

SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS INCOMPRESSÍVEIS EMPREGANDO O MÉTODO SPH UTILIZANDO UM ALGORITMO ITERATIVO NA DETERMINAÇÃO DO CAMPO DE PRESSÕES

Mayksoel Medeiros de Freitas e Helio Pedro Amaral Souto

Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Caixa Postal 97282, 28610-974 Nova
Friburgo, RJ, Brasil

Palavras Chave: Algoritmo iterativo, Fluidos newtonianos incompressíveis, Método de partículas lagrangiano, Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH).

Resumo. Foi desenvolvido um simulador numérico (C/C++) para a resolução de escoamentos de fluidos newtonianos incompressíveis, baseado no método de partículas lagrangiano, livre de malhas, *Smoothed Particle Hydrodynamics* (SPH). Tradicionalmente, duas estratégias são utilizadas na determinação do campo de pressões de forma a garantir-se a condição de incompressibilidade do fluido. A primeira delas é a formulação chamada *Weak Compressible Smoothed Particle Hydrodynamics* (WCSPH), onde uma equação de estado para um fluido quase-incompressível é utilizada na determinação do campo de pressões. A segunda, emprega o Método da Projeção e o campo de pressões é obtido mediante a resolução de uma equação do tipo Poisson. Neste trabalho, propôs-se um método iterativo, baseado no Método da Projeção, para o cálculo do campo de pressões: *Incompressible Smoothed Particle Hydrodynamics* (ISPH). A fim de validar o método iterativo e o código computacional, foi simulado um problema bidimensional, o escoamento no interior de uma cavidade com a parede superior posta em movimento com velocidade constante. Na resolução deste problema foi utilizado um novo procedimento de reposicionamento periódico de partículas e partículas fantasmas do tipo I e II.

—*E-mail addresses: mayksoel@iprj.uerj.br, helio@iprj.uerj.br .

1 INTRODUÇÃO

Na Dinâmica dos Fluidos Computacional (DFC), em geral, os problemas são resolvidos numericamente mediante o uso de métodos numéricos convencionais que empregam malhas computacionais. Contudo, para alguns tipos de escoamentos particulares estes métodos podem apresentar algumas dificuldades práticas, de implementação, nas suas aplicações. Como alternativa, métodos puramente lagrangianos livres de malhas (*meshfree*), baseados em partículas, têm sido desenvolvidos nas últimas décadas. A principal vantagem desses métodos é a sua grande capacidade de tratar problemas envolvendo grandes deformações, superfícies livres, captura de interfaces móveis, choques etc. Dentre esses métodos, o *Smoothed Particle Hydrodynamics* (SPH) [11] vem se tornando muito popular na DFC.

O método SPH foi originalmente formulado para a simulação de escoamentos compressíveis. Para estes escoamentos o campo de pressões encontra-se relacionado, por exemplo, com a massa específica do fluido através de uma equação de estado. Escoamentos incompressíveis foram, inicialmente, também simulados da mesma forma, utilizando-se uma equação de estado do tipo quase-incompressível [5, 6, 11]. Porém, o uso dessa formulação pode levar ao aparecimento de grandes oscilações numéricas (não físicas) do campo de pressões, o que torna o método instável.

O Método da Projeção [2] é uma alternativa para o cálculo do campo de pressões de modo a poder impor-se a incompressibilidade do fluido. O principal fator inibidor da sua aplicação é o fato de que esta estratégia exige um grande esforço computacional, voltado para a resolução do sistema de equações algébricas oriundo da discretização da equação de Poisson, utilizada na determinação do campo de pressões. No método SPH a matriz dos coeficientes do sistema algébrico, resultante da discretização da equação diferencial, é esparsa e apresenta uma forma não-estruturada em função da distribuição temporal e espacial das partículas. Tal fato dificulta a resolução numérica, eficiente, do referido sistema de equações algébricas [18].

Para tentar superar as dificuldades oriundas do grande esforço computacional associado à resolução do problema de Poisson, bem como dos problemas associados à formulação utilizando uma equação de estado, Bao et al. [7] propuseram um processo iterativo para o cálculo do campo de pressões, via uma correção de pressão, baseado na combinação do Método da Projeção com o emprego de uma equação de estado na sua forma diferencial. Entretanto, no presente trabalho, o objetivo principal foi a proposição de um método iterativo alternativo, também baseado no Método da Projeção, para a resolução do problema de um escoamento incompressível mediante o uso do método SPH, sem o emprego de uma equação de estado.

2 O MÉTODO SPH

Este método foi desenvolvido originariamente por Gingold e Monaghan [8] e Lucy [12], para a sua aplicação a problemas astrofísicos. Ele baseia-se no conceito de aproximação local de uma função, em um dado ponto, por meio de uma formulação integral (representação integral). Essa formulação é, posteriormente, substituída por uma aproximação por partículas. As partículas são utilizadas na discretização do domínio físico e as propriedades relevantes do escoamento como a massa específica, a pressão, a velocidade e a energia interna são determinadas e atribuídas a cada uma dessas partículas.

Nesse método, uma função de aproximação é aplicada na discretização espacial das equações diferenciais parciais, dando origem a um sistema de equações diferenciais ordinárias. Numa próxima etapa, esse sistema de equações é resolvido utilizando-se uma das tradicionais técnicas numéricas de integração. Neste trabalho empregou-se o método *Leap-Frog*.

O primeiro passo, a representação integral ou aproximação de núcleo (kernel), para uma dada função, é a essência do método SPH

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}', \quad (1)$$

onde \mathbf{x} é o vetor posição, $W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)$ é a função núcleo, ou de suavização e $\langle \bullet \rangle$ é definido como sendo o *operador aproximação de núcleo*. Na função de suavização a variável h é conhecida como o *comprimento de suavização*.

A função núcleo possui um suporte compacto, isto é

$$W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) = 0; \quad \forall |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \geq kh, \quad (2)$$

onde k é uma constante relacionada à função núcleo e define a área efetiva (não-nula) da função núcleo para uma dada posição [11]. As funções núcleo são de extrema importância na formulação do método SPH, pois não só definem a região do domínio de influência das partículas, como a consistência da aproximação de uma dada função. A Fig. 1 ilustra o domínio Ω discretizado por partículas, juntamente com uma representação da função núcleo e do raio kh do domínio de suporte.

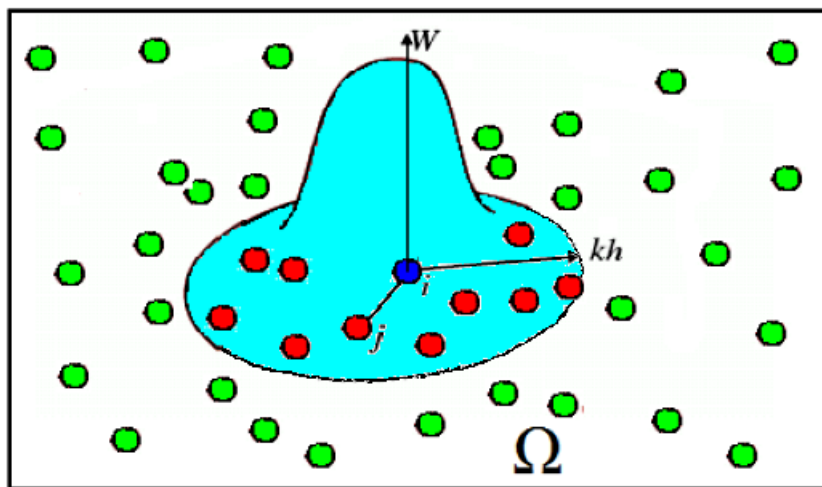


Figura 1: Domínio Ω representado por um conjunto de partículas. A partícula i , no centro, tem suas propriedades calculadas a partir do somatório das propriedades das partículas j , que encontram-se dentro do domínio de suporte da função núcleo.

A função de suavização utilizada em todas as simulações foi a *Spline Cúbica* [6, 11]

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

onde dada a dimensão espacial d do problema, tem-se que

$$f_d = \begin{cases} \frac{1}{h} & \text{se } d = 1 \text{ (unidimensional),} \\ \frac{15}{7\pi h^2} & \text{se } d = 2 \text{ (bidimensional),} \\ \frac{2\pi h^3}{3} & \text{se } d = 3 \text{ (tridimensional)} \end{cases} \quad (4)$$

e $R = \frac{r}{h}$, sendo r a distância entre as partículas i e j . Para essa função núcleo $k = 2$.

No SPH, a integral presente na Eq. (1) é aproximada por meio de uma soma ponderada (pela função núcleo) dos valores da função, considerando todas as partículas dentro do suporte compacto da função núcleo. Esse procedimento é conhecido como *aproximação por partículas* [11].

Portanto, aproximando-se a integral na Eq. (1) por um somatório, considerando somente as partículas dentro do domínio de suporte da função núcleo, obtém-se a sua forma discretizada [6, 11]

$$\langle f(\mathbf{x}_i) \rangle = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) W_{ij}, \quad (5)$$

onde m_j e ρ_j representam a massa e a massa específica da partícula j e

$$W_{ij} = W(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|, h) = W(R_{ij}, h), \quad (6)$$

sendo $R_{ij} = \frac{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|}{h}$.

Na simulação de problemas de dinâmica dos fluidos, assim como em muitas outras aplicações práticas, é necessário aproximar-se os operadores divergente, gradiente e laplaciano de uma dada função, uma vez que os mesmos estão presentes nas equações de balanço que governam os fenômenos de transporte. Na literatura, como por exemplo em Carmo [3], são encontradas algumas das possíveis formulações utilizadas na aproximação desses operadores. Considerando que a função núcleo possui um suporte compacto e que o seu domínio de integração esteja totalmente contido no interior do domínio de simulação, uma possibilidade de aproximação para esses operadores é dada por [6]

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}_i) \rangle = \frac{1}{\rho_i} \sum_{j=1}^N m_j [f(\mathbf{x}_j) - f(\mathbf{x}_i)] \cdot \nabla_i W_{ij}, \quad (7)$$

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}_i) \rangle = \frac{1}{\rho_i} \sum_{j=1}^N m_j [f(\mathbf{x}_j) - f(\mathbf{x}_i)] \nabla_i W_{ij}, \quad (8)$$

$$\langle \nabla^2 f(\mathbf{x}_i) \rangle = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} [f(\mathbf{x}_i) - f(\mathbf{x}_j)] \frac{\mathbf{x}_{ij}}{r_{ij}^2} \cdot \nabla_i W_{ij}, \quad (9)$$

onde

$$\nabla_i W_{ij} = \frac{\mathbf{x}_{ij}}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} = \frac{1}{h} \frac{\mathbf{x}_{ij}}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial R_{ij}} \quad (10)$$

sendo $\mathbf{x}_{ij} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$ e $r_{ij} = |\mathbf{x}_{ij}|$ é a distância entre as partículas i e j .

Se o suporte compacto da função núcleo não estiver completamente contido no interior do domínio Ω do problema, as equações anteriores não mais fornecerão uma aproximação acurada para esses operadores diferenciais. Geralmente, alguma correção deve ser introduzida nessas regiões, a fim de minimizar-se esse efeito de borda, de modo a que essas equações possam continuar a ser utilizadas de forma precisa [11].

3 EQUAÇÕES DE BALANÇO

As equações que governam a dinâmica do escoamento de fluidos são obtidas por meio dos balanços de massa, de quantidade de movimento e de energia (quando o escoamento não for isotérmico). Neste estudo as equações de equilíbrio serão escritas em função das derivadas materiais da massa específica e da velocidade, tendo em vista a natureza Lagrangiana do método empregado. A equação que representa o princípio da conservação de massa é chamada de equação da continuidade

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \vec{v}, \quad (11)$$

onde ρ é a massa específica, t o tempo e \vec{v} o vetor velocidade do fluido. Por outro lado, a velocidade das partículas do fluido pode ser obtida da equação da conservação da quantidade de movimento. Para um fluido newtoniano incompressível ela é conhecida como a equação de Navier-Stokes

$$\frac{D\vec{v}}{Dt} = \frac{1}{\rho} \left(-\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{v} + \vec{f}_{ext} \right), \quad (12)$$

onde μ é a viscosidade dinâmica do fluido, considerada como constante, \vec{f}_{ext} corresponde às forças externas, p é a pressão termodinâmica e $\nabla^2 = \nabla \cdot \nabla$ é o operador laplaciano.

Utilizando-se os operadores SPH, apresentados na seção anterior, obtém-se a forma discretizada destas equações [6]:

$$\frac{D\rho_i}{Dt} = \sum_{j=1}^N m_j v_{ij}^\beta \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta}, \quad (13)$$

e

$$\frac{Dv_i^\alpha}{Dt} = -\frac{1}{\rho_i^2} \sum_{j=1}^N m_j p_{ji} \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\alpha} + \sum_{j=1}^N \frac{m_j (\mu_i + \mu_j)}{\rho_i \rho_j} v_{ij}^\alpha \frac{x_{ij}^\beta}{(r_{ij}^2 + \eta^2)} \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta} + \frac{1}{\rho} f_{ext}^\alpha, \quad (14)$$

onde α e β definem as componentes vetoriais, $v_{ij}^\beta = v_i^\beta - v_j^\beta$, $p_{ij} = p_i - p_j$, $x_{ij}^\beta = x_i^\beta - x_j^\beta$ e η é um parâmetro de regularização, sendo normalmente dado por $\eta^2 = 0,00001h^2$ [3].

A equação da energia não foi apresentada, e nem discretizada, uma vez que se está considerando somente o caso de um escoamento incompressível isotérmico.

4 ASPECTOS NUMÉRICOS

Nesta seção são apresentados alguns aspectos computacionais, importantes, associados à implementação numérica do método SPH, para a resolução de problemas de dinâmica dos fluidos.

4.1 A busca por partículas vizinhas

Apenas as partículas que se encontram dentro do domínio de suporte da função núcleo possuem contribuições não nulas no cálculo de um dado campo para uma dada partícula i . A este grupo de partículas denomina-se de *partículas próximas vizinhas*. Como no método SPH a posição das partículas varia continuamente no tempo e no espaço, não existindo nenhuma conectividade entre elas, encontrar as partículas na vizinhança de uma dada partícula é o primeiro passo em uma simulação. Aqui, optou-se pela utilização do algoritmo chamado de *Busca Direta* [11], no qual, para cada partícula i , é verificada a sua distância em relação a todas as outras partículas j ($j = 1, 2, \dots, N$), onde N representa o número total de partículas. Sendo esta distância menor do que o comprimento de suavização kh , medido a partir da posição da partícula i , a partícula j é caracterizada como sendo uma vizinha da partícula i (veja a Fig. 2).

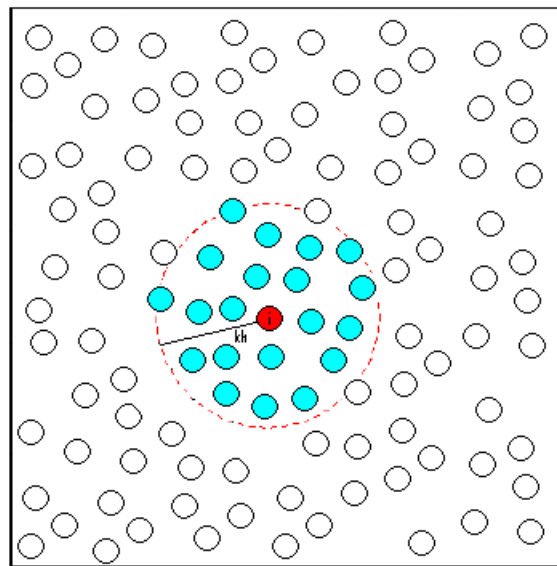


Figura 2: Busca Direta: as partículas com distância $r_{ij} < kh$ são vizinhas da partícula i .

Apesar do alto custo computacional desta técnica, devido à natureza do método SPH a sua implementação numérica pode ser facilmente paralelizada. Recomenda-se o trabalho de Góes [9] para um exemplo de paralelização desta algoritmo de busca empregando a biblioteca CUDA (*Compute Unified Device Architecture*) da NVIDIA Corporation.

4.2 Correção XSPH

Visando a reduzir os possíveis problemas decorrentes da interpenetração das partículas, podendo gerar instabilidade no método e um movimento desordenado das partículas, utiliza-se uma técnica conhecida como XSPH (*eXtend Smoothed Particle Hydrodynamics*) [11] que consiste em calcular uma média, ponderada pela função núcleo, das velocidades das partículas vizinhas e corrigir a velocidade de cada partícula através dessa média ponderada multiplicada por um parâmetro empírico $\varepsilon \in [0, 1]$

$$\vec{v}_i^{XSPH} = \vec{v}_i + \varepsilon \sum_{j=1}^N \frac{2m_j}{\rho_i + \rho_j} (\vec{v}_i - \vec{v}_j) W_{ij}, \quad (15)$$

onde \vec{v}_i^{XSPH} é a velocidade corrigida e \vec{v}_i a velocidade calculada inicialmente para cada partícula. A escolha deste parâmetro depende do tipo de escoamento estudado e tem influência na qualidade dos resultados obtidos. Em se tratando da simulação de escoamentos incompressíveis, Liu e Liu [11] recomendam a escolha de $\varepsilon = 0,3$ uma vez que ela mostrou ser adequada na maioria dos problemas por eles considerados.

4.3 O passo de tempo

O conjunto de equações diferenciais ordinárias, oriundo da discretização espacial das equações de balanço, precisa ser integrado no tempo a fim de que possa ser avaliada a evolução temporal das variáveis dependentes (massa específica, velocidade e posição). Com esta finalidade, foi utilizado o método numérico explícito *Leap-Frog*, que é um método de segunda ordem no tempo, $\mathcal{O}(\Delta t^2)$. A principal vantagem do método *Leap-Frog* é que o mesmo requer uma baixa quantidade de memória RAM (*Random Access Memory*) quando da sua utilização.

A descrição deste método pode ser encontrada, por exemplo, em Góes [9]. Métodos explícitos tais como os de Euler, Runge-Kutta, preditor-corretor etc. poderiam, naturalmente, também ser empregados. Outros esquemas passíveis de utilização na resolução deste sistema de equações diferenciais ordinárias encontram-se descritos em Crespo [5].

Nos trabalhos que utilizam o método SPH, não é comum a utilização de *esquemas de integração temporal implícitos*, uma vez que isso resulta em um sistema linear com uma matriz esparsa que apresenta, a princípio, uma forma não estruturada, não exibindo um padrão fixo, devido à inexistência de conectividade entre as partículas, o que dificulta a sua resolução e acarreta num grande esforço computacional, embora permitam o uso de maiores incrementos de tempo! Assim sendo, na maior parte das aplicações são utilizados esquemas de integração temporal explícitos que estão sujeitos à *condição de estabilidade de CFL* (Courant-Friedrichs-Levy), ou seja, o domínio computacional de dependência numa simulação deve incluir o domínio de dependência físico [1], levando a uma restrição do passo de tempo. A estimativa para cada passo de tempo utilizado no simulador computacional desenvolvido é calculada por [14, 16]

$$\Delta t = \min \left(\lambda_1 \frac{h^2}{\nu}, \lambda_2 \sqrt{\frac{h}{|a|}}, \lambda_3 \frac{h}{c} \right) \quad (16)$$

onde a é a aceleração, h o comprimento de suavização, c a velocidade do som no meio, $\nu = \mu/\rho$ a viscosidade cinemática do fluido, com λ_1 , λ_2 e λ_3 sendo fatores de segurança. O primeiro termo entre parenteses na Eq. (16) foi proposto por Morris, Fox e Zhu [16], com $\lambda_1 = 0,125$. Os segundo e terceiro termos foram propostos por Monaghan [14], que sugeriu o uso de $\lambda_2 = 0,25$ e $\lambda_3 = 0,4$.

4.4 Tratamento das fronteiras

No método SPH a prescrição das condições de contorno não é tão fácil e direta como nos métodos tradicionais baseados em malhas. Visando à correta imposição das condições de contorno, além de resolver outros problemas inerentes à utilização dos operadores SPH em regiões próximas ao contorno do domínio de resolução, uma das soluções propostas consiste na introdução das chamadas *partículas fantasmas* [11] de tipo I e II.

As partículas fantasmas do tipo I são posicionadas na fronteira do domínio e produzem forças repulsivas sobre as partículas próximas à fronteira, de modo a impor-se a condição de não-deslizamento e evitar-se a penetração dessas partículas no contorno do domínio físico.

Em relação às partículas fantasmas do tipo II, dada uma certa partícula real i , localizada a uma distância inferior a kh da fronteira, uma nova partícula virtual é posicionada simetricamente do lado externo da fronteira, vide a Fig. 3. Essas partículas não são consideradas no cômputo das propriedades físicas e a sua dinâmica não é simulada, mas elas possuem propriedades físicas. Seu papel limita-se a simular a continuidade do domínio, a fim de evitar-se problemas do tipo deficiência de partículas próxima à fronteira e possibilitar a imposição das condições de contorno. Estas partículas virtuais possuem a mesma massa específica e pressão das partículas reais correspondentes. Em relação à velocidade, por exemplo, para a prescrição da condição de não-deslizamento em uma fronteira sólida, a velocidade da partícula é determinada da seguinte forma

$$\mathbf{v}_{i'} = 2\mathbf{v}_c - \mathbf{v}_i, \quad (17)$$

onde $\mathbf{v}_{i'}$ é a velocidade da partícula fantasma i' do tipo II, simétrica com relação à partícula real i , que tem velocidade \mathbf{v}_i e \mathbf{v}_c é a velocidade da fronteira, representada pelas partículas fantasmas do tipo I. Ambos os tipos de partículas fantasmas foram utilizados na obtenção dos resultados numéricos.

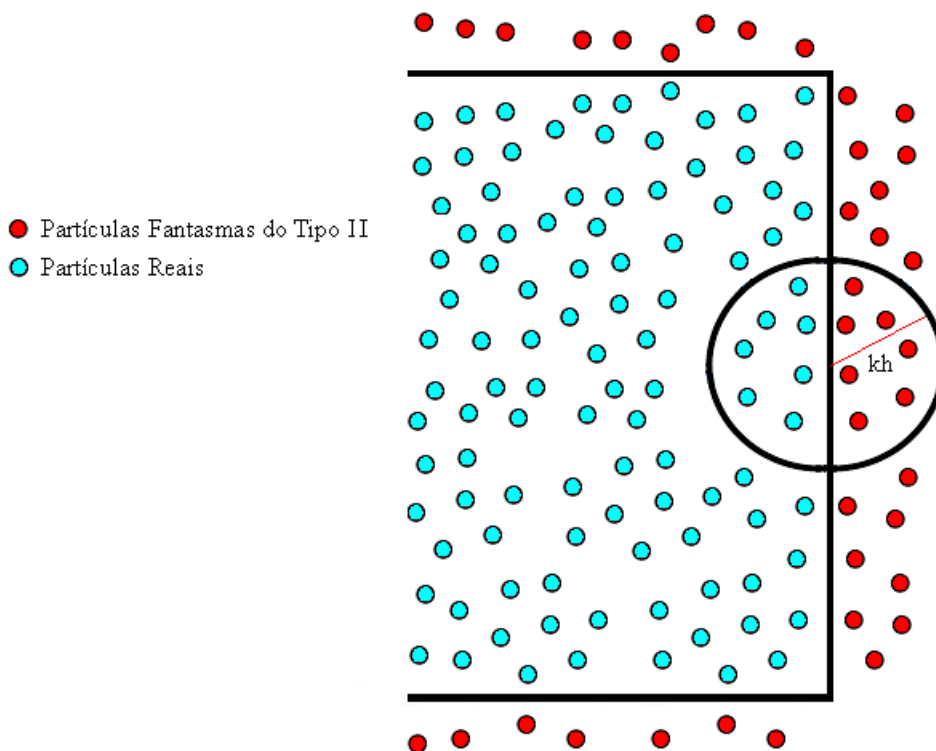


Figura 3: As partículas fantasmas do tipo II são posicionadas simetricamente em relação às partículas interiores (reais).

4.5 Reposicionamento periódico das partículas

No escoamento incompressível, as partículas movem-se ao longo das linhas de corrente quando as equações de Navier-Stokes são resolvidas de forma acurada. Entretanto, expansões e contrações do espaçamento entre as partículas acontecem sob certas condições, tais como nos escoamentos com vorticidade. Isso leva ao aparecimento de regiões do domínio com um aumento da concentração de partículas enquanto que outras regiões podem sofrer com a sua respectiva diminuição, o que pode acarretar no comprometimento da acurácia do método.

Xu, Stansby e Laurence [19] alertaram para o fato de que a presença de distribuições irregulares de partículas leva a um erro crescente nos resultados numéricos. Além disso, tal fato pode dar origem ao aparecimento de uma matriz dos coeficientes, do sistema linear oriundo da discretização espacial, mal-condicionada. No método SPH a instabilidade de tensão é a responsável pelo surgimento da aglomeração de partículas [15, 19]. Como consequência, Monaghan [15] mostrou que quando a distância entre as partículas é muito pequena, algumas funções núcleo, que são comumente utilizadas nas aproximações dos operadores diferenciais, apresentam um comportamento que não é físico, introduzindo erros numéricos na simulação, ou seja, à medida que as partículas se aproximam cada vez mais uma das outras, a interação entre elas começa a diminuir ao invés de aumentar! Por outro lado, uma grande separação entre as partículas ocasiona erros numéricos associados ao reduzido número de partículas vizinhas na determinação das propriedades das partículas.

Portanto, Xu, Stansby e Laurence [19] indicaram o reposicionamento periódico das partículas a fim de minimizar os efeitos prejudiciais deste problema. Assim sendo, propõe-se uma nova técnica de reposicionamento das partículas que pode ser usada em escoamentos confinados. Nela as partículas, de tempos em tempos, são alocadas nas mesmas posições que elas ocupavam na configuração inicial (instante de tempo inicial) e as suas propriedades são recalculadas utilizando-se a própria formulação do método SPH. Assim, para um dado campo f , avaliam-se os seus novos valores, para as partículas reposicionadas, a partir dos respectivos valores que as partículas possuíam no instante de tempo precedente ao reposicionamento, usando-se como função de interpolação a própria formulação de representação de uma função do método SPH [6], a Eq. (5).

Por exemplo, no caso do escoamento no interior da cavidade, após transcorridos 0,15 segundos de escoamento, as partículas de fluido encontram-se dispostas conforme mostrado na Fig. 4. Como pode ser observado, ocorre o surgimento de espaços vazios nos cantos superiores esquerdo e direito e uma aglomeração de partículas na região imediatamente a jusante. Essa disposição altamente irregular das partículas leva a resultados que não são acurados.

Portanto, para evitar-se esse problema é proposta uma técnica de reposicionamento das partículas que é feita da seguinte forma: “novas” partículas são posicionadas seguindo a distribuição inicial de partículas a um intervalo de tempo pré-fixado. Essas partículas têm suas propriedades calculadas a partir dos valores da massa específica, velocidade, pressão etc. das partículas já existentes, empregando-se como método de interpolação a própria representação integral e aproximação por partículas do método SPH. Uma vez calculadas as propriedades dessas “novas” partículas, estas passam a ser utilizadas na simulação e as partículas “velhas” que antes eram utilizadas são abandonadas.

Assim, para as “novas” partículas as suas propriedades são calculadas da seguinte forma:

$$\rho_i^{nova} = \frac{\sum_{j=1}^N m_j^{velha} W_{ij}}{\sum_{j=1}^N \frac{m_j^{velha}}{\rho_j^{velha}} W_{ij}}, \quad (18)$$

$$\mathbf{v}_i^{nova} = \sum_{j=1}^N \frac{m_j^{velha}}{\rho_j^{velha}} \mathbf{v}_j^{velha} W_{ij}, \quad (19)$$

$$p_i^{nova} = \sum_{j=1}^N \frac{m_j^{velha}}{\rho_j^{velha}} p_j^{velha} W_{ij}, \quad (20)$$

onde ρ_i^{nova} , \mathbf{v}_i^{nova} e p_i^{nova} são as propriedades determinadas para cada “nova” partícula i e as partículas j , bem como as suas respectivas propriedades, que aparecerem nos somatórios representam as “velhas” partículas vizinhas de cada “nova” partícula i .

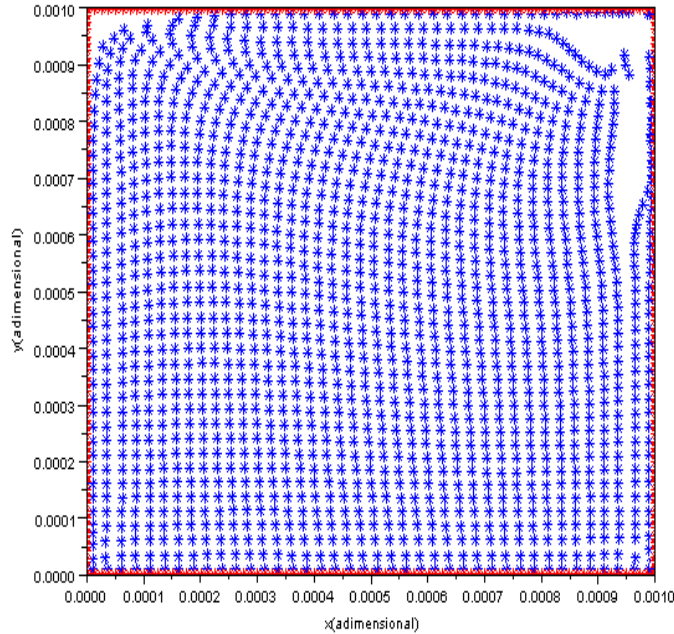


Figura 4: Configuração das partículas após transcorridos 0,15 segundos de escoamento.

5 O ALGORITMO ITERATIVO

Na simulação de escoamentos incompressíveis uma das principais dificuldades compreende o cálculo do campo de pressões. Como não existe uma equação específica para determinar-se este campo, técnicas devem ser empregadas com esta finalidade. Estas devem levar à proposição de um campo de pressões que resulte na obtenção de um campo de velocidades que satisfaça a condição de incompressibilidade, $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$. A estratégia que frequentemente é empregada na obtenção deste campo é oriunda do Método da Projeção, que emprega a decomposição de Helmholtz-Hodge [4].

Com a finalidade de determinar-se o campo de pressões, é proposto um algoritmo iterativo baseado no Método da Projeção e que será referido como o *Método de Poisson Iterativo*. Neste algoritmo a obtenção do campo de pressões é realizada em duas etapas. Na primeira delas, é obtido um campo intermediário de velocidades, resolvendo-se a equação do *momentum* (Eq. (12)) sem as forças de pressão e, na segunda etapa, o campo de velocidades é projetado em um espaço de divergência nula. O campo projetado garante a incompressibilidade do escoamento [3]. Dessa forma, a primeira etapa do algoritmo consiste na resolução da equação diferencial parcial

$$\begin{cases} \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \frac{\mathbf{v}^* - \mathbf{v}^n}{\Delta t} = \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{v}^n + \frac{1}{\rho} \mathbf{f}_{ext}^n & \text{em } \Omega, \\ \mathbf{v}^n = 0 & \text{em } \delta\Omega \end{cases} \quad (21)$$

onde $\delta\Omega$ representa a fronteira do domínio.

Uma vez obtido o campo de velocidades \mathbf{v}^* , na primeira etapa, busca-se encontrar um novo campo de velocidades, \mathbf{v}^{n+1} , no instante de tempo futuro, que satisfaça a condição de incompressibilidade. Então, o próximo passo resume-se na resolução do seguinte problema:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \frac{\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho}\nabla p^{n+1} \quad \text{em } \Omega, \\ \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad \text{em } \Omega, \\ \frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad \text{em } \delta\Omega, \end{array} \right. \quad (22)$$

onde p^{n+1} é o campo de pressões no instante de tempo futuro, $t^{n+1} = t^n + \Delta t$, que deve levar a um campo de velocidades que satisfaça a condição de incompressibilidade. A condição de contorno $\partial p/\partial \mathbf{n} = 0$ em $\delta\Omega$ deve ser imposta mediante o uso das partículas fantasmas. Portanto, para que o novo campo de velocidades tenha divergência nula, $\nabla \cdot \mathbf{v}^{n+1} = 0$, tem-se que verificar a seguinte igualdade:

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho}\nabla p^{n+1} \right) = \frac{1}{\Delta t}\nabla \cdot \mathbf{v}^*, \quad (23)$$

que é a equação de Poisson. Utilizando-se o operador laplaciano dado pela Eq. (9) e o operador divergente, Eq. (7), a Eq. (23) pode ser discretizada na forma

$$\sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} \left(\frac{4}{\rho_i + \rho_j} \right) p_{ij}^{n+1} \frac{\mathbf{x}_{ij}}{(r_{ij}^2 + \eta^2)} \cdot \nabla_i W_{ij} = \frac{1}{\Delta t} \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_i} \mathbf{v}_{ij}^* \cdot \nabla_i W_{ij}, \quad (24)$$

onde foi introduzida a média harmônica $4/(\rho_i + \rho_j)$, $\mathbf{v}_{ij}^* = \mathbf{v}_i^* - \mathbf{v}_j^*$ e $p_{ij}^{n+1} = p_i^{n+1}$.

O método iterativo proposto neste trabalho representa uma forma alternativa de resolução da equação de Poisson. Neste processo iterativo faz-se uso das equações

$$p_i^* = \frac{\sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} \left(\frac{4}{\rho_i + \rho_j} \right) p_j^n \frac{\mathbf{x}_{ij}}{(r_{ij}^2 + \eta^2)} \cdot \nabla_i W_{ij} - \frac{1}{\Delta t} \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_i} \mathbf{v}_{ij}^* \cdot \nabla_i W_{ij}}{\sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} \left(\frac{4}{\rho_i + \rho_j} \right) \frac{\mathbf{x}_{ij}}{(r_{ij}^2 + \eta^2)} \cdot \nabla_i W_{ij}} \quad (25)$$

e

$$p_i^{n+1} = p_i^* - \gamma \Delta p_i, \quad (26)$$

onde $\Delta p_i = p_i^* - p_i^n$ e γ é um parâmetro empírico de sub-relaxação, que deve ser determinado por tentativa e erro para cada problema estudado. A Eq. (25) é obtida da equação de Poisson discretizada, Eq. (24), explicitando-se p_i^{n+1} e considerando-o como sendo um campo de pressões intermediário, p_i^* , e avaliando-se p_j no instante de tempo atual, $t = t^n$.

Uma vez calculado o campo de pressões, calcula-se a nova velocidade a partir da equação

$$\mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}^* - \frac{\Delta t}{\rho}\nabla p^{n+1} \quad (27)$$

que deverá satisfazer a condição de incompressibilidade.

Esse procedimento iterativo é utilizado para prover o campo de pressões, que uma vez calculado é utilizado no cálculo das forças de pressão na equação de *momentum*. A implementação numérica deste método é descrita no Algoritmo 1.

Algoritmo 1: Método de Poisson Iterativo.

```

1  $\mathbf{v}^* = \mathbf{v}^n + \Delta t \left( \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{v}^n + \frac{1}{\rho} \mathbf{f}_{ext}^n \right)$ 
2  $|RES| = R_0$ 
3                                     /*  $R_0$  é um valor de inicialização */
4 while  $|RES| > tol$  do
5                                     /*  $tol$  é a tolerância */
6     Calcula-se  $p^*$  (Eq. (25))
7      $\Delta p = p^* - p^n$ 
8      $p^{n+1} = p^n - \gamma \Delta p$ 
9      $RES^{n+1} = \nabla \cdot \mathbf{v}^* - \Delta t \nabla \cdot \left( \frac{1}{\rho} \nabla p^{n+1} \right)$ 
10     $|RES| = \sqrt{\sum_{i=1}^N (RES_i^{n+1})^2}$ 
11     $p_i^n = p_i^{n+1}$ 
12 end

```

6 RESULTADOS NUMÉRICOS

Como aplicação considerou-se o problema do escoamento incompressível de um fluido newtoniano viscoso no interior de uma cavidade quadrada. O fluido movimenta-se devido ao deslocamento da parede superior da cavidade (com velocidade constante V_{top}), mantendo-se as demais paredes fixas. A condição de não deslizamento do fluido nas paredes sólidas é imposta através de condições de contorno do tipo Dirichlet. Obteve-se a solução para baixos números de Reynolds (1 e 10) e para o regime permanente. Os resultados são mostrados somente para os perfis de velocidades na direção x , ao longo da ordenada y correspondente ao centro da altura da cavidade, e na direção y , ao longo da abscissa x localizada na posição central da cavidade.

Além dos resultados obtidos com a versão do método SPH que usa o procedimento iterativo na determinação do campo de pressões, utilizou-se também na comparação dos resultados numéricos versões do método SPH utilizando duas diferentes formas para o cálculo do campo de pressões: i) empregando uma equação de estado (WCSPH) e ii) o método de Chorin tradicional [13]. A equação de estado empregada foi a mesma que a utilizada por Fox e Zhu [16]

$$p = c^2(\rho - \rho_0) \quad (28)$$

onde utilizou-se para a velocidade do som um valor igual a 1×10^{-2} m/s. Para o método de Chorin

$$p^{n+1} = p^n - \lambda \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (29)$$

com \mathbf{v}^* calculado pela Eq. (21), \mathbf{v}^{n+1} determinado pela Eq. (27) e utilizou-se um parâmetro λ de relaxação igual a 1×10^{-5} .

Os resultados numéricos obtidos foram comparados com os calculados empregando-se um simulador baseado no Método dos Volumes Finitos (MFV), com uma malha euleriana de 80×80

volumes de controle. Este simulador foi desenvolvido com uma formulação semi-implícita para a discretização no tempo, esquemas do tipo *Total Variation Diminishing* (TVD) para a aproximação dos fluxos convectivos, nas faces dos volumes de controle, e uma aproximação do tipo diferenças centradas para os termos difusivos das equações do balanço da quantidade de movimento. O esquema TVD empregado na obtenção dos resultados numéricos foi o *Monotomized Central-Difference* (MC). Uma descrição detalhada acerca deste simulador numérico pode ser encontrada em Schulz e Souto [17].

Os parâmetros comuns utilizados na obtenção dos primeiros resultados encontram-se na Tabela 1. Apesar do controle dinâmico do passo de tempo, nestas primeiras simulações o incremento de tempo foi mantido constante e o critério de estabilidade do método numérico, condição de CFL, foi respeitado. Foram utilizadas nas simulações 1.600 partículas reais (40×40) e 320 fantasmas e um reposicionamento de partículas a cada 100 passos de tempo. O número de Reynolds é definido como $Re = V_{top}L/\nu$, onde L representa a dimensão dos lados da cavidade e ν a viscosidade cinemática. O processo iterativo é interrompido quando o valor da tolerância para o resíduo (RES) for igual a 1×10^{-2} ou quando o número máximo (30) de iterações for atingido, tanto para o método de Chorin quanto para o método aqui apresentado. O fluido encontra-se inicialmente em repouso e os resultados apresentados foram determinados para um tempo final igual a $t = 0, 15$ s, suficiente para que o regime permanente seja alcançado.

Tabela 1: Parâmetros utilizados no problema da cavidade para $Re=1$.

Parâmetro	Valor
Altura e Comprimento (L)	10^{-3} m
Viscosidade cinemática (ν)	10^{-6} m ² /s
Massa específica (ρ)	10^3 kg/m ³
Vetor velocidade inicial (v_x, v_y)	(0,0) m/s
Velocidade da placa superior (V_{top})	10^{-3} m/s
Pressão inicial (p)	0 Pa
Espaçamento entre partículas (Δx)	$2,5 \times 10^{-5}$ m
Comprimento de suavização (h)	$1,2 \times \Delta x$ m
Passo de tempo (Δt)	5×10^{-5} s
Correção XSPH (ε)	0,3
Coefficiente de relaxação (γ)	1×10^{-3}

Conforme visto, os primeiros resultados foram obtidos para $V_{top} = 10^{-3}$ m/s, ou seja, $Re = 1$. Os perfis de velocidades encontram-se na Fig. 5, que mostra o perfil da componente horizontal do vetor velocidade adimensional v_x/V_{top} em função da ordenada adimensional y/L para o instante de tempo considerado, e na Fig. 6, que apresenta o perfil da componente vertical do vetor velocidade adimensional v_y/V_{top} em função da abscissa adimensional x/L .

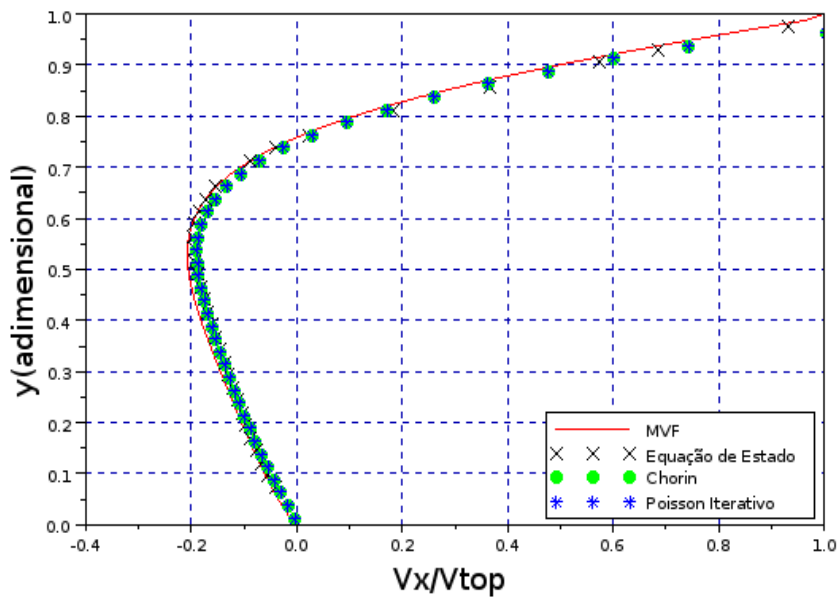


Figura 5: Comparação entre as soluções do método dos Volumes Finitos e do simulador numérico para a componente horizontal do vetor velocidade ao longo da linha central vertical da cavidade ($Re = 1$).

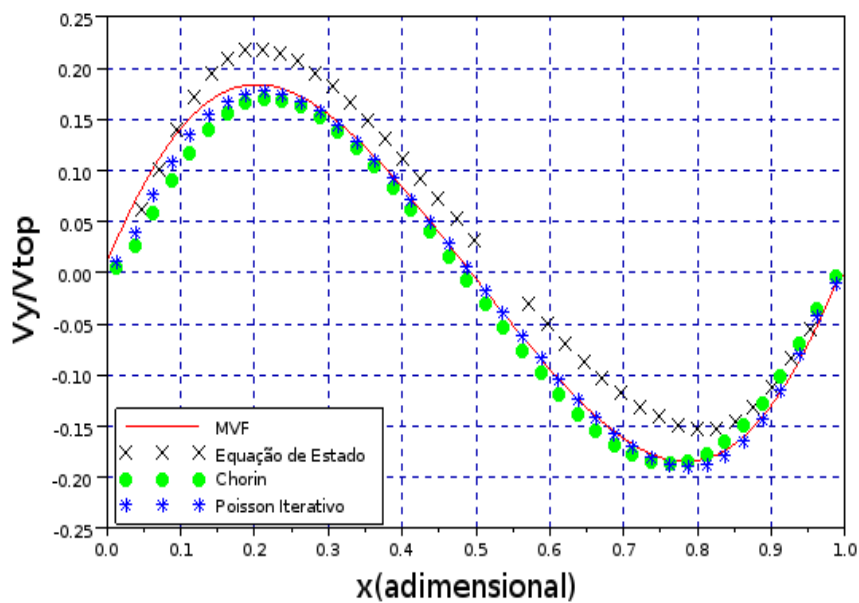


Figura 6: Comparação entre as soluções do método dos Volumes Finitos e do simulador numérico para a componente vertical do vetor velocidade ao longo da linha central horizontal da cavidade ($Re = 1$).

Observa-se que os resultados obtidos encontram-se muito próximos daqueles fornecidos pela solução determinada com o simulador baseado no método dos volumes finitos (MVF). Na literatura, verifica-se que a obtenção de bons resultados para o perfil vertical do vetor velocidade não é uma tarefa simples, conforme pode ser verificado, por exemplo, nos trabalhos de R. Xu,

P. Stansby e D. Laurence [10], Liu e Liu [11] e Yildiz, Rook e Suleman [20]. Os resultados reproduzidos utilizando-se a equação de estado na determinação do campo de pressões fornecem valores menos acurados do que os obtidos pelos dois outros métodos no que diz respeito à componente v_y do vetor velocidade, embora o perfil horizontal apresente resultados equivalentes. Em relação ao método de Chorin, não houve diferenças apreciáveis quanto ao perfil horizontal do campo de velocidades enquanto que para o perfil vertical resultados um pouco menos acurados do que os do método aqui proposto foram encontrados. As discrepâncias observadas para a componente vertical do vetor velocidade, conforme as investigações iniciais, parecem ser ocasionadas pelos valores do campo de pressões e da divergência do campo de velocidades, em regiões bem próximas das fronteiras físicas do problema [6].

A mesma simulação numérica do escoamento no interior da cavidade foi refeita considerando-se, agora, que a velocidade da parede superior é dada por $V_{top} = 10^{-2}$ m/s, mantendo-se os demais parâmetros fornecidos na Tabela 2 inalterados. Portanto, para este escoamento o número de Reynolds é dez vezes superior ($Re = 10$) ao do problema anterior. Os resultados foram obtidos para o mesmo instante final de tempo, $t = 0,15$ s, uma vez que este valor também é suficiente para que o regime permanente seja estabelecido. Diferentemente do caso anterior, um incremento de tempo (Δt) variável foi utilizado na integração numérica. Este incremento foi determinado a partir da Eq. (16), de modo a verificar-se o critério de estabilidade preconizado pela condição de Courant-Friedrichs-Lewy. O passo de tempo médio para as simulações foi de $7,5 \times 10^{-6}$ s.

Tabela 2: Parâmetros utilizados no problema da cavidade para $Re=10$.

Parâmetro	Valor
Altura e Comprimento (L)	10^{-3} m
Viscosidade cinemática (ν)	10^{-6} m ² /s
Massa específica (ρ)	10^3 kg/m ³
Vetor velocidade inicial (v_x, v_y)	(0,0) m/s
Velocidade da placa superior (V_{top})	10^{-2} m/s
Pressão inicial (p)	0 Pa
Espaçamento entre partículas (Δx)	$2,5 \times 10^{-5}$ m
Comprimento de suavização (h)	$1,2 \times \Delta x$ m
Correção XSPH (ϵ)	0,3
Coefficiente de relaxação (γ)	5×10^{-1}

A Figura 7 mostra o perfil da componente horizontal adimensional do vetor velocidade em função da ordenada adimensional para o instante de tempo final considerado. Já a Figura 8 contém o perfil da componente vertical adimensional do vetor velocidade em função da abcissa adimensional e também para $t = 0,15$ s.

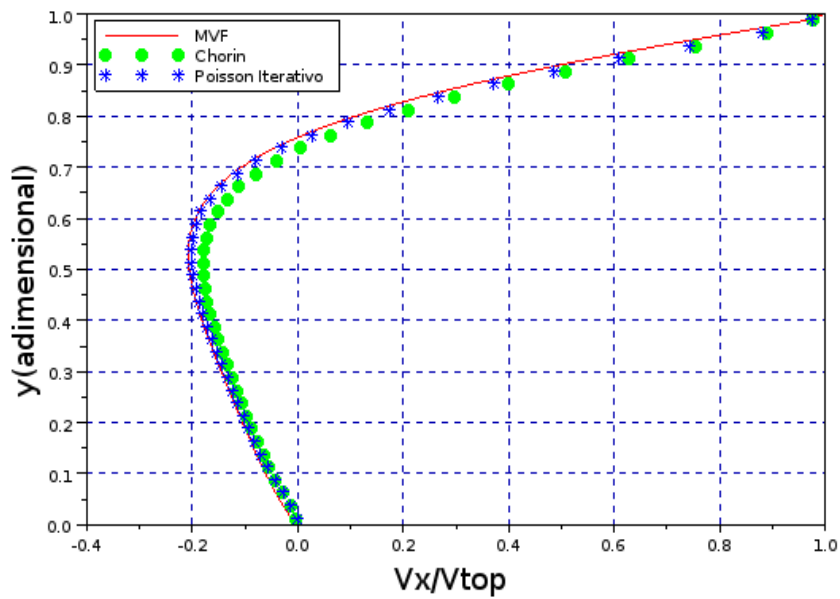


Figura 7: Comparação entre as soluções do método dos Volumes Finitos e do simulador numérico para a componente horizontal do vetor velocidade ao longo da linha central vertical da cavidade ($Re = 10$).

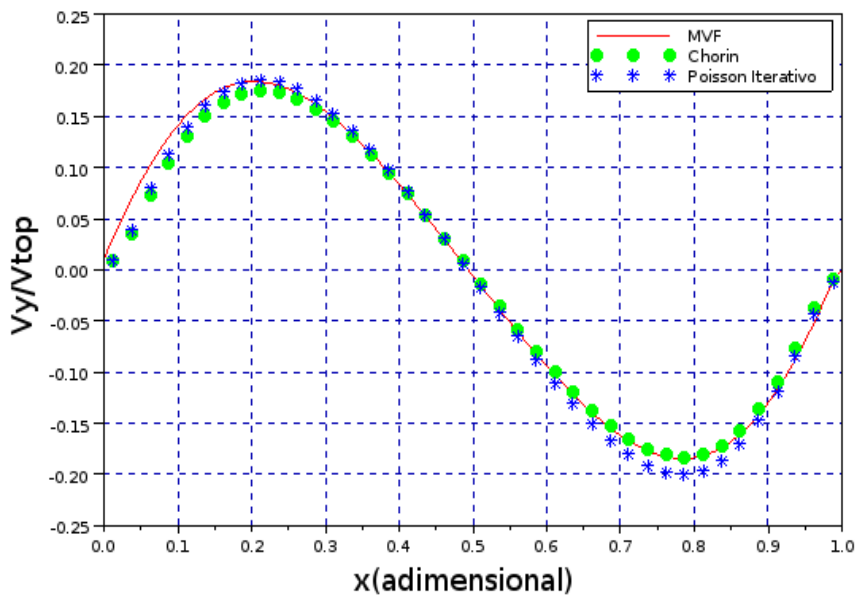


Figura 8: Comparação entre as soluções do método dos Volumes Finitos e do simulador numérico para a componente vertical do vetor velocidade ao longo da linha central horizontal da cavidade ($Re = 10$).

Novamente, nota-se que os resultados obtidos com o método SPH, empregando-se o algoritmo Poisson Iterativo, apresentam valores que encontram-se muito próximos daqueles fornecidos pelo método dos Volumes Finitos. Sob certos aspectos pode-se dizer, para a componente horizontal do vetor velocidade, que estes valores ajustam-se melhor às previsões do método

dos Volumes Finitos do que os mostrados anteriormente para um número de Reynolds unitário. Entretanto, o mesmo não pode ser dito com relação à componente vertical, que apresenta erros ligeiramente maiores aos do escoamento com $Re=1$. Estes erros também seriam provocados pelo cálculo não acurado da divergência do campo de velocidades em algumas regiões do domínio físico próximas das paredes da cavidade. Para este número de Reynolds não foi possível obter resultados com a versão WCSPH. Comparando-se os resultados determinados com o método de Chorin, pode-se verificar que resultados ligeiramente superiores foram calculados com o método Poisson Iterativo para a componente horizontal adimensionalizada (Fig. 7). Por outro lado, constata-se que resultados equivalentes foram determinados para a componente vertical adimensionalizada com ambos os métodos (Fig. 8).

Deve-se ressaltar o fato de que só foi possível obter-se resultados satisfatórios para o escoamento com um número de Reynolds igual a 10 mediante o uso da técnica de reposicionamento espacial, com periodicidade temporal, das partículas de fluido.

Finalizando a seção de resultados numéricos, apresenta-se nas Figs. 9 e 10 os valores dos campos de pressões obtidos como o método dos Volumes Finitos e com o método SPH fazendo uso do processo iterativo para a determinação da pressão introduzido neste trabalho. Antes de mais nada deve-se ressaltar o fato que os valores das pressões são determinados a menos de uma constante, sendo que os mesmos devem levar aos valores corretos do gradiente de pressão. Observa-se da Fig. 9 que o campo de pressões resultante é praticamente constante a exceção de duas regiões localizadas na parte superior da cavidade à esquerda e à direita. Nelas, verifica-se que devido ao movimento rotacional no sentido horário tem-se uma região com pressões negativas à esquerda e positivas à direita. Os resultados calculados com o método SPH, Fig. 10, apresentam o mesmo comportamento qualitativo.

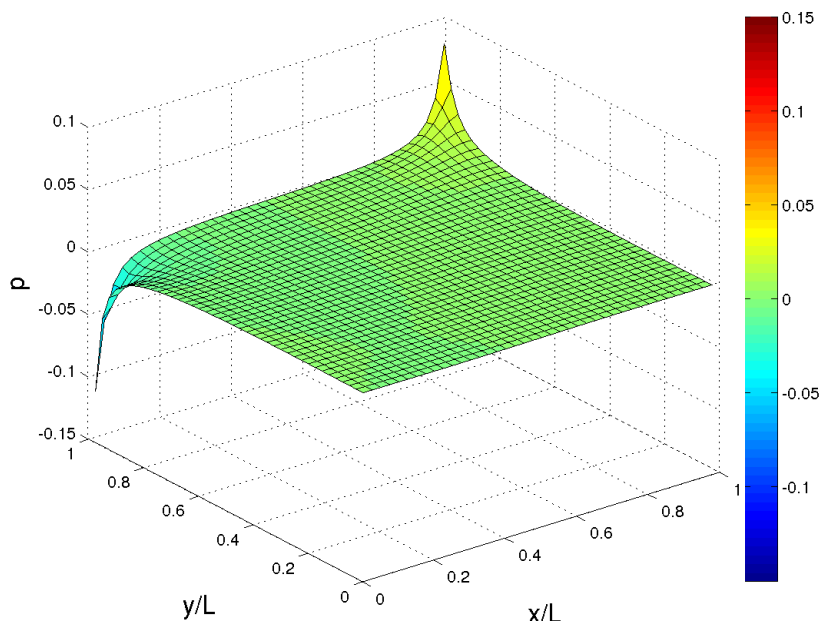


Figura 9: Campo de pressões determinado com o método dos Volumes Finitos para as coordenadas adimensionalizadas e $Re = 1$.

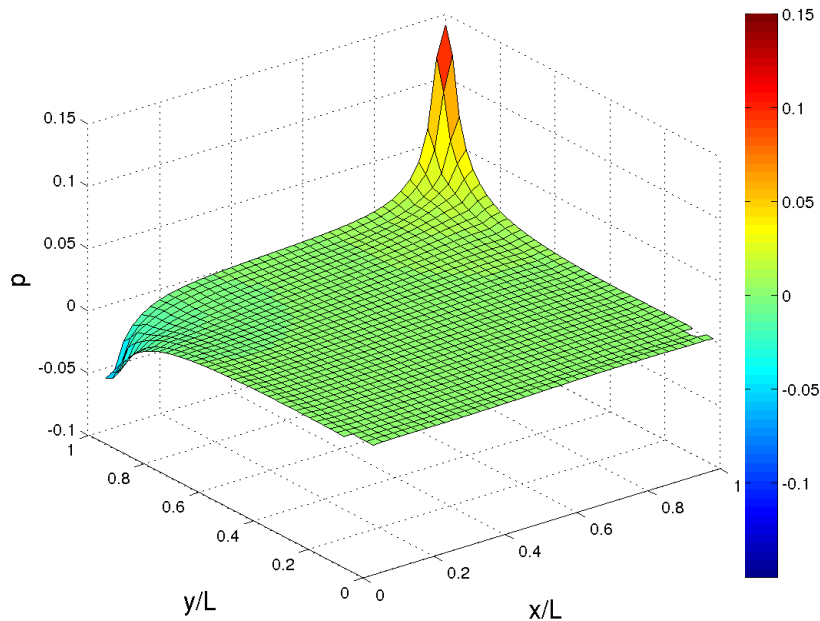


Figura 10: Campo de pressões determinado com o método Poisson Iterativo para as coordenadas adimensionalizadas e $Re = 1$.

7 CONCLUSÕES

Pôde-se verificar que os valores numéricos obtidos com o algoritmo proposto correspondiam satisfatoriamente aos previstos pelo método dos Volumes Finitos para os dois números de Reynolds considerados. Entretanto, algumas discrepâncias foram encontradas com relação aos perfis da componente vertical do vetor velocidade. Estudos iniciais indicam que estes erros são oriundos da má conservação da massa em algumas poucas regiões bem próximas das fronteiras físicas da cavidade.

O reposicionamento periódico das partículas mostrou-se uma ferramenta útil no sentido de evitar-se uma distribuição altamente irregular das partículas, que poderia levar a resultados pouco acurados [6]. Também deve-se destacar a importância do uso das partículas fantasmas do tipo II, que possibilitaram a implementação de condições de contorno do tipo Neumann quando da obtenção iterativa do campo de pressões.

Finalizando, considera-se que o simulador numérico desenvolvido neste trabalho produziu bons resultados para o problema da cavidade, sendo que este problema é tradicionalmente utilizado, na literatura, na validação de códigos numéricos baseados no método SPH. Tal fato demonstra que a técnica empregada pode ser considerada como uma ferramenta útil na simulação de problemas de dinâmica dos fluidos, embora apresente limitações que devem ser corrigidas ou contornadas em trabalhos futuros.

Acknowledgments

Este trabalho contou com o apoio do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) através do processo 305958/2012-7.

REFERÊNCIAS

- [1] J. D. Anderson. *Computational Fluid Dynamics*. McGrawHill, 1995.

- [2] J. B. Bell, P. Colella, and H. Glaz. A second-order projection method for the incompressible Navier-Stokes equations. *J. Comput. Phys*, 85:257, 1989.
- [3] F. P. Carmo. *A Equação de Poisson e a Decomposição de Helmholtz-Hodge com Operadores SPH*. PhD thesis, Pontifícia Universidade Católica, Rio de Janeiro, Brasil, 2008.
- [4] A. J. Chorin and J. Marsden. *A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics*. Springer, New York, 1992.
- [5] A. J. C. Crespo. *Application of the Smoothed Particle Hydrodynamics model SPHysics to free-surface hydrodynamics*. 2008 . 170 f. PhD thesis, Universidade de Vigo, Vigo, 2008.
- [6] M. M. de Freitas. Simulação de escoamentos incompressíveis empregando o método SPH utilizando algoritmos iterativos na determinação do campo de pressões. Master's thesis, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, Brasil, 2013.
- [7] B. K. Bao et al. Pressure corrected SPH for fluid animation. *Computer Animation and Virtual Worlds*, 20:311–320, 2009.
- [8] R. A. Gingold and J. J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics: Theory and application to non-spherical stars. *Physical Review*, 181:375–389, 1977.
- [9] J. F. Góes. Resolução numérica de escoamentos compressíveis empregando um método de partículas livre de malhas e o processamento em paralelo (cuda). 2011 . 101 f. Master's thesis, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico, Nova Friburgo, 2011.
- [10] E.S. Lee, C. Moulinec, R. Xu, D. Violeau, D. Laurence, and P. Stansby. Comparisons of weakly compressible and truly incompressible algorithms for the sph mesh free particle method. *Journal of Computational Physics*, 227:8417–8436, 2008.
- [11] G. R. Liu and M. B. Liu. *Smoothed Particle Hydrodynamics: A Meshfree Particle Method*. World Scientific, Singapore, 2003.
- [12] L. B. Lucy. Numerical approach to testing the fission hypothesis. *Astronomical Journal*, 82:1013–1024, 1977.
- [13] R. C. Maliska. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. LTC, Rio de Janeiro, 2004.
- [14] J. J. Monaghan. Smoothed Particle Hydrodynamics. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 30:543–574, 1992.
- [15] J.J. Monaghan. SPH without a tensile instability. *Journal of Computational Physics*, 159:290–311, 2000.
- [16] J. P. Morris, P. J. Fox, and Y. Zhu. Modeling low Reynolds number incompressible flows using SPH. *Journal of Computational Physics*, 136:214–226, 1997.
- [17] J. A. T. Schulz and H. P. Amaral Souto. Numerical simulation of a two-phase flow in a porous medium employing the finite volume method and a semi-implicit approach. *International Review of Chemical Engineering*, 2:728–735, 2010.

- [18] B. Solenthaler. Incompressible fluids simulation and advanced surface handling with SPH. Master's thesis, University of Zurich, Zurich, Switzerland, 2010.
- [19] R. Xu, P. Stansby, and D. Laurence. Accuracy and stability in incompressible SPH (ISPH) based on the projection method and a new approach. *Journal of Computational Physics*, 228:6703–6725, 2009.
- [20] M. Yildiz, R. A. Rook, and A. Suleman. Sph with the multiple boundary tangent method. *International Journal for numerical method in engineering*, 77:1416–1438, 2008.