j=1}^N \left[\sum_{I=0}^k b_I(\mathbf{x}, h) \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_j}{h} \right)^{I+1} \right] \Delta v_j = 0, \\
 \vdots \\
 \sum_{j=1}^N \left[\sum_{I=0}^k b_I(\mathbf{x}, h) \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_j}{h} \right)^{I+n} \right] \Delta v_j = 0
 \end{cases} \tag{5.14}$$

e

$$m_k(\mathbf{x}, h) = \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_j}{h} \right)^k \Delta v_j, \tag{5.15}$$

os coeficientes $b_I(\mathbf{x}, h)$ são determinados pelo algoritmo ao resolver o seguinte sistema:

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

Após a determinação dos coeficientes $b_I(\mathbf{x}, h)$, o núcleo polinomial da equação (5.13) estabelece uma aproximação por partículas com consistência de ordem n . No entanto, algumas características devem ser levadas em consideração:

- Custo computacional elevado, pois o método consiste em construir uma matriz de momentos e resolver o sistema originado por ela para cada partícula.
- A matriz deve ser não-singular e, portanto, a distribuição das partículas deve satisfazer certas condições.
- As propriedades, positividade e simetria da função núcleo podem não ser cumpridas.

Influência da Desordem das Partículas e do Comprimento de Suavização Sobre os Operadores SPH

Originalmente, conforme [17], mostrou-se que a interpolação SPH é contínua e consistente de segunda ordem, por outro lado, o SPH é conhecido por perder consistência em malhas perturbadas, então, Quinlan [26] destacou que a aplicação SPH sobre estas malhas induzirá um erro de discretização adicional (de magnitude $O(h)$ ou divergente em $\frac{1}{h}$, sendo h o comprimento de suavização) que pode ser predominante, dependendo do nível de perturbação e relação entre a razão $\frac{\Delta x}{h}$, onde Δx é o espaçamento das partículas não perturbadas.

É possível observar por meio de relatos em [27], a perda de precisão dos operadores gradiente e laplaciano numa malha perturbada utilizando o MPS, relacionado ao SPH, e define-se em [1] uma medida de desordem das partículas com a estimativa da influência na precisão de um tipo de expressão do gradiente. Para contornar este problema de inconsistência, uma alternativa é estimar o erro introduzido pelos operadores SPH, e escolher o mais robusto.

A análise é baseada na utilização de partículas fixas mas desordenadas, ou seja, que estão espacialmente dispostas de forma randômica, e não mais uniformemente distribuídas. São efetuados vários testes visando verificar a influência de uma dada desordem, o comprimento de suavização e um número crescente de partículas, para os operadores SPH (gradiente e laplaciano).

Considera-se a desordem canônica, conforme [6], que especifica uma reconfiguração de partículas uniformemente distribuídas por meio de uma perturbação leve que muda randomicamente a posição de cada uma das partículas.

6.1 Desordem canônica de partículas

A perturbação canônica está definida para o caso bidimensional, como uma mudança aleatória de partículas do seu estado de equilíbrio e internas a uma circunferência de raio $R=\eta\Delta x$, com $\eta \in [0, 0.5[$, onde Δx é a distância entre as partículas não perturbadas. O parâmetro θ (equação da circunferência) é escolhido aleatoriamente com variação de 0 a 2π . O caso tridimensional procede de maneira análoga.

A Figura 6.1 destaca a região de perturbação de uma partícula que é limitada por uma circunferência de raio R . Nela consta alguns exemplos de onde a perturbação canônica

poderia transladar a partícula.

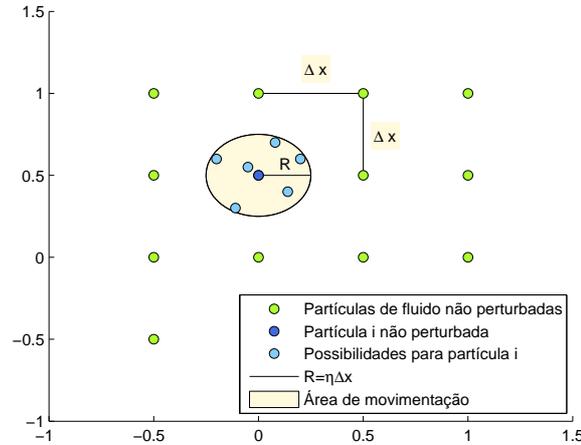


Figura 6.1: Esquema de desordem ou perturbação canônica de partículas com $\Delta x = \Delta y$.

A perturbação η varia num intervalo semi-fechado de tal forma que o máximo valor assumido seja incapaz de gerar uma sobreposição de partículas, evitando também uma aglomeração numa mesma região. Dessa forma, quando η tender a 0.5 a partícula nunca atingirá $\frac{1}{2}\Delta x$. Os valores atribuídos para η em todas as simulações neste trabalho são aleatoriamente escolhidos de acordo com o modelo de perturbação canônica. Utiliza-se alguns dos valores de η encontrados em [?] para análise comparativa.

6.2 Modelo de malha para testes numéricos

Os testes serão conduzidos em uma malha bidimensional, quadrada de comprimento L fixo. As partículas fantasmas não serão utilizadas nas primeiras verificações, a fim de não embutir influências da fronteira no erro de consistência, entretanto farão parte das análises globais. Adota-se a razão $\frac{h}{\Delta x}$ fixa, e o comprimento de suavização é estudado variando o valor de Δx .

Para os testes de consistência, o número de partículas é mantido constante, enquanto nos testes dos operadores, o comprimento L é constante, de modo que o número de partículas aumenta quando Δx diminui.

6.3 Avaliação da consistência

6.3.1 Definição

A consistência é comumente estudada por meio de uma distribuição uniforme das partículas, de certa forma, equivalente a uma malha regular. Na prática dificilmente isso acontece. Assim, considera-se uma distribuição randômica, ou, em outras palavras, pergunta-se, de que maneira uma desordem, por exemplo, representada por uma perturbação na regularidade das partículas, influencia a precisão do método?

Dessa forma, a consistência é estudada como a capacidade do método em resolver um problema com solução polinomial, de forma a recuperar a n -ésima derivada do polinômio de p -ésima ordem e rotulado de C_p^n . Note que a recuperação do polinômio não garante

que suas derivadas também sejam recuperadas. Portanto, é preciso levar em conta a consistência para as derivadas também.

As quatro primeiras condições de consistência são, C_0^0 , C_0^1 , C_1^0 e C_1^1 , e suas expressões SPH são descritas como:

$$\sum V_j W_{ij} = 1 \quad (6.1)$$

$$\sum V_j \nabla W_{ij} = 0 \quad (6.2)$$

$$\sum V_j \mathbf{x}_{ij} \nabla W_{ij} = 0 \quad (6.3)$$

$$\sum V_j \mathbf{x}_j \otimes \nabla W_{ij} = I, \quad (6.4)$$

onde V , ∇ , \otimes e I são respectivamente, volume, operador gradiente, produto tensorial e a matriz identidade. Cumprindo as quatro condições acima, pode-se afirmar que é possível recuperar uma função linear e sua primeira derivada.

6.3.2 Funções erro

Cada condição de consistência C_p^n é quantificada por uma função de erro local $\xi_{p,i}^n$, em cada partícula, definido por uma norma $L2$, conforme [6].

$$\xi_{0,i}^0 = \left(\sum V_j W_{ij} - 1 \right)^2 \quad (6.5)$$

$$\xi_{0,i}^1 = \left\| \sum V_j \nabla W_{ij} - 0 \right\|^2 h^2 \quad (6.6)$$

$$\xi_{1,i}^0 = \left\| \sum V_j \mathbf{x}_{ij} \nabla W_{ij} - 0 \right\|^2 \frac{1}{h^2} \quad (6.7)$$

$$\xi_{1,i}^1 = \left\| \sum V_j \mathbf{x}_j \otimes \nabla W_{ij} - I \right\|^2. \quad (6.8)$$

Funções $\xi_{p,i}^n$ são nulas quando a consistência é perfeitamente cumprida e, aumentam a medida que falta consistência. A segunda equação é multiplicada por h^2 e a terceira dividida, isso para recuperar um erro normalizado de acordo com [6].

A função erro global E_p^n é a raiz quadrada do erro local médio incluindo as partículas de fronteira.

$$E_p^n = \sqrt{\langle \xi_p^n \rangle}. \quad (6.9)$$

6.3.3 Resultados de testes da consistência

Como conclusão, as quatro primeiras condições de consistência são sempre recuperadas sobre malhas regulares, enquanto que nenhuma delas está perfeitamente cumprida em malhas perturbadas. Os resíduos mostram uma dependência linear sobre a perturbação canônica, sendo maior em C_1^1 . Quando o número de partículas aumenta, C_1^0 é recuperado, enquanto C_0^0 e C_1^1 mostram um resíduo constante e C_0^1 diverge. Este último ponto é uma séria limitação do SPH em simular pequenos problemas e executar testes de convergência. Outra análise desenvolvida, de forma análoga, considera a variação do comprimento de suavização.

6.4 Avaliação do operador gradiente SPH

A avaliação da precisão do operador gradiente é realizada mantendo o tamanho do domínio constante e efetuando a diminuição do comprimento de suavização, o que carac-

teriza a necessidade de aumentar o número de partículas para que não haja uma queda da quantidade delas no suporte compacto. Como o comportamento de uma experiência realista independe de qualquer malha, o fator escala de normalização k , utilizado na função núcleo está diretamente vinculado a dimensão L do domínio e não de h .

6.4.1 Tipos de Gradiente

Seguindo [6], os três tipos de operador gradiente vistos anteriormente serão reescritos aqui seguindo uma abordagem de volume:

$$G_0 := \sum V_j f(\mathbf{x}_j) \nabla W_{ij} \quad (6.10)$$

$$G_+ := \sum V_j (f(\mathbf{x}_j) + f(\mathbf{x}_i)) \nabla W_{ij} \quad (6.11)$$

$$G_- := \sum V_j (f(\mathbf{x}_j) - f(\mathbf{x}_i)) \nabla W_{ij} \quad (6.12)$$

O G_0 corresponde a expressão canônica do operador gradiente, ou seja, equivalente ao **SPH I**. G_- e G_+ são respectivamente, equivalentes aos operadores **SPH II** e **SPH III**. O propósito de G_+ é conservar localmente o momento linear, por outro lado, G_- é construído para assegurar que o gradiente de um campo escalar será nulo, mesmo que C_0^1 não seja assegurada. Note que G_0 e G_- não conservam localmente o momento linear.

6.4.2 Função da condição de consistência C_0^1 na estimativa do gradiente

Escrevendo o operador gradiente G_K em termos gerais, têm-se

$$\nabla_{Kf(\mathbf{x}_i)} = \sum V_j (f(\mathbf{x}_j) + Kf(\mathbf{x}_i)) \nabla W_{ij}, \quad (6.13)$$

e, conseqüentemente, após uma manipulação algébrica

$$\nabla_{Kf(\mathbf{x}_i)} = \sum V_j f(\mathbf{x}_j) \nabla W_{ij} + Kf(\mathbf{x}_i) \sum V_j \nabla W_{ij}. \quad (6.14)$$

O primeiro termo do lado direito da equação (6.13) é o gradiente canônico e o segundo termo mostra a condição C_0^1 . Isso sugere que quando C_0^1 não é cumprida, os três modelos de gradiente não são idênticos e o erro de G_0 é proporcional a $f(\mathbf{x}_i)$ para $\nabla_{+f(\mathbf{x}_i)}$ e $\nabla_{-f(\mathbf{x}_i)}$. Além disso, quando considerado um campo constante F_0 , o gradiente $\nabla_0 F_0$ e $\nabla_+ F_0$ são explicitamente:

$$\nabla_0 F_0 = F_0 \sum V_j \nabla W_{ij}, \quad (6.15)$$

$$\nabla_+ F_0 = 2F_0 \sum V_j \nabla W_{ij}, \quad (6.16)$$

demonstrando que G_0 e G_+ não podem obter um gradiente nulo para um campo constante quando C_0^1 não é cumprida; G_+ é de duas vezes mais sensível à condição C_0^1 de G_0 devido ao fator 2 na equação (6.16).

6.4.3 Tipos de Campos

Os três campos escalares definidos aqui são, constante F_0 , linear F_1 e quadrático F_2 . Define-se, respectivamente, pelas seguintes expressões:

$$F_0(x, y) = K \quad (6.17)$$

$$F_1(x, y) = K_x \xi_1 + K_y \xi_2 \quad (6.18)$$

$$F_2(x, y) = K_x \frac{\xi_1^2}{2} + K_y \frac{\xi_2^2}{2} \quad (6.19)$$

de modo que K_x e K_y sejam os valores das inclinações normalizadas ou curvaturas normalizadas para F_0 , F_1 e F_2 , respectivamente, e ainda $\xi_1 = \frac{x}{L}$ e $\xi_2 = \frac{y}{L}$, onde x e y são as coordenadas normalizadas.

Conforme mostrado em [6], o erro global dos operadores gradiente independe da direção, desde que $K_x = K_y$ ($K_x = K_y = K_z$ para 3D). Isso ocorre devido a essência isotrópica do núcleo SPH que redistribui o erro para todas as direções. Essa observação implica que a direção do gradiente influenciada pelas partículas perturbadas não pode distinguir magnitudes diferentes ao longo dos eixos. Por exemplo, a função $f(x, y) = 1000x + y$ não distribui de forma homogênea o erro em ambas as direções, isso porque $K_x = 10^3$ e $K_y = 10^0$.

Dessa forma, adota-se $K_x = K_y$ em todos os modelos de campos estudados e as análises restringem-se apenas à direção x , assim sendo, para estudar a intensidade do gradiente, K_x (K para F_0) foi variado ao longo dos seguintes valores: 10^{-2} , 10^{-1} , 10^0 , 10^1 e 10^2 .

6.4.4 Funções Erro

Os desvios entre os operadores gradiente SPH e gradiente analítico são medidos localmente através do erro normalizado:

$$\lambda_{x_j}^i(G_K) = \frac{1}{N_i^2} \left(\nabla_{K, x_j} F_i - \frac{\partial F_i}{\partial x_j} \right)^2 \quad (6.20)$$

onde $\lambda_{x_j}^i$ representa a x_j componente de G_K . O termo N_i é o fator normalização igual ao número de partículas presentes em cada conjunto $V_i = \{\mathbf{x}_j, \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| \leq kh\}$, centrado em \mathbf{x}_i , para o campo constante F_0 e para a magnitude do gradiente analítico dos outros dois campos. Note que as derivadas $\frac{\partial F_i}{\partial x_j}$ são nulas, exceto:

$$\frac{\partial F_1}{\partial x} = \frac{K_x}{L} \quad (6.21)$$

$$(6.22)$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial x} = \frac{K_x x}{L^2} \quad (6.23)$$

De maneira similar ao estudo de consistência, determina-se o erro global $\Lambda_{x_j}^i(G_K)$ pela raiz quadrada do erro local médio.

6.4.5 Resultados

6.4.5.1 Campo Constante

O erro global é expresso como uma função que depende de h , η e K , na forma $\Lambda_x^0(h, \eta, K) = a_1 h^{a_2} \eta^{a_3} K^{a_4}$ e (a_1, a_2, a_3, a_4) são adaptados para todos os casos, conforme abaixo:

$$\Lambda_x^0(G_0) = 3.12e - 03 h^{-1.03} \eta^{0.985} K^{-0.0857} \quad (6.24)$$

$$\Lambda_x^0(G_+) = 6.11e - 03 h^{-1.04} \eta^{0.987} K^{-0.0848} \quad (6.25)$$

Essas equações indicam uma aceitável proporcionalidade $\frac{\eta}{h}$ e uma dependência fraca em relação a K , e confirma que G_+ é duas vezes mais sensível que G_0 . As estimativas foram verificadas para o campo constante $F_0(x, y) = K$, onde $K = 1$, e variando os valores de h e η , conforme observa-se nas figuras a seguir.

Quando $\eta = 0$, todos os três operadores geram boa aproximação. Para $\eta \neq 0$, o erro é proporcional a $\frac{1}{h}$ e proporcional a η . Surpreendentemente, Λ_x^0 diminui quando K aumenta considerando as equações (6.15) e (6.16) com o erro normalizado para K . Isto pode ser explicado pelo fato de que valores mais baixos para K são mais sensíveis a ponto flutuante do erro de truncamento. Como esperado, o desvio de G_+ é o dobro maior do que o de G_0 , G_- determina exatamente o gradiente nulo, sendo assim, não será representado. As comparações entre o modelo de estimativa do erro e os resultados numéricos serão apresentadas apenas para o gradiente do campo linear.

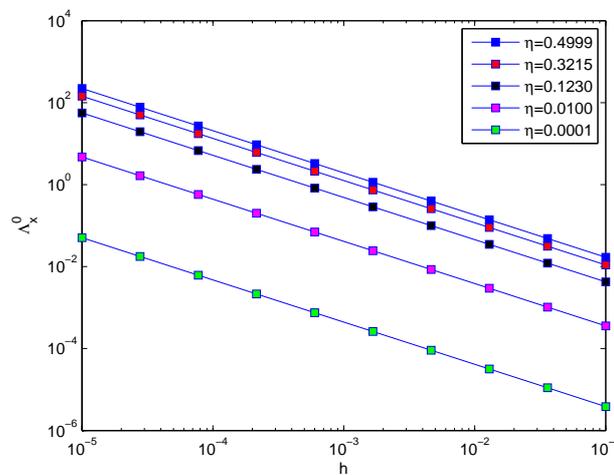


Figura 6.2: Análise da estimativa do erro global de G_0 para campo constante via parâmetro h .

A Figura 6.2 aponta uma acentuada queda no erro global do operador G_0 a medida que aumenta-se o tamanho de h . Isso deve-se ao fato de possuir uma maior concentração de partículas no suporte compacto. Evidencia também que quanto menor a perturbação η e maior o tamanho de h , mais próximo de zero estará o erro global, desde que haja um aumento do número de partículas. As mesmas características podem ser observadas nas Figuras 6.3 e 6.4. Os testes foram realizados com base na diminuição do h , fator que determina o raio do suporte (possivelmente multiplicado por um fator escalar k) compacto e delimita o número de partículas presentes na região de influência da função núcleo.

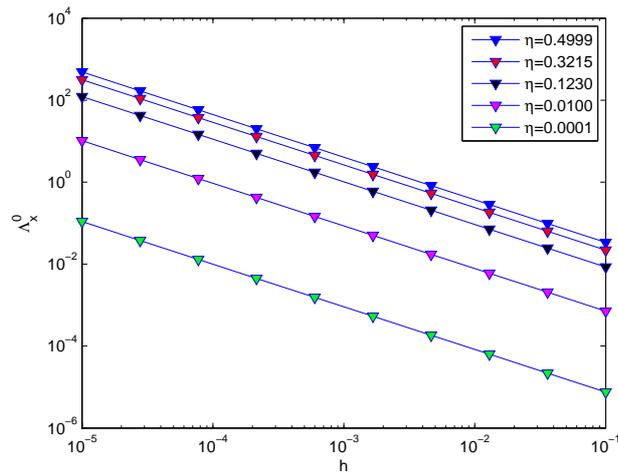


Figura 6.3: Análise da estimativa do erro global de G_+ para campo constante via parâmetro h .

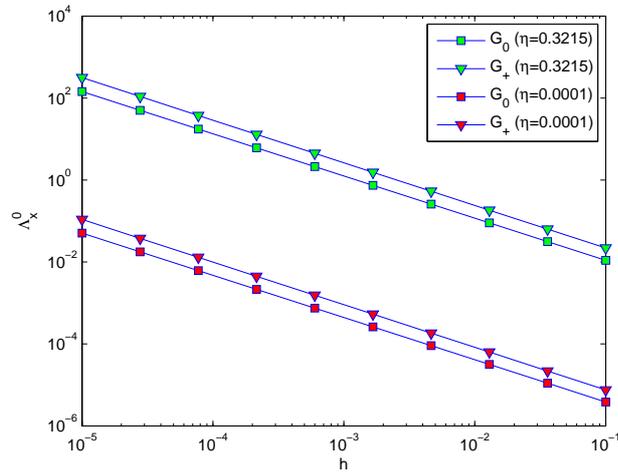


Figura 6.4: Comparação do erro global entre G_0 e G_+ para campo constante via parâmetro h .

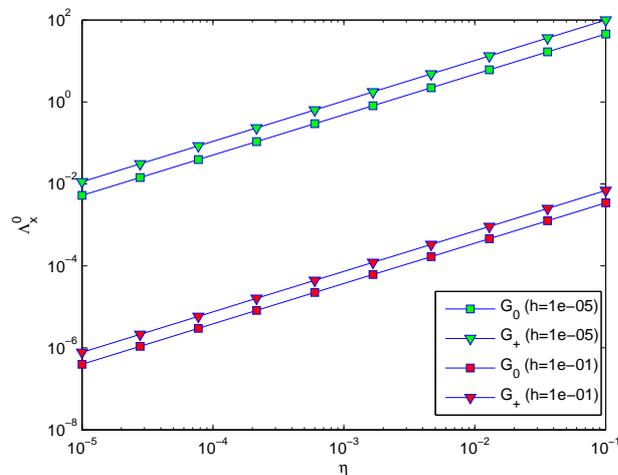


Figura 6.5: Comparação da estimativa do erro global entre G_0 e G_+ para campo constante via parâmetro η .

A Figura 6.5 leva em consideração a variação da perturbação η , e afirma que menores perturbações geram menos impacto na aproximação dos operadores. Note que o operador G_- não foi mostrado nas figuras porque apresentou aproximações adequadas para o gradiente nulo.

6.4.5.2 Campo Linear

De maneira análoga ao caso anterior, obtêm-se os erros globais para campos lineares. Em todos os tipos de campos abordados, as influências do erro global são as variáveis h , η e K_x .

$$\Lambda_x^1(G_0) = 4.36e - 03 h^{-0.941} \eta^{0.988} K_x^{-0.0847} \quad (6.26)$$

$$\Lambda_x^1(G_+) = 9.12e - 03 h^{-0.936} \eta^{0.989} K_x^{-0.0854} \quad (6.27)$$

$$\Lambda_x^1(G_-) = 1.70e - 01 h^{-0.0406} \eta^{1.15} K_x^{-0.0903} \quad (6.28)$$

Os testes foram verificados para o campo constante $F_1(x, y) = K_x \xi_1 + K_y \xi_2$, onde $K_x = K_y = 1$, com função núcleo *new* quártico, $\alpha = 1.3$ e variando os valores de h e η , conforme observado em cada figura.

As equações descrevem as mesmas características apresentadas em campos constantes, o erro é aproximadamente proporcional a $\frac{\eta}{h}$ para G_0 e G_+ . Surpreendentemente, G_- se comporta muito melhor que G_0 e G_+ , uma vez que apresenta: nenhuma influência de h ; desvios diferentes de zero apenas para grandes transtornos nas partículas ou gradientes muito fortes.

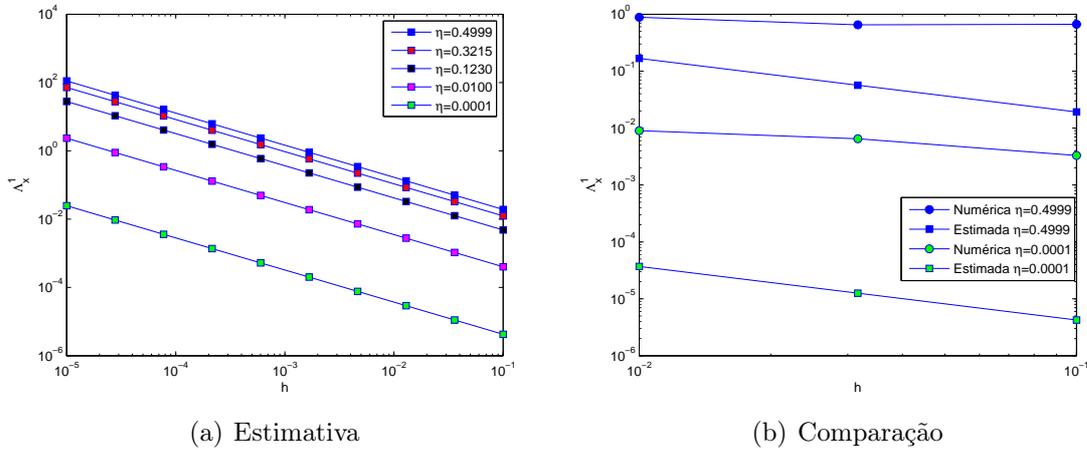


Figura 6.6: Análise do erro global de G_0 para campo linear via parâmetro h .

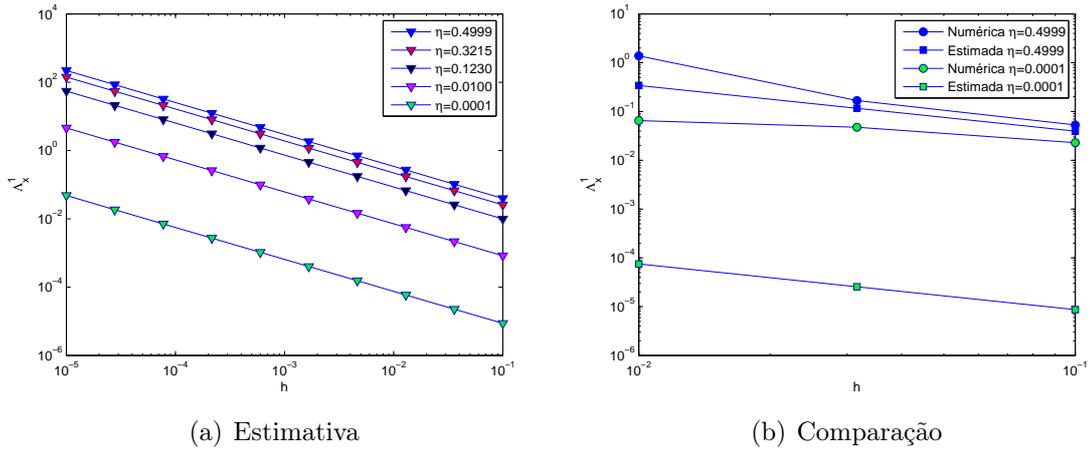


Figura 6.7: Análise do erro global de G_+ para campo linear via parâmetro h .

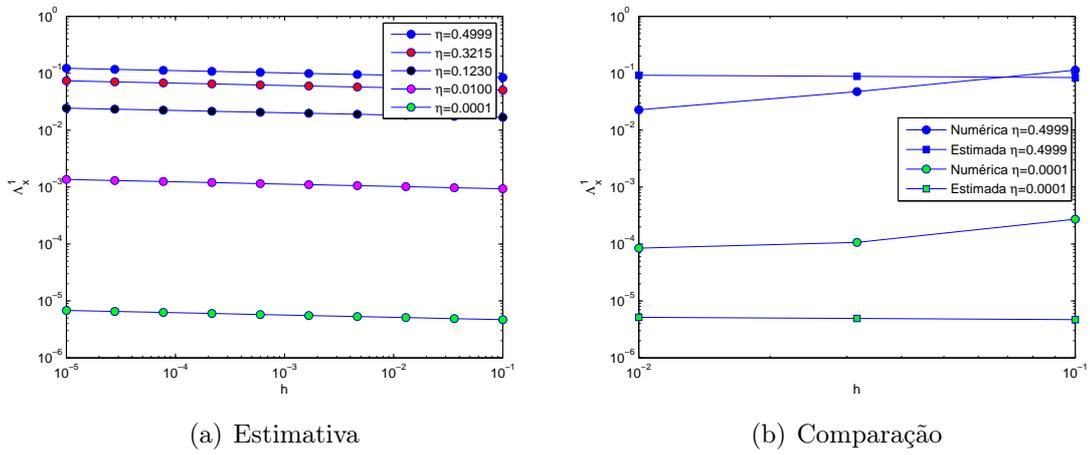


Figura 6.8: Análise do erro global de G_- para campo linear via parâmetro h .

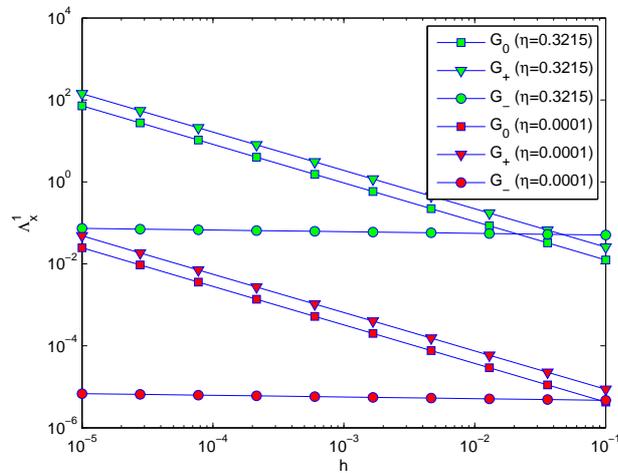


Figura 6.9: Comparação da estimativa do erro global entre G_0 , G_+ e G_- para campo linear via parâmetro h .

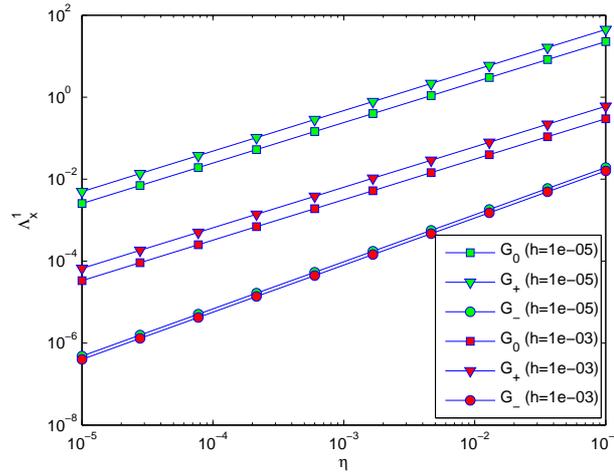


Figura 6.10: Comparação da estimativa do erro global entre G_0 , G_+ e G_- para campo linear via parâmetro η .

Assim como nos casos anteriores para campo constante, os operadores G_0 e G_+ mantiveram as mesmas características. Destaca-se os resultados obtidos para as aproximações de G_- , ficando evidente a irrelevante interferência em relação ao tamanho do comprimento de suavização. Dessa forma, G_- está suscetível apenas a perturbação canônica.

As análises das estimativas indicam que o operador G_+ apresenta o maior de todos os erros, que corresponde a duas vezes o valor de G_0 . Provavelmente, deve-se ao fato do sinal + embutido, originando um acúmulo sobre $f(\mathbf{x}_i)$ e $f(\mathbf{x}_j)$, entretanto, as soluções numéricas apresentaram dificuldades em acompanhar o perfil dos erros. Enquanto isso, o operador G_- apresentou o menor de todos os desvios e uma baixa dependência sobre o comprimento de suavização h , mantendo o perfil nas soluções numéricas. Do ponto de vista numérico é o melhor a ser utilizado, porém, não conserva localmente o momento linear, e estudos mais detalhados faz-se necessário para estimar se este inconveniente sobrecarrega os benefícios obtidos a partir da sua superioridade em relação a desordem das partículas.

6.5 Avaliação do operador laplaciano SPH

6.5.1 Tipos de laplaciano

Os operadores laplaciano de acordo com [16] são dados da seguinte forma:

$$\Delta_{MCG}(\mathbf{u})_i := \frac{2}{\pi}(d+2) \sum V_j \frac{\mathbf{x}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij}}{\mathbf{x}_{ij}^2 + \theta^2} \nabla W_{ij} \quad (6.29)$$

$$\Delta_{MEA}(\mathbf{u})_i := 2 \sum V_j \frac{\nabla W_{ij} \cdot \mathbf{x}_{ij}}{\mathbf{x}_{ij}^2 + \eta^2} \mathbf{v}_{ij} \quad (6.30)$$

onde d e $\theta = 0.01h^2$ são a dimensão e um termo para evitar denominador nulo, respectivamente. O termo $\mathbf{r}_{ab} \cdot \mathbf{v}_{ab}$ é o produto escalar entre o vetor distância das partículas e o vetor diferença de velocidades. O fator $\frac{1}{\pi}$ foi adicionado para coincidir com o laplaciano analítico. Como $\Delta_{MCG}(\mathbf{u})_i$ é orientado ao longo do eixo entre partículas, a sua força de tensão é axial e o momento angular é localmente conservado [6]. O laplaciano $\Delta_{MEA}(\mathbf{u})_i$ está orientado ao longo do vetor diferença de velocidades \mathbf{v}_{ij} de modo que o momento angular não é conservado localmente.

6.5.2 Tipos de campos

A medida que o papel mais importante do laplaciano é modelar a tensão viscosa baseado na segunda derivada da velocidade, ele é aplicado aqui a um campo de vetores. Os campos investigados são os mesmos que para a investigação dos gradientes, entretanto aplicados à componente x da velocidade:

$$\mathbf{U}_0(x) = (K_x, 0, 0) \quad (6.31)$$

$$\mathbf{U}_1(x) = (K_x \xi, 0, 0) \quad (6.32)$$

$$\mathbf{U}_2(x) = (K_x \frac{\xi}{2}, 0, 0) \quad (6.33)$$

O laplaciano corresponde a uma segunda derivada em relação a x .

6.5.3 Função erro

Define-se a função erro em termos gerais como:

$$\omega_{x_j}^i(\Delta_\phi) = \frac{1}{N_i^2} \left(\Delta_{\phi, x_j} \mathbf{U}_i - \sum_k \frac{\partial^2 \mathbf{U}_{i, x_j}}{\partial x_k^2} \right)^2 \quad (6.34)$$

onde Δ_{ϕ, x_j} é a componente x_j do laplaciano ϕ (MCG ou MEA). O laplaciano analítico (termo entre parênteses) é igual a $\frac{\partial^2 \mathbf{U}_{i, x_j}}{\partial x_k^2}$ quando $x_j = x_k = x$ e nulo caso contrário, o fator de normalização N_i é o mesmo que para o caso do gradiente. O erro global Ω é calculado conforme equação (6.9).

6.5.4 Resultados

6.5.4.1 Campo constante

Devido à presença do termo em \mathbf{v}_{ab} em ambas as expressões, o operador laplaciano SPH de um campo constante é sempre nulo, independentemente do comprimento de suavização ou desordem das partículas.

6.5.4.2 Campo linear

Os operadores laplaciano seguem as mesmas características dos operadores gradientes para cada parâmetro investigado, sendo também proporcionais à $\frac{\eta}{h}$.

O erro global pode ser expresso apropriadamente como função, $\Omega_x^1(h, \eta, K_x) = a_1 h^{a_2} \eta^{a_3} K_x^{a_4}$ e (a_1, a_2, a_3, a_4) são adaptados para todos os casos, conforme abaixo:

$$\Omega_x^1(\Delta_{MCG}) = 8.89e - 03 h^{-1.01} \eta^{0.979} K_x^{-0.0844} \quad (6.35)$$

$$\Omega_x^1(\Delta_{MEA}) = 6.07e - 03 h^{-1.03} \eta^{0.986} K_x^{-0.0849} \quad (6.36)$$

o que confirma a proporcionalidade $\frac{\eta}{h}$ e baixa influência de K_x .

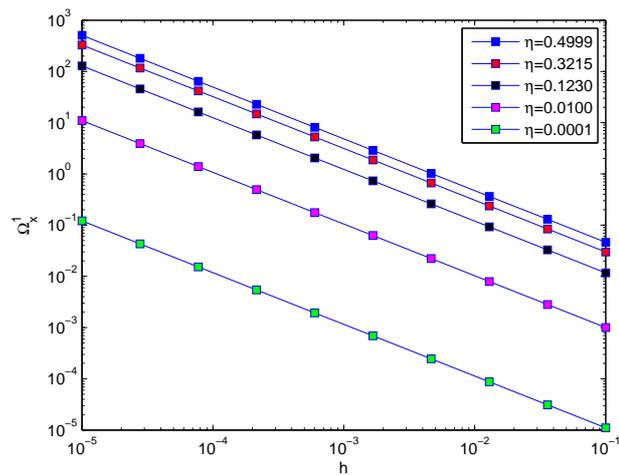


Figura 6.11: Análise da estimativa do erro global de MCG para campo linear via parâmetro h .

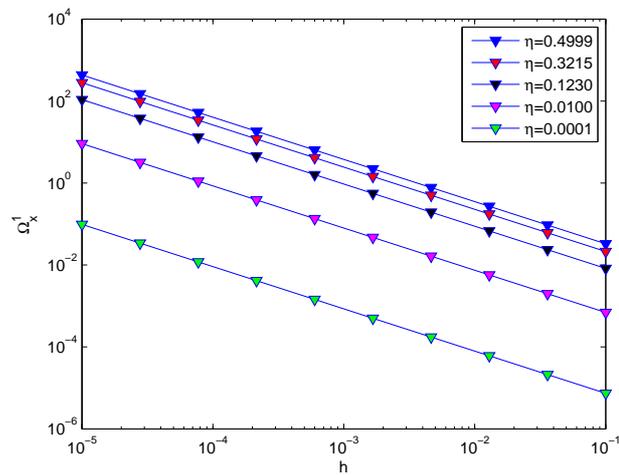


Figura 6.12: Análise da estimativa do erro global de MEA para campo linear via parâmetro h .

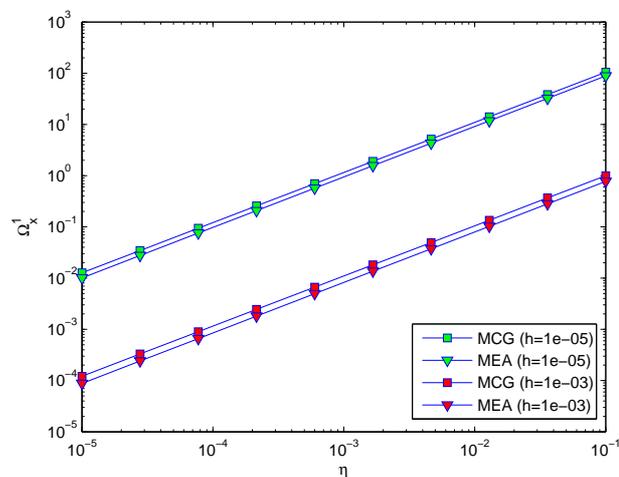


Figura 6.13: Comparação da estimativa do erro global entre MCG e MEA para campo linear via parâmetro η .

Ambos operadores apresentam as mesmas características com relação aos parâmetros investigados e, ao contrário dos gradientes, não há vantagens claras para se adotar o MCG ou MEA. Entretanto, MEA mostra um erro 20% inferior a MCG para todos os parâmetros investigados. Isso pode ser observado na Figura 6.13.

Como conclusão, destaca-se os seguintes resultados: a consistência SPH foi estudada para o caso onde há uma desordem das partículas e uma variação do comprimento de suavização h . As quatro primeiras condições de consistência são cumpridas para uma distribuição uniforme de partículas [6], independente de h , entretanto, nos casos onde há perturbações isso se torna uma tarefa complexa. O desvio das condições de consistência aumentam com a desordem das partículas e há dependência sobre o comprimento de suavização com um comportamento diferente dependendo da condição de consistência. C_0^0 e C_1^1 são independentes de h , enquanto C_1^0 é proporcional a h e C_0^1 diverge a uma razão $\frac{1}{h}$ o que se torna um problema quando se está simulando pequenas configurações. A importância de C_0^1 para o cálculo do gradiente também foi destacada.

As precisões dos operadores SPH (gradiente e laplaciano) também foram verificadas tendo como variações, h e o parâmetro normalizado K_x que corresponde a um campo de amplitude, de inclinação ou curvatura (equivalente ao coeficiente angular da reta). O operador G_- apresentou o melhor comportamento com um erro de duas ordens de magnitude mais baixas do que G_0 e G_+ para pequenas perturbações, e ainda, uma irrelevante dependência sobre h .

Em relação ao laplaciano, tanto MEA quanto MCG mostram as mesmas características, com pequena vantagem para MEA, cuja função de erro é geralmente 30% inferior a MCG. Estas considerações são puramente numéricas e devem ser aprofundadas por meio de um estudo da física. É fato que G_- e MEA não conservam localmente o momento linear e angular [27], respectivamente. Isto deve ser verificado com cautela, a fim de investigar quais benefícios garante-se e se há prejuízos quanto a não conservação dos momentos. As análises para campos quadráticos serão objetos de estudos para o futuro.

O Problema de Inconsistência das Partículas no Método SPH

Para as integrações expressas na equação (5.4), o domínio de integração é assumido como sendo totalmente contínuo e sem suporte truncado na fronteira. A equação (5.4) estabelece os requisitos sobre os momentos de uma função núcleo, que são as representações da capacidade do método SPH em reproduzir polinômios. A equação (5.7) descreve que a função núcleo é nula na fronteira, isso também é válido para suas derivadas.

Essas equações citadas acima são, na verdade, condições de construção de uma função núcleo, conforme visto anteriormente. Além disso, as expressões são indicadores de precisão da aproximação. Se uma função núcleo satisfaz as equações (5.4) e (5.7), ela e suas derivadas até a ordem n podem ser recuperadas com precisão de ordem n . Além disso, o momento M_0 na equação (5.4) afirma a condição de normalização, e M_1 declara a propriedade de simetria da função núcleo.

Similar ao conceito de consistência no tradicional MEF, se uma aproximação SPH pode reproduzir um polinômio de ordem n exatamente, a aproximação SPH é dita de ordem n ou consistência C^n .

Um grande problema para o método seria o surgimento de uma função núcleo não-positiva, que é geralmente necessária para simular problemas hidrodinâmicos. Uma função núcleo negativa (mesmo parcial) pode resultar em variáveis não físicas, tais como massa negativa, densidade negativa, etc. No entanto, uma função núcleo não-negativa não vai satisfazer M_2 , sendo assim, uma aproximação do núcleo SPH por meio de uma função não-negativa é de segunda ordem na maioria dos casos, conforme visto anteriormente. Em outras palavras, a consistência do núcleo SPH usando uma função não-negativa é menor do que segunda ordem [13, 14].

Se as aproximações do núcleo SPH são realizadas para as regiões truncadas por fronteiras, não será possível reproduzir exatamente o polinômio e suas derivadas, uma vez que M_0 e M_1 não são satisfeitos nessas regiões. Portanto, o método SPH original tem a consistência C^1 do núcleo para as regiões internas. No entanto, para as regiões de fronteira, não tem sequer a consistência C^0 [13].

Em suma, a inconsistência de partículas é originada a partir da discrepância entre o núcleo SPH contínuo e a aproximação por partículas. Todavia, partículas na fronteira, partículas distribuídas de maneira desordenada e variação do comprimento de suavização podem produzir inconsistência no processo de aproximação por partículas.

7.1 Partícula inconsistente

O SPH original com uma função núcleo convencional tem consistência C^0 e C^1 para regiões internas. A consistência do núcleo está relacionada com sua aproximação no mundo contínuo, dessa forma, se alguma das condições de consistência do núcleo for satisfeita, isso não significa necessariamente que a aproximação correspondente no mundo discreto também irá satisfazer. Esta discrepância entre a aproximação por partículas e a aproximação do núcleo é denominada como inconsistência de partículas [12].

As formas discretas dos momentos M_0 e M_1 são:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j; h) \Delta v_j &= 1 \\ \sum_{j=1}^N (\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j; h) \Delta v_j &= 0 \end{aligned} \quad (7.1)$$

A caracterização do problema é devida à dificuldade em cumprir as condições de consistência discretas. Observe o exemplo da Figura 5.1(b), as aproximações para as partículas de fronteira não serão unitárias mesmo para distribuição uniforme das partículas, isso ocorre devido ao truncamento da função núcleo na fronteira. Para o caso da Figura 5.1(c) o valor da aproximação dificilmente será nulo, devido a distribuição desordenada das partículas, essa interferência ocorre mesmo que as partículas estejam totalmente no interior do domínio onde a função núcleo não sofre truncamento.

7.2 Restauração da consistência das partículas

7.2.1 Abordagem CSPM

Tem sido relatado que o método SPH original não tem sequer a consistência C^0 e C^1 nas aproximações por partículas. Diferentes abordagens têm sido utilizadas para melhorar esse problema e, portanto, tratar a inconsistência para melhorar a precisão da aproximação SPH. Algumas delas envolvem a reconstrução de uma nova função núcleo, de modo a satisfazer as condições de consistência na forma discreta. No entanto, essas abordagens geralmente não são aceitas para simulações em hidrodinâmica porque a função núcleo pode ser negativa, não-simétrica, e não monótona decrescente. Dessa forma, o tratamento da inconsistência levará em consideração a função núcleo em sua forma convencional.

Uma abordagem inicial [17] baseia-se na propriedade anti-simétrica da derivada de uma função núcleo:

$$\sum_{j=1}^N W_{i,\alpha} \Delta v_j = 0. \quad (7.2)$$

onde α é o índice de dimensão indexada. Portanto, quando aproximando a derivada de uma função f , a aproximação por partículas pode ser reescrita como:

$$f_{i,\alpha} = \sum_{j=1}^N (f_j - f_i) W_{i,\alpha} \Delta v_j \quad (7.3)$$

ou

$$f_{i,\alpha} = \sum_{j=1}^N (f_j + f_i) W_{i,\alpha} \Delta v_j \quad (7.4)$$

Note que a equação (7.2) não cumpre necessariamente o mesmo valor que sua contraparte na forma contínua $\int_{\Omega} W_{i,\alpha} d\mathbf{x} = 0$ (válida para regiões internas). Esta é também uma manifestação da inconsistência das partículas. Portanto, as equações (7.3) e (7.4), na verdade, utilizam a inconsistência das partículas na aproximação da derivada da função núcleo restauradora, ou equilibra a inconsistência das partículas na aproximação das derivadas de uma função, e assim, melhora a precisão das aproximações.

Com base em expansão em série de Taylor na aproximação SPH de uma função, Chen [3] desenvolveu o então chamado Método *Corrective Smoothed Particle Method* - CSPM. No espaço unidimensional, o CSPM pode ser apresentado brevemente, conforme mostrado a seguir.

Supondo que f seja suficientemente derivável, pode-se expandir $f(x)$ em série de Taylor ao redor do ponto x_i .

$$f(\mathbf{x}) = f_i + (x - x_i)f_{i,x} + \frac{(x - x_i)^2}{2!}f_{i,xx} + \dots \quad (7.5)$$

Multiplicando ambos os lados da equação (7.5) pela função núcleo W e integrando ao longo de todo o domínio computacional, têm-se

$$\int f(x)W_i(x)dx = f_i \int W_i(x)dx + f_{i,x} \int (x - x_i)W_i(x)dx + \frac{f_{i,xx}}{2} \int (x - x_i)^2 W_i(x)dx + \dots \quad (7.6)$$

Se os termos envolvendo derivadas na equação (7.6) são negligenciados, uma aproximação do núcleo corretor para a função $f(\mathbf{x})$ na partícula i é obtida da seguinte maneira:

$$f_i = \frac{\int f(x)W_i(x)dx}{\int W_i(x)dx}. \quad (7.7)$$

Para uma função núcleo convencional (não-negativa e simétrica), o segundo termo RHS da equação (7.6) é nulo para a região interna e não-nulo para a região de fronteira. Portanto, a aproximação do núcleo corretor expressa na equação (7.7) uma precisão C^2 para a região interna e C^1 para região de fronteira.

Comparando as equações (7.7) e (2.2), verifica-se que para a região interna, as aproximações usando a função núcleo convencional e CSPM são as mesmas, devido ao cumprimento da condição de normalização (na forma contínua). Para as regiões de contorno, uma vez que a integral da função núcleo é truncada na fronteira, a condição de normalização não pode ser satisfeita. Assegurando o denominador não-unitário, o CSPM restaura a consistência C^0 do núcleo. Por conseguinte, assumindo que a integral da função núcleo nas regiões de fronteira sempre será unitária, como nas regiões internas, já é a razão suficiente para justificar que o SPH original não tem a consistência C^0 do núcleo.

A forma discreta da equação (7.7) desprezando os termos envolvendo as derivadas, assim como no realizado anteriormente, é dada por:

$$f_i = \frac{\sum_{j=1}^N f_j W_{ij} \Delta v_j}{\sum_{j=1}^N W_{ij} \Delta v_j}. \quad (7.8)$$

A aproximação por partículas do segundo termo RHS da equação (7.5) não é necessariamente nula, mesmo para as partículas internas. Isso ocorre devido à inconsistência das partículas. Portanto, estritamente falando, a aproximação por partículas expressa na equação (7.8) é consistência C^0 , tanto para as partículas internas quanto para partículas de fronteira. Apenas se as partículas estiverem uniformemente distribuídas, a aproximação do segundo termo RHS da equação (7.5) será nula. Neste caso, a aproximação por partículas expressa na equação (7.8) é consistência C^1 para as partículas internas.

Substituindo $W_i(x)$ na equação (7.5) por $W_{i,x}$ e desprezando o termo da derivada de segunda ordem e superiores, uma aproximação do núcleo corretor para a primeira derivada pode ser escrita:

$$f_{i,x} = \frac{\int [f(x) - f(x_i)] W_{i,x}(x) dx}{\int (x - x_i) W_{i,x}(x) dx}. \quad (7.9)$$

A forma discreta da equação (7.9) é dada por:

$$f_{i,x} = \frac{\sum_{j=1}^N (f_j - f_i) W_{i,x} \Delta v_j}{\sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) W_{i,x} \Delta v_j}. \quad (7.10)$$

De maneira similar, a aproximação CSPM do núcleo para as derivadas são de consistência C^1 para regiões internas, mas C^0 para partículas da região de fronteira. Exceto para os casos com partículas internas e uniformemente distribuídas, as aproximações CSPM de partículas para as derivadas são consistência C^0 , tanto para partículas internas, quanto para as da região de fronteira.

7.2.2 Abordagem FPM

O *Finite Particle Method* - FPM gera de forma simultânea a restauração da consistência das partículas para aproximar uma função e suas derivadas. Revendo a expansão da série de Taylor de uma função $f(\mathbf{x})$ no espaço multidimensional, têm-se:

$$f(\mathbf{x}) = f_i + (\mathbf{x}^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha) f_{i,\alpha} + \frac{(\mathbf{x}^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha)(\mathbf{x}^\gamma - \mathbf{x}_i^\gamma)}{2!} f_{i,\alpha\gamma} + \dots, \quad (7.11)$$

onde α e γ representam os índices de dimensão indexadas.

Multiplicando ambos os lados da equação (7.12) pela função núcleo $W_i(x)$ e sua derivada de primeira ordem $W_{i,\beta}$, e além disso desprezando as derivadas de segunda ordem e superiores, têm-se:

$$\int f(\mathbf{x}) W_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = f_i \int W_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + f_{i,\alpha} \int (\mathbf{x}^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha) W_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (7.12)$$

$$\int f(\mathbf{x}) W_{i,\beta} d\mathbf{x} = f_i \int W_{i,\beta} d\mathbf{x} + f_{i,\alpha} \int (\mathbf{x}^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha) W_{i,\beta}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (7.13)$$

O termo β novamente representa o índice de dimensão indexada. Observa-se que existem duas equações e duas incógnitas (f_i e $f_{i,\alpha}$), dessa forma, as equações (7.12) e (7.13) compõem, portanto, um sistema linear que pode ser facilmente resolvido.

As aproximações para f_i e $f_{i,\alpha}$, na forma contínua são expressas por:

$$f_i = \frac{\begin{vmatrix} \int f(\mathbf{x}) W_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} & \int (\mathbf{x}^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha) W_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ \int f(\mathbf{x}) W_{i,\beta} d\mathbf{x} & \int (\mathbf{x}^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha) W_{i,\beta}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \int W_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} & \int (\mathbf{x}^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha) W_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ \int W_{i,\beta} d\mathbf{x} & \int (\mathbf{x}^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha) W_{i,\beta}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \end{vmatrix}} \quad (7.14)$$

$$f_{i,\alpha} = \frac{\begin{vmatrix} \int W_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} & \int f(\mathbf{x}) W_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ \int W_{i,\beta} d\mathbf{x} & \int f(\mathbf{x}) W_{i,\beta} d\mathbf{x} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \int W_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} & \int (\mathbf{x}^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha) W_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ \int W_{i,\beta} d\mathbf{x} & \int (\mathbf{x}^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha) W_{i,\beta}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \end{vmatrix}}. \quad (7.15)$$

As equações (7.14) e (7.15) podem ser reescritas na forma discreta da seguinte maneira:

$$f_i = \frac{\begin{vmatrix} \sum_{j=1}^N f_j W_{ij} \Delta v_j & \sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha) W_{ij} \Delta v_j \\ \sum_{j=1}^N f_j W_{ij,\beta} \Delta v_j & \sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha) W_{ij,\beta} \Delta v_j \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \sum_{j=1}^N W_{ij} \Delta v_j & \sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha) W_{ij} \Delta v_j \\ \sum_{j=1}^N W_{ij,\beta} \Delta v_j & \sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha) W_{ij,\beta} \Delta v_j \end{vmatrix}} \quad (7.16)$$

$$f_{i,\alpha} = \frac{\begin{vmatrix} \sum_{j=1}^N W_{ij} \Delta v_j & \sum_{j=1}^N f_j W_{ij} \Delta v_j \\ \sum_{j=1}^N W_{ij,\beta} \Delta v_j & \sum_{j=1}^N f_j W_{ij,\beta} \Delta v_j \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \sum_{j=1}^N W_{ij} \Delta v_j & \sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha) W_{ij} \Delta v_j \\ \sum_{j=1}^N W_{ij,\beta} \Delta v_j & \sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha) W_{ij,\beta} \Delta v_j \end{vmatrix}}. \quad (7.17)$$

Ao determinar as equações (7.14) e (7.15) as aproximações do núcleo contínuo, bem como as equações (7.16) e (7.17) para as aproximações por partículas, nenhuma modificação na função núcleo convencional é efetuada. Nas equações (7.12) e (7.13), os termos relacionados com a função e a primeira derivada são mantidos, apenas os termos relacionados com a derivada de segunda ordem e superiores são negligenciados. Portanto, as aproximações do núcleo resultantes do processo são de segunda ordem de precisão (ou C^1), tanto para as partículas internas quanto nas regiões de fronteira.

As aproximações por partículas, modelo discreto, são também de segunda ordem de precisão (ou C^1), tanto para as partículas internas quanto para as das regiões de fronteira, independente da distribuição uniforme ou perturbada. Em outras palavras, FPM tem consistência C^1 nas aproximações contínuas e discretas. A consistência do núcleo na forma contínua ou discreta do FPM pode ser melhorada se a segunda derivada ou superiores forem mantidas na expansão em série de Taylor, equação (7.10). Em geral, se a k -ésima derivada for negligenciada, isso significa que a aproximação do núcleo (modelo contínuo) e por partículas (modelo discreto) serão de $k + 1$ ordem de precisão ou consistência C^k [13].

O FPM compartilha algumas características comuns com CSPM uma vez que ambos usam expansão em série de Taylor sobre as aproximações do núcleo SPH originais. No entanto, o FPM é claramente diferente da CSPM.

Observações:

- Em CSPM, as aproximações de uma função e suas derivadas são sequencialmente calculadas, embora as mesmas ordens de derivada sejam resolvidas simultaneamente. No FPM, uma função e todas as suas derivadas são simultaneamente calculadas.
- Em CSPM, derivadas de ordem mais baixas são inerentes nas expressões para aproximar ordens superiores. No FPM, exceto para os valores da função, derivadas de ordem não inferiores são inerentes em aproximar as derivadas de ordem superior. Por conseguinte, os possíveis erros numéricos existentes nas derivadas de ordem inferior não serão acumulados nas derivadas de ordem superior.
- O CSPM tem consistência C^1 para o núcleo nas regiões internas e consistência C^0 nas as regiões de fronteira. O FPM tem consistência C^1 para o núcleo em ambas as regiões se apenas as derivadas de primeira ordem forem negligenciadas na expansão em série de Taylor. Exceto para partículas uniformemente distribuídas e internas, CSPM tem consistência C^0 . O FPM tem consistência C^1 sempre, desde que apenas as derivadas de primeira ordem sejam negligenciadas na expansão em série de Taylor.

7.3 Resultados numéricos

Para analisar ainda mais a consistência na aproximação por partículas, realiza-se estudos numéricos para verificar de modo prático os métodos de restauração da consistência. Dessa forma, foi implementado modelos de aproximação para funções constante e linear. Uma vez que a aproximação das derivadas seguem o mesmo procedimento que a aproximação para uma função propriamente dita, apenas os resultados das aproximações para as funções serão apresentados. Para evitar influências da região de fronteira, os testes destinam-se apenas às regiões do domínio onde a função núcleo não sofrerá truncamento.

Os resultados das aproximações das funções serão obtidos usando o SPH original, e também os dois métodos de restauração de consistência, CSPM e FPM. A função núcleo utilizada para as aproximações será definida logo abaixo, conforme visto em [13].

$$W(R) = \alpha_d \begin{cases} \frac{2}{3} - R^2 + \frac{1}{2}R^3 & 0 \leq R < 1 \\ \frac{1}{6}(2 - R)^3 & 1 \leq R < 2 \\ 0 & R \geq 2 \end{cases}, \quad (7.18)$$

onde $\alpha_1 = 1/h$ e $\alpha_2 = 15/7\pi h^2$ para uma e duas dimensões respectivamente.

7.3.1 Zero ordem de consistência (C^0)

A C^0 consistência representa a capacidade de reproduzir ou, em outras palavras, aproximar uma função constante. Para o teste numérico considera-se arbitrariamente a função constante $f(x) = 1$ num intervalo $[0, 1]$.

A Tabela 7.1 mostra o erros relativos obtidos na aproximação dessa função, para isso utilizou-se 10 partículas distribuídas uniformemente entre $x = 0.05$ e $x = 0.95$, sendo $\Delta x = 0.1$. O volume associado a cada partícula é $\Delta v = 0.1$ fixo e o comprimento de suavização é adotado como sendo, $h = k\Delta v$, onde o fator escala $k = 1.5$ e $\alpha = 1$.

Tabela 7.1: Resultados obtidos na aproximação para $f(x) = 1$ com $h = 1.5\Delta v$.

Partículas	Solução Exata	Erro(SPH)	Erro(CSPM)	Erro(FPM)
1	1.0	0.7788	0	0
2	1.0	0.5577	0	0
3	1.0	0.5577	0	0
4	1.0	0.5577	0	0
5	1.0	0.5577	0	0
6	1.0	0.5577	0	0
7	1.0	0.5577	0	0
8	1.0	0.5577	0	0
9	1.0	0.5577	0	0
10	1.0	0.7788	0	0

Os resultados mostraram que a influência do truncamento da função núcleo na fronteira afetou as cinco primeiras e cinco últimas partículas, pois as aproximações para as partículas de 6 a 9 mantiveram-se constantes. Observa-se também o ganho de consistência com os métodos de restauração, pois ambos conseguiram zerar o erro relativo.

Um segundo teste é verificado para as mesmas condições, exceto para k e h , que agora passam a ser $h = \alpha k\Delta v$, com $k = 1.7$ e $\alpha = 1.2$.

Tabela 7.2: Resultados obtidos na aproximação para $f(x) = 1$ com $h = 1.2k\Delta v$.

Partículas	Solução Exata	Erro(SPH)	Erro(CSPM)	Erro(FPM)
1	1.0	0.7201	0	0
2	1.0	0.4575	0	0
3	1.0	0.4401	0	0
4	1.0	0.4401	0	0
5	1.0	0.4401	0	0
6	1.0	0.4401	0	0
7	1.0	0.4401	0	0
8	1.0	0.4401	0	0
9	1.0	0.4575	0	0
10	1.0	0.7201	0	0

Os resultados apresentados na Tabela 7.2 deixam claro a influência do truncamento da função núcleo na fronteira. Bastou aumentar o comprimento de suavização para que os erros afetassem as sétimas primeiras e sétimas últimas partículas. Nesse segundo exemplo, pode-se facilmente observar o ganho de consistência pelos métodos de restauração ao zerar os erros locais.

7.3.2 Primeira ordem de consistência (C^1)

A C^1 consistência representa a capacidade de reproduzir ou, em outras palavras, aproximar uma função linear. Para o teste numérico considera-se arbitrariamente a função linear $f(x) = x$ num intervalo $[0, 1]$.

A Tabela 7.3 mostra o erros relativos obtidos na aproximação dessa função, para isso utilizou-se 10 partículas distribuídas uniformemente entre $x = 0.05$ e $x = 0.95$, sendo $\Delta x = 0.1$. O volume associado a cada partícula é $\Delta v = 0.1$ fixo e o comprimento de suavização é adotado como sendo, $h = 1.2k\Delta v$, onde o fator escala $k = 1.7$.

Tabela 7.3: Resultados obtidos na aproximação para $f(x) = x$ com $h = 1.2k\Delta v$.

Partículas	Solução Exata	Erro(SPH)	Erro(CSPM)	Erro(FPM)
1	0.05	0.0092	0.1023	0
2	0.15	0.0609	0.0023	0
3	0.25	0.1012	0.0000	0
4	0.35	0.1408	0.0000	0
5	0.45	0.1804	0	0
6	0.55	0.2201	0	0
7	0.65	0.2597	0	0
8	0.75	0.2993	0.0000	0
9	0.85	0.3389	0.0023	0
10	0.95	0.3965	0.1023	0

Os resultados da Tabela 7.3 mostram a dificuldade do método SPH original em aproximar uma função linear, isso ocorre tanto para as partículas sob influência do truncamento da função núcleo na fronteira, quanto para as partículas internas. É possível notar que o CSPM apresenta limitações nas regiões de fronteira, pois os erros locais mostram que a consistência não foi completamente recuperada, já no FPM a consistência foi recuperada tanto para partículas internas, quanto para as partículas na região de fronteira. Esses

erros na região de fronteira acontecem porque há ausência de partículas dentro do suporte compacto, de modo que, se houvesse duas vezes mais partículas nessas regiões a consistência seria recuperada.

Estendendo a função linear para o caso bidimensional, tem-se, $f(x, y) = x + y$, num domínio de $[0, 1] \times [0, 1]$. Os parâmetros utilizados foram $\Delta v = 0.1$, $k = 1.5$, $h = k\Delta v$ e 441 partículas distribuídas uniformemente no domínio.

Tabela 7.4: Erros de aproximação da função linear $f(x, y) = x + y$ livre de fronteira.

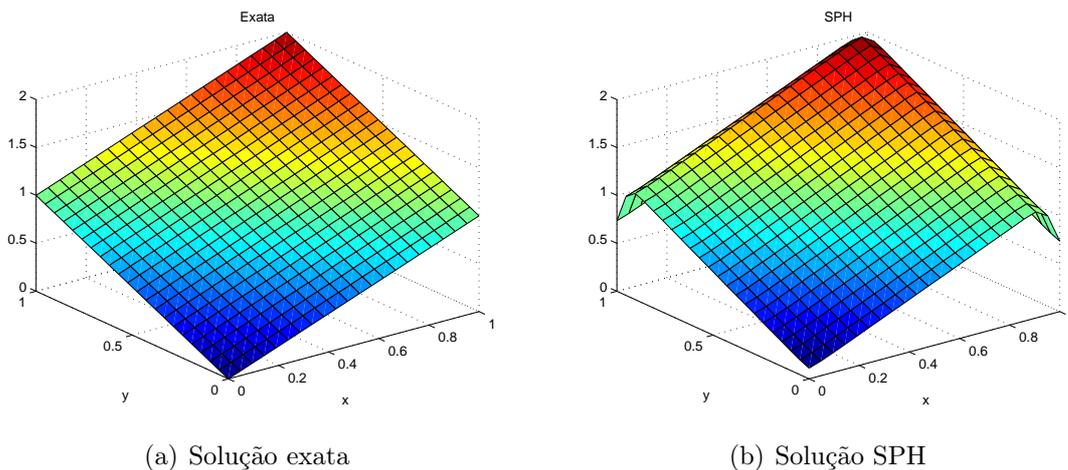
Erros	SPH	CSPM	FPM
Mínimo erro	0.0740	0	0
Máximo erro	0.2019	$1.1102e - 15$	$2.8866e - 15$
Erro global	0.3856	$1.6967e - 08$	$2.6530e - 08$

Tabela 7.5: Erros de aproximação da função linear $f(x, y) = x + y$ com fronteira.

Erros	SPH	CSPM	FPM
Mínimo erro	0.0467	0	0
Máximo erro	0.6420	0.1653	$2.7756e - 14$
Erro global	0.4427	0.2727	$5.5471e - 08$

Os resultados apresentados na Tabela 7.4 foram obtidos para partículas internas, ou seja, sem a influência das partículas que estão na região de fronteira, enquanto os da Tabela 7.5 consideram também as partículas de fronteira.

A Figura 7.0 mostra as aproximações numéricas para a função linear, mas agora com partículas fantasmas na região da fronteira.



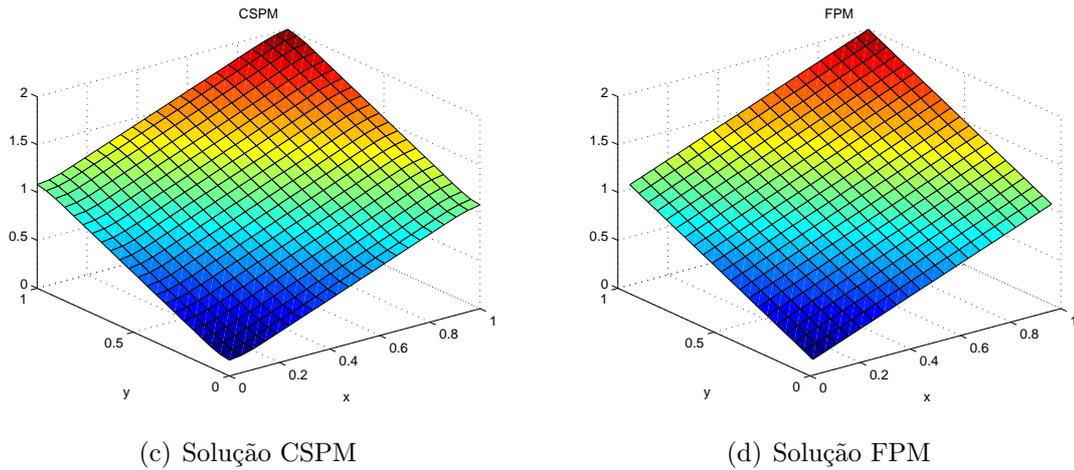


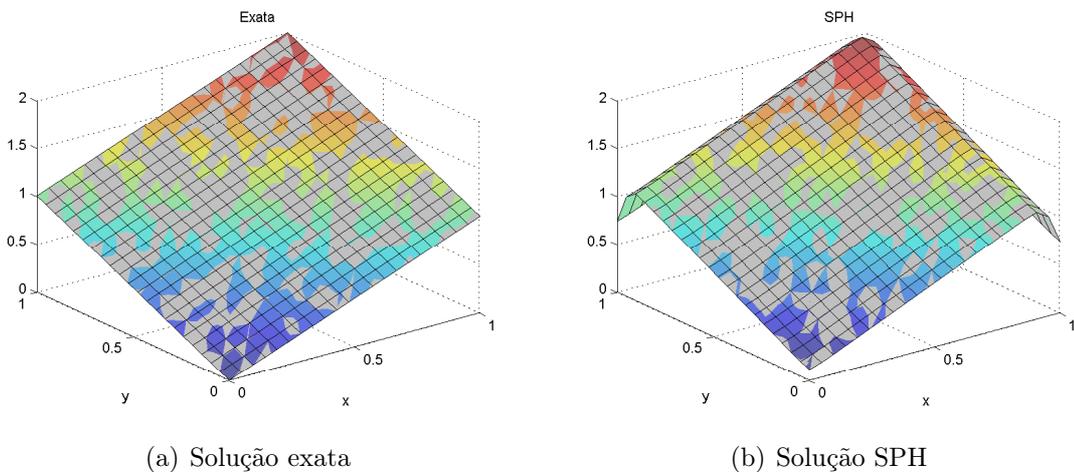
Figura 7.0: Aproximações para a função linear $f(x, y) = x + y$.

Com os mesmos parâmetros utilizados no exemplo anterior, e agora aplicando uma perturbação canônica nas partículas, obtêm-se os seguintes resultados:

Tabela 7.6: Erros de aproximação da função linear $f(x, y) = x + y$ com $\eta = 0.0001$.

Erros	SPH	CSPM	FPM
Mínimo erro	0.0468	$7.0309e - 06$	0
Máximo erro	0.6422	0.1653	$2.8571e - 05$
Erro global	0.4427	0.2727	0.0029

A Figura 7.0 mostra duas soluções em cada gráfico, a colorida refere-se a solução numérica perturbada plotada sobre nós perturbados, entre outras palavras, $\bar{z} = f(\bar{x}, \bar{y})$, onde \bar{x} e \bar{y} sofreram uma perturbação canônica. Por outro lado, a cinza refere-se a solução numérica perturbada plotada sobre nós uniformes, ou seja, $\bar{z} = f(\bar{x}, \bar{y})$ mas plotados na forma (x, y, \bar{z}) . O mesmo acontece na Figura 7.0.



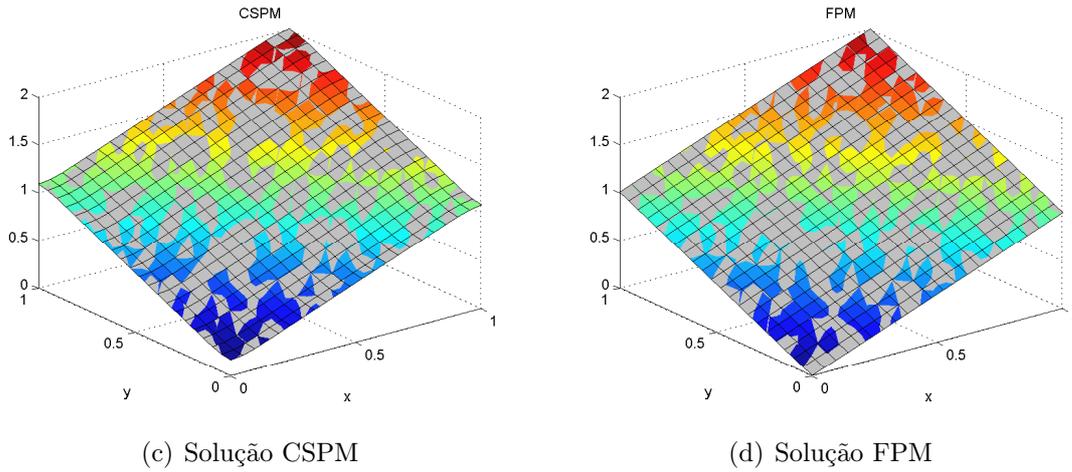
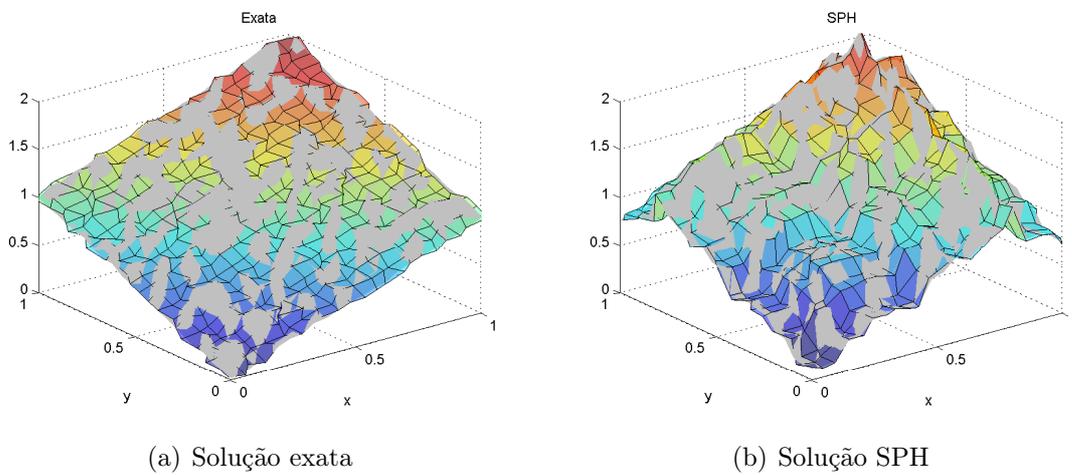


Figura 7.0: Aproximações para a função linear $f(x, y) = x + y$ com $\eta = 0.0001$.

Tabela 7.7: Erros de aproximação da função linear $f(x, y) = x + y$ com $\eta = 0.3215$.

Erros	SPH	CSPM	FPM
Mínimo erro	$1.8130e - 04$	$7.0049e - 06$	$1.1102e - 16$
Máximo erro	0.6774	0.1635	0.0765
Erro global	0.4667	0.2708	0.1564



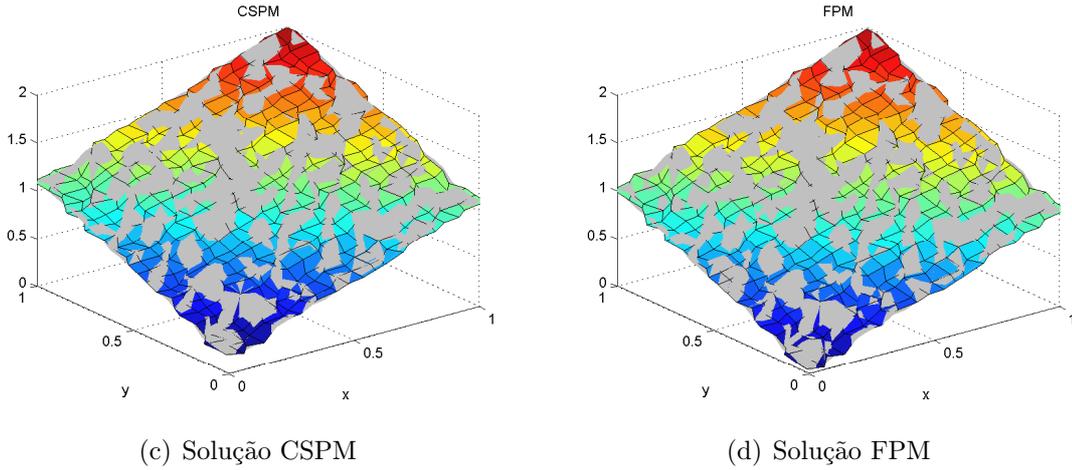


Figura 7.0: Aproximações para a função linear $f(x, y) = x + y$ com $\eta = 0.3215$.

Nota-se claramente que os erros de aproximação dos métodos CSPM e FPM permaneceram idênticos para os dois casos de perturbação, a única diferença permaneceu no método SPH, entretanto a ordem não sofreu mudanças significativas.

Testes numéricos para uma função quadrática $f(x, y) = x^2 + y^2$ foram executados, entretanto, como a segunda ordem de consistência C^2 não é cumprida, os erros de aproximação aumentam em grande proporção.

7.4 Um método SPH de alta ordem via função núcleo inversa

7.4.1 O método SPH inverso

De modo similar ao método SPH tradicional, pode-se definir as aproximações para uma função f e para seu gradiente (∇f) introduzindo uma função núcleo, chamada de W . Vejamos:

$$\begin{cases} f(\mathbf{x}) \cong \frac{1}{h} \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}' \\ \nabla f(\mathbf{x}) \cong \frac{1}{h^2} \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \nabla W_x(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}' \end{cases} \quad (7.19)$$

Assim, o problema da inconsistência ao aproximar de forma discreta os momentos M_0 e M_1 , conforme equação (7.1), pode ser minimizado ao considerar as aproximações na forma contínua apresentadas na equação (7.20). De modo particular, para obter a n -ésima ordem de consistência, basta reescrever a equação (7.19)

$$\begin{cases} \mathbf{x}^m \cong \frac{1}{h} \int_{\Omega} \mathbf{x}'^m W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}' \\ \nabla \mathbf{x}^m \cong \frac{1}{h^2} \int_{\Omega} \mathbf{x}'^m \nabla W_x(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}', \end{cases} \quad (7.20)$$

para todo $m = 0, 1, \dots, n$. Aqui \mathbf{x}^m denota um vetor de dimensão indexada de ordem m .

Da mesma forma como procedeu-se no método SPH tradicional, substitui-se o sinal \cong por $=$ ao aplicar o operador $\langle \rangle$ nas equações (7.19) e (7.20), com isso têm-se:

$$\begin{cases} \langle f(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{h} \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}' \\ \langle \nabla f(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{h^2} \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \nabla W_x(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}', \end{cases} \quad (7.21)$$

$$\begin{cases} \langle \mathbf{x}^m \rangle &= \frac{1}{h} \int_{\Omega} \mathbf{x}'^m W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}' \\ \langle \nabla \mathbf{x}^m \rangle &= \frac{1}{h^2} \int_{\Omega} \mathbf{x}'^m \nabla W_x(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}'. \end{cases} \quad (7.22)$$

Para as regiões internas, onde não há necessidade de tratamento de fronteira, obtém-se as condições de consistência reescritas conforme equação (7.23)

$$\begin{cases} \mathbf{x}^m &= \langle \mathbf{x}^m \rangle \\ \nabla \mathbf{x}^m &= \langle \nabla \mathbf{x}^m \rangle, \end{cases} \quad (7.23)$$

pois, elas nem sempre podem ser satisfeitas, no caso em que haja truncamento de fronteira ou partículas desordenadas essas condições não serão cumpridas.

Sendo assim, objetiva-se construir uma nova função de convolução f^{-1} de tal forma a restaurar a m -ésima ordem de consistência. Define-se então:

$$\begin{cases} \mathbf{x}^m &= f^{-1} \langle \mathbf{x}^m \rangle \\ \nabla \mathbf{x}^m &= f^{-1} \langle \nabla \mathbf{x}^m \rangle, \end{cases} \quad (7.24)$$

para todo $m = 0, 1, \dots, n$. Para o caso unidimensional, $\nabla x^m = \frac{dx^m}{dx} = mx^{m-1}$, desde que ∇x^m seja o polinômio x^{m-1} . Note que a segunda igualdade da equação (7.24) será automaticamente satisfeita se a primeira também for. De acordo com [9], a função núcleo SPH inversa é definida da seguinte forma:

$$f^{-1}(f(\mathbf{x})) = \frac{1}{h} \int_{\mathbf{x}-s}^{\mathbf{x}+s} f(\mathbf{x}') L(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}' \quad (7.25)$$

sendo s o comprimento do intervalo de integração (válido para 2D e 3D por causa da mudança de variável para R). A ordem da inversa é dada sob a forma $2p = n$, assim sendo,

$$L^{(2p)}(R) = \sum_{i=0}^p a_{2i} R^{2i}, \quad (7.26)$$

onde a_i são os coeficientes desconhecidos do polinômio que assume a forma de função núcleo inversa. Note que os termos ímpares são desprezados por causa da propriedade de simetria da função núcleo.

Se a expressão W é conhecida, se a ordem n de precisão é sabida e se s , também, então os coeficientes a_i podem ser determinados com base nas condições de consistência determinadas na equação (7.24).

Por exemplo, seja W a função *spline* cúbica definida na equação (7.18), com $s = 2h$ para compartilhar a mesma região de integração de W , a aproximação inversa $L^{2p}(R)$ pode ser obtida com diferentes ordens de consistência.

$$\begin{cases} 2^a \text{ ordem} : L^2(R) &= \frac{41}{64} - \frac{75R^2}{256} \\ 4^a \text{ ordem} : L^4(R) &= \frac{10693}{8192} - \frac{32025R^2}{16384} + \frac{63525R^4}{131072} \\ 6^a \text{ ordem} : L^6(R) &= \frac{367713}{131072} - \frac{5153925R^2}{524288} + \frac{13403775R^4}{2097152} - \frac{9084075R^6}{8388608} \end{cases} \quad (7.27)$$

7.4.2 Uma adaptação do método SPH inverso com a função núcleo *Dome-shaped* modificada

O método SPH inverso é muito recente na literatura, e consiste na determinação de um polinômio capaz de recuperar ordens mais altas de consistência do método SPH tradicional. Por meio de estudos em [9, 14] verificou-se que a função núcleo *Dome-shaped* quadrática possui uma formulação muito semelhante ao método SPH inverso. Dessa forma, após varios testes numéricos, foi possível comprovar a determinação de um polinômio restaurador de consistência. A validação do método foi baseada nas soluções SPH, CSPM, FPM, Inversa e também a comparação com a solução exata, uma vez conhecida é a melhor forma de validar o método. Sem complexidade de cálculos exaustivos, a primeira forma do polinômio pode ser definida. Toma-se como exemplo a construção de um polinômio de ordem $2p = n$, onde $n = 2$. Define-se $L^{2p}(R)$ exatamente como na equação (7.26), resultando em:

$$L^2(R) = a_0 + a_2 R^2 = a_0 + a_2 \left(\frac{r}{h}\right)^2. \quad (7.28)$$

Note que ao expandir os coeficientes do polinômio, aquele que acompanha o termo linear e todos os de ordem ímpar são desprezados, isso ocorre devido a propriedade de simetria da função núcleo. É possível também que, procedendo desta maneira, em algum momento, as derivadas de W sejam impedidas de perder o suporte compacto. Esta informação é importante para o método SPH inverso que baseia-se na função W para obter o polinômio restaurador, segundo [14].

Para o modelo unidimensional, integra-se $L^{2p}(R)$ no intervalo $[-2, 2]$, ou seja, duas vezes de $[0, h]$, uma vez que $R = \frac{r}{h}$ e r é o módulo da diferença entre duas partículas. Sendo assim, igualando a integral de $L^2(R)$ em relação a r com seu correspondente na condição de consistência (primeira linha da equação (7.1)), obtém-se:

$$\begin{aligned} 2 \int_0^h (a_0 + a_2 \left(\frac{r}{h}\right)^2) dr &= 1 \\ 2ha_0 + \frac{2ha_2}{3} &= 1 \end{aligned} \quad (7.29)$$

A segunda condição de consistência da equação (7.1) impõe:

$$a_0 + a_2 = 0 \quad (7.30)$$

As equações (7.29) e (7.30) definem um sistema linear, cuja solução é $a_0 = \frac{3}{4h}$ e $a_2 = \frac{-3}{4h}$, com isso, obtém-se:

$$\begin{aligned} W(R) &= \frac{3}{4h} - \frac{3}{4h} R^2 \\ &= \frac{3}{4h} (1 - R^2) \\ &= \gamma_1 \frac{1}{h} (1 - R^2), \end{aligned} \quad (7.31)$$

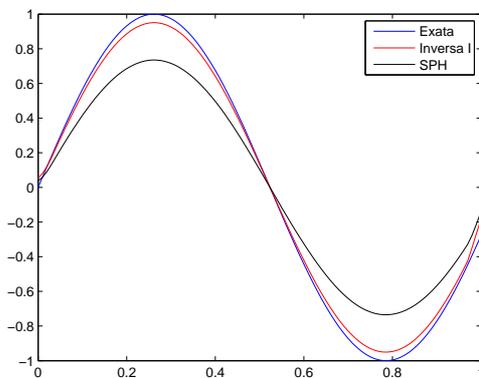
onde $\gamma_1 = \frac{3}{4}$. Essa função W é conhecida como *Dome-shaped* quadrática. Em termos gerais ela é aplicada como sendo $W(R) = \frac{3}{4\pi h} (1 - R^2)$ onde $\frac{3}{4\pi}$ corresponde ao coeficiente de normalização unidimensional.

Por fim, $L^2(R)$ é definida conforme a equação (7.31) mas desprezando o termo γ_1 ,

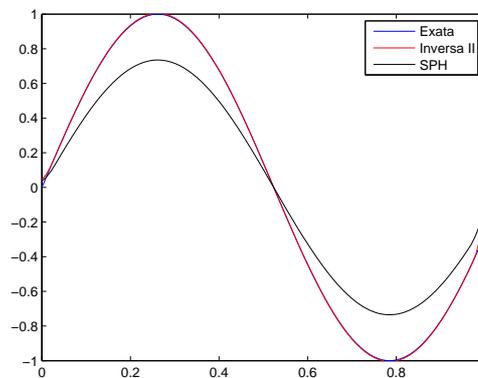
$$L^2(R) = \frac{1}{h}(1 - R^2). \quad (7.32)$$

7.4.3 Resultados numéricos com o método SPH inverso

Para verificar os efeitos dos métodos, aplica-se ambos os casos na aproximação da função $f(x) = \text{sen}(6x)$, no intervalo $[0, 1]$, com 100 partículas, $k = 1$, $\alpha = 3.15$ e $h = \alpha\Delta x$ e para o método SPH tradicional foi aplicado a função núcleo cúbica definida na equação (7.18). Na Figura 7.1 é possível visualizar as soluções numéricas para a função mencionada usando distribuição uniforme das partículas, já na Figura 7.2 aplicou-se uma perturbação canônica $\eta = 0.3215$. Para efeitos de simplificação, adota-se as nomenclaturas (inversa I) para o método SPH inverso e (inversa II) para o método adaptado.

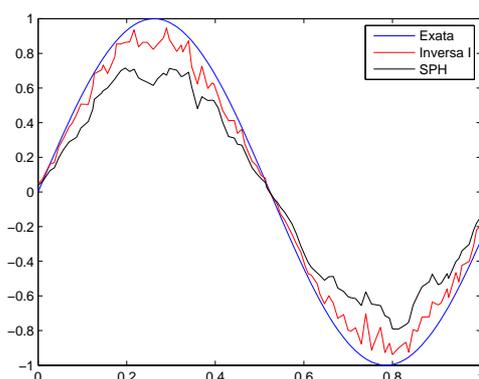


(a) Solução SPH inversa I

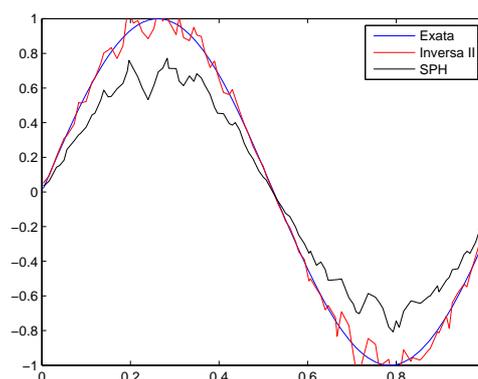


(b) Solução SPH inversa II

Figura 7.1: Aproximações para a função $f(x) = \text{sen}(6x)$.



(a) Solução SPH inversa I



(b) Solução SPH inversa II

Figura 7.2: Aproximações para a função $f(x) = \text{sen}(6x)$ com perturbação $\eta = 0.3215$.

Tabela 7.8: Erros de aproximação da função linear $f(x) = \text{sen}(6x)$.

Perturbação	SPH	Inversa I	Inversa II
$\eta = 0$	0.2657	0.0527	0.0166
$\eta = 0.3215$	0.2963	0.1288	0.0728

Nos dois exemplos mostrados, a solução inversa II mostrou-se mais eficaz, conforme dados da Tabela 7.8. É importante ressaltar que tratamento algum de fronteira foi aplicado, e que ambos os métodos mostram as influências do truncamento da função núcleo nos gráficos.

A Equação de *Poisson*

Seja Ω uma região em \mathbb{R}^2 limitada por uma curva fechada $S = \partial\Omega$, e f é uma função dada. A equação de *Poisson* representa a classe de EDPs do tipo elíptica e é definida por:

$$\nabla^2\psi(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}). \quad (8.1)$$

8.1 Discretização SPH para a equação de *Poisson*

No método SPH, o domínio é discretizado por um conjunto finito de partículas. Dada uma função escalar ψ , o operador laplaciano SPH III (3.18) no problema (8.1) tem-se:

$$\sum_{j \in V_i} 2 \frac{m_j}{\rho_j} \frac{(\psi(\mathbf{x}_i) - \psi(\mathbf{x}_j))}{r_{ij}^2} \mathbf{x}_{ij} \cdot \nabla_i W(\mathbf{x}_{ij}; h) = f(\mathbf{x}_i). \quad (8.2)$$

Consequentemente, reescreve-se o gradiente da função núcleo como

$$\nabla_i W(\mathbf{x}_{ij}, h) = \frac{\alpha_{w,n} \mathbf{x}_{ij}}{h r_{ij}} \frac{\partial w_{ij}}{\partial R},$$

assim, a equação (8.2) pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$\sum_{j \in V_i} 2 \frac{m_j}{\rho_j} (\psi(\mathbf{x}_i) - \psi(\mathbf{x}_j)) \frac{\alpha_{w,n}}{h r_{ij}} \frac{\partial w}{\partial R} = f(\mathbf{x}_i),$$

ou, de maneira mais simplificada, dada por

$$\sum_{j \in V_i} 2 \frac{m_j}{\rho_j} (\psi(\mathbf{x}_i) - \psi(\mathbf{x}_j)) F(\mathbf{x}_{ij}) = f(\mathbf{x}_i), \quad (8.3)$$

sendo

$$F(\mathbf{x}_{ij}) = \frac{\alpha_{w,n}}{h r_{ij}} \frac{\partial w_{ij}}{\partial R}.$$

A equação (8.3) aplicada a cada partícula i do domínio do problema resulta no seguinte sistema:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{j \in V_1} 2 \frac{m_j}{\rho_j} (\psi(\mathbf{x}_1) - \psi(\mathbf{x}_j)) F(\mathbf{x}_{1j}) = f(\mathbf{x}_1) \\ \sum_{j \in V_2} 2 \frac{m_j}{\rho_j} (\psi(\mathbf{x}_2) - \psi(\mathbf{x}_j)) F(\mathbf{x}_{2j}) = f(\mathbf{x}_2) \\ \vdots \\ \sum_{j \in V_n} 2 \frac{m_j}{\rho_j} (\psi(\mathbf{x}_n) - \psi(\mathbf{x}_j)) F(\mathbf{x}_{nj}) = f(\mathbf{x}_n) \end{array} \right. , \quad (8.4)$$

sendo n o número de partículas que discretizam o domínio. O sistema linear de equações (8.4) é representado matricialmente por

$$A \cdot \psi = \mathbf{b}.$$

A matriz A tem dimensão $n \times n$ e é representada pelos seguintes coeficientes

$$a_{ij}, \quad i, j \in \{1, 2, \dots, n\},$$

cujos valores são:

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{ij} = -2 \frac{m_j}{\rho_j} F(\mathbf{x}_{ij}), \quad j \neq i \\ a_{ii} = -\sum_{k \neq i} a_{ik} \end{array} \right. . \quad (8.5)$$

O vetor ψ é de dimensão n e é conhecido como vetor solução, as entradas do vetor são dadas por:

$$\psi_i = \psi(\mathbf{x}_i).$$

O vetor \mathbf{b} também de dimensão n é chamado de vetor independente cuja as entradas do vetor são:

$$b_i = f(\mathbf{x}_i).$$

8.2 Aplicações

Sendo um dos objetivos principais deste trabalho, a equação de *Poisson* bidimensional é de extrema importância para solucionar as equações de Navier-Stokes. Será abordado apenas o caso bidimensional.

Calcula-se o erro relativo em todos os testes numéricos envolvendo as equações de *Poisson* por meio de $\|\cdot\|_2$ ao efetuar o seguinte cálculo:

$$Erro_{relativo} = \frac{\|Exata - Numérica\|}{\|Exata\|} \quad (8.6)$$

8.2.1 A equação de *Poisson* com condições *Dirichlet* de fronteira

A condição *Dirichlet* estabelece um valor específico da variável dependente na fronteira.

Teste numérico 1

Um primeiro conjunto de testes numéricos será realizado para investigar qual o melhor valor deve-se adotar à razão $\frac{h}{\Delta x} = \alpha$. Com isso, pretende-se selecionar a função núcleo com melhores resultados nas aproximações para partículas uniformemente distribuídas e com alguma perturbação (conforme equação (4.1)). Por fim, determinar qual o melhor valor para o parâmetro α .

Seja a equação diferencial

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} &= 4, \quad 0 < x < 1, \quad 0 < y < 1; \\ \psi(0, y) &= x^2, \quad \psi(1, y) = (x - 1)^2, \quad 0 \leq y \leq 1; \\ \psi(x, 0) &= y^2, \quad \psi(x, 1) = (1 - y)^2, \quad 0 \leq x \leq 1. \end{aligned} \tag{8.7}$$

Cuja solução exata é $\psi(x, y) = (x - y)^2$.

Realizou-se testes numéricos com todos os sete modelos de função núcleo apresentadas neste trabalho, e à todos eles, tratamento de fronteira algum foi aplicado. Os quatro melhores resultados obtidos nas aproximações constam na Tabela 8.1. O domínio $[0, 1] \times [0, 1]$ foi discretizado com 1600 partículas, com $k = 2$ e para a função duplo cosseno, a constante de amplitude $K = 2$. Lembrando que o comprimento de suavização é dado da forma $h = \alpha \Delta x$ e k surge como fator de escala do comprimento de suavização para ampliar o número de partículas dentro do suporte compacto da função núcleo.

A Tabela 8.1 destaca a sensibilidade das soluções para pequenas mudanças de α e com $\eta = 0$.

Tabela 8.1: Erros de aproximação da equação (8.7) com variação da razão $\frac{h}{\Delta x}$.

Função núcleo	$\frac{h}{\Delta x} = 1.29$	$\frac{h}{\Delta x} = 1.28$	$\frac{h}{\Delta x} = 1.27$	$\frac{h}{\Delta x} = 1.26$
<i>Spline</i> cúbica	0.2125	0.2150	0.2174	0.2197
Gaussiana	0.0596	0.0546	0.0498	0.0453
Duplo cosseno	0.0239	0.0238	0.0238	0.0240
<i>New</i> quártico	0.0092	0.0048	0.0064	0.0099

Os testes mostraram vantagem para as funções duplo cosseno e *new* quártico, sendo ainda mais significativa ao adotar o núcleo *new* quártico. Outra característica é que para ambas as funções com melhor desempenho, a razão $\frac{h}{\Delta x} = 1.28$ foi a mais apropriada.

A Figura 8.1 apresenta as soluções exata e numérica para a equação (8.7) com distribuição uniforme.

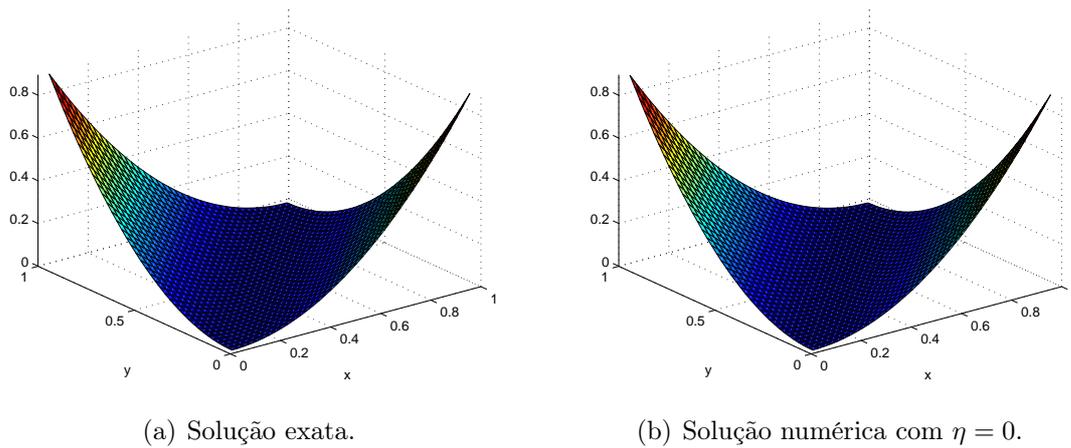


Figura 8.1: Aproximação para a equação (8.7) com função núcleo *new* quártico e tratamento normal de fronteira.

A Tabela 8.2 destaca a sensibilidade das soluções para pequenas mudanças de α e com $\eta = 0.3215$.

Tabela 8.2: Erros de aproximação da equação (8.7) com variação da razão $\frac{h}{\Delta x}$ e $\eta = 0.3215$.

Função núcleo	$\frac{h}{\Delta x} = 1.29$	$\frac{h}{\Delta x} = 1.28$	$\frac{h}{\Delta x} = 1.27$	$\frac{h}{\Delta x} = 1.26$
<i>Spline</i> cúbica	0.3439	0.4262	0.3153	0.4208
Gaussiana	0.2337	0.2151	0.1958	0.2350
Duplo cosseno	0.1976	0.2841	0.2795	0.2422
<i>New</i> quártico	0.1689	0.1168	0.2141	0.2123

A Tabela 8.3 destaca a sensibilidade das soluções para pequenas mudanças de α e com $\eta = 0.4999$.

Tabela 8.3: Erros de aproximação da equação (8.7) com variação da razão $\frac{h}{\Delta x}$ e $\eta = 0.4999$.

Função núcleo	$\frac{h}{\Delta x} = 1.29$	$\frac{h}{\Delta x} = 1.28$	$\frac{h}{\Delta x} = 1.27$	$\frac{h}{\Delta x} = 1.26$
<i>Spline</i> cúbica	0.5335	0.8835	0.9744	0.9873
Gaussiana	0.5053	0.4884	0.7299	0.4575
Duplo cosseno	0.9750	1.5007	0.7458	1.3729
<i>New</i> quártico	0.6847	1.3704	2.0937	1.1246

A Figura 8.2 apresenta as soluções numéricas para a equação (8.7) com distribuições perturbadas.

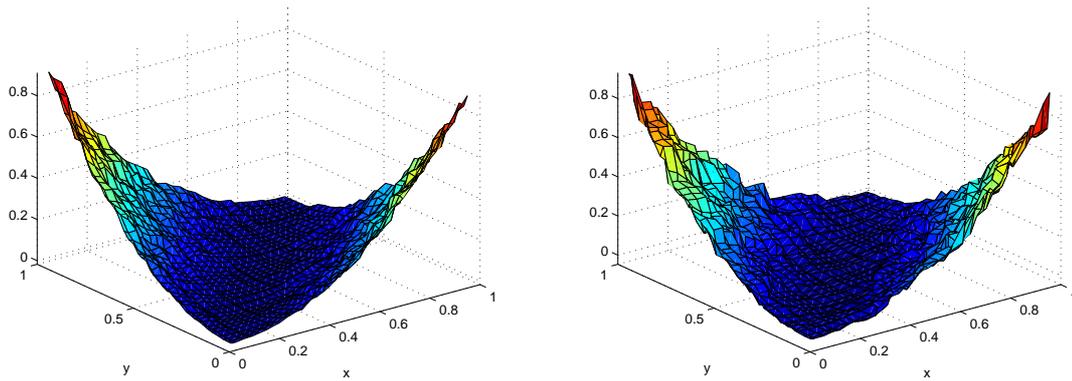
(a) Solução numérica com $\eta = 0.3215$.(b) Solução numérica com $\eta = 0.4999$.

Figura 8.2: Aproximação para a equação (8.7) com função núcleo *new* quártico e tratamento normal de fronteira.

Comparando os resultados anteriores com o resultado indicado em [30], é possível chegar a conclusão final para o valor de α , basta observar as próximas três tabelas. Os valores adotados para a constante de escala k foram obtidos por meio de testes numéricos. Se $k = 1$ o número de partículas dentro do suporte compacto fica muito pequeno e gera inconsistência. Se $k = 3$, os resultados são equivalentes aos obtidos com $k = 2$, implicando apenas num esforço computacional mais elevado e podendo exceder o número sugerido de partículas dentro do suporte compacto, conforme relatado em [6].

Tabela 8.4: Erros de aproximação da equação (8.7) com variação do número de partículas com $\eta = 0$.

Número de Partículas	1600	3600	6400	10000
$k = 2$ e $h = 1.28kdx$	0.0048	0.0106	0.0156	0.0188
$k = 2$ e $h = 1.3kdx$	0.0138	0.0038	0.0057	0.0080

Tabela 8.5: Erros de aproximação da equação (8.7) com variação do número de partículas com $\eta = 0.3215$.

Número de Partículas	1600	3600	6400	10000
$k = 2$ e $h = 1.29kdx$	0.1689	0.0661	0.0647	0.0738
$k = 2$ e $h = 1.3kdx$	0.0513	0.0588	0.0630	0.0704

Tabela 8.6: Erros de aproximação da equação (8.7) com variação do número de partículas com $\eta = 0.4999$.

Número de Partículas	1600	3600	6400	10000
$k = 2$ e $h = 1.29kdx$	0.6847	0.1513	0.1636	0.1655
$k = 2$ e $h = 1.3kdx$	0.1616	0.1504	0.1594	0.1667

Ao analisar os resultados das tabelas anteriores, recomenda-se dentre as sete funções núcleo apresentadas, a *new* quártico com $\alpha = 1.3$ tanto para partículas uniformemente distribuídas quanto para partículas com alguma perturbação sobre seu estado uniforme.

Teste numérico 2

O segundo teste numérico consiste em analisar as influências do tratamento de fronteira na aproximação para o modelo de equação diferencial.

Seja a equação diferencial

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = x^2 y, \quad 0 < x < \pi, \quad 0 < y < \pi;$$

$$\psi(0, y) = 0, \quad \psi(\pi, y) = \frac{1}{12} y \pi^4 + \operatorname{senh}(\pi)(\cos(y) + \operatorname{sen}(y)), \quad 0 \leq y \leq \pi; \quad (8.8)$$

$$\psi(x, 0) = \operatorname{senh}(x), \quad \psi(x, \pi) = \frac{1}{12} \pi x^4 - \operatorname{senh}(x), \quad 0 \leq x \leq \pi.$$

Cuja solução exata é $\psi(x, y) = \frac{1}{12} x y^4 + \operatorname{senh}(y)(\cos(x) + \operatorname{sen}(x))$.

Adotou-se um número variável de partículas na discretização com intuito de verificar os efeitos desse aumento na solução numérica. Outra análise, provém da perturbação aplicada sobre as partículas em estado uniforme. De modo geral, a perturbação depende do valor de Δx , entre outras palavras, a medida que Δx diminui, a perturbação canônica (equação (4.1)) também diminui, e quanto menor a perturbação, mais próximo da discretização uniforme ficam as partículas.

Em suma: quanto maior a perturbação, maior será o erro; quanto maior a perturbação, maior será o valor de Δx ; quanto menor o valor de Δx , menor será o número de partículas dentro do suporte compacto, com isso, maior será o erro, e assim, justifica-se a análise quanto ao valor da razão $\frac{h}{\Delta x}$. Isso ficará mais evidente nos resultados a seguir.

Na Tabela 8.7 consta os resultados obtidos ao aproximar equação (8.8) sem as condições de *Dirichlet*.

Tabela 8.7: Erros de aproximação da equação (8.8) com tratamento normal de fronteira.

Número Partículas	1600	3600	6400	10000
$\eta = 0$	0.0074	0.0051	0.0046	0.0045
$\eta = 0.3215$	0.0307	0.0274	0.0282	0.0251
$\eta = 0.4999$	0.0752	0.0601	0.0569	0.0595

A Figura 8.3 apresenta as soluções da equação (8.8) sem as condições de *Dirichlet*.

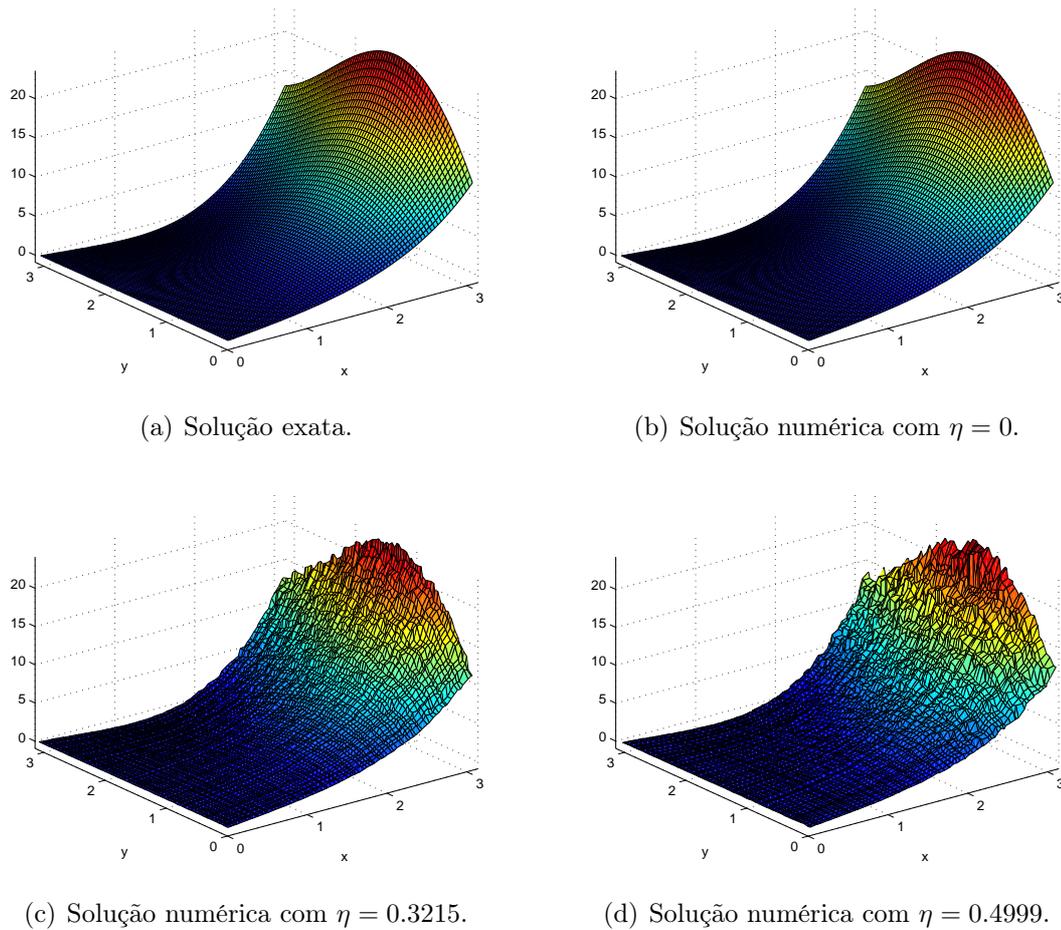


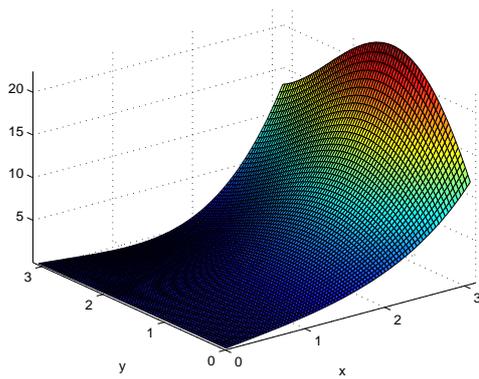
Figura 8.3: Aproximação para a equação (8.8) com função núcleo *new* quártico, 6400 partículas e tratamento normal de fronteira.

Na Tabela 8.8 consta os resultados obtidos ao aproximar equação (8.8) com as condições de *Dirichlet* na atribuição de partículas fantasmas.

Tabela 8.8: Erros de aproximação da equação (8.8) com tratamento de fronteira por partículas fantasmas do tipo I e II.

Número Partículas	1600	3600	6400	10000
$\eta = 0$	0.0475	0.0461	0.0459	0.0461
$\eta = 0.3215$	0.0766	0.0666	0.0502	0.0578
$\eta = 0.4999$	0.1006	0.0941	0.0866	0.0954

A Figura 8.4 apresenta as soluções da equação (8.8) com as condições de *Dirichlet* na atribuição de partículas fantasmas.



(a) Solução exata.

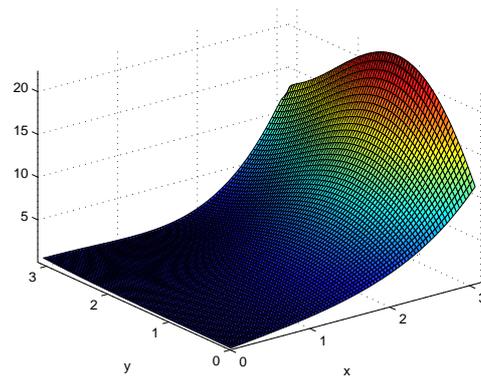
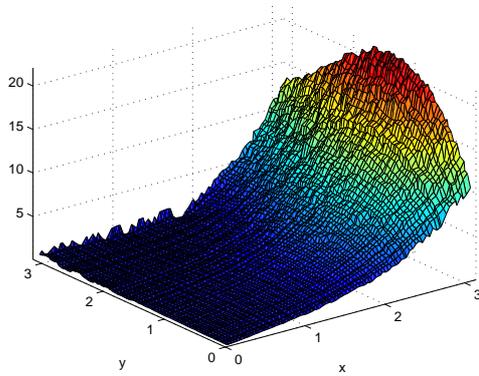
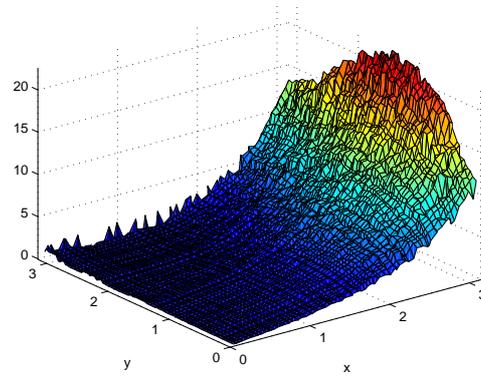
(b) Solução numérica com $\eta = 0$.(c) Solução numérica com $\eta = 0.3215$.(d) Solução numérica com $\eta = 0.4999$.

Figura 8.4: Aproximação para a equação (8.8) com função núcleo *new* quártico, 6400 partículas e tratamento de fronteira por partículas fantasmas do tipo I e II.

Na Tabela 8.9 consta os resultados obtidos ao aproximar equação (8.8) com as condições de *Dirichlet* na atribuição de partículas *dummy*.

Tabela 8.9: Erros de aproximação da equação (8.8) com tratamento de fronteira por partículas fantasmas *dummy*.

Número Partículas	1600	3600	6400	10000
$\eta = 0$	0.0061	0.0026	0.0020	0.0025
$\eta = 0.3215$	0.0407	0.0362	0.0270	0.0258
$\eta = 0.4999$	0.0678	0.0605	0.0488	0.0549

A Figura 8.5 apresenta as soluções da equação (8.8) com as condições de *Dirichlet* na atribuição de partículas *dummy*.

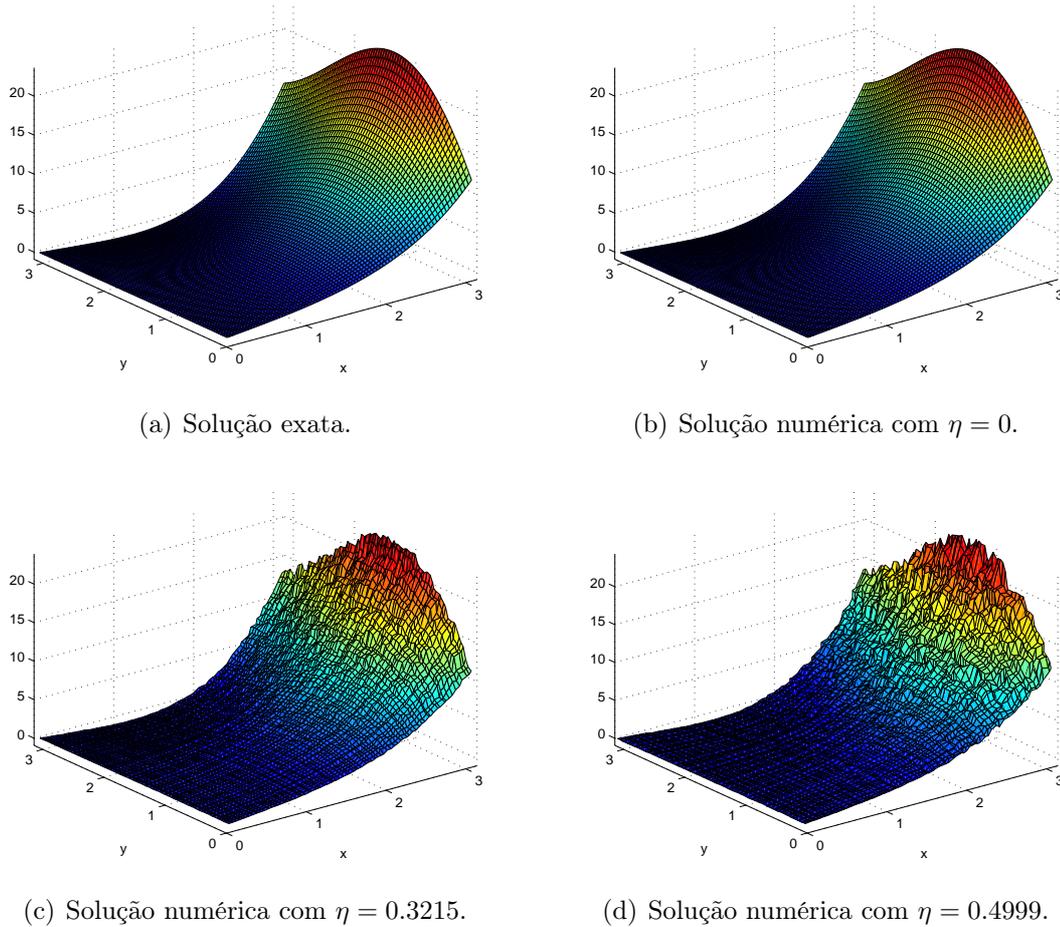


Figura 8.5: Aproximação para a equação (8.8) com função núcleo *new* quártico, 6400 partículas e tratamento de fronteira por partículas *dummy*.

8.2.2 A equação de *Poisson* com condições mistas de fronteira

Nesta seção além da condição *Dirichlet*, aborda-se também a condição *Neumann*. Ela estabelece um valor específico para a derivada da variável dependente (ou gradiente) na fronteira. Sendo assim, torna-se necessário a escolha de um método numérico para aproximar essas derivadas espaciais. Neste trabalho adotou-se o esquema de diferenças finitas compactas de alta ordem.

O método de diferenças finitas compactas, ou diferenças compactas, também conhecido como diferenças Hermitianas, têm seus primeiros relatos em 1878, conforme apontado em [28], que determina um ganho de precisão sem a inclusão de mais pontos, como costumeiro em outros métodos, baseando-se no fato de que a derivação de cada equação de diferenças satisfaz diversos pontos ao mesmo tempo ao invés de um único apenas.

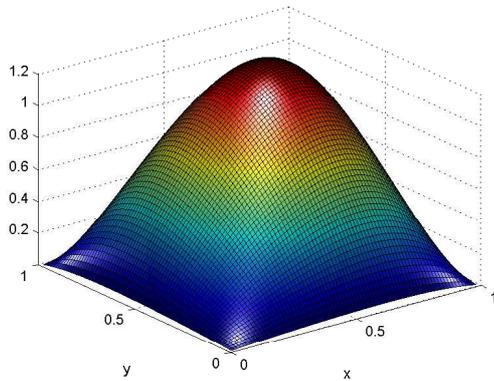
Dessa forma, para aproximar as derivadas espaciais na fronteira, onde as partículas encontram-se uniformemente distribuídas, o esquema de diferenças finitas compactas é um misto de duas diferentes ordens, com isso, dividiu-se a fronteira em cinco partes para obtenção da aproximação. Para o ponto no contorno, usou-se aproximação de quinta ordem e para os outros pontos de sexta ordem. Vejamos o procedimento para o cálculo das derivadas.

Para o ponto no contorno, $i = 1$, adotou-se a discretização de quinta ordem descentrada:

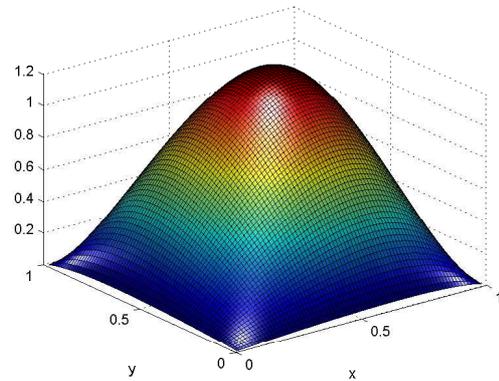
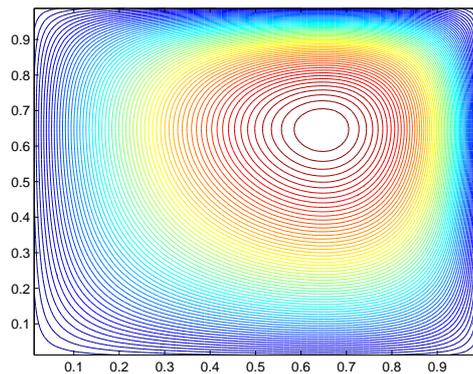
$$f'_1 + 4f'_2 = \frac{1}{24\Delta x}(-74f_1 + 16f_2 + 72f_3 - 16f_4 + 2f_5) + O(\Delta x^5).$$

Cuja solução exata é $\psi(x, y) = -10xy(x - 1)(y - 1)e^{x^2+y^2}$.

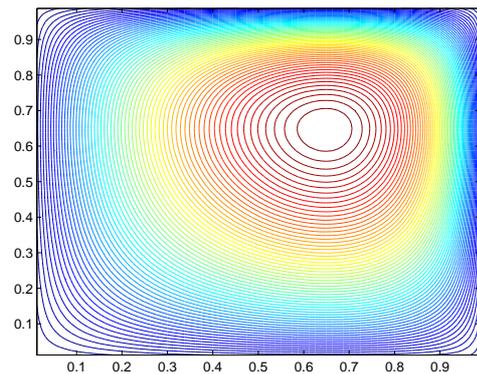
Na Figura 8.6 é possível observar as soluções exata e numérica da equação (8.9) com distribuição uniforme de 6400 partículas. Utilizou-se a função núcleo *new* quártico, $k = 2$, $\alpha = 1.3$ e $h = k\alpha\Delta x$. É possível também comparar as curvas de níveis das duas soluções, garantindo melhor compreensão dos resultados obtidos.



(a) Solução exata.

(b) Solução numérica com $\eta = 0$.

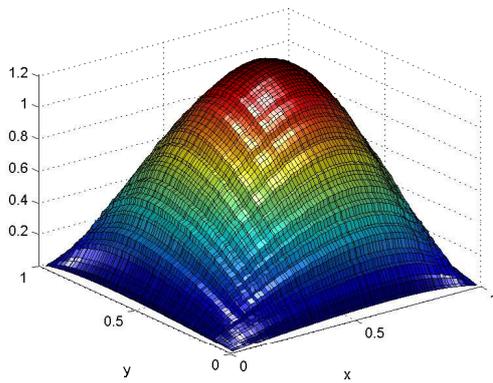
(c) Curvas de níveis da solução exata.



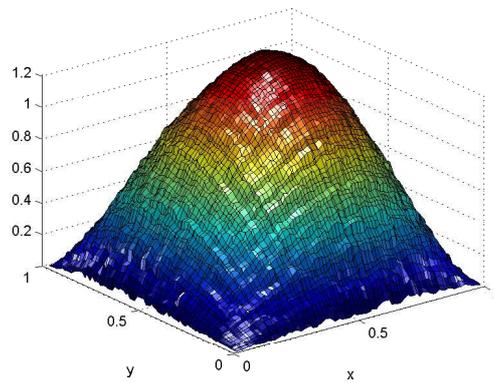
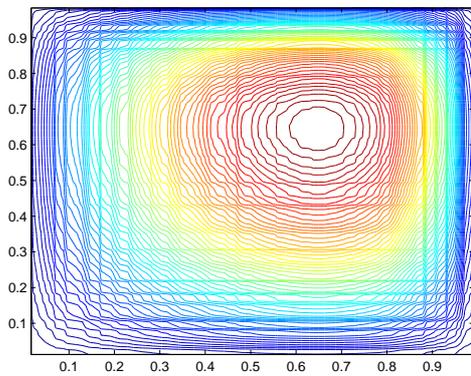
(d) Curvas de níveis da solução numérica.

Figura 8.6: Aproximação para a equação (8.9) com tratamento de fronteira por partículas *dummy*.

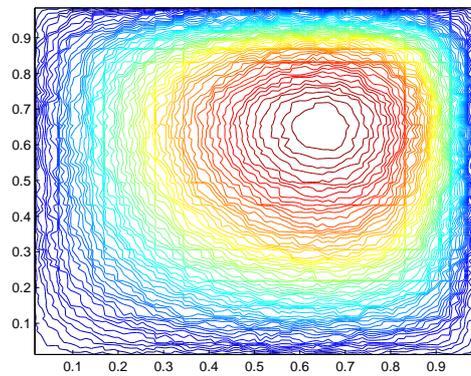
Na Figura 8.7 é possível observar as soluções exata e numérica da mesma equação e com os mesmos parâmetros, entretanto, aplicou-se uma perturbação canônica $\eta = 0.3215$. É importante observar que a solução exata para partículas perturbadas também será uma solução deslocada, ou seja, ela é calculada utilizando as coordenadas das partículas perturbadas.



(a) Solução exata.

(b) Solução numérica com $\eta = 0.3215$.

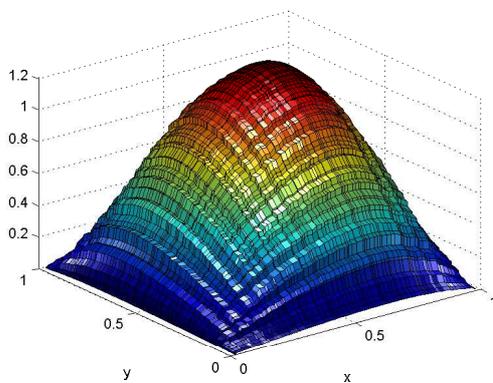
(c) Curvas de níveis da solução exata.



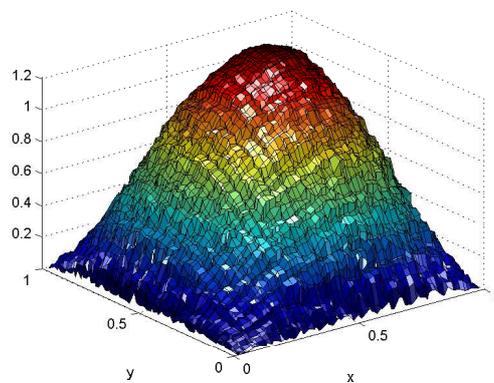
(d) Curvas de níveis da solução numérica.

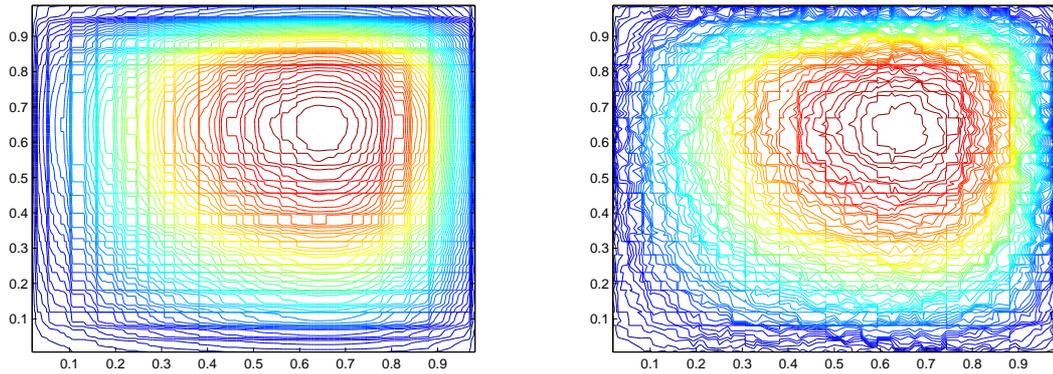
Figura 8.7: Aproximação para a equação (8.9) com perturbação $\eta = 0.3215$ e tratamento de fronteira por partículas *dummy*.

Assim como na Figura 8.7, a Figura 8.8 destaca as soluções exata e perturbada da equação (8.9), nenhum parâmetro foi modificado, exceto a intensidade da perturbação, que agora passa ser $\eta = 0.4999$.



(a) Solução exata.

(b) Solução numérica com $\eta = 0.4999$.



(c) Curvas de níveis da solução exata.

(d) Curvas de níveis da solução numérica.

Figura 8.8: Aproximação para a equação (8.9) com perturbação $\eta = 0.4999$ e tratamento de fronteira por partículas *dummy*.

Tabela 8.10: Erros de aproximação da equação (8.9) com tratamento de fronteira por partículas fantasmas *dummy*.

Número Partículas	1600	3600	6400	10000	14400	$O(\Delta x) _{\partial\Omega}$
$\eta = 0$	0.0205	0.0062	0.0036	0.0067	0.0093	7.3898
$\eta = 0.3215$	0.0536	0.0636	0.0806	0.0770	0.0770	7.3898
$\eta = 0.4999$	0.1638	0.1767	0.1811	0.1792	0.1924	7.3898

Ao analisar os resultados contidos na Tabela 8.10 é possível compreender as características das soluções: para partículas uniformemente distribuídas, quanto maior o número de partículas, menor é o erro, desde que o número de partículas seja inferior a 10000, pois para essa quantidade o erro volta a crescer; para partículas com alguma perturbação, quanto mais partículas são inseridas, maior é o erro, esse padrão ocorre para um número de partículas entre 100 e 10000; para 10000 partículas o número decresceu em relação a 64000 e também manteve-se menor quando comparado com 14400, isso nos dois casos de partículas perturbadas. Esse aumento no erro acontece porque o número de partículas determina o valor de h , e quanto maior o número de partículas, menor é o tamanho do comprimento de suavização. É possível que esse padrão seja mantido toda vez que houver a mudança do número de partículas representada por uma potência par de base 10, por exemplo, entre 10^2 e 10^4 , ou 10^4 e 10^6 . Dessa forma, é importante avaliar o valor de α sempre que uma simulação ocorrer. Como ele foi mantido fixo, os erros tiveram esse perfil crescente, mas isso pode ser minimizado aumentando o valor de α .

Para facilitar a compreensão, toma-se como exemplo a distribuição perturbada $\eta = 0.3215$ com 1600 partículas. Se o valor $\alpha = 1.3$ for alterado para $\alpha = 1.5$, o erro 0.0536 baixa para 0.0334 confirmando as análises realizadas, e assim, por meio deste ajuste o perfil de soluções com partículas perturbadas pode ficar cada vez mais parecido com o perfil de soluções que utilizam partículas uniformemente distribuídas.

Considerações finais

A Tabela 8.11 apresenta de forma sucinta os resultados obtidos neste estudo ao longo de sua evolução. Sua disposição por linhas e colunas definem toda a trajetória da pesquisa, incluindo toda a parte de programação em *Matlab*[®]. A primeira coluna representa a investigação realizada, tendo como base a literatura e/ou testes numéricos. A segunda coluna determina a base necessária para gerar um resultado para o problema investigado, por fim, a terceira coluna destaca os resultados obtidos e validados com base em livros e artigos nacionais e internacionais. Enquanto isso, as linhas determinam a ordem cronológica das investigações.

Tabela 8.11: Síntese dos resultados obtidos na pesquisa.

Investigação	Dados	Sugestão
Aproximação	operador gradiente operador laplaciano	gradiente diferença G_- MEA
Restauração da consistência	função constante função linear	método FPM método FPM
Tratamento de fronteira	$\eta = 0$ $\eta = 0.3215$ $\eta = 0.4999$	partículas <i>dummy</i> partículas <i>dummy</i> partículas <i>dummy</i>
Parâmetro α para $\eta = 0$	$60 \leq N \leq 100$ $N < 60$ ou $N > 100$	$\alpha = 1.3$ α não determinado
Parâmetro α para $\eta > 0$	$60 \leq N \leq 100$	$\alpha > 1.3$
Função núcleo	equação de <i>Poisson</i>	<i>new</i> quártico
Domínio	$[0, 1] \times [0, 1]$	discretizar com 6400 partículas
Equação de <i>Poisson</i>	condição de <i>Neumann</i>	diferenças compactas 6 ^a ordem

A soluções numéricas foram calculadas com software *Matlab*[®] *R2012a* utilizando processador *core*[®] *i7* de 2.20 GHz e 6.0 GB de memória RAM, sem placa de vídeo dedicada. O tempo computacional para a geração da solução numérica da equação de *Poisson* é de ≈ 7 segundos para 1600 partículas e ≈ 7 minutos para 14400 partículas.

Smoothed Particle Hydrodynamics Test - SPHT

O *Smoothed Particle Hydrodynamics Test* é um programa desenvolvido como parte do projeto de pesquisa de mestrado do autor. Ele foi pensado e elaborado de tal forma que contribua com as pesquisas envolvendo SPH em qualquer parte do mundo. O objetivo é servir como ferramenta de apoio nas aproximações de funções utilizando o método SPH, de modo que o usuário possa ter condições de validar seus resultados por meio de comparações. Além do método SPH tradicional, consta no programa outros quatro métodos, cuja finalidade é restaurar a consistência da aproximação por partículas. São eles: CSPM (*Corrective Smoothed Particle Method*), FPM (*Finite Particle Method*), inversa I (Filtro Inverso) e inversa II (Função *Dome-shaped* Modificada). O programa está preparado para mostrar resultados de aproximações com três diferentes ordens de consistência, sendo elas: C^0 , C^1 e C^2 . As análises de consistência estão disponíveis nesta dissertação.

A.1 Iniciando o programa SPHT

Execute o programa “*Smoothed Particle Hydrodynamics Test.m*” e prossiga com as etapas detalhadas a seguir:

Primeiramente selecione o método de solução, são eles:

- SPH tradicional;
- CSPM;
- FPM;
- inversa I;
- inversa II.

Ao selecionar cada um dos métodos, uma janela com informações será aberta. Por exemplo, ao selecionar o método SPH tradicional, a mensagem “não selecione os núcleos inversos para esse método” surgirá. Isso quer dizer que na segunda etapa, o usuário não deve selecionar as opções “inversa I” ou “inversa II”.

A segunda etapa consiste em selecionar a função núcleo, são elas:

- gaussiana;

- *spline* cúbica;
- *new* quártico;
- *spline* quántica;
- *Wendland*;
- duplo cosseno;
- *new* cúbica;
- inversa I;
- inversa II.

A terceira etapa consiste em atribuir valores os parâmetros necessários para o teste numérico.

- Número de partículas - quantidade de partículas inseridas no domínio;
- xi - valor inicial do intervalo;
- xf - valor final do intervalo;
- Alfa - corresponde ao valor α resultante da razão $\frac{h}{\Delta x}$;
- Eta - corresponde ao coeficiente de perturbação η . Se $\eta = 0$ significa que a distribuição das partículas será uniforme, se $\eta > 0$, a distribuição será perturbada;
- k - corresponde a constate de escala do raio de suavização da função núcleo.

A quarta e última etapa é a escolha do modelo de função para que o método escolhido determine a aproximação. Os modelos são fixos e não permitem inclusão de novas funções sem que o código seja modificado pelos autores. Os modelos são:

- $f(x) = 0.5$;
- $f(x) = x$;
- $f(x) = \sin(6x)$;
- $f(x) = \log(x)$;
- $f(x) = e^x$;
- $f(x) = \sqrt{x}$;
- $f(x) = x^2$;
- $f(x) = x^3$.

Ao concluir essas etapas e clicar no botão “calcular”, o gráfico da solução exata será plotado na janela de interface, juntamente com a solução numérica. Caso o usuário necessite comparar as soluções com outros dados, basta alterar os parâmetros e clicar no botão “calcular” novamente.

Observação: para comparar soluções o usuário não deverá utilizar o botão “limpar”.

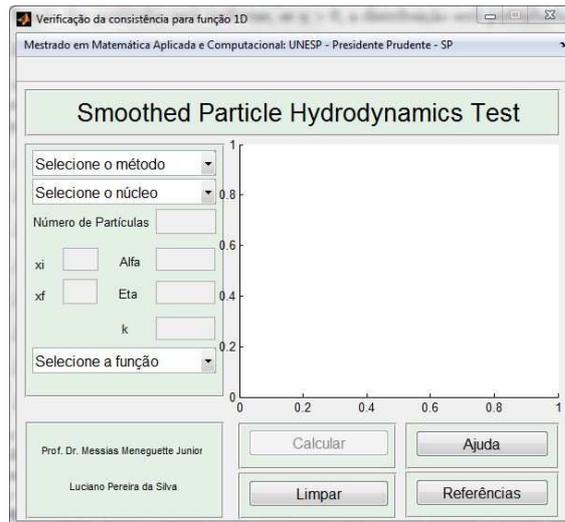


Figura A.1: Interface do programa Smoothed Particle Hydrodynamics Test.

Observação: o botão “calcular” só será ativado após a conclusão das duas primeiras etapas. O tratamento de fronteira se dá por meio de partículas fantasmas do tipo I e II para todos os casos.

A.2 A modificação do programa SPHT

Para os casos em que o pesquisador necessite de aproximações para alguma função não estabelecida no programa, será possível contactar os autores por e-mail e solicitar a inclusão da função desejada. Para isto basta encaminhar os dados para:

lucianocogo@gmail.com e *messias@fct.unesp.br* com o assunto “Inclusão de função no SPHT”. Os autores colocam-se à disposição para outras formas de contribuição e melhorias no SPHT.

Referências

- [1] M. Antuono; B. Bouscasse; A. Colagrossi; S. Marrone. A measure of spatial disorder in particle methods. *Computer Physics Communications*, 18(10):2609–2621, 2014.
- [2] T. Belytschko; Y. Krongauz; D. Organ; M. Fleming; P. Krysl. Meshless methods: an overview and recent developments. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 139:3–47, 1996.
- [3] J. K. Chen; J. E. Beraun; T. C. Carney. A corrective smoothed particle method for boundary value problems in heat conduction. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 46:231–252, 1999.
- [4] S. Cummins; M. Rudman. An SPH projection method. *Journal of Computational Physics*, 152:584–607, 1999.
- [5] D. A. Fulk. *A numerical analysis of smoothed particle hydrodynamics*. PhD thesis, Air Force Institute of Technology, 1994.
- [6] C. Geoffroy; B. Samuel; W. Lars; K. Rainer; B. Hans-Jorg. Influence of particle disorder and smoothing length on SPH operator accuracy. *Conference Paper - 10th international SPHERIC workshop*, June 2015.
- [7] R. A. Gingold; J. J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics - theory and application to non-spherical stars. *Royal Astronomical Society*, 181:375–389, 1977.
- [8] S. Koshizuka; Y. Oka. Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid. *Nuclear Science and Engineering*, 123:421–434, 1996.
- [9] F. Le; M. J. Christophe; L. Julien; A. Andrea; C. Joelle. A high-order SPH method by introducing inverse kernels. *Chinese Journal of Aeronautics*, 2017.
- [10] G. R. Li; S. Quek. *Finite Element Method: A Practical Course*. Butterworth-Heinemann, 2003.
- [11] L. D. Libersky; A. G. Petscheck. High strain lagrangian hydrodynamics - a three-dimensional SPH code for dynamic material response. *Journal of Computational Physics*, 109:67–75, 1993.
- [12] M. B. Liu; G. Liu; K. Lam. Construing smoothed functions in smoothed particle hydrodynamics with applications. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 155:263–284, 2003.
- [13] M. B. Liu; G.R. Liu. Restoring particle consistency in smoothed particle hydrodynamics. *Applied Numerical Mathematics*, 56:19–36, 2006.

- [14] G. R. Liu; M. B. Liu,. *Smoothed Particle Hydrodynamics: a meshfree particle method*. World Scientific Publishing, 1 edition, 2003.
- [15] L. B. Lucy. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *Astron. Journal*, 82:1013–1024, 1977.
- [16] F. Macià; M. Antuono; L. M. González; A. Colagrossi. Theoretical analysis of the no-slip boundary condition enforcement in SPH methods. *Progress of Theoretical Physics*, 125(6):1091–1121, 2011.
- [17] J. J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics. *Annual Review of Astronomical and Astrophysics.*, 30:543–574, 1992.
- [18] J. J. Monaghan. Simulating free surface flow with SPH. *Journal of Computational Physics*, 110:339–406, 1994.
- [19] J. J. Monaghan; A. Kowharyan. SPH simulating of multi-phase flow. *Computer Physics Communications*, 87:225–235, 1995.
- [20] J. J. Monaghan; J. C. Lattanzio. A refined particle method for astrophysical problems. *Astronomy and Astrophysics*, 149:135–143, 1985.
- [21] J. J. Monaghan; P. Cleary. Conduction modelling using smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 148:227–264, 1999.
- [22] J. P. Morris. A study of the stability properties of SPH. *Applied Mathematics Reports and Preprints*, 1994. Monash University.
- [23] J. P. Morris. *Analysis of smoothed particle hydrodynamics with applications*. PhD thesis, Monash University, 1996.
- [24] A. Paiva; F. Petronetto; G. Tavares; T. Lewiner. *Simulação de Fluidos sem Malha: Uma introdução ao método SPH*. IMPA, 2009.
- [25] F. Petronetto. *A Equação de Poisson e a Decomposição de Helmholtz-Hodge com Operadores SPH*. PhD thesis, PUC-Rio, Rio de Janeiro, 2008.
- [26] N. J. Quinlan; M. Basa; M. Lastiwka. Truncation error in mesh-free particle methods. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 66(13):2064–2085, 2006.
- [27] A. Souto-Iglesias; F. Macià; L.M. González; J.L. Cercos-Pita. On the consistency of MPS. *Computer Physics Communications*, 184(3):732–745, 2013.
- [28] L. F. Souza. *Instabilidade Centrífuga e Transição para Turbulência em escoamentos Laminares Sobre Superfícies Côncavas*. PhD thesis, ITA - Campo Montenegro, São José dos Campos, 2003.
- [29] M. L. P. Souza; M. S. Brait. Discretização da equação de poisson para aplicação em eletroosmose. *Anais I Congresso de Matemática Aplicada e Computacional*, 2011.
- [30] A. S. Takata. Aspectos teórico-práticos dos métodos SPH e MPS. Master’s thesis, FCT/UNESP-PP, Presidente Prudente, 2015.
- [31] D. Violeau. *Fluid Mechanics and the SPH Method: Theory and Applications*. Oxford University Press, 2012.

-
- [32] X. F. Yang; S. L. Peng; M. B. Liu. A new kernel function for SPH with applications to free surface flows. *Journal of Applied Mathematical Modelling*, 38:3822–3833, 2014.