

## 2 Smoothed Particle Hydrodynamics

Soluções numéricas de equações diferenciais parciais (EDP) são hoje de suma importância em áreas aplicadas, tais como engenharia, meteorologia, oceanografia e geologia, por auxiliarem na compreensão de uma ampla gama de fenômenos naturais modelados matematicamente por EDP's. Uma EDP é um modelo matemático desenvolvido com base num estudo descritivo de um conjunto de fenômenos relacionados ao problema considerado.

Dada a importância e abrangência dessas equações, existe um grande interesse na comunidade científica por estudos teóricos e experimentais que possam auxiliar em sua solução. A maior parte desses estudos teóricos consideram hipóteses idealizadas, onde os fenômenos relacionados às equações são tratados de forma isolada e simplificada (31, 48).

Os estudos experimentais são utilizados para a compreensão de aspectos globais dos fenômenos relacionados às equações que os descrevem, porém, recentemente tem havido um grande interesse na modelagem numérica dessas equações, principalmente pelo aumento da capacidade de processamento dos computadores e pelo desenvolvimento de códigos computacionais eficientes na solução dessas equações.

O propósito deste capítulo é a formalização do método numérico utilizado para resolver as equações diferenciais parciais, conhecido como SPH, do inglês Smoothed Particles Hydrodynamics.

### 2.1 Conceitos básicos de SPH

Desde sua introdução para resolver problemas astrofísicos em 1977 nos trabalhos de Lucy (65) e Gingold e Monaghan (39), o método SPH tem sido estudado e estendido para modelar uma maior variedade de problemas, incluindo, além de problemas astrofísicos (12, 55, 85), problemas em hidrodinâmica (1, 70, 77, 102, 108) e mecânica (53, 87).

No método SPH, o fluido é representado por um conjunto de partículas, definidas como pontos no espaço, aos quais também associamos propriedades físicas individuais. As funções e suas derivadas parciais envolvidas nas equações

diferenciais parciais que descrevem o problema são, em SPH, aproximadas por uma média das propriedades de partículas próximas. Assim, no método SPH, as partículas, além de discretizar o fluido, também são utilizadas como a estrutura computacional para aproximar os campos envolvidos no problema.

Mais ainda, como não é necessária nenhuma conectividade pré-definida entre as partículas da discretização, o método SPH é bastante atrativo para vários problemas, onde outros métodos tradicionais encontram grandes dificuldades. Por exemplo, em métodos lagrangeanos que usam uma malha como a estrutura de discretização do problema, como o método de elementos finitos (MEF) (109), o tratamento de grandes deformações na malha tem sido uma tarefa grandiosa. Algumas aplicações do método SPH a problemas com grandes deformações são: impacto em alta velocidade (44, 49) e explosão (58, 61, 97, 99).

Além disso, ao contrário da grande dificuldade encontrada em aplicar métodos eulerianos, como por exemplo o método de diferenças finitas (MDF) (4), em problemas com geometrias complexas, o método SPH é facilmente aplicado a esse tipo de problema.

Por último, outra característica atrativa de SPH é a combinação da formulação Lagrangiana com as partículas em simulações de escoamentos de fluidos. Ao contrário de outros métodos que não usam malhas (28, 37, 103), nos quais os elementos da discretização (nós ou partículas) são somente usados como pontos de interpolação, as partículas no método SPH também carregam propriedades físicas, movendo-se em função das interações entre si e de forças externas, e guardando toda a dinâmica do escoamento. Em particular, em simulações de escoamentos de fluidos, o método SPH captura facilmente a superfície livre ou a interface entre dois fluidos, tarefa esta bastante difícil com métodos eulerianos.

O método SPH, sendo um método de discretização por partículas, sem uso de malha e de formulação Lagrangiana, tem sido usado em diferentes áreas para várias aplicações práticas. A formulação mais detalhada do método SPH será descrita nas próximas seções. Uma revisão de métodos sem malhas e/ou métodos de partículas é encontrado no trabalho de Li et al (57). Em particular, vários outros trabalhos revisam o método SPH, destacando-se entre eles os de Benz (11) e de Monaghan (69).

## 2.2

### **Representação Integral**

Nesta seção descrevemos a formulação básica do método SPH. As aproximações discretas para os operadores diferenciais envolvidos em EDP's são

deduzidas em duas etapas. A primeira delas é a *representação integral* de funções e a segunda é uma discretização do operador integral obtido, conhecida na literatura por *aproximação por partículas*.

### 2.2.1

#### Representação Integral de uma Função em SPH

Seja  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  o domínio do problema e  $f$  uma função qualquer

$$f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n .$$

A **representação integral** da função  $f$  é definida como a integral do produto da função  $f$  por uma função suave  $W_h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$

$$f_h(u) \doteq \int_{\Omega} f(x) W_h(u-x) d^n x . \quad (2-1)$$

A função  $W_h$  é conhecida na literatura por *núcleo*.

Essa definição é muitas vezes motivada pelo delta de Dirac. A delta de Dirac pode ser vista como uma função  $\delta(x)$  definida por

$$\delta(x) = 0, \text{ se } x \neq 0$$

e satisfazendo

$$\int_{\mathbb{R}^n} \delta(x) d^n x = 1 .$$

Essa definição, embora heurística, não deve ser tomada com rigor, principalmente porque nenhuma função pode ter as propriedades acima. Pois, de acordo com a teoria de integração de Lebesgue, se duas funções mensuráveis  $f(x)$  e  $g(x)$  são tais que  $f(x) = g(x)$ , exceto em um conjunto de medida nula ( $\{0\}$ ), então  $f(x)$  é integrável se, e somente se,  $g(x)$  é integrável, e vale que as integrais são iguais. Por isso, basta observar que  $f(x) = \delta(x)$  e  $g(x) = 0$  são iguais, exceto em  $x = 0$ , e diferem nos valores de sua integração. Uma definição rigorosa da delta de Dirac requer conceitos de teoria da medida (7, 30).

O núcleo  $W_h$ , além de suave, deve satisfazer outras condições, que serão descritas no decorrer desta seção. Em particular, deve-se existir  $W_1$  tal que

$$W_h(x) = \frac{1}{h^n} W_1\left(\frac{1}{h}x\right) , \quad (2-2)$$

onde  $n$  é a dimensão do problema,  $h$  é um número positivo e  $W_1(x)$  é uma função diferenciável, com suporte compacto e integral unitária. Uma família  $\{W_h\}$  de funções diferenciáveis, com suporte compacto e integral unitária, é

dita uma *aproximação da identidade*. Nesse caso:

$$\lim_{h \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}^n} f(x) W_h(u-x) d^n x = f(u). \quad (2-3)$$

O núcleo  $W_h$  na representação integral (2-1) é escolhido no método SPH, satisfazendo (2-2) e (2-3). E, portanto, tendo as seguintes propriedades:

**compacidade**

$$W_h(x) = 0 \text{ quando } |x| > \kappa h \quad (2-4)$$

**normalização**

$$\int_{\Omega} W_h(u-x) d^n x = 1 \quad (2-5)$$

Aqui, vale ressaltar que a definição de representação integral (2-1), embora contínua, é apenas uma aproximação, pois vale a igualdade (em média) apenas no limite

$$\int f(u) du = \lim_{h \rightarrow 0} \int f_h(u) du. \quad (2-6)$$

Na literatura de SPH (35, 67), a representação integral é uma aproximação de segunda ordem quando o núcleo  $W_h$  utilizado é uma função par. Assim, o erro na representação integral pode ser estimado usando expansão em séries de Taylor da função  $f(x)$ , em torno do ponto  $u$ . Usando (2-1) e (2-4) temos

$$\begin{aligned} f_h(u) &\doteq \int_{\Omega} f(x) W_h(u-x) d^n x \\ &= \int_{\Omega} [f(u) - (u-x) f'(u) + r((u-x)^2)] W_h(u-x) d^n x \\ &= f(u) \int_{\Omega} W_h(u-x) d^n x + \\ &\quad + f'(u) \int_{\Omega} (x-u) W_h(u-x) d^n x + r(h^2) \end{aligned} \quad (2-7)$$

onde  $r(h^2)$  é um resíduo de segunda ordem. Note que se o núcleo é uma função par, então  $(x-u) W_h(u-x)$  é uma função ímpar e satisfaz

$$\int_{\Omega} (x-u) W_h(u-x) d^n x = 0. \quad (2-8)$$

Conseqüentemente, utilizando as equações (2-5), (2-7) e (2-8) obtemos

$$f_h(u) \doteq \int_{\Omega} f(x) W_h(u-x) d^n x = f(u) + r(h^2).$$

Portanto, pode-se afirmar que a representação integral de uma função (2-1) é uma aproximação de segunda ordem. Contudo, essa precisão pode não ser de

segunda ordem, se o núcleo utilizado não for uma função par.

Para obter uma maior precisão é necessário escolher núcleos para os quais sucessivos termos na expressão do desenvolvimento em séries de Taylor se anulem. Um exemplo desse tipo de núcleo é o interpolador de Bessel que satisfaz

$$\int_{-\infty}^{\infty} u^k B(u, h) du = 0 \text{ para } k = 1, 2, 3$$

e cuja representação integral é uma aproximação de quarta ordem.

Na condição de compacidade (2-4), a área efetiva (não-nula) do núcleo  $W_h$  no ponto  $u \in \Omega$  é chamada de *suporte* de  $u$ , e é dada por

$$V(u) = \{x, |x - u| \leq \kappa h\} \subset \Omega. \quad (2-9)$$

O suporte é definido pelo *comprimento suave*  $h = h(u)$  e pelo fator de escala  $\kappa$  associado ao núcleo. Nesta tese tomamos o comprimento suave  $h$  constante. Outros trabalhos (46, 82, 92, 96) expressam o comprimento suave em função da posição e do tempo,  $h = h(u, t)$ . Mais ainda, a forma do suporte pode ser distinta da forma esférica dada pelo conjunto  $V(u)$  em (2-9).

### 2.2.2

#### Representação Integral da Derivada de uma Função

A aproximação para a derivada espacial  $\nabla \cdot f$  num ponto  $u \in \Omega$  é obtida simplesmente substituindo  $f$  por  $\nabla \cdot f$  na equação (2-1)

$$(\nabla \cdot f)_h(u) \doteq \int_{\Omega} [\nabla \cdot f(x)] W_h(u - x) d^n x, \quad (2-10)$$

onde o divergente na integral é operado com respeito à variável  $x$ .

Podemos reescrever (2-10) usando a seguinte identidade:

$$[\nabla \cdot f(x)] W_h(u - x) = \nabla \cdot [f(x) W_h(u - x)] - f(x) \cdot \nabla W_h(u - x),$$

donde

$$(\nabla \cdot f)_h(u) = \int_{\Omega} \nabla \cdot [f(x) W_h(u - x)] d^n x - \int_{\Omega} f(x) \cdot \nabla W_h(u - x) d^n x. \quad (2-11)$$

Pelo teorema de Gauss o fluxo de um campo vetorial  $F$  através de uma superfície fechada  $S$  é igual ao divergente de  $F$  sobre a região  $R$  limitada por  $S$ . Portanto, usando o teorema de Gauss na primeira integral na equação (2-11), temos

$$(\nabla \cdot f)_h(u) = \int_S [f(x) W_h(u - x)] \cdot \eta dS - \int_{\Omega} f(x) \cdot \nabla W_h(u - x) d^n x, \quad (2-12)$$

onde  $\eta$  é o vetor unitário normal à superfície  $S$  do domínio de integração  $\Omega$ .

Como o núcleo  $W$  é definido tendo suporte compacto, a integral de superfície na equação (2-12) é nula, exceto nas partículas cujo suporte compacto contém pontos da superfície  $S$ . Então, faz-se

$$(\nabla \cdot f)_h(u) \doteq - \int_{\Omega} f(x) \cdot \nabla_x W_h(u-x) d^n x \quad (2-13)$$

e, em pontos com a integral de superfície não-nula, modificações devem ser feitas para avaliar os efeitos na superfície do domínio de integração. O índice  $x$  no operador diferencial  $\nabla$  representa a variável na qual é realizada a diferenciação.

Na equação (2-13), notamos que o operador diferencial aplicado à função  $f$  na equação 2-10 é aplicado ao núcleo  $W_h$ . Em outras palavras, a representação integral da derivada de uma função segue os valores da função e da derivada espacial do núcleo, ao invés da derivada da própria função.

### 2.3

#### Aproximação por Partículas

No método SPH, todo o sistema é representado por um número finito de partículas, distribuídas aleatoriamente, que carregam propriedades materiais individuais.

As representações integrais (2-1) e (2-13), obtidas para uma função  $f$  e sua derivada em um ponto  $u \in \Omega$ , podem ser discretizadas substituindo a integral pelo somatório de todas as partículas que discretizam o domínio. Usando, porém, a condição de compacidade (2-4), a integração sobre o domínio do problema  $\Omega$  se reduz à integração sobre o suporte compacto do núcleo e, portanto, o somatório também é localmente calculado; operando-se apenas nas partículas que pertencem ao suporte compacto (Figura 2.1).

O volume infinitesimal  $d^n x$  é substituído pelo elemento de volume  $\Delta V$  relacionado à porção do sistema representada por uma partícula vizinha. O volume  $\Delta V$ , por sua vez, pode ser relacionado à massa  $m$  da partícula pela expressão

$$m = \Delta V \cdot \rho,$$

onde  $\rho$  é a densidade da partícula.

A representação integral para uma função  $f$ , em uma partícula indexada por  $i$ , pode então ser discretizada da seguinte forma:

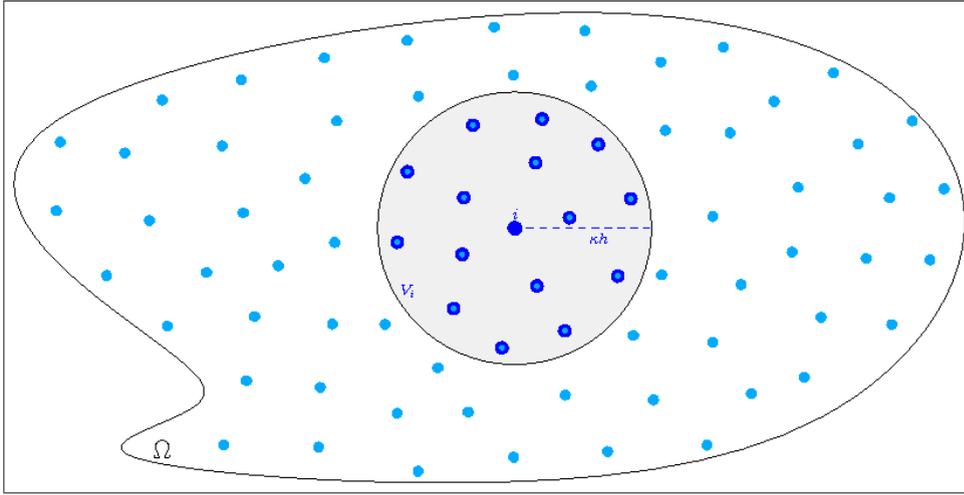


Figura 2.1: Discretização do domínio  $\Omega$ . Na aproximação SPH apenas partículas que estão dentro do suporte compacto são utilizadas.

$$\begin{aligned}
 f_h(x_i) &= \int_{\Omega} f(x) W_h(x_i - x) d^n x \\
 &\approx \sum_{j \in V_i} f(x_j) W_h(x_i - x_j) \Delta V_j \\
 &= \sum_{j \in V_i} f(x_j) W_h(x_i - x_j) \frac{1}{\rho_j} m_j
 \end{aligned} \tag{2-14}$$

onde o somatório percorre todas as partículas que pertencem ao suporte do núcleo  $W_h$  no ponto  $x_i$

$$V_i = \mathbf{V}(x_i) = \{x_j, |x_j - x_i| \leq \kappa h\} .$$

Portanto, o valor de uma função na partícula  $i$ , posicionada em  $x_i$ , é aproximado, usando uma média dos valores da função em todas as partículas  $j$  pertencentes a seu suporte, ponderados pelo núcleo e por propriedades físicas dessas partículas vizinhas

$$f_h(x_i) = \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} f(x_j) W_{ij} , \tag{2-15}$$

onde

$$W_{ij} = W_h(x_i - x_j) .$$

A aproximação por partículas para a derivada de uma função  $f$  é dada pela discretização por partículas da equação 2-13

$$(\nabla \cdot f)_h(x_i) = - \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(x_j) \cdot \nabla W_{ij} , \tag{2-16}$$

onde o gradiente na equação acima é em relação as partículas  $j$

$$\nabla W_{ij} = \nabla_x W_h(x_i - x)|_{x=x_j}.$$

As aproximações por partículas nas equações (2-15) e (2-16) discretizam as representações integrais contínuas de uma função e sua derivada, baseadas em um conjunto arbitrário de partículas. O uso dessa soma em partículas arbitrariamente distribuídas para aproximar a integral faz de SPH um método sem malha para integração numérica, tornando-o, como citado anteriormente, atrativo para problemas com grandes deformações.

O comprimento suave  $h$  é muito importante em SPH, uma vez que está diretamente ligado à eficiência da simulação e à precisão numérica do método. Se  $h$  é muito pequeno, não existem partículas suficientes no suporte compacto de dimensão  $\kappa h$  para exercer forças em uma dada partícula, resultando em baixa precisão numérica. Por outro lado, se  $h$  é muito grande, propriedades locais serão suavizadas globalmente, e a simulação, além de muito cara computacionalmente, também não será precisa. Portanto, a aproximação por partículas em SPH depende de que haja um número necessário e suficiente de partículas dentro do suporte compacto de cada partícula do sistema. O conjunto de partículas vizinhas é chamado de *vizinhança*.

Computacionalmente, o custo e a velocidade do método também dependem do número de partículas vizinhas. No método SPH, o processo de encontrar a vizinhança de uma partícula é normalmente conhecido por *busca por partículas vizinhas*, ou simplesmente *busca por vizinhança*.

Existem vários algoritmos para detectar a vizinhança em SPH. Em simulações onde o comprimento suave  $h$  não é constante, recomenda-se a utilização do algoritmo Tree-SPH (46). Quando, porém, o comprimento suave  $h$  é constante, como nesta tese, é recomendado o algoritmo de busca usando uma grade de busca (68). Uma exposição mais completa do algoritmo linked-list é encontrada no trabalho de Simpson (94).

## 2.4

### Núcleos: funções de base radial

O método SPH utiliza as representações integrais (2-1) e (2-13), para aproximar uma função e sua derivada, usando uma função suave  $W_h$  como núcleo. O núcleo é de extrema importância, pois não somente determina o padrão da aproximação, como também define a dimensão do suporte das partículas, e determina a consistência e, conseqüentemente, a precisão de ambas aproximações: integral e por partículas.

Diferentes núcleos são usados no método SPH. Várias condições ou propriedades são discutidas na literatura, para que uma função possa ser usada como um núcleo. Algumas dessas propriedades são listadas a baixo.

1. **Suavidade:**

$$W_h(x) \in C^\infty$$

2. **Normalização:**

$$\int_{\Omega} W_h(x) d^n x = 1$$

3. **Suporte compacto:**

$$W_h(x) = 0 \text{ quando } \|x\| > \kappa h$$

4. **Aproximação da identidade:**

$$\lim_{h \rightarrow 0} \int_{\Omega} f(x) W_h(u-x) d^n x = f(u)$$

5. **Positividade:**

$$W_h(x) \geq 0$$

6. **Simetria:**

$$W_h(x) = F_h(\|x\|)$$

Pelas propriedades 1, 2 e 3 podemos dizer que a representação integral (2-1) está bem definida. Em particular, a terceira propriedade faz da aproximação SPH uma operação local (equações 2-15 e 2-16). A quarta propriedade é consequência das propriedades 2 e 3.

A quinta propriedade significa que o núcleo deve ser não-negativo no suporte. Essa propriedade não é necessária para a convergência, mas é importante para assegurar aproximações coerentes para propriedades físicas envolvidadas no problema. Valores negativos para o núcleo podem resultar aproximações incoerentes para variáveis que representam propriedades físicas das partículas, como, por exemplo, densidades negativas. Alguns trabalhos, porém, utilizam núcleos que em algumas regiões têm valores negativos; podemos citar o núcleo usado no trabalho de Monaghan e Lattanzio (74).

A sexta propriedade é importante para que partículas à mesma distância, porém, em diferentes posições, tenham a mesma influência (em relação ao núcleo) na partícula posicionada no centro do mesmo. Essa também não é uma condição fundamental e que, às vezes, é transgredida (64).

Qualquer função, com as propriedades anteriores, pode ser empregada como um núcleo em SPH. Diferentes funções são encontradas em diversos trabalhos (22, 79) que utilizam o método SPH. Lucy (65) utilizou a seguinte função como núcleo:

$$W_h(x - x') = W_h(R) = \alpha_d \begin{cases} (1 + 3R)(1 - R)^3 & , 0 \leq R \leq 1 \\ 0 & , R > 1 \end{cases} \quad (2-17)$$

onde  $\alpha_d$  é uma constante de normalização, obtida pela condição de normalização (propriedade 2), e  $R$  é a distância relativa entre duas partículas

$$R = \frac{r}{h} = \frac{|x - x'|}{h}.$$

Monaghan (69) afirma que é sempre melhor utilizar como núcleo uma função Gaussiana. A seguinte função gaussiana foi utilizada em seu trabalho original (39) em astrofísica:

$$W_h(x - x') = W_h(R) = \alpha_d e^{-R^2}. \quad (2-18)$$

A função gaussiana não tem suporte compacto, condição esperada de um núcleo em SPH (propriedade 3), mas aproxima-se rapidamente de zero quando a distância entre duas partículas aumenta. Contudo, mesmo tomando um suporte finito, o mesmo provavelmente será muito grande para que a função gaussiana possa ser considerada nula, tornando-a computacionalmente inviável devido à inclusão de muitas partículas no suporte de cada partícula.

Outra classe de núcleos muito importante são os núcleos dados por funções splines. Sendo funções que aproximam o núcleo gaussiano e têm suporte compacto, as splines têm sido utilizadas com maior frequência como núcleos em SPH. Um exemplo é a função spline quártica (76)

$$W_h(R) = \alpha_d \begin{cases} (3 - R)^5 - 6(2 - R)^5 - 15(1 - R)^5 & , 0 \leq R \leq 1 \\ (3 - R)^5 - 6(2 - R)^5 & , 1 \leq R \leq 2 \\ (3 - R)^5 & , 2 \leq R \leq 3 \\ 0 & , R > 3 \end{cases} \quad (2-19)$$

O núcleo utilizado nesta tese também é um núcleo spline, porém de quarta ordem (63). Tal núcleo é dado pela seguinte expressão:

$$W_h(R) = \alpha_d \begin{cases} \frac{2}{3} - \frac{9}{8}R^2 + \frac{19}{24}R^3 - \frac{5}{32}R^4 & , 0 \leq R \leq 2 \\ 0 & , R > 2 \end{cases} \quad (2-20)$$

onde, dada a dimensão  $d$  do problema, temos

$$\alpha_d = \begin{cases} \frac{1}{h} & , \text{ se } d = 1 \\ \frac{15}{7\pi h^2} & , \text{ se } d = 2 \\ \frac{315}{208\pi h^3} & , \text{ se } d = 3 \end{cases}$$

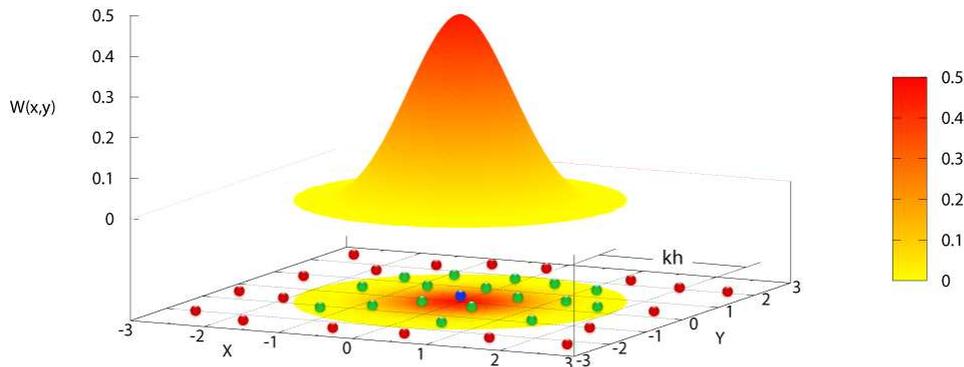


Figura 2.2: Núcleo Quártico. Apenas as partículas (verdes)  $j$  que distam menos do que  $\kappa h$  e, portanto, estão no suporte compacto da partícula (azul)  $i$  fazem parte da aproximação SPH. Partículas que distam mais do que  $\kappa h$  não são utilizadas nas aproximações.

Todas as propriedades listadas anteriormente, exceto a quinta (positividade), são encontradas no núcleo quártico (2-20). Além dessas, o núcleo quártico tem a segunda derivada suave, e essa propriedade está diretamente ligada à questão da estabilidade do método SPH (75, 100). A Figura 2.2 ilustra o núcleo quártico utilizado.

Observa-se que em todos os exemplos as funções tomadas como núcleos são funções que têm a seguinte forma:

$$W_h(x) = W_h(R),$$

onde  $R = \frac{|x|}{h}$ . Essa é uma escolha natural para funções-núcleos em SPH, embora alguns trabalhos utilizem núcleos que não repetem este padrão (62, 64, 93).

Uma maneira sistemática para construir núcleos com as propriedades listadas anteriormente é encontrada em (63). Uma análise do comportamento de vários núcleos em uma dimensão pode ser encontrada no trabalho de Fulk e Quinn (36).

## 2.5 Partículas

Usando a representação integral e a aproximação por partículas, foram obtidos os operadores SPH. Para uma dada partícula indexada por  $i$ , os valores de uma função e de suas derivadas são aproximados por:

**Função**  $f$  (escalar ou vetorial)

$$(f)_h(\mathbf{x}_i) = \sum_{j \in \mathbf{V}_i} \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \quad (2-21)$$

**Gradiente** de uma função escalar  $f$

$$(\nabla f)_h(\mathbf{x}_i) = \sum_{j \in \mathbf{V}_i} \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) \nabla_i W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \quad (2-22)$$

**Divergente** de uma função vetorial  $\mathbf{f}$

$$(\nabla \cdot \mathbf{f})_h(\mathbf{x}_i) = \sum_{j \in \mathbf{V}_i} \frac{m_j}{\rho_j} \mathbf{f}(\mathbf{x}_j) \cdot \nabla_i W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \quad (2-23)$$

onde os somatórios percorrem todas as partículas vizinhas, isto é, contidas no suporte

$$\mathbf{V}_i = \mathbf{V}(x_i) = \{x_j, |x_j - x_i| \leq \kappa h\}.$$

Nas equações acima, supõe-se que o núcleo seja esfericamente simétrico

$$W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) = W(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|, h), \quad (2-24)$$

donde

$$\nabla_i W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) = \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} = \frac{\mathbf{x}_{ij}}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} \quad (2-25)$$

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

Observe que o gradiente do núcleo  $\nabla W$  na aproximação (2-16) é obtido em relação à partícula  $j$ . Tendo o núcleo, porém, a propriedade dada pela equação (2-24) vale

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

e, portanto, o sinal negativo é “removido” nas equações (2-22) e (2-23).

No nosso método SPH cada partícula possui uma porção individual de massa de todo o sistema; essa quantidade é constante no espaço e no tempo (em simulações cujo tempo é uma variável independente no sistema). Por outro lado, a densidade de uma partícula é um atributo variável, e a aproximação da mesma é uma tarefa muito importante em SPH. Pois, além da

densidade determinar a distribuição das partículas que discretizam o domínio do problema, ela tem um papel importante em todas as aproximações em SPH.

Uma maneira de se obter a densidade  $\rho(x_i)$  na partícula indexada por  $i$  é aplicar na aproximação (2-21) a própria função densidade  $\rho(x)$ . A densidade na partícula é então aproximada por

$$(\rho)_h(\mathbf{x}_i) = \sum_{j \in V_i} \frac{m_j}{\rho_j} \rho(\mathbf{x}_j) W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) = \sum_{j \in V_i} m_j W_{ij}, \quad (2-26)$$

onde

$$W_{ij} = W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) .$$

A equação (2-26) é uma das formas mais populares de se obter a densidade em SPH. Contudo, essa aproximação é menos precisa quando as partículas estão próximas da fronteira do domínio. Utilizando a aproximação (2-26), a deficiência de partículas quando o suporte de uma partícula intersecta a fronteira do domínio pode levar a resultados incorretos para a densidade.

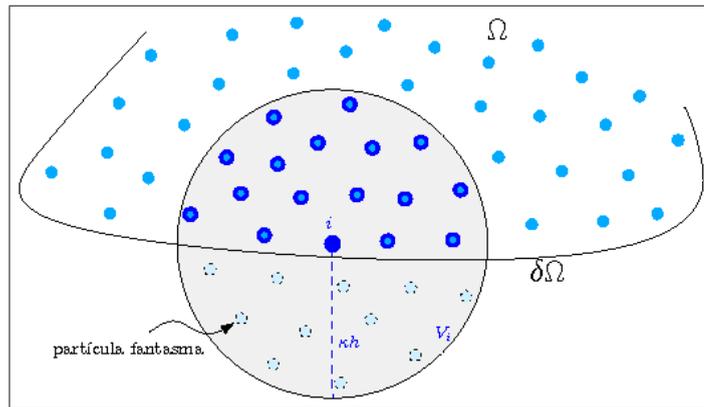


Figura 2.3: O suporte compacto do núcleo  $W$  na partícula  $i$  intersecta a fronteira  $\delta\Omega$  do domínio. Partículas fantasmas são utilizadas para estabilizar o método nas aproximações próximas da fronteira do domínio. Nesta imagem, ilustramos as partículas fantasmas (na cor branca) que pertencem ao suporte compacto da partícula  $i$ .

Algumas correções têm sido propostas para tratar essa deficiência de partículas na fronteira. Campbell (14) inclui termos na representação integral da derivada de uma função (equação 2-13) representando a integral de superfície, primeira integral na equação 2-12, quando esta é não-nula. Por outro lado, Chen, Beraun e Carney (15) modificam apenas a expressão (2-26) para melhorar a aproximação da densidade nas partículas próximas da fronteira.

Nesta tese usamos as chamadas *partículas fantasmas* para corrigir as aproximações em partículas próximas da fronteira. Libersky et al (58) introduziram partículas fantasmas para simular a interação de partículas com a

fronteira do domínio. Depois, Randles e Libersky (89) propuseram um tratamento mais geral para simular essa interação.

Partículas fantasmas são partículas definidas fora do domínio do problema, com propriedades definidas de acordo com a condição de fronteira a ser imposta. Podemos defini-las de acordo com as partículas (reais) que discretizam o domínio do problema ou defini-las aleatoriamente (Figura 2.3).

O núcleo utilizado em toda tese é o núcleo quártico (equação 2-20) com o fator de escala  $\kappa = 2$  (veja equação 2-9). A Figura 2.4 ilustra o comportamento da densidade dada pela equação (2-26), quando o comprimento suave  $h$  do núcleo varia. Discretizamos o domínio  $\Omega = [-1, 1]^2$  utilizando 1.093 partículas. A massa do sistema foi determinada de tal forma que as partículas tivessem densidade igual a um.

Na Figura 2.4 observamos que à medida que o comprimento suave aumenta, o resultado obtido pela equação (2-26) vai sendo cada vez mais preciso. A partir de um certo valor de  $kh$ , porém, o custo-benefício entre o número médio de operações e a melhora na aproximação, no cálculo da densidade, é alto.

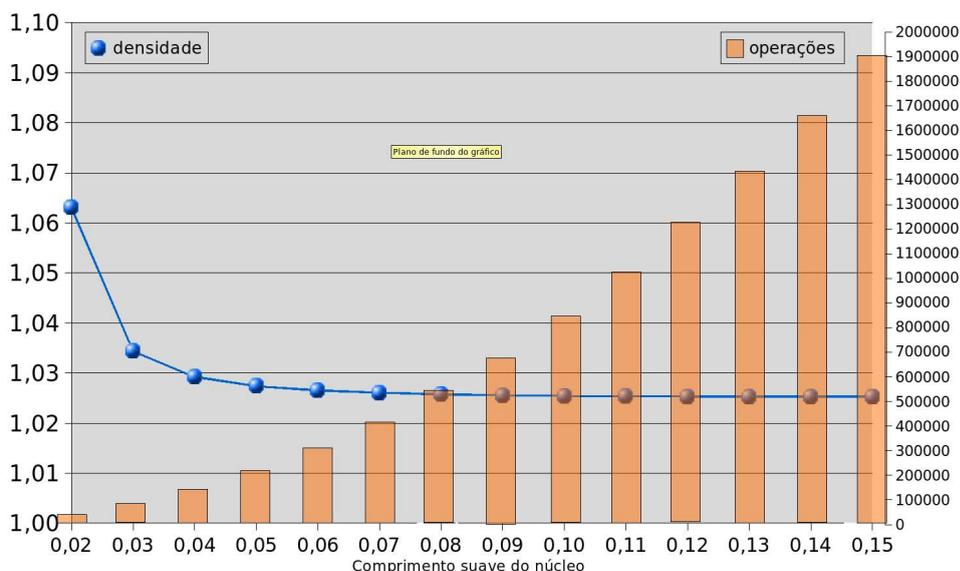


Figura 2.4: A densidade em cada partícula é dada pela equação (2-26). A densidade média em todas as partículas, em função do comprimento suave  $h$  (veja equação 2-9), é ilustrada pelo gráfico de bolas. No gráfico de barras ilustramos o número de operações necessárias para realizar a aproximação. À medida que o comprimento suave aumenta, a equação (2-26) vai obtendo melhores resultados. A partir de um certo valor de  $kh$ , porém, o custo-benefício entre o número de operações e a melhora na aproximação, no cálculo da densidade, é alto. Foram utilizadas partículas fantasmas para o cálculo da densidade.