

3

Operadores SPH

Não é comum encontrar as aproximações (2-22) e (2-23) para os operadores diferenciais nos trabalhos que utilizam o método SPH. Outras aproximações resultantes de propriedades implícitas do próprio método, ou de identidades para os operadores diferenciais, são encontradas na literatura (78, 101).

Este capítulo tem como objetivo apresentar e comparar algumas aproximações para um mesmo operador diferencial utilizadas em várias aplicações do método. Nesse sentido, são apresentadas algumas versões SPH para os operadores gradiente, divergente e laplaciano.

As versões apresentadas para cada operador diferencial serão analisadas estatisticamente. Nesses testes serão utilizadas funções analíticas para definir propriedades nas partículas da discretização de um domínio Ω . Alguns operadores SPH serão testados em vários cenários variando a densidade de partículas da amostragem.

As partículas em cada cenário serão amostradas de acordo com uma distribuição disco de Poisson. Essa distribuição assegura uma amostragem uniforme na qual quaisquer dois pontos dessa amostragem distam mais do que uma distância mínima r , ou seja, dado um disco de raio r sobre um elemento qualquer da amostragem, não existe nenhum outro elemento pertencente a amostragem dentro desse disco. Dunbar e Humphreys (24) descreveram um método eficiente para gerar pontos aleatoriamente obedecendo a essa distribuição. Nesta tese, uma implementação do algoritmo descrito por Dunbar e Humphreys é responsável pela posição inicial das partículas.

3.1

Operador Divergente SPH

Iniciamos este estudo comparativo expondo diferentes aproximações para o operador divergente SPH. Depois, essas versões de operadores discretos serão testadas em algumas funções. Os resultados obtidos serão analisados e comparados entre si.

A primeira aproximação para o divergente de uma função $\mathbf{f}$ em SPH, obtida na seção 2.3, será chamada de **operador divergente SPH básico**

$$(\nabla \cdot \mathbf{f})_h(\mathbf{x}_i) = \sum_{j \in \mathbf{v}_i} \frac{m_j}{\rho_j} \mathbf{f}(\mathbf{x}_j) \cdot \nabla_i W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) . \quad (3-1)$$

Essa aproximação não é precisa, e freqüentemente não obedece às propriedades de conservação associadas às equações no modelo contínuo (57), quando aplicada à simulação de escoamentos.

Monaghan (73) utilizou as identidades

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{f}) = \rho \nabla \cdot \mathbf{f} + \mathbf{f} \cdot \nabla \rho \quad (3-2)$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{f}}{\rho} \right) = \frac{\rho \nabla \cdot \mathbf{f} + \mathbf{f} \cdot \nabla \rho}{\rho^2} \quad (3-3)$$

para obter novas aproximações para o operador divergente no método SPH. Essas duas identidades são reescritas como

$$\nabla \cdot \mathbf{f} = \frac{1}{\rho} [\nabla \cdot (\rho \mathbf{f}) - \mathbf{f} \cdot \nabla \rho] \quad (3-4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{f} = \rho \left[\nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{f}}{\rho} \right) + \frac{\mathbf{f}}{\rho^2} \cdot \nabla \rho \right] \quad (3-5)$$

e utilizadas para substituir o operador divergente $\nabla \cdot \mathbf{f}(x)$ na equação (2-10). Os mesmos argumentos utilizados para obter a aproximação (3-1) são aplicados para cada termo que contém o operador divergente no lado direito das equações (3-4) e (3-5). Ainda, os termos fora de cada divergente são avaliados na própria partícula.

As aproximações obtidas para o divergente de $\mathbf{f}$ em uma partícula i , utilizando as equações (3-4) e (3-5), definem os seguintes operadores:

operador divergente SPH diferença

$$(\nabla \cdot \mathbf{f})_h(\mathbf{x}_i) = \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j \in \mathbf{v}_i} m_j (f(\mathbf{x}_j) - f(\mathbf{x}_i)) \cdot \nabla_i W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \right] \quad (3-6)$$

operador divergente SPH simétrico

$$(\nabla \cdot \mathbf{f})_h(\mathbf{x}_i) = \rho_i \left[\sum_{j \in \mathbf{v}_i} m_j \left(\frac{f(\mathbf{x}_j)}{\rho_j^2} + \frac{f(\mathbf{x}_i)}{\rho_i^2} \right) \cdot \nabla_i W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \right] \quad (3-7)$$

Uma característica desses dois operadores discretos é que a iteração entre partículas aparecem explicitamente no operador SPH.

As três diferentes aproximações obtidas para o operador divergente no método SPH: básica (3-1), diferença (3-6) e simétrica (3-7); serão utilizadas para aproximar o gradiente de uma mesma função.

Mais explicitamente, um domínio Ω será representado por um conjunto de partículas geradas aleatoriamente com uma distribuição disco de Poisson (24). Dada uma partícula indexada por i , uma função-teste definirá a propriedade $\mathbf{f}_i$ da partícula, definida por $\mathbf{f}_i = \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)$, onde $\mathbf{x}_i$ é a posição da partícula. O divergente dessa propriedade obtido por cada operador divergente SPH será comparado com o divergente analítico da função-teste. Daqui em diante, exceto quando houver necessidade de distingui-los dos demais operadores, os operadores divergente SPH serão chamados apenas de operadores SPH.

Mediremos qualitativamente os resultados obtidos pelos operadores SPH através do *erro absoluto*. O erro absoluto entre o resultado obtido por um dos operadores SPH $(\nabla \cdot \mathbf{f})_h$ e o valor exato dado pelo divergente da função analítica $\nabla \cdot \mathbf{f}$ é dado por

$$e = |(\nabla \cdot \mathbf{f})_h - \nabla \cdot \mathbf{f}|. \quad (3-8)$$

Nos exemplos que seguem, o domínio Ω do problema será sempre a região bidimensional

$$\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1].$$

Função constante

A primeira função-teste utilizada é a função vetorial constante

$$\mathbf{U}(x, y) = (1, 1), \quad (3-9)$$

cujo divergente é nulo

$$\nabla \cdot \mathbf{U}(x, y) = 0.$$

Este exemplo tem como finalidade mostrar a seguinte propriedade do operador SPH diferença:

Propriedade 1 *Dada uma propriedade constante, o resultado obtido pelo operador divergente SPH diferença é igual ao valor exato do divergente dessa propriedade. Ou seja, se a propriedade $\mathbf{f}$ é constante, então o operador divergente SPH diferença é tal que*

$$(\nabla \cdot \mathbf{f})_h = 0.$$

Essa propriedade é facilmente demonstrada: basta observar que o termo $\mathbf{f}(x_i) - \mathbf{f}(x_j)$ na equação 3-6 se anula quando $\mathbf{f}$ é uma propriedade constante.

Os operadores SPH básico (equação 3-1) e simétrico (equação 3-7) não têm essa propriedade. A Figura 3.1 ilustra o histograma do erro absoluto obtido pelos dois operadores em uma amostragem do domínio Ω com 1.948 partículas.

Erro absoluto

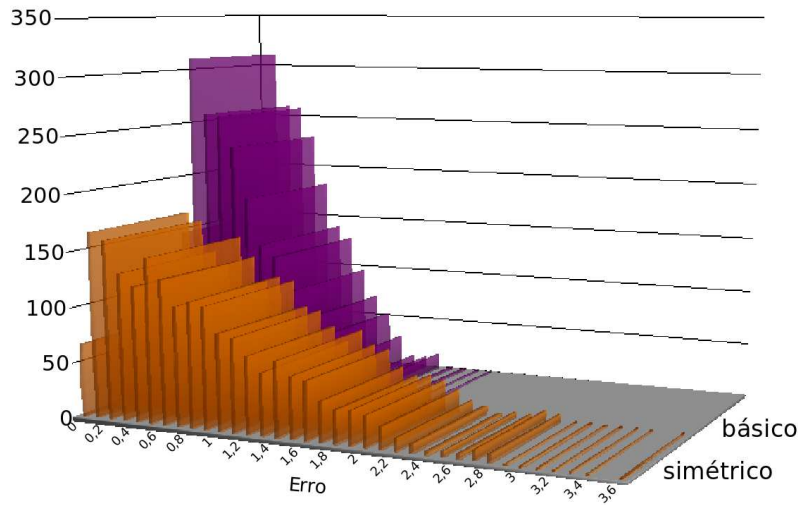


Figura 3.1: Os operadores SPH básico e simétrico são utilizados para obter o divergente da propriedade $\mathbf{U}_i = \mathbf{U}(x_i, y_i) = (1, 1)$ em 1.948 partículas que representam o domínio Ω . Um histograma do erro absoluto para cada um dos operadores é ilustrado. Embora ambos os operadores possuam erros consideravelmente altos, o operador SPH simétrico é ainda pior do que o operador SPH básico.

A propriedade $\mathbf{U}_i$ na partícula i é definida por

$$\mathbf{U}_i = \mathbf{U}(x_i, y_i) = (1, 1) .$$

onde (x_i, y_i) é a posição da partícula i . A densidade utilizada nos operadores SPH são obtidas pela equação (2-26). Observa-se que o operador SPH simétrico obteve resultados ainda piores do que o operador SPH básico.

Na distribuição por discos de Poisson, quanto menor o raio, maior a densidade da amostragem. Isso significa que, mantido o suporte compacto de tamanho fixo, a quantidade de partículas dentro do suporte compacto cresce à medida que o raio do disco de Poisson diminui.

A Figura 3.2 ilustra os valores máximo, mínimo e médio dos erros obtidos em 30 amostragens para cada raio do disco de Poisson. Observa-se que à medida que a densidade de partículas aumenta, os erros obtidos pelos operadores SPH básico e simétrico diminuem e, para qualquer valor do raio do disco de Poisson, o operador SPH básico resulta em melhores aproximações do que o operador SPH simétrico.

Vale lembrar que, o custo computacional para obter o divergente da propriedade usando um operador SPH é dado pelo número de partículas vizinhas. Portanto, quanto menor o raio do disco de Poisson, isto é, quanto

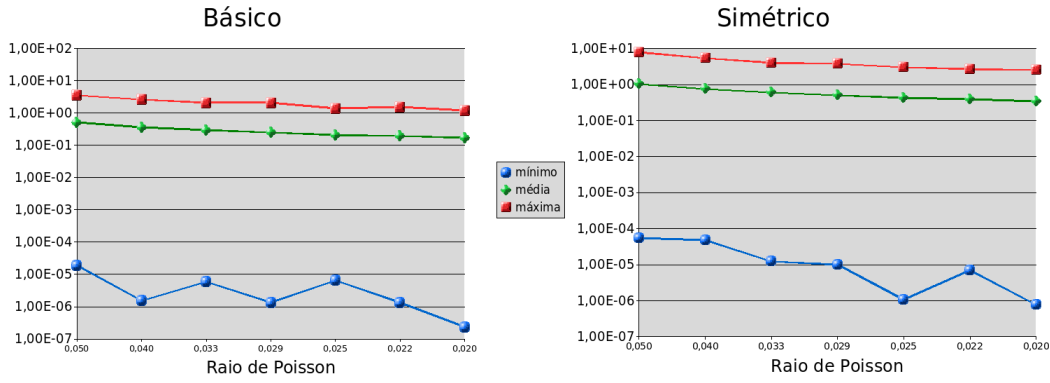


Figura 3.2: Os operadores SPH básico e simétrico são utilizados para obter o divergente da propriedade $\mathbf{U}_i = \mathbf{U}(x_i, y_i) = (1, 1)$. A média do erro absoluto em 30 amostragens para cada raio do disco de Poisson é ilustrada. À medida que o raio diminui, isto é, a quantidade de partículas dentro do suporte compacto cresce, o erro absoluto médio diminui lentamente. Vale lembrar que, quanto maior o número de partículas dentro do suporte compacto, maior o custo computacional para obter o divergente da propriedade. O eixo Y (erro absoluto) está em escala logarítmica.

maior o número de partículas dentro do suporte compacto, maior o custo computacional para obter o divergente da propriedade.

Funções que diferem por constante

Neste segundo exemplo, utiliza-se as funções-teste

$$\mathbf{F}(x, y) = (x + 1, 2y + 1) \quad (3-10)$$

e

$$\mathbf{G}(x, y) = (x + 2, 2y + 2) \quad (3-11)$$

que têm o mesmo divergente

$$\nabla \cdot \mathbf{F}(x, y) = \nabla \cdot \mathbf{G}(x, y) = 3,$$

para observar que os operadores divergente SPH básico e simétrico não são invariantes quando duas funções se diferem por uma constante. Isto é, o operador SPH básico, e da mesma forma o simétrico, obtêm valores distintos ao calcular o divergente de propriedades que diferem, apenas, por uma constante.

A Figura 3.3 ilustra os resultados obtidos pelo operador SPH básico. Foram utilizadas 2.360 partículas na discretização do domínio Ω . Nota-se que, embora os divergentes tenham analiticamente o mesmo valor, o resultado obtido pelo operador SPH básico para o divergente da propriedade $\mathbf{F}$ é diferente

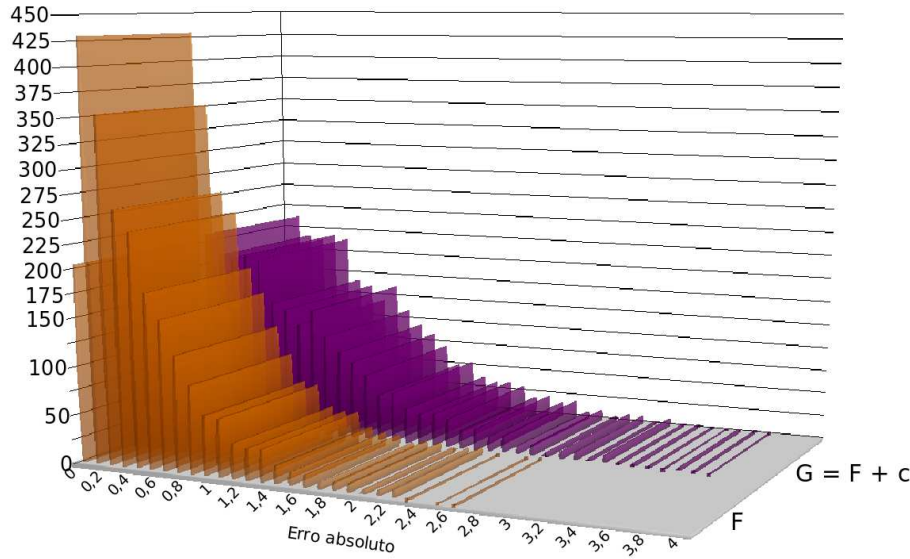


Figura 3.3: As propriedades $\mathbf{F}$ e $\mathbf{G}$ foram definidas em 2.360 partículas que discretizam o domínio Ω . Analiticamente, $\nabla \cdot \mathbf{F}(x, y) = \nabla \cdot \mathbf{G}(x, y)$, pois $\mathbf{G} - \mathbf{F} = \mathbf{c} = (1, 1)$. O resultado obtido, porém, pelo operador SPH básico para o divergente da propriedade $\mathbf{F}$ é diferente do resultado obtido para o divergente da propriedade $\mathbf{G}$.

do resultado obtido para o divergente da propriedade $\mathbf{G}$

$$(\nabla \cdot \mathbf{F})_h \neq (\nabla \cdot \mathbf{G})_h .$$

O mesmo comportamento é visto no operador SPH simétrico. Mais ainda, na Figura 3.4 podemos observar outra péssima característica desse operador. Ao definir as funções $\mathbf{G}_k = \mathbf{F} + k\mathbf{c}$ com $\mathbf{c} = (1, 1)$, para $k = 0, \dots, 9$, tem-se, analiticamente, $\nabla \cdot \mathbf{G}_k(x, y) = \nabla \cdot \mathbf{F}(x, y)$ para todo k . No entanto, à medida que k cresce, o erro absoluto em 2.366 partículas que discretizam o domínio Ω tem resultados cada vez piores.

Enquanto os operadores divergente SPH básico e simétrico não obtêm o mesmo resultado quando duas funções diferem por constantes, o operador SPH diferença tem essa desejada propriedade:

Propriedade 2 *Dadas duas propriedades que diferem por um campo constante, os resultados obtidos pelo operador divergente SPH diferença para cada propriedade são iguais. Ou seja, se as propriedades $\mathbf{f}$ e $\mathbf{g}$ são tais que $\mathbf{f} = \mathbf{g} + \mathbf{c}$, onde $\mathbf{c}$ é um campo constante, então o operador divergente SPH diferença é tal que*

$$(\nabla \cdot \mathbf{f})_h = (\nabla \cdot \mathbf{g})_h .$$

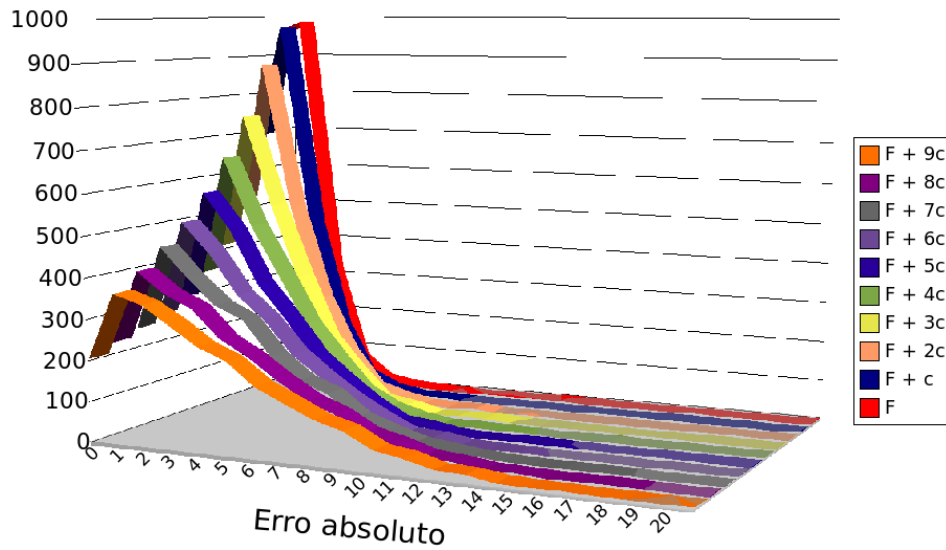


Figura 3.4: O operador SPH simétrico é testado nas funções $\mathbf{G}_k = \mathbf{F} + k\mathbf{c}$ com $\mathbf{c} = (1, 1)$, para $k = 0, \dots, 9$. Analiticamente, $\nabla \cdot \mathbf{G}_k = \nabla \cdot \mathbf{F}$ para todo k . No entanto, o resultado obtido pelo operador SPH simétrico é diferente para cada vetor constante $k\mathbf{c}$. O erro absoluto em 2.366 partículas que discretizam o domínio Ω é mostrado para cada função $\mathbf{G}_k$; à medida que a constante k cresce, o operador SPH simétrico obtém resultados cada vez mais imprecisos, como ilustram os histogramas.

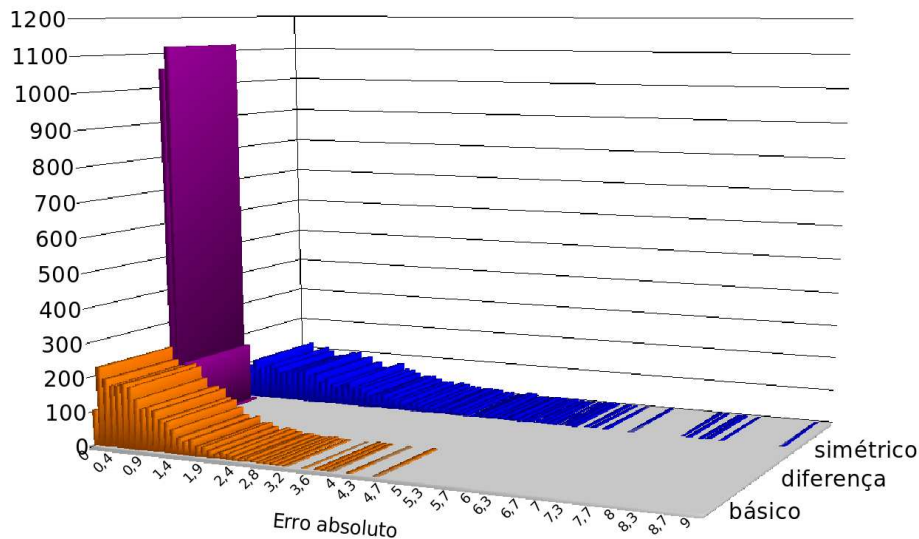


Figura 3.5: O operador SPH diferença resulta na melhor aproximação para o divergente da propriedade definida pela função de teste $\mathbf{F}$ em 2.370 partículas.

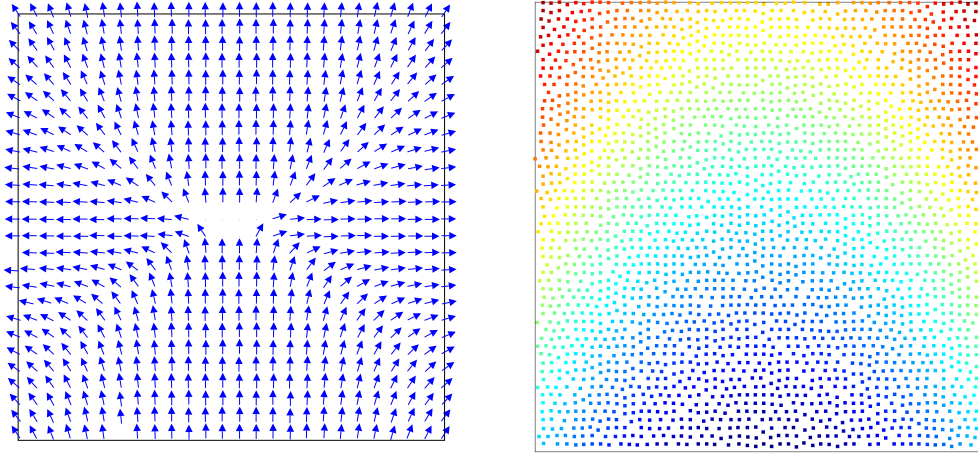
Essa propriedade também é facilmente demonstrada. Basta observar que o termo $\mathbf{f}(x_i) - \mathbf{f}(x_j)$ na equação 3-6 é tal que

$$\mathbf{f}(x_i) - \mathbf{f}(x_j) = (\mathbf{f}(x_i) + \mathbf{c}) - (\mathbf{f}(x_j) + \mathbf{c})$$

para qualquer vetor $\mathbf{c}$ constante.

Além de possuir as propriedades (1) e (2), o operador SPH diferença é aquele que obtém as melhores aproximações. A Figura 3.5 ilustra o resultado obtido pelos 3 operadores divergente SPH para o divergente da propriedade $\mathbf{F}$ em 2.370 partículas que discretizam Ω . Pode-se observar que o erro absoluto obtido pelo operador SPH diferença é muito menor do que os erros absolutos obtidos pelos demais operadores divergente SPH.

Divergente polinomial



a) A propriedade $\mathbf{P}_i$

b) Divergente analítico

Figura 3.6: A propriedade da partícula é definida pela função teste $\mathbf{P}(x, y)$. Para uma dada partícula i a propriedade $\mathbf{P}_i$ é definida por $\mathbf{P}_i = \mathbf{P}(x_i, y_i)$, onde (x_i, y_i) é a posição da partícula. A propriedade gerada pela função $\mathbf{P}$ é ilustrada à esquerda (vetores normalizados em um grid regular para uma melhor ilustração do campo). Na figura da direita, o mapa de cores ilustra o divergente analítico em 2581 partículas dado por $\nabla \cdot \mathbf{P}(x, y) = x^2 + y$.

A próxima função teste

$$\mathbf{P}(x, y) = \left(\frac{1}{3} x^3, \frac{1}{2} y^2 \right) \quad (3-12)$$

tem como divergente a função polinomial

$$\nabla \cdot \mathbf{P}(x, y) = x^2 + y.$$

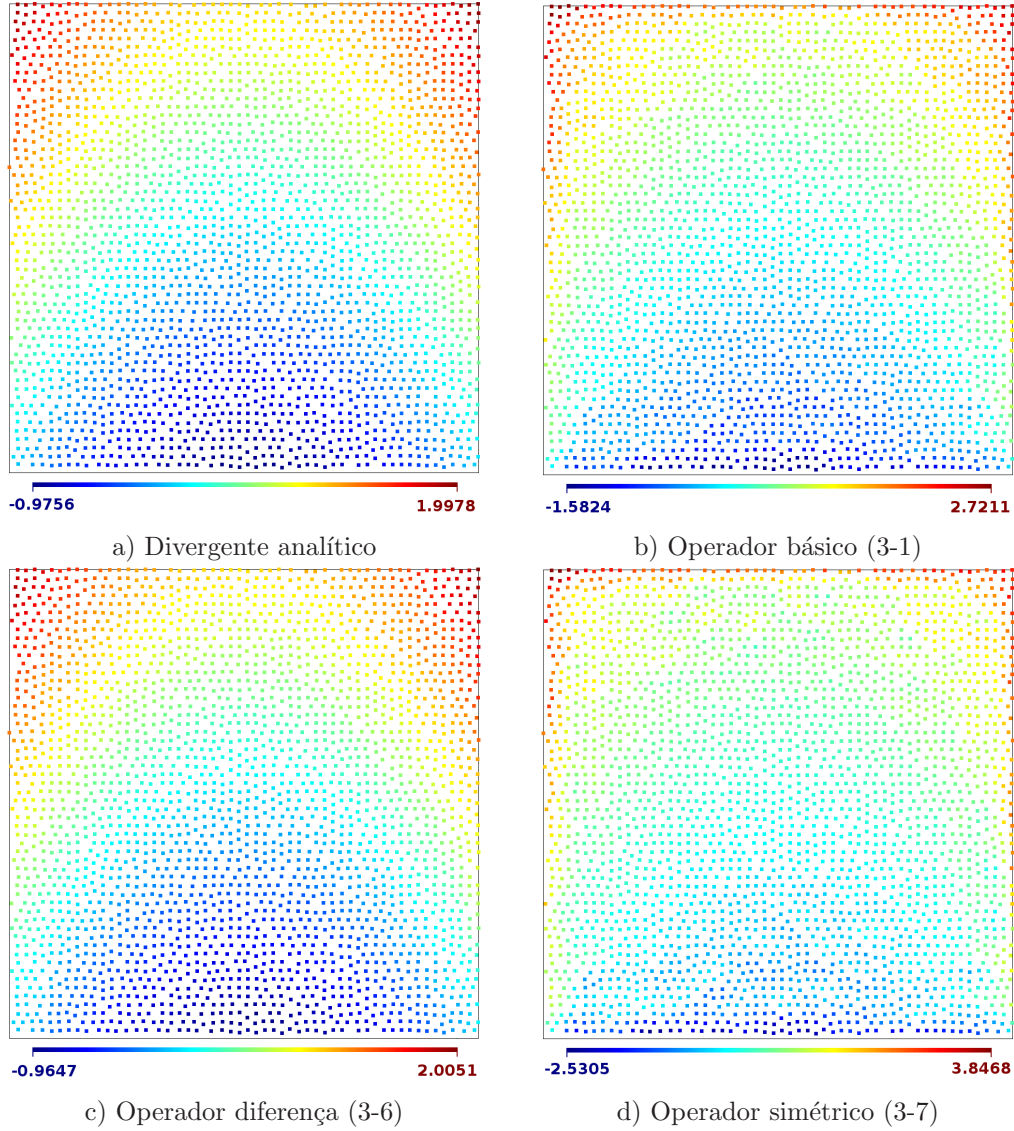


Figura 3.7: Resultados obtidos pelos operadores divergente SPH ilustrados pelos mapas de cores (escalas distintas). O operador SPH diferença obtém o melhor resultado.

O domínio Ω é representado por 2.581 partículas. Como nos exemplos anteriores, para cada partícula indexada por i , a propriedade $\mathbf{P}_i$ é definida por $\mathbf{P}_i = \mathbf{P}(x_i, y_i)$, onde (x_i, y_i) é a posição da partícula. Os resultados $(\nabla \cdot \mathbf{P})_h(x_i, y_i)$ obtidos pelos operadores divergente SPH serão comparados com o valor exato do divergente da propriedade $\mathbf{P}$ dada por $\nabla \cdot \mathbf{P}(x_i, y_i)$. A Figura 3.6 ilustra a propriedade $\mathbf{P}$ em uma amostragem regular com os vetores normalizados (3.6(a)) e o valor exato do divergente da propriedade $\nabla \cdot \mathbf{P}(x_i, y_i)$ em todas as 2.581 partículas que discretizam Ω (3.6(b)).

As diferentes aproximações obtidas pelos operadores SPH para a propriedade $\mathbf{P}$ são ilustradas na Figura 3.7. Mesmo com os mapas de cores, associados a cada resultado obtido pelos operadores SPH, estando em escalas diferentes,

nota-se a coerência entre as ilustrações do resultado obtido pelo operador diferença (Figura 3.7(c)) e o divergente exato (Figura 3.7(a)). Os operadores SPH básico (Figura 3.7(b)) e simétrico (Figura 3.7(d)) obtêm resultados piores do que o operador SPH diferença.

Divergente Nulo

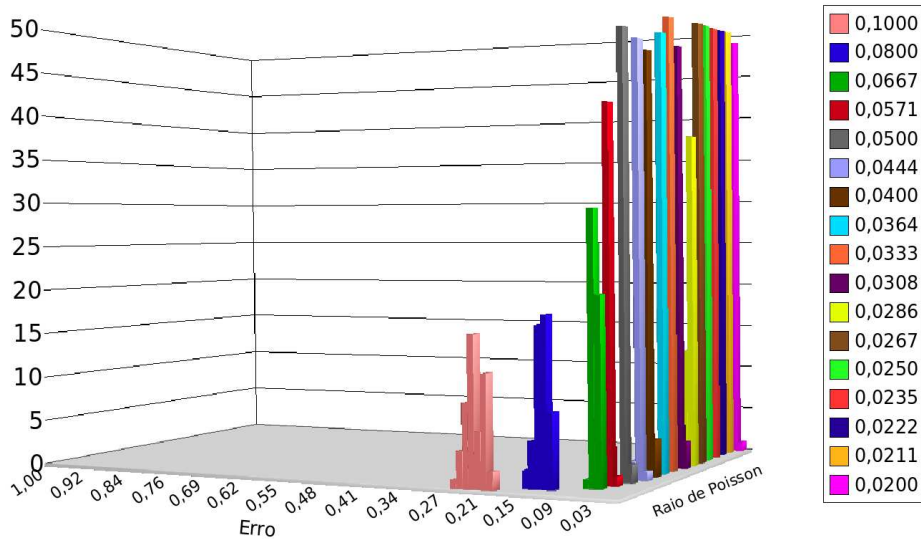


Figura 3.8: Para cada raio do disco de Poisson, o operador SPH diferença obtém o divergente da função $\mathbf{T}$ em 50 diferentes cenários que discretizam o domínio Ω . Para cada cenário, é calculada a média do erro absoluto ao obter o divergente da propriedade nas partículas. Um histograma, para cada raio do disco de Poisson, é definido pelas médias das 50 amostras. O operador SPH diferença obtém bons resultados, mesmo quando o raio do disco de Poisson é alto, o que significa poucas partículas no suporte compacto.

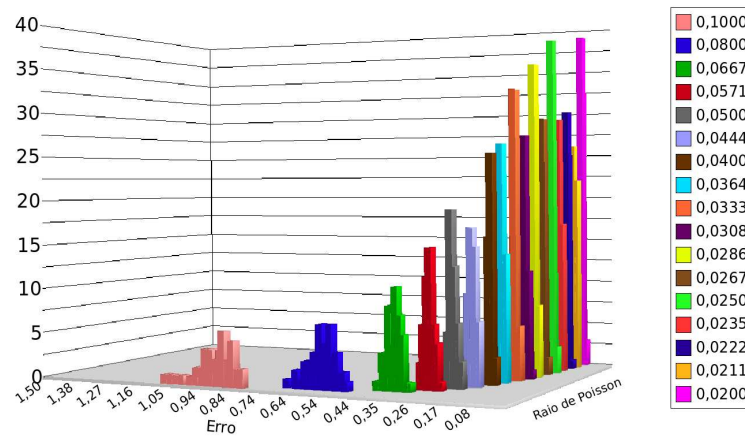
Na primeira função-teste utilizada, uma função constante $\mathbf{U}$ com divergente nulo, o operador SPH diferença obteve o resultado exato para o divergente da propriedade definida por essa função. A propriedade (1) do operador SPH diferença assegura que para campos constantes $\mathbf{U}$ o operador SPH diferença obtém o valor exato

$$(\nabla \cdot \mathbf{U})_h(\mathbf{x}_i) = \nabla \cdot \mathbf{U}(\mathbf{x}_i) = 0.$$

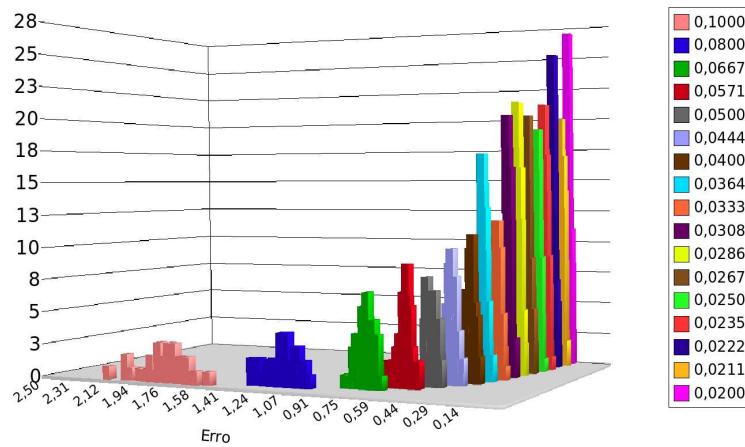
A próxima função-teste, embora não seja constante, também tem divergente nulo. A propriedade (1), porém, não pode ser utilizada para assegurar a funcionalidade do operador SPH diferença para essa função.

Definimos a função-teste como

$$\mathbf{T}(x, y) = (-\sin(\pi x) \cdot \cos(\pi y), \cos(\pi x) \cdot \sin(\pi y)). \quad (3-13)$$



a) Operador básico



b) Operador simétrico

Figura 3.9: Para cada raio do disco de Poisson, os operadores SPH básico e simétrico obtêm o divergente da função $\mathbf{T}$ em 50 cenários que discretizam o domínio Ω . Um histograma, para cada raio do disco de Poisson, é definido pelas médias dos erros absolutos das 50 amostras. Os resultados obtidos pelos operadores SPH básico e simétrico são piores do que o resultado obtido pelo operador SPH diferença.

A Figura 3.8 ilustra os erros médios obtidos pelo operador SPH diferença ao obter o divergente da propriedade definida pela função $\mathbf{T}$. Para cada raio do disco de Poisson, 50 cenários foram criados. A média do erro absoluto, em cada cenário, é calculada para o operador SPH diferença. Um histograma para cada raio do disco de Poisson é ilustrado. Observa-se que o histograma do erro médio obtido está concentrado próximo do zero para qualquer raio do disco de Poisson menor do que 0,0571. Isso significa que o operador SPH diferença obtém resultados precisos sem um grande esforço computacional, já que, quanto menor o raio do disco de Poisson, maior a densidade de partículas e, conseqüentemente, maior a quantidade de partículas dentro do suporte compacto.

Os operadores SPH básico e simétrico também são utilizados para aproximar o divergente da propriedade definida pela função $\mathbf{T}$. Observa-se na Figura 3.9 que os resultados obtidos por esses operadores são piores do que o resultado obtido pelo operador SPH diferença.

Conclusão

Em todos os testes realizados o operador divergente SPH diferença

$$(\nabla \cdot \mathbf{f})_h(\mathbf{x}_i) = \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j \in \mathbb{V}_i} m_j (\mathbf{f}(\mathbf{x}_j) - \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)) \cdot \nabla_i W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \right]$$

obteve os melhores resultados ao aproximar o divergente de propriedades $\mathbf{f}$, dadas por funções-teste. Ao comparar os resultados obtidos com o divergente analítico das funções-teste, o operador SPH diferença obteve resultados muito mais próximos do exato do que os demais operadores.

Também foi mostrado que o operador SPH diferença é, entre os considerados, o único operador divergente SPH invariante quando duas funções diferem por constantes, isto é, se duas funções $\mathbf{f}$ e $\mathbf{g}$ são tais que $\mathbf{f} = \mathbf{g} + \mathbf{c}$, onde $\mathbf{c}$ é um vetor constante, então $(\nabla \cdot \mathbf{f})_h = (\nabla \cdot \mathbf{g})_h$ quando é usado o operador SPH diferença.

Sendo assim, foi escolhido operador divergente SPH diferença como o operador divergente SPH.

3.2

Operador Gradiente SPH

A aproximação para o gradiente de uma função f em SPH, obtida na seção 2.3, será chamada de **operador gradiente SPH básico**

$$(\nabla f)_h(\mathbf{x}_i) = \sum_{j \in \mathbb{V}_i} \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) \nabla_i W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) . \quad (3-14)$$

Também podem ser utilizadas as igualdades

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

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

para obter novas aproximações para o operador gradiente no método SPH. Com o mesmo raciocínio utilizado para obter os operadores SPH divergente, obtém-se os seguintes operadores:

operador gradiente SPH diferença

$$(\nabla f)_h(\mathbf{x}_i) = \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j \in \mathbf{V}_i} m_j (f(\mathbf{x}_j) - f(\mathbf{x}_i)) \nabla_i W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \right] \quad (3-15)$$

operador gradiente SPH simétrico

$$(\nabla f)_h(\mathbf{x}_i) = \rho_i \left[\sum_{j \in \mathbf{V}_i} m_j \left(\frac{f(\mathbf{x}_j)}{\rho_j^2} + \frac{f(\mathbf{x}_i)}{\rho_i^2} \right) \nabla_i W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \right] \quad (3-16)$$

Os operadores gradiente SPH básico (3-14), diferença (3-15) e simétrico (3-16) serão testados de maneira semelhante aos operadores divergente SPH na seção anterior. O mesmo domínio Ω será representado por um conjunto finito de partículas. Cada partícula terá uma propriedade f_i definida por uma função f . Então, os operadores gradiente SPH serão utilizados para obter o gradiente dessa propriedade $\nabla f_i = (\nabla f)_h(x_i, y_i)$, onde (x_i, y_i) é a posição da partícula i .

A análise dos resultados obtidos pelos operadores gradiente SPH será feita comparando-os com o resultado exato dado pelo gradiente analítico ∇f . Nesta seção, um operador gradiente SPH será simplesmente chamado de operador SPH, salvo quando for necessário distingui-los dos demais operadores.

Qualitativamente, pode-se avaliar os resultados obtidos pelos operadores gradiente SPH de duas formas: o erro relativo da norma e o erro de fase. O *erro relativo da norma* entre um vetor aproximado $\bar{\mathbf{v}}$ e o vetor exato $\mathbf{v}$, supondo $\mathbf{v} \neq 0$, é dado pelo quociente entre o erro absoluto e o valor exato

$$e = \frac{\|\bar{\mathbf{v}} - \mathbf{v}\|}{\|\mathbf{v}\|}. \quad (3-17)$$

Quando o valor exato é nulo, consideraremos apenas o erro absoluto, apesar da diferença de escala.

$$e = \|\bar{\mathbf{v}} - \mathbf{v}\|.$$

O *erro de fase* é dado pelo ângulo entre os vetores aproximado $\bar{\mathbf{v}}$ e exato $\mathbf{v}$. Supondo $|\bar{\mathbf{v}}| \neq 0$ e $|\mathbf{v}| \neq 0$ o erro de fase entre esses vetores é dado por

$$\theta = \arccos \left(\frac{\langle \bar{\mathbf{v}}, \mathbf{v} \rangle}{|\bar{\mathbf{v}}| |\mathbf{v}|} \right). \quad (3-18)$$

Caso qualquer um dos vetores seja nulo, então não será possível medir este erro.

Gradiente constante

O primeiro exemplo tem como função-teste a função linear dada por

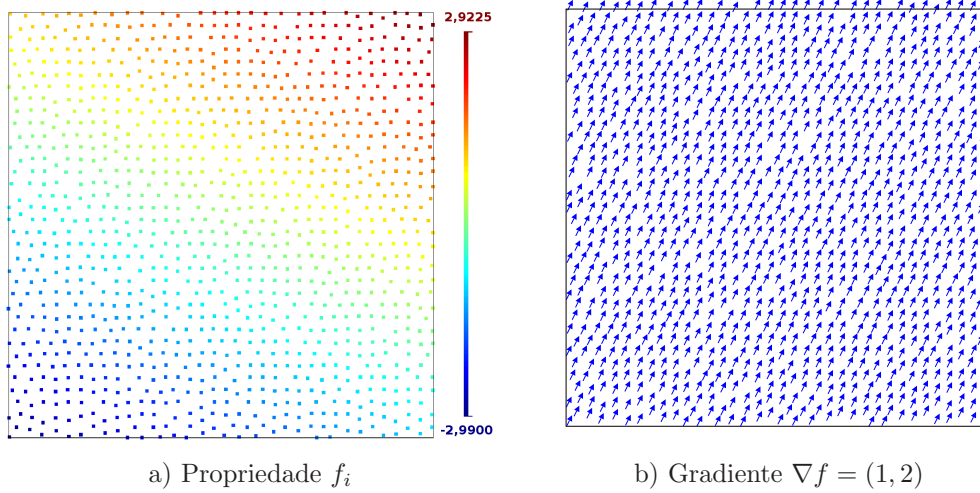


Figura 3.10: Função-teste $f(x, y) = x + 2y$. A figura da esquerda ilustra as partículas utilizadas para discretizar o domínio Ω . A cor associada a cada partícula i representa o valor da propriedade $f_i = f(x_i, y_i)$, onde (x_i, y_i) é a posição da partícula i . A figura da direita mostra o gradiente analítico $\nabla f(x_i, y_i)$ em cada partícula.

$$f(x, y) = x + 2y, \quad (3-19)$$

cujo gradiente é dado pelo vetor constante $(1, 2)$ para qualquer que seja (x, y)

$$\nabla f(x, y) = (1, 2).$$

Um conjunto de 1.093 partículas foi utilizado para discretizar o domínio Ω . Defini-se a propriedade f_i na partícula i dada por

$$f_i = f(x_i, y_i) = x_i + 2y_i,$$

onde (x_i, y_i) é a posição da partícula i . A Figura 3.10 ilustra a discretização do domínio Ω , onde o mapa de cores na figura da esquerda associa o valor da propriedade f_i a cada partícula da discretização. Na figura da direita o gradiente analítico é ilustrado.

Nos experimentos, os três operadores SPH utilizados para aproximar o gradiente da propriedade f_i obtiveram três campos distintos. Os resultados obtidos são ilustrados na Figura 3.11. O gradiente da propriedade f em uma partícula

$$\nabla f_i = (\nabla f)_h(x_i, y_i),$$

dado pelos operadores gradiente SPH (vermelho), são sobrepostos ao gradiente analítico (azul).

Visualmente, na Figura 3.11(b), não há diferença entre o resultado ob-

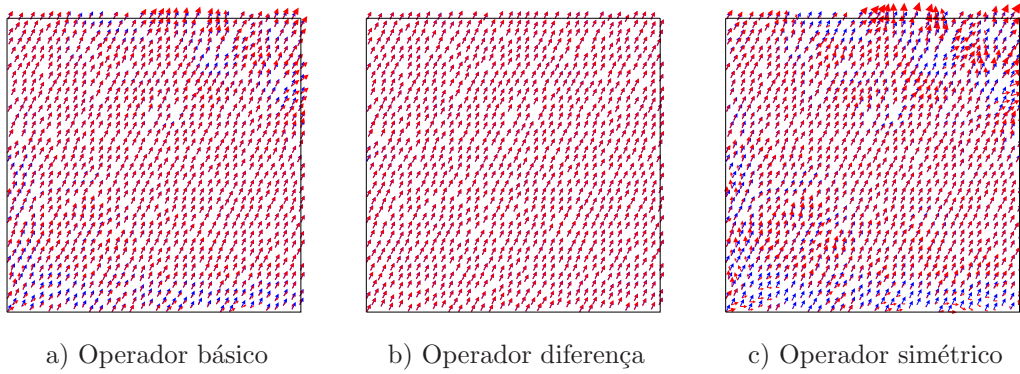


Figura 3.11: Os resultados obtidos com os operadores gradiente SPH (em vermelho) são sobrepostos ao gradiente analítico (em azul). Visualmente, o operador SPH diferença obteve a melhor aproximação para o gradiente da propriedade f_i dada pela equação (3-19).

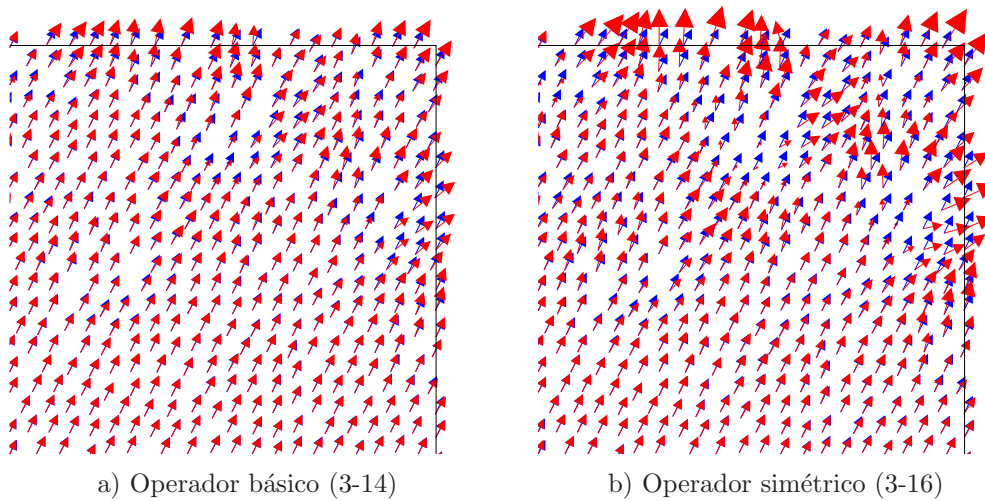
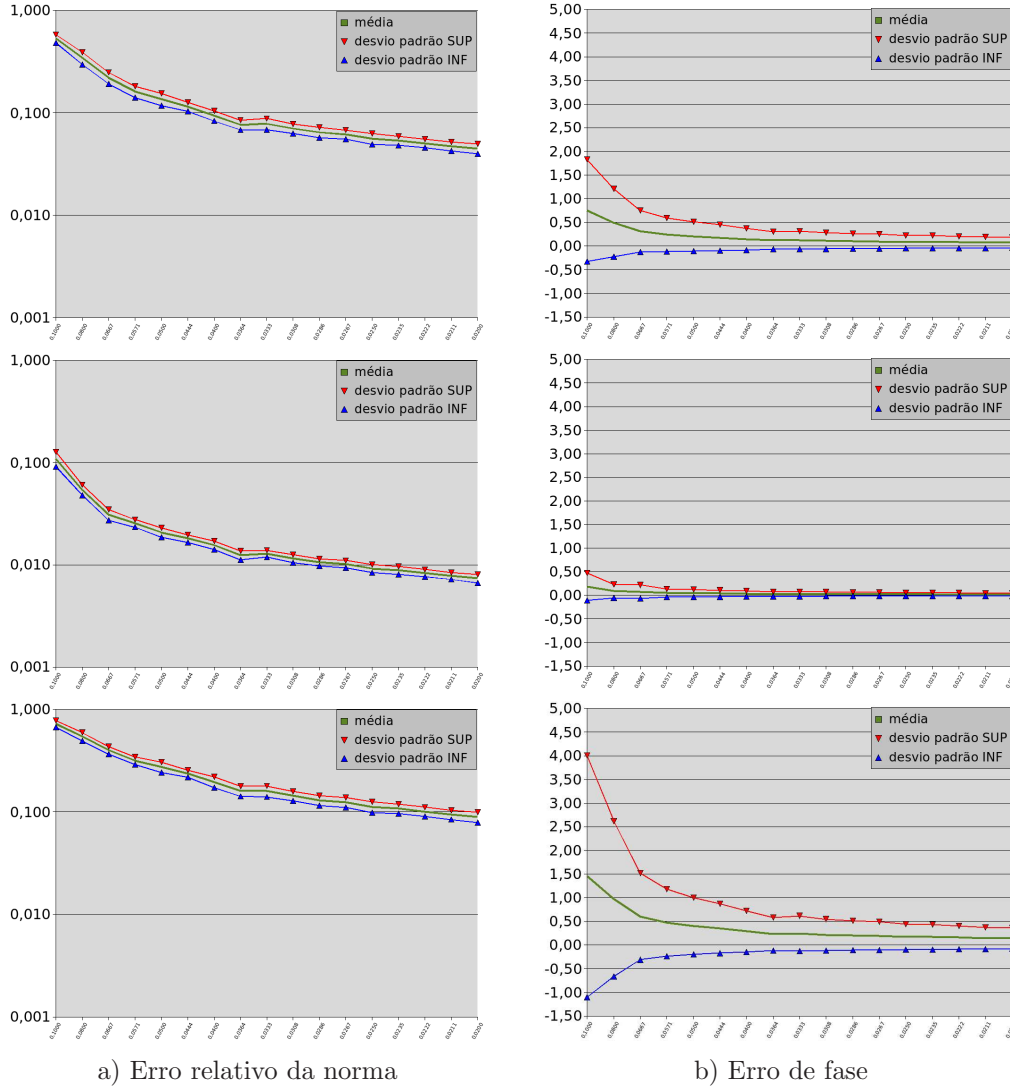


Figura 3.12: Operadores gradiente SPH. Em destaque, uma região de Ω onde, visualmente, observa-se a diferença entre o resultado obtido pelos operadores SPH básico e simétrico e o gradiente exato da propriedade f_i .

tido pelo operador SPH diferença e o valor exato. Por outro lado, os operadores básico e simétrico resultam em campos que aproximam erroneamente o gradiente de f , sendo a aproximação dada pelo operador simétrico (Figura 3.11(c)) ainda pior do que a aproximação obtida pelo operador básico (Figura 3.11(a)). Na Figura 3.12, destaca-se uma região do domínio (o quadrante superior direito), onde o gradiente da propriedade em algumas partículas é aproximado incorretamente pelos operadores básico 3.12(a) e simétrico 3.12(b).

Os erros relativo da norma e de fase dão uma medida da qualidade da aproximação, quanto menor for o erro, melhor será a aproximação efetuada. Os erros relativo da norma e de fase para cada operador SPH, ao obter o gradiente da propriedade f_i , são mostrados na Figura 3.13. Do topo à base: operadores SPH básico, diferença e simétrico. Para cada raio do disco de Poisson (eixo

horizontal) foram obtidos o erro relativo médio, o erro de fase médio e os desvios padrão referentes a cada tipo de erro em 50 amostragens do domínio Ω . Note-se o melhor comportamento do operador diferença, em comparação aos demais operadores gradiente SPH.



a) Erro relativo da norma

b) Erro de fase

Figura 3.13: Do topo à base: operadores SPH básico, diferença e simétrico. Para cada raio do disco de Poisson, a média em 50 amostragens é ilustrada juntamente com o desvio padrão para o erro relativo da norma (esquerda) e o erro fase (direita).

Observa-se também que, assim como o operador divergente SPH diferença, o operador gradiente SPH diferença obtém o mesmo resultado quando é utilizado para calcular o gradiente de duas funções que diferem por constantes. Mais ainda, observa-se que os erros dados pelos operadores básico e simétrico ao aproximar o gradiente da função

$$g(x, y) = f(x, y) + c$$

crecem a medida que é aumentado o valor da constante c .

Por fim, dada uma propriedade definida por uma função-teste constante, o operador gradiente SPH diferença, assim como o operador divergente SPH diferença, não só obtém a melhor aproximação dentre os operadores, como também resulta em uma aproximação exata, isto é, o valor da aproximação da propriedade em cada partícula é igual ao valor analítico do gradiente.

Portanto, as propriedades 1 e 2 também são válidas para o operador gradiente SPH diferença.

Função trigonométrica

As comparações dos operadores gradiente SPH são finalizadas com a função-teste dada pela seguinte expressão trigonométrica

$$T(x, y) = \cos(2\pi xy) + x^2 - \frac{1}{2}\sin(2\pi y). \quad (3-20)$$

O campo gradiente dessa função trigonométrica, ilustrado na Figura 3.14, é dado por

$$\nabla T(x, y) = (2x - 2\pi y \sin(2\pi xy), \pi \cos(2\pi y) - 2\pi x \sin(2\pi xy)).$$

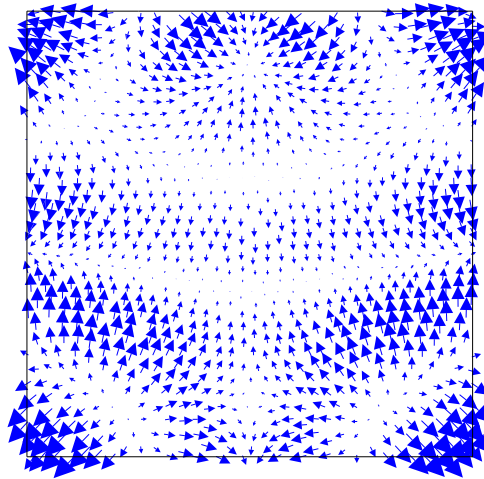


Figura 3.14: Gradiente da função trigonométrica 3-20.

A coluna da direita na Figura 3.15 ilustra o erro absoluto médio obtido pelos operadores SPH em vários cenários. Para cada raio do disco de Poisson, um histograma com os erros médios relativos em 50 cenários é criado. Na coluna da esquerda, a aproximação obtida por cada operador SPH diferença para um cenário com raio da distribuição disco de Poisson igual a 0,05 é ilustrada em uma sub-região do domínio, onde notamos a vantagem do operador SPH diferença quanto aos demais operadores gradiente SPH.

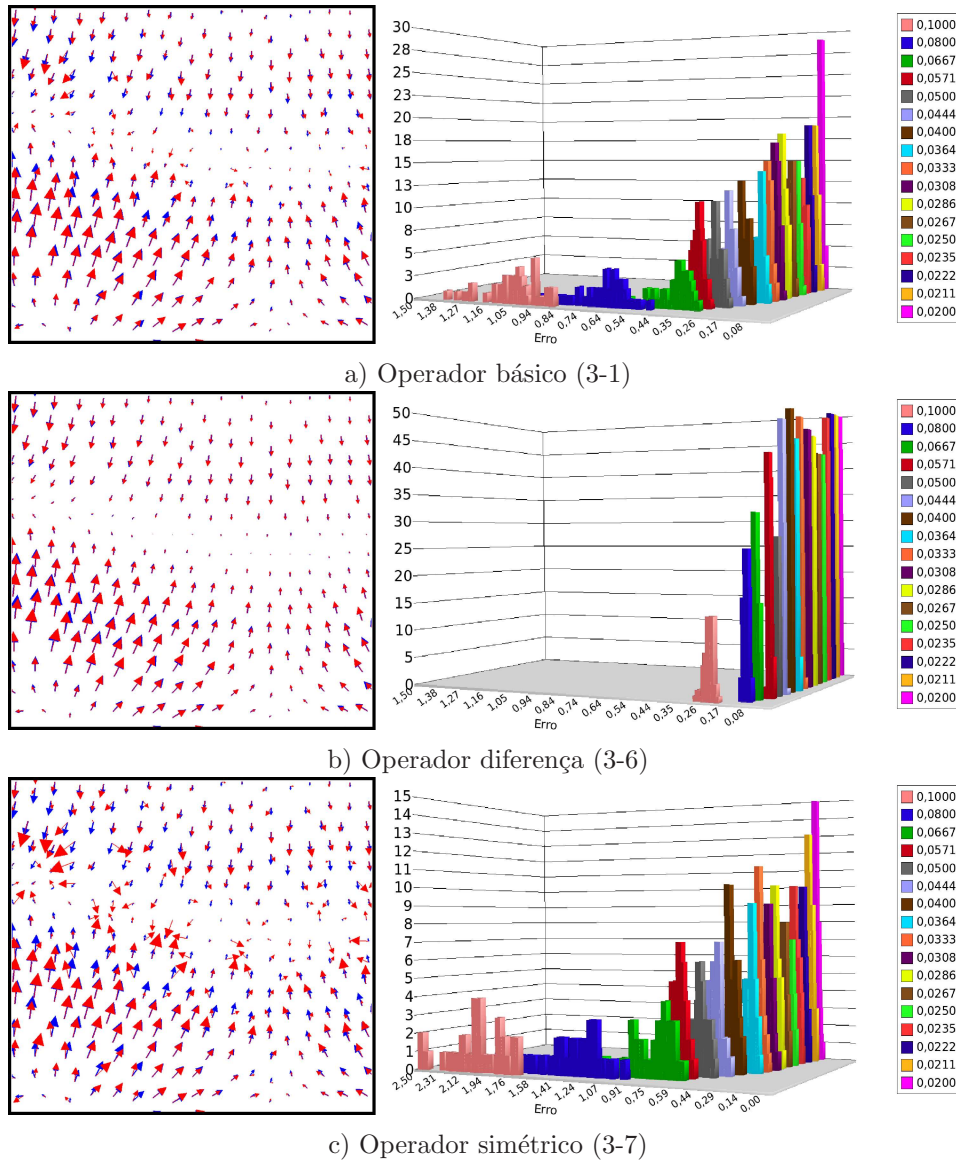


Figura 3.15: Para cada raio do disco de Poisson, os operadores SPH obtêm o gradiente da propriedade dada pela função T em 50 cenários que discretizam o domínio Ω . Um histograma, para cada raio do disco de Poisson, é definido pelas médias dos erros absolutos das 50 amostras. Ilustramos os histogramas obtidos na coluna da direita. Na coluna da esquerda a aproximação obtida por cada operador gradiente SPH para um cenário, com raio da distribuição disco de Poisson igual a 0,05, é ilustrada em uma sub-região do domínio onde se nota a vantagem do operador SPH diferença quanto aos demais operadores gradiente SPH.

Conclusão

Em todos os testes realizados o operador gradiente SPH diferença

$$(\nabla \mathbf{f})_h(\mathbf{x}_i) = \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j \in \mathbf{v}_i} m_j (\mathbf{f}(\mathbf{x}_j) - \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)) \nabla_i W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \right]$$

obteve os melhores resultados ao aproximar o gradiente de propriedades dadas analiticamente por uma função de teste f . Ao comparar-se os resultados obtidos com o gradiente analítico dessas funções-teste, o operador SPH diferença obteve resultados muito mais próximos do exato do que os dos demais operadores gradiente SPH.

Além disso, assim como o operador divergente SPH diferença, o operador gradiente SPH diferença é invariante quando duas funções diferem por constantes, o que não acontece com os demais operadores gradiente SPH.

Por último, vale lembrar que ao calcular o gradiente de uma função constante o operador SPH diferença obteve o resultado exato.

Sendo assim, foi escolhido o operador gradiente SPH diferença como o operador gradiente SPH.

3.3

Operador Laplaciano SPH

Vistas as aproximações para os operadores gradiente e divergente no método SPH, chega-se ao final deste estudo comparativo dos operadores diferenciais básicos com o operador laplaciano. O operador laplaciano em coordenadas cartesianas bi-dimensional é dado por

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}. \quad (3-21)$$

Serão apresentados algumas versões do operador laplaciano encontradas em SPH e analisados os resultados obtidos pelos operadores em algumas funções-teste.

O primeiro operador laplaciano SPH é baseado nos operadores gradiente e divergente SPH. Visto que o laplaciano no espaço euclidiano é o divergente do gradiente

$$\Delta = \nabla \cdot \nabla, \quad (3-22)$$

pode-se obter uma aproximação para o laplaciano da seguinte forma: 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 visto anteriormente. Daí, usando um dos operadores divergente

SPH, obtém-se uma aproximação para $\nabla \cdot g$. O resultado obtido após essas duas aproximações é uma aproximação para o laplaciano

$$\nabla \cdot g = \nabla \cdot \nabla p = \Delta p.$$

Como foi visto, os operadores gradiente e divergente SPH diferenças resultaram nas melhores aproximações para as suas respectivas derivadas. A aproximação obtida pela composição do operador divergente SPH diferença, com o operador gradiente SPH diferença define o

operador laplaciano SPH composto

$$(\Delta f)_h(\mathbf{x}_i) = \frac{1}{\rho_i} \sum_{j \in \mathbf{v}_i} m_j (\langle \nabla f \rangle_j - \langle \nabla f \rangle_i) \cdot \nabla_i W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j), \quad (3-23)$$

onde

$$\langle \nabla f \rangle_k = \frac{1}{\rho_k} \left[\sum_{l \in \mathbf{v}_i} m_l (f(\mathbf{x}_l) - f(\mathbf{x}_k)) \nabla_k W_h(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_l) \right].$$

Outra aproximação encontrada na literatura de SPH (20) é dada pela seguinte identidade

$$\Delta(\rho f) = f \Delta \rho + \rho \Delta f + 2(\nabla f \cdot \nabla \rho).$$

Rescrevendo-a da seguinte forma

$$\rho \Delta f = \Delta(\rho f) - f \Delta \rho - 2(\nabla f \cdot \nabla \rho)$$

e aplicando diretamente o operador laplaciano SPH básico

$$(\Delta f)_h(\mathbf{x}_i) = \sum_{j \in \mathbf{v}_i} \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) \Delta W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$$

nos operadores laplaciano encontrados na identidade acima, obtém-se o

operador laplaciano SPH diferença

$$(\Delta f)_h(x_i) = \sum_{j \in \mathbf{v}_i} m_j (f(x_j) - f(x_i)) \left(\Delta_i W_{ij} - \frac{2}{\rho_i} \nabla_i W_{ij} \cdot \nabla \rho_i \right), \quad (3-24)$$

onde

$$\Delta_i W_{ij} = \Delta_i W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$$

e

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

No operador laplaciano SPH diferença, o termo $\nabla \rho_i$ é pré-calculado

usando o operador gradiente SPH diferença

$$(\nabla \rho)_h(\mathbf{x}_i) = \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j \in \mathbf{V}_i} m_j (\rho(\mathbf{x}_j) - \rho(\mathbf{x}_i)) \nabla_i W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \right].$$

A desvantagem em usar os operadores laplaciano SPH composto e diferença está na necessidade de realizar, para cada partícula, dois somatórios para obter a aproximação SPH para o laplaciano, o que é computacionalmente muito caro. A próxima, e última, aproximação evita esse problema.

A última aproximação (72) é baseada na expansão em séries de Taylor. Para uma função $f(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} = (x, y)$, a expansão em séries de Taylor, até os termos de segunda ordem, sobre um ponto $\mathbf{u} = (a, b)$, é dada por

$$\begin{aligned} f(x, y) &= f(a, b) + (x - a) \frac{\partial f}{\partial x}(a, b) + (y - b) \frac{\partial f}{\partial y}(a, b) + \\ &+ \frac{1}{2} \left((x - a)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(a, b) + (y - b)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(a, b) \right) + \\ &+ (x - a)(y - b) \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(a, b) \\ &+ \mathcal{O}(\|(x, y) - (a, b)\|^3) \end{aligned} \quad (3-25)$$

Assumindo a igualdade dada pela expressão 3-25 sem os termos de ordem superior a dois, obtém-se a aproximação para a função f dada por

$$\begin{aligned} f(x, y) &= f(a, b) + (x - a) \frac{\partial f}{\partial x}(a, b) + (y - b) \frac{\partial f}{\partial y}(a, b) + \\ &+ \frac{1}{2} \left((x - a)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(a, b) + (y - b)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(a, b) \right) + \\ &+ (x - a)(y - b) \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(a, b) \end{aligned} \quad (3-26)$$

Tendo o núcleo W as propriedades de simetria e normalização listadas na seção 2.4, os seguintes resultados acontecem

$$\int (\mathbf{u} - \mathbf{x}) \frac{\mathbf{u} - \mathbf{x}}{|\mathbf{u} - \mathbf{x}|^2} \nabla_u W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n x = 0$$

e

$$\int (\mathbf{u} - \mathbf{x})_i (\mathbf{u} - \mathbf{x})_j \frac{\mathbf{u} - \mathbf{x}}{|\mathbf{u} - \mathbf{x}|^2} \nabla_u W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n x = \delta_{ij},$$

onde o símbolo de Kronecher δ_{ij} é definido por

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

Portanto, multiplicando a expressão 3-26 por

$$\frac{\mathbf{u} - \mathbf{x}}{|\mathbf{u} - \mathbf{x}|^2} \nabla_u W(\mathbf{u} - \mathbf{x})$$

e integrando-a, obtém-se a aproximação analítica

$$\Delta f(\mathbf{u}) = 2 \int \frac{f(\mathbf{u}) - f(\mathbf{x})}{|\mathbf{u} - \mathbf{x}|^2} (\mathbf{u} - \mathbf{x}) \nabla_u W(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d^n x. \quad (3-27)$$

A aproximação 3-27 pode agora ser facilmente discretizada usando a aproximação por partículas. Dada uma função escalar f , define-se o

operador laplaciano SPH Taylor

$$(\Delta f)_h(\mathbf{x}_i) = \sum_{j \in \mathbf{v}_i} \frac{m_j}{\rho_j} \frac{2(f(\mathbf{x}_i) - f(\mathbf{x}_j))}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|^2} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \cdot \nabla_i W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j). \quad (3-28)$$

Definidos os operadores laplaciano SPH básico, composto, diferença e Taylor, far-se-á a análise dos mesmos, comparando os resultados obtidos ao aproximar o laplaciano de uma função escalar f com o valor exato do laplaciano Δf . Nesta seção os operadores laplaciano SPH serão chamados simplesmente de operadores SPH, salvo quando houver a necessidade de distingui-los dos demais operadores.

Função quadrática

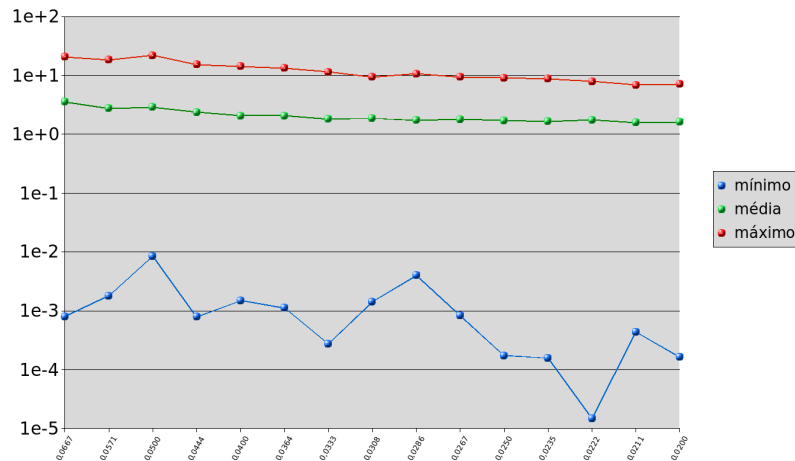
As comparações para os operadores laplaciano SPH iniciam-se com a função-teste

$$q(\mathbf{v}) = x^2 + y^2, \quad (3-29)$$

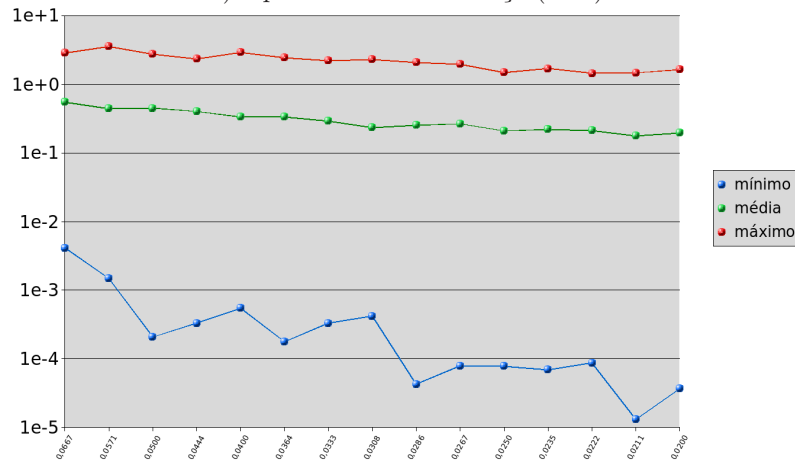
onde $\mathbf{v} = (x, y)$. O laplaciano dessa função é dado pela função constante

$$\Delta q(\mathbf{v}) = 4.$$

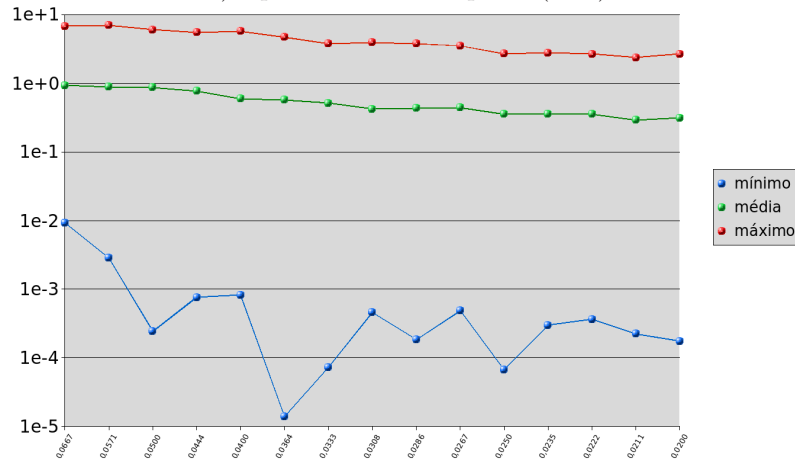
De maneira análoga aos testes com os operadores gradiente e divergente SPH, defini-se a propriedade q_i numa dada partícula i pertencente à discretização do domínio Ω , dada pela função-teste $q_i = q(\mathbf{v}_i)$ onde $\mathbf{v}_i$ é a posição da partícula i . Serão utilizados os operadores laplaciano SPH para obter o laplaciano aproximado dessa propriedade e, os resultados obtidos, serão comparados ao valor esperado, dado pelo laplaciano analítico $\Delta q(\mathbf{v}) = 4$.



a) Operador SPH diferença (3-24)



b) Operador SPH composto (3-23)



c) Operador SPH Taylor (3-28)

Figura 3.16: Os resultados obtidos pelos operadores laplaciano SPH: composto 3.16(b), diferença 3.16(a) e Taylor 3.16(c). Quanto menor o raio do disco de Poisson, menor o erro absoluto médio obtido pelos operadores SPH. Os resultados obtidos pelos operadores SPH composto e Taylor são mais precisos do que o resultado obtido pelo operador SPH diferença.

Mediremos qualitativamente os resultados obtidos pelos operadores SPH através do *erro absoluto* entre o resultado obtido por um dos operadores SPH $(\Delta f)_h$ e o valor exato dado pelo laplaciano da função analítica Δf é dado por

$$e = |(\Delta f)_h - \Delta f|.$$

A Figura 3.16 ilustra os resultados obtidos pelos operadores laplaciano SPH para o laplaciano da propriedade q_i variando a densidade de partículas. O erro absoluto médio, para cada raio do disco de Poisson, é calculado e ilustrado. Os operadores composto e Taylor obtêm bons resultados para o laplaciano da propriedade q_i . O operador SPH diferença obteve, dentre os três, o resultado menos preciso.

Função trigonométrica

A próxima função-teste

$$t(x, y) = \sin(\pi(x + y)) - \cos(\pi(x - y)) \quad (3-30)$$

tem como laplaciano a função

$$\Delta t(x, y) = -2\pi^2 (\sin(\pi(x + y)) - \cos(\pi(x - y))) = -2\pi^2 t(x, y).$$

Neste exemplo é utilizado um conjunto de 1.757 partículas para representar o domínio Ω . A Figura 3.17(a) ilustra essas partículas, onde o mapa de cores associa a cada partícula o valor do laplaciano analítico $\Delta t(\mathbf{v}_i)$, onde $\mathbf{v}_i$ é a posição da partícula.

Os resultados obtidos com os operadores laplaciano SPH composto, diferença e Taylor são ilustrados nas Figuras 3.17(b), 3.17(c) e 3.17(d), respectivamente. O mapa de cores em cada resultado associa o valor do laplaciano da propriedade t_i obtido pelo operador SPH $(\Delta t)_h(\mathbf{v}_i)$.

Observa-se na Figura 3.17 que os resultados obtidos pelo operador laplaciano SPH composto e Taylor são mais precisos do que o operador laplaciano SPH diferença. A coerência entre os mapas de cores de cada operador laplaciano SPH e o valor do laplaciano analítico ilustra esse fato.

A Figura 3.18 ilustra o erro absoluto médio para 50 amostragens obtido pelos operadores laplaciano SPH composto e Taylor, usando o raio do disco de Poisson igual a 1/3. O operador SPH Taylor obtém um resultado menos preciso do que o operador SPH composto.

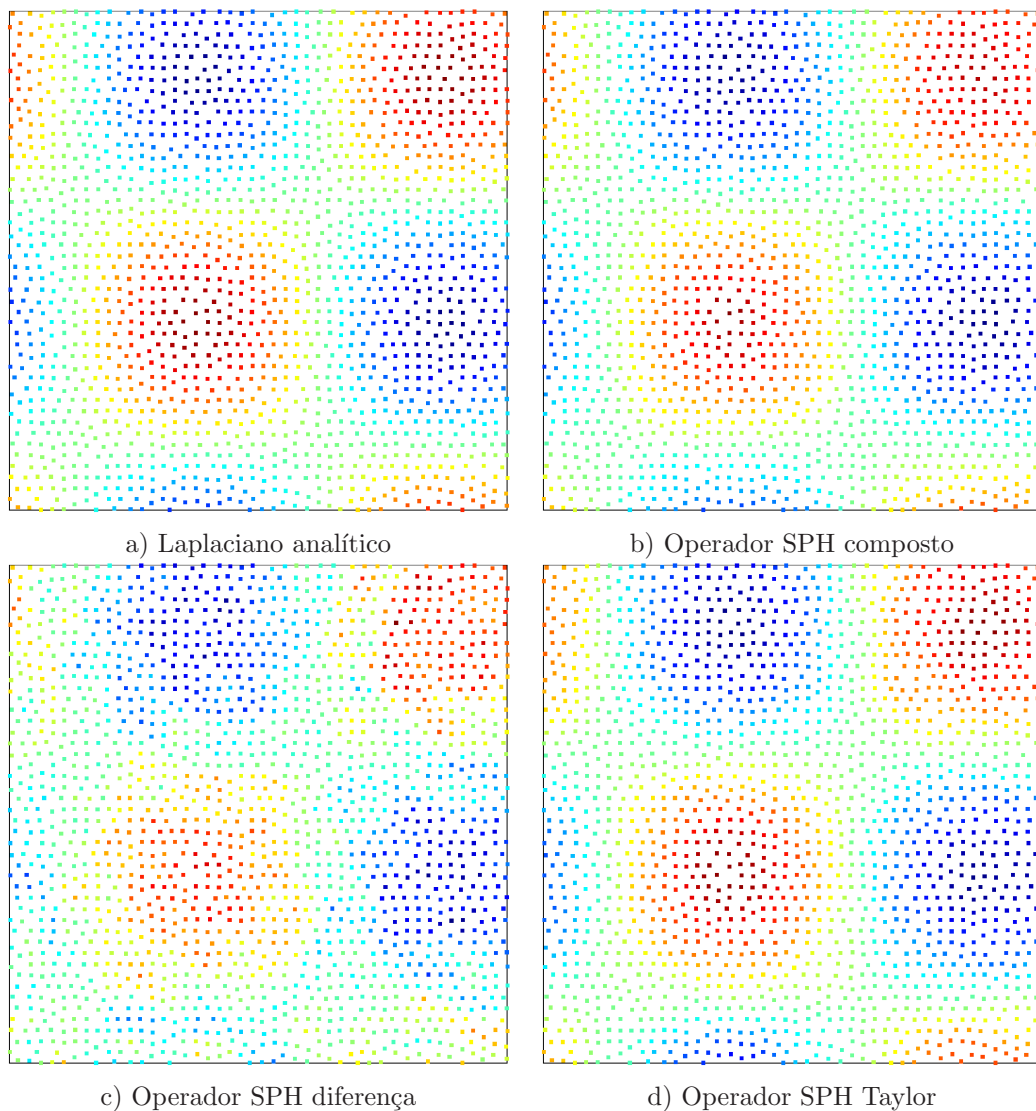
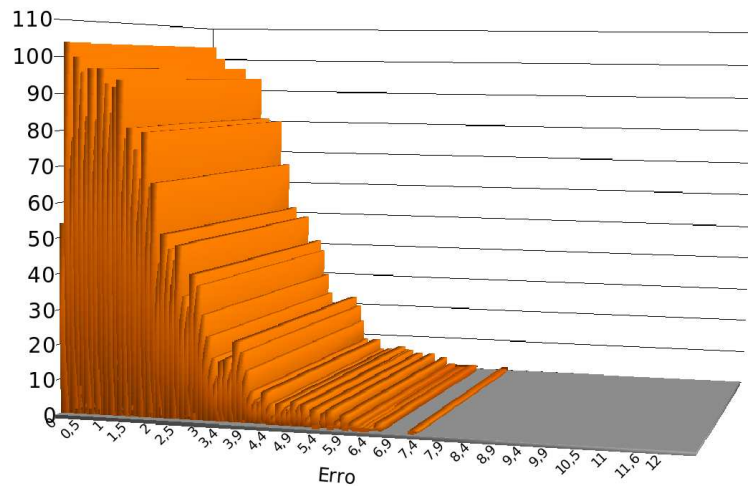


Figura 3.17: São ilustrados os resultados obtidos pelos operadores laplaciano SPH para o laplaciano da propriedade t_i em 1.757 partículas que discretizam o domínio Ω . O mapa de cores associa a cada partícula o valor do laplaciano analítico em 3.17(a) e dos resultados obtidos com os operadores laplaciano SPH composto, diferença e Taylor em 3.17(b), 3.17(c) e 3.17(d), respectivamente.

Operador SPH composto



Operador SPH Taylor

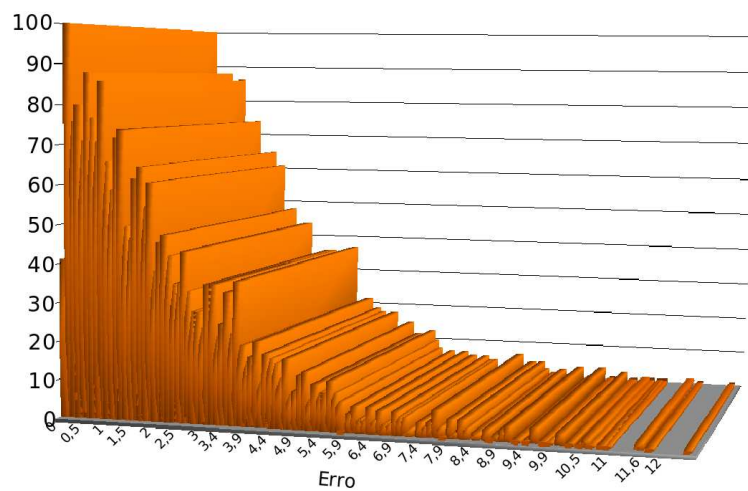


Figura 3.18: Os resultados obtidos pelos operadores laplaciano SPH composto e taylor para o laplaciano da propriedade t_i são ilustrados pelo histograma do erro absoluto médio.

Função exponencial

A última função-teste é dada pelo produto entre uma função exponencial e uma função trigonométrica

$$p(x, y) = -e^x \sin(y) . \quad (3-31)$$

O laplaciano desta função é nulo em todos os pontos

$$\Delta p(x, y) = 0 .$$

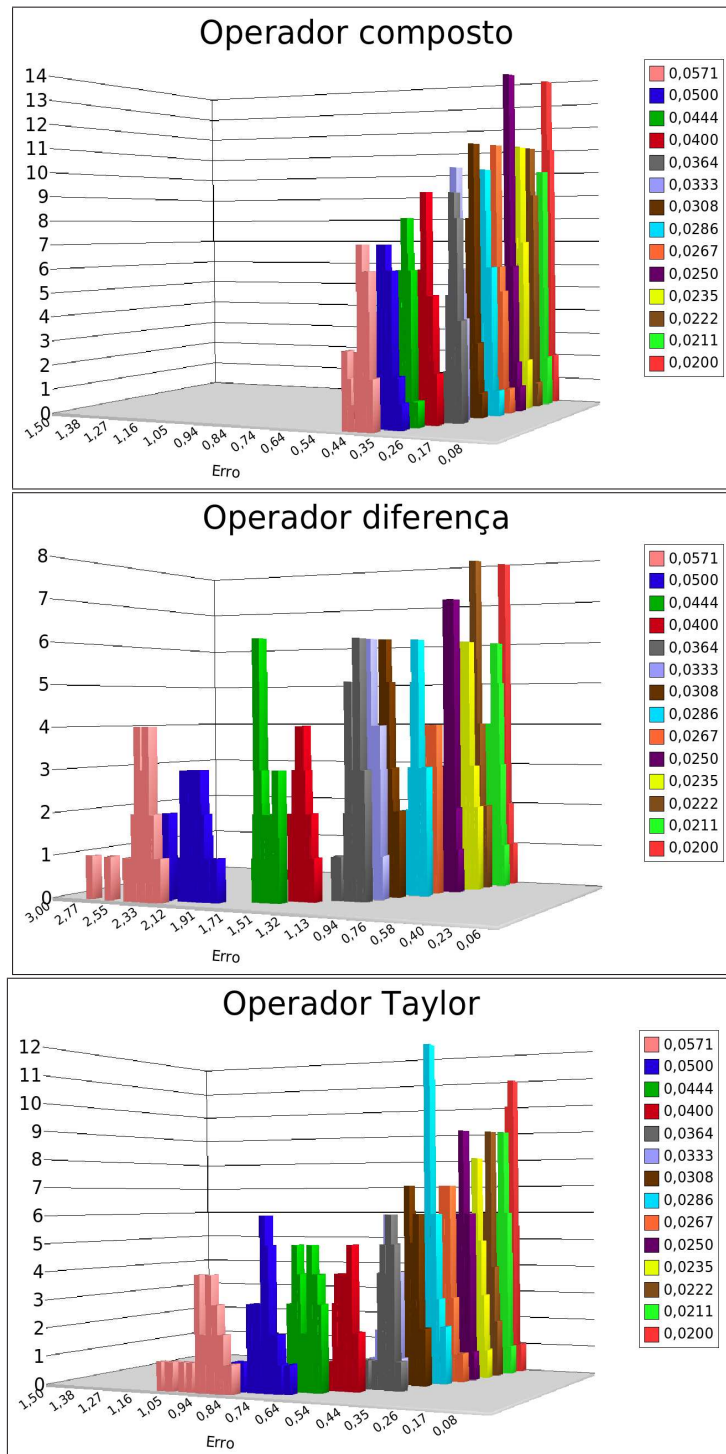


Figura 3.19: Os resultados obtidos pelos operadores laplaciano SPH para o laplaciano da propriedade p_i em vários cenários variando a densidade de partículas na discretização do domínio.

A Figura 3.19 ilustra os erros médios obtidos pelo operador SPH diferença ao obter o laplaciano da propriedade definida pela função p . Para cada raio do disco de Poisson, 50 cenários foram criados. A média do erro absoluto, em cada cenário, é calculada para o operador SPH diferença. Um histograma para cada raio do disco de Poisson é ilustrado. Note-se que eixo do erro absoluto não é o mesmo para todos os operadores e, portanto, o operador SPH diferença obteve o resultado menos preciso na aproximação. Os operadores SPH composto e Taylor conseguem resultados semelhantes para o laplaciano da propriedade quando a densidade de partículas aumenta, ou seja, o raio do disco de Poisson diminui.

Conclusão

Em todos os testes realizados o operador laplaciano SPH composto (3-23) obteve os melhores resultados ao aproximar o laplaciano de propriedades f , dadas por funções-teste. Essa seria uma escolha natural se não fosse pela seguinte observação: o operador SPH composto é obtido como um somatório de termos que são dados por somatórios. Isto é, para aproximar o laplaciano de uma função f são necessários, para cada partícula, dois somatórios. O primeiro dá o resultado do gradiente $g = \nabla f$ da propriedade, e o segundo é o divergente do gradiente aproximado $\nabla \cdot g$. Isso torna o operador SPH composto computacionalmente caro.

Como a diferença entre os operadores SPH composto e Taylor é consideravelmente pequena, optou-se por utilizar o último devido ao menor esforço computacional necessário para obter a aproximação. Portanto, o operador laplaciano SPH Taylor

$$(\Delta f)_h(\mathbf{x}_i) = \sum_{j \in \mathbf{v}_i} \frac{m_j}{\rho_j} \frac{2(f(\mathbf{x}_i) - f(\mathbf{x}_j))}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|^2} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \nabla_i W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$$

é o operador laplaciano SPH escolhido nesta tese.