



PROPOSTA DE METODOLOGIA DE ENSINO DE DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL UTILIZANDO O MÉTODO LAGRANGIANO SPH

Carlos Alberto Dutra Fraga Filho - cadff1@gmail.com

Universidade do Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico - Laboratório de Simulação de Escoamentos com Superfície Livre (LABESUL)
Av. Fernando Ferrari, 514, Campus Universitário – Goiabeiras.
29075-910 – Vitória – ES.

Instituto Federal de Educação Tecnológica – IFES
Avenida Vitória, 1729 – Jucutuquara.
29040-780 – Vitória – ES.

Enilene Lovatte – elovatte@gmail.com

Universidade do Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico – Núcleo de Estudos da Qualidade do Ar (NQUALIAR)
Av. Fernando Ferrari, 514, Campus Universitário – Goiabeiras.
29075-910 – Vitória – ES.

Instituto Federal de Educação Tecnológica – IFES
Avenida Vitória, 1729 – Jucutuquara.
29040-780 – Vitória – ES.

Edilson Luiz Nascimento - edilsonluiz@gmail.com

Universidade do Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico – Núcleo de Estudos da Qualidade do Ar (NQUALIAR)
Av. Fernando Ferrari, 514, Campus Universitário – Goiabeiras.
29075-910 – Vitória – ES.

Instituto Federal de Educação Tecnológica – IFES
Rodovia ES-010 - Km 6,5 – Manguinhos
29173-087 – Serra – ES.

***Resumo:** Este trabalho apresenta uma proposta de metodologia para o ensino-aprendizagem de dinâmica dos fluidos computacional baseada na aplicação do método numérico lagrangiano sem malhas SPH como uma alternativa aos tradicionais métodos eulerianos com uso de malhas. Apesar de poucas décadas de uso, o SPH apresenta vantagens de aplicação na solução numérica de problemas clássicos estudados nos cursos de engenharia, por permitir uma melhor visualização da evolução espaço-temporal do escoamento (e das*



propriedades do fluido), um menor custo computacional no estudo de geometrias complexas e a obtenção de soluções numéricas estáveis. Foram obtidos resultados para dois problemas clássicos de engenharia: a quebra da barragem e um fluido incompressível, em repouso, no interior de um reservatório. Os estudos comprovaram que a abordagem lagrangiana, atualmente pouco utilizada na graduação de engenharia no Brasil, pode facilitar o entendimento físico dos problemas estudados nos cursos de dinâmica dos fluidos computacional.

Palavras-chave: *dinâmica dos fluidos computacional, método lagrangiano SPH, educação em engenharia.*

1. INTRODUÇÃO

A visão euleriana é, historicamente, a mais utilizada na modelagem dos problemas físicos que envolvem fluidos. Esta modelagem requer o uso de métodos numéricos – método das diferenças finitas (MDF), método dos volumes finitos (MVF) e método dos elementos finitos (MEF) – que empregam grades ou malhas para a solução das formulações diferenciais ou integrais (Liu & Liu, 2010). Baseado em uma malha adequadamente pré-definida, as equações governantes podem ser convertidas em um conjunto de equações algébricas, com incógnitas nodais para as variáveis de campo. Porém, esses métodos eulerianos apresentam limitações para aplicações em vários tipos de problemas complexos.

As maiores dificuldades provenientes do uso de malhas consistem no fato de que se deve sempre garantir a consistência. O uso da malha pode levar a várias dificuldades ao se tratar com problemas de escoamentos de fluidos que apresentem superfície livre, interfaces móveis, geometrias complexas ou mudanças topológicas. Caso estas características existam, a geração de uma malha, pré-requisito para a simulação numérica de qualidade, torna-se um processo difícil, demorado e caro.

A modelagem lagrangiana baseia-se na hipótese de que o domínio do problema pode ser dividido em pequenas parcelas que não interagem umas com outras. O volume é dividido em um conjunto discreto de partículas de massas definidas (elementos lagrangianos). Cada partícula recebe as coordenadas que definem sua posição no espaço e as propriedades físicas de cada elemento lagrangiano são encontradas a cada instante de tempo definido.

O modelo lagrangiano de partículas não emprega malhas (*meshless*) e tem sido uma alternativa aplicada nas pesquisas, apontando para o emprego de métodos computacionais mais eficazes para a solução de problemas mais complexos, onde são fornecidas soluções numéricas estáveis e acuradas para equações integrais ou equações diferenciais parciais.

Algumas das vantagens do emprego da modelagem lagrangiana em relação à euleriana são: simplicidade e menor custo computacional em geometrias complexas, a não necessidade de utilização de malhas, a não produção de oscilações numéricas, a conservação da massa pelo elemento lagrangiano, além da visualização gráfica dos resultados obtidos permitir o melhor entendimento da evolução espaço-temporal do escoamento.

Na próxima seção são apresentados os fundamentos do Método SPH e as aproximações para as Equações de Conservação, governantes do escoamento de um fluido.

2. PROPOSTA DE USO DO MÉTODO *SMOOTHED PARTICLE HYDRODYNAMICS* (SPH) EM CURSOS DE ENGENHARIA

2.1. Fundamentos Matemáticos

O SPH é fundamentado na identidade matemática válida para uma função escalar $f(X)$ definida e contínua em todo o domínio:

$$f(X) = \int f(X') \delta(X' - X) dX' \quad (01)$$

onde:

$f(X)$ é a função escalar no ponto fixo, na posição $X = (x, y)$,

$\delta(X' - X)$ é a função delta de Dirac:

$$\delta(X' - X) = \begin{cases} 1, \text{ para } X = X' \\ 0, \text{ para } X \neq X' \end{cases}$$

Ao substituir-se o delta de Dirac pela função de suavização W , obtém-se a aproximação para a função na posição X :

$$\langle f(X) \rangle = \int f(X') W(X' - X, h) dX' \quad (02)$$

onde:

h é o raio de suporte

$dX' = dx' dy'$ é um elemento infinitesimal de área.

A essência do método SPH consiste em discretizar o domínio Ω em um número finito de partículas e nestas obter os valores das grandezas de interesse, a partir de interpolações ponderadas dos valores das grandezas nas partículas da vizinhança. Apenas as partículas vizinhas, aquelas que se encontram dentro do domínio de influência (a uma distância máxima definida kh da partícula a considerada), contribuirão para o comportamento desta. Para que as soluções encontradas sejam representativas do domínio do problema, o número de partículas vizinhas dentro do domínio de influência, deve ser de 5, 21 e 57 em casos 1D, 2D e 3D, respectivamente (Liu & Liu, 2003).

A Figura 1 apresenta a disposição das partículas dentro do domínio de influência.

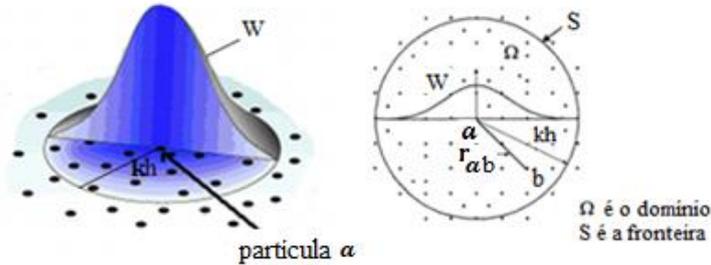


Figura 1. (a) Representação gráfica do domínio de influência. A partícula de referência a tem como vizinhas todas as partículas dentro do domínio. (b) O *kernel* (W) garante a maior contribuição das partículas vizinhas mais próximas para o valor da grandeza física na partícula de referência.

A busca de partículas vizinhas pode ser realizada de maneira direta ou com o auxílio de *grids*, que conduzem a um menor número de operações matemáticas e reduzem o custo computacional (Liu & Liu, 2003; Gesteira *et al.*, 2010). A Figura 2 mostra a busca direta (todas os pares de partículas " ab " do domínio terão as distâncias calculadas e comparadas com o valor de kh) e o emprego de um *grid*, que diminui o número de buscas (apenas as partículas dentro da região sombreada serão objeto da procura, que se limitará a 3, 9 ou 27 células, em casos 1D, 2D ou 3D, nesta ordem).

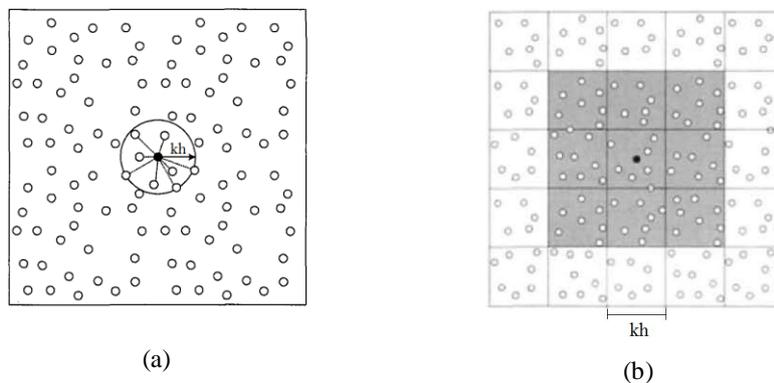


Figura 2. Busca das partículas vizinhas. (a) De forma direta. (b) Com o emprego de um *grid*. (Adaptado de Liu & Liu, 2003).

Diferentes *kernels* podem ser utilizados e para que eles sejam considerados adequados à interpolação, é necessário que respeitem determinadas propriedades: convergência, suavidade, positividade, simetria, normalização dentro do domínio de suporte e suporte compacto. O *kernel spline* cúbico, proposto por Liu & Liu (2003), foi utilizado neste trabalho pelo seu comportamento matemático desejável, bem como de suas derivadas, na representação das propriedades físicas estudadas.



$$W(r, h) = fator \begin{cases} \left[\frac{2}{3} - \left(\frac{|r - r_b|}{h} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{|r - r_b|}{h} \right)^3 \right], & 0 \leq |r - r_b| \leq h \\ \left[\frac{1}{6} \left(2 - \left(\frac{|r - r_b|}{h} \right)^3 \right) \right], & h < |r - r_b| \leq 2h \\ 0, & \text{nos demais casos.} \end{cases} \quad (03)$$

onde:

$$fator = \begin{cases} \frac{15}{7\pi h^2}, & \text{no caso 2D} \\ \frac{15}{\pi h^3}, & \text{no caso 3D.} \end{cases}$$

Outros *kernels* são empregados no método SPH, conforme proposição de alguns autores: quártico, proposto por Lucy (1977); quártico, proposto por Wendland (1995) apud *Gesteira et al.* (2010); *spline* quártico, proposto por Morris (1997); novo quártico, apresentado por Liu & Liu (2003), sendo cada um mais recomendado para o estudo de um determinado problema físico. A Figura 3 apresenta o *kernel* empregado por Lucy em seu trabalho pioneiro e o *spline* cúbico deste trabalho.

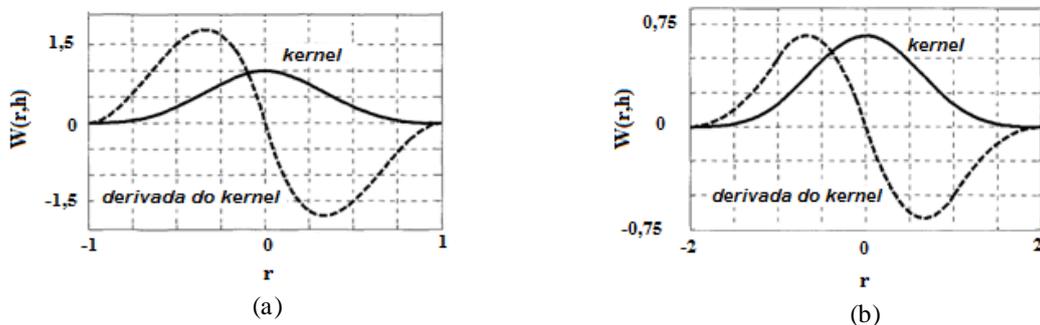


Figura 3. *Kernels* e suas derivadas de primeira ordem. (a) Empregado no trabalho pioneiro de (Lucy, 1977) e (b) *Spline* cúbico, deste trabalho. Adaptada de (Liu & Liu, 2003).

O SPH aproxima propriedades físicas (como a massa específica), gradientes (como os de pressão), divergentes (como os de velocidades) e laplacianos (como os de temperatura e de velocidades) relacionados ao fluido em escoamento, com um erro de 2ª ordem.

A equação geral para a aproximação de uma grandeza física é:

$$A(r_a) = \sum_{b=1}^n m_b \frac{A_b}{\rho_b} W(|r_a - r_b|, h) \quad (04)$$

Para o divergente a seguinte forma pode ser empregada:

$$\nabla \cdot A(r_a) = \frac{1}{\rho_a} \sum_{b=1}^n m_b (A_b - A_a) \cdot \nabla W(|r_a - r_b|, h) \quad (05)$$

Para o gradiente (forma simétrica):

$$\nabla A(r_a) = \sum_{b=1}^n m_b \left(\frac{A_a}{\rho_a^2} + \frac{A_b}{\rho_b^2} \right) \nabla W(|r_a - r_b|, h) \quad (06)$$

A expressão para o laplaciano da função pode ser obtido a partir da expansão da série de Taylor em torno da posição da partícula de referência, conforme demonstrado por (Petronetto, 2010):

$$\nabla^2 A(r_a) = 2 \sum_{b=1}^n \frac{m_b}{\rho_b} [A_a - A_b] \frac{\partial W(r, h)}{\partial r} \frac{1}{|r_a - r_b|} \quad (07)$$

onde:

∇ é operador nabla; $A(r_a)$, ou A_a , é a grandeza física que está sendo aproximada (refere-se à partícula fixa a); A_b é a grandeza física para a partícula vizinha b ; n é o número de partículas vizinhas no domínio de influência; m_b é a massa da partícula b ; W é o *kernel*; h é o raio de suporte; $|r_a - r_b|$ é a distância radial entre as partículas (a e b); ρ_b é a massa específica da partícula vizinha b ; A_b é o valor da grandeza em cada uma das partículas b , vizinhas da partícula a ; $(a, b) \in (1, \dots, n)$.

No método SPH, criado para a simulação de fluidos compressíveis, a pressão é uma função explícita da massa específica local do fluido. Em casos dinâmicos, o fluido compressível é aproximado a um fluido incompressível por meio de um fluido quase-compressível e a pressão é calculada através de uma equação de estado. Neste trabalho, foi empregada a conhecida equação de Tait, sugerida por (Batchelor, 2000):

$$P_i = B \left(\left(\frac{\rho_i}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right) \quad (08)$$

onde:

P_i é a pressão da partícula; ρ_i é a massa específica da partícula; ρ_0 é a massa específica de repouso do fluido; $\gamma = 7$; B é o termo relacionado às flutuações de massa específica do fluido, possuindo um valor para cada problema.

Uma maneira simples de se tratar os contornos fixos e planos em SPH é através da reflexão geométrica das partículas nas paredes (consideradas como planos bem definidos). As colisões das partículas, consideradas sólidas, com os planos são tratadas como total ou parcialmente elásticas, através da definição de um coeficiente de restituição da energia cinética. A Figura 4 mostra as posições inicial (C_0) e final (C_f) do centro de massa de uma partícula, após colidir sucessivamente com dois planos em uma iteração numérica (Nóbrega, 2003). O ponto C_1 corresponde à posição final que seria atingido pelo centro de massa da partícula caso não houvesse as paredes delimitando o domínio.

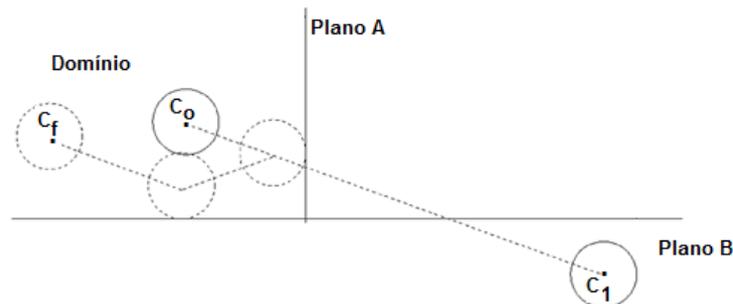


Figura 4. Colisões sofridas por uma partícula em um passo de tempo.
 Adaptada de (Nóbrega, 2003).

Uma analogia à dinâmica molecular é também empregada no tratamento dos contornos no SPH. As áreas com contornos sólidos são preenchidas com partículas congeladas (partículas fantasma ou virtuais) que evitam a penetração das partículas móveis naqueles. A utilização de uma linha de partículas virtuais localizadas sobre o contorno sólido (partículas do tipo I) é, de forma geral, a maneira mais aplicada (Monaghan, 1994). Estas partículas exercem uma força de repulsão sobre as partículas reais do fluido, evitando que essas ultrapassem o contorno sólido. Tal força é calculada através de uma analogia com a força molecular de Lennard-Jones. Partículas virtuais do tipo II (localizadas fora do contorno) também podem ser empregadas. A Figura 5 apresenta o emprego de ambos os tipos de partículas fantasma, no objetivo de simular as paredes sólidas.

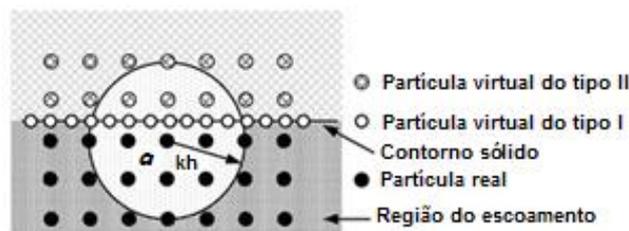


Figura 5. Ilustração esquemática da região do contorno sólido. Disposição das partículas virtuais em linha (tipo I). Além do contorno, estão as partículas virtuais do tipo II.
 Adaptada de (Liu & Liu, 2003).

Gesteira *et al.* (2010) apresentaram no manual do *SPHysics* (um código numérico aberto de livre acesso na *internet*) ainda a possibilidade de emprego de contornos dinâmicos ou repulsivos (também baseado no potencial de Lennard-Jones).

Em regiões próximas aos contornos, ocorre de as partículas de referência não possuírem um domínio de influência completo, o que vem a diminuir a precisão das interpolações efetuadas. Este fenômeno é conhecido como inconsistência das partículas. Visando a correção deste acontecimento próximo aos contornos, e a restauração da consistência, alguns autores propuseram a aplicação do Método de Partículas Suavizadas Corrigido (CSPM) (Chen *et al.*, 1999; Liu & Liu, 2010).

A Figura 6 mostra como ocorre o truncamento do domínio de influência para uma partícula fixa, próxima ao contorno.

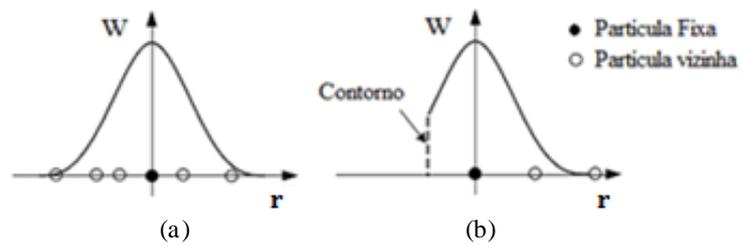


Figura 6. Truncamento do domínio de influência. Em (a) o domínio de influência está completo e em (b) a partícula fixa está próxima ao contorno e o truncamento ocorre. Adaptada de (Liu & Liu, 2010).

2.2. Aproximações SPH para as Equações de Conservação

A modelagem do escoamento de fluidos e transporte de energia é efetuada pelas equações de conservação da massa, do momento linear e da energia. A evolução do campo de massas específicas, de velocidades e de energia ao longo do tempo é definida pelas equações (09) a (11). A Tabela 1 apresenta as equações de conservação e as respectivas aproximações por SPH, para um fluido viscoso e compressível.

Tabela 1 – Equações de conservação e respectivas aproximações SPH.

Equações diferenciais de conservação (contínuo)	Aproximações SPH (domínio discretizado por partículas)
Massa: $\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v}$	$\frac{d\rho_a}{dt} = \sum_b m_b \mathbf{v}_{ab} \cdot \nabla W(\mathbf{r}_{ab} , h) \quad (09)$
Momentum: $\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{\nabla P}{\rho} + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{g} + \mathbf{f}_{ext}$	$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{v}_a}{dt} = & \sum_b m_b \left(\frac{P_a}{\rho_a^2} + \frac{P_b}{\rho_b^2} \right) \nabla W(\mathbf{r}_{ab} , h) + \\ & + 2\nu \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} \mathbf{v}_{ab} \frac{\mathbf{X}_{ab}}{ \mathbf{X}_{ab} ^2} \cdot \nabla W(\mathbf{X}_a - \mathbf{X}_b, h) + \\ & + \mathbf{g} + \mathbf{f}_{ext} \end{aligned} \quad (10)$
Energia: $\frac{de}{dt} = -P \nabla \cdot \mathbf{v} + \varepsilon_v + \nabla \cdot \mathbf{q} + q_H$	$\frac{de_a}{dt} = -P_a \sum_b m_b \mathbf{v}_{ab} \cdot \nabla W(\mathbf{r}_{ab} , h) + \varepsilon_v + \nabla \cdot \mathbf{q} + q_H \quad (11)$

onde:
 \mathbf{v} é o vetor velocidade; \mathbf{g} é a aceleração da gravidade; ν é a viscosidade cinemática do fluido; P é a pressão; \mathbf{f}_{ext} são as forças externas; t é o tempo; e é a energia específica; ε_v é o termo de dissipação de energia por unidade de volume; \mathbf{q} é o fluxo de calor por condução; q_H é o calor gerado por outras fontes por unidade de volume; $\mathbf{r}_{ab} = \mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b$; $\mathbf{X}_{ab} = \mathbf{X}_a - \mathbf{X}_b$; $\mathbf{v}_{ab} = \mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b$.

O termo $\nabla \cdot \mathbf{q}$ é modelado pela lei de Fourier.

2.3. Simulações Numéricas

Dois problemas físicos foram estudados neste trabalho: um fluido incompressível no interior de um reservatório fechado e a quebra de uma barragem.

2.3.1. Reservatório contendo um líquido incompressível em repouso

Este é um dos primeiros problemas que devem ser entendidos e solucionados pelo aluno no estudo da Hidrostática. Trata-se de um tanque preenchido por um líquido incompressível e isotérmico. O aluno deve ser capaz de entender o problema fisicamente e, a partir daí, aplicar as considerações físicas às equações de conservação.

A Figura 7 exibe a disposição inicial regular das partículas no reservatório.

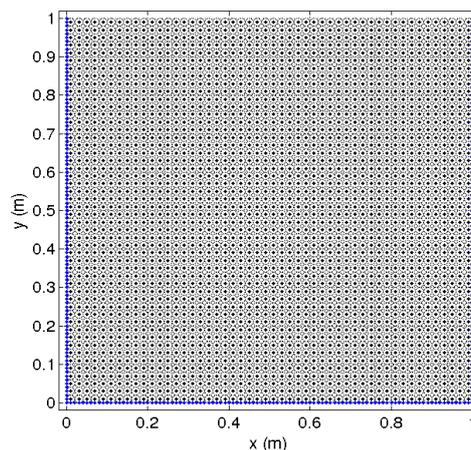


Figura 7. Reservatório preenchido por 2500 partículas no instante inicial. Estão representados os centros de massa (\cdot), bem como os volumes tangenciando-se. Os contornos em azul são planos definidos geometricamente.

A Figura 8 apresenta um fluxograma com os módulos, de um código numérico empregando o SPH, para a solução numérica do problema.

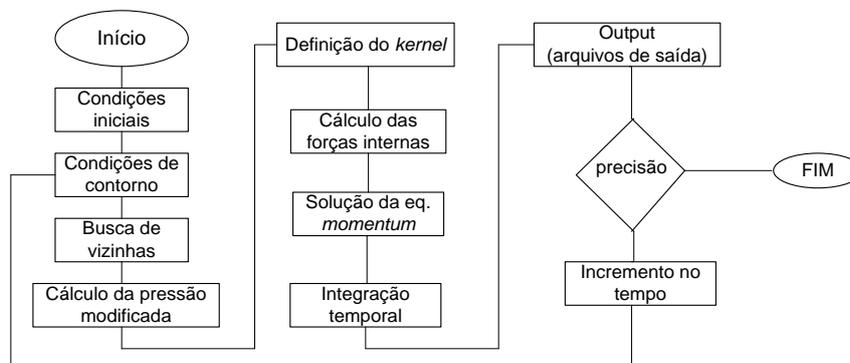


Figura 8. Fluxograma de um código numérico para o problema do reservatório.

Após 5,0 s de simulação foi verificada a coincidência das posições neste instante e as posições iniciais, conforme mostra a Figura 9 (a). Na Figura 9 (b) são apresentadas as pressões das partículas. No gráfico são visualizadas as partículas em suas respectivas posições espaciais, e suas pressões representadas pela escala de cores.

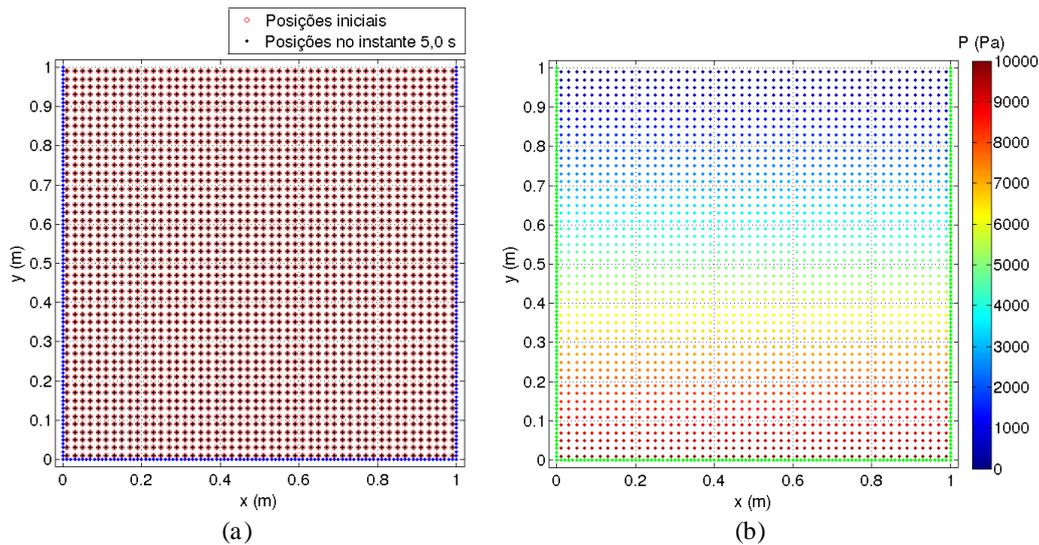
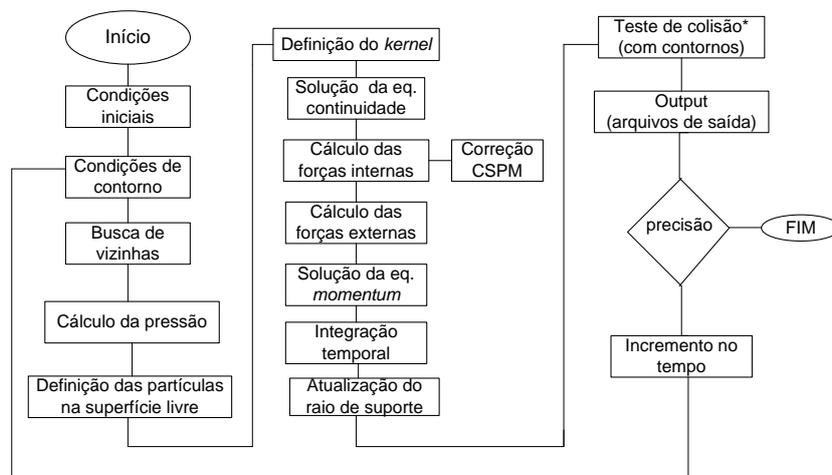


Figura 9. (a) As posições das partículas invariantes no tempo.
 (b) o campo de pressões hidrostáticas constante no tempo.

2.3.2 Quebra da barragem

Trata-se de um problema clássico da dinâmica de fluidos. Acidentes estão relacionados a sua ocorrência, sendo sua simulação de grande importância na engenharia. Na Figura 10, é apresentado um fluxograma de um código numérico empregado na solução deste problema.



*Implementada a reflexão geométrica das partículas.

Figura 10. Fluxograma do código numérico para o problema da quebra da barragem.

A Figura 11 apresenta a distribuição inicial dos centros de massa das partículas.

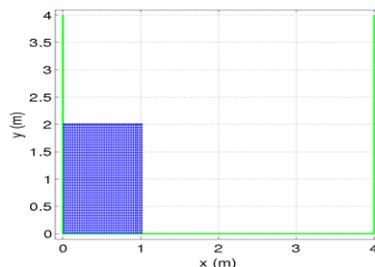


Figura 11. Distribuição inicial das partículas. A comporta está posicionada após a última coluna de partículas (à direita) impedindo a quebra.

Na Figura 12, é mostrada a evolução da quebra da barragem até o instante 1,00 s.

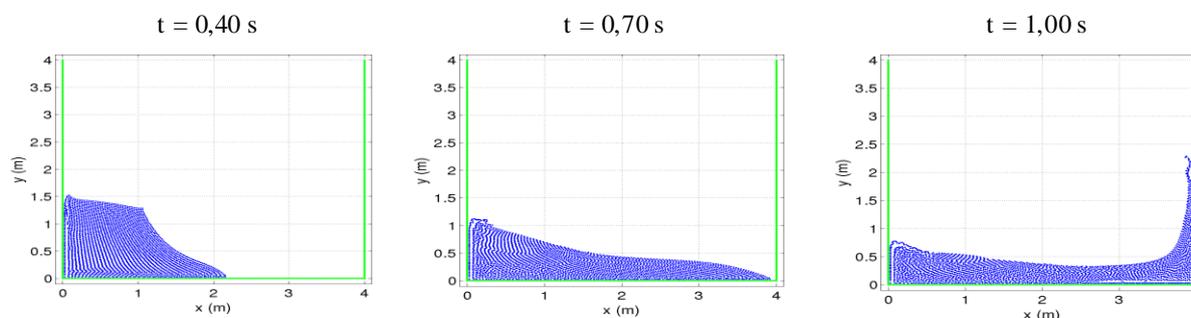


Figura 12. Evolução da quebra da barragem.

3. CONCLUSÕES

A aplicação do método lagrangiano de partículas SPH na solução de problemas de dinâmica de fluidos e transporte de energia conduz a resultados que facilitam ao aluno o entendimento físico do fenômeno estudado. A partir da análise gráfica dos resultados, o aluno é conduzido a uma visão mais familiar e que lhe permite um melhor entendimento do fenômeno (reportando-se à modelagem lagrangiana que é, na maioria dos cursos de engenharia no Brasil, posta à parte em favor do aprendizado dos métodos eulerianos). O método SPH, por ser um método que não utiliza malhas, apresenta vantagens como permitir uma solução mais simples de problemas que envolvam superfícies livres ou geometrias complexas, requerendo do aluno, no entanto, uma compreensão ampla das leis físicas que regem a dinâmica dos fluidos, para que venha ser capaz de desenvolver seu próprio código numérico ou mesmo utilizar-se de um *software* disponível, como usuário.

4. REFERÊNCIAS / CITAÇÕES

CHEN, J. K., BERAUN, J.E. & CARNEY, T. C. A Corrective Smoothed Particle Method for Boundary Value Problems in Heat Conduction. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 46: 231-252, 1999.

GESTEIRA, M. G.; ROGERS, B. D.; DALRYMPLE R. A.; CRESPO A. J. C., NARAYANASWAMY M., *User Guide for SPHysics Code*, 2010.



GINGOLD R. A.; MONAGHAN J. J. Smoothed Particle Hydrodynamics: Theory and Application to Non-spherical stars. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 181:375-38, 1977.

LIU · M. B.; G. R. LIU, Smoothed Particle Hydrodynamic, A Meshfree Particle Method. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore, 2003. 473 p, il.

LIU · M.B.; G.R. LIU. Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH): an Overview and Recent Developments. Arch. Comput. Methods Eng., 17: 25-76, 2010.

LUCY L. B. Numerical approach to testing the fission hypothesis. Astronomical Journal, 82:1013-1024, 1977.

MONAGHAN J. J. Simulating free surface flows with SPH. J. Comput. Phys., 110 (2):399-406, 1994.

MORRIS, J. P.; FOX, P. J.; ZHU, Y. Modeling Low Reynolds Number Incompressible Flows Using SPH. Journal of Computational Physics, 136: 214-226, 1997.

NOBREGA, T. H. C. UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA, Centro Tecnológico, 2007. 85 p, il. Trabalho de Conclusão de Curso de Ciências da Computação (Graduação).

PETRONETTO, F., PAIVA A., LAGE M., TAVARES G., LOPES H. & LEWINER T. Meshless Helmholtz-Hodge Decomposition. IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, 16(2): 338-349, 2010.

PROPOSITION OF A METHODOLOGY OF TEACHING COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS USING THE LAGRANGIAN SPH METHOD

Abstract: *This paper proposes a methodology for teaching and learning of computational fluid dynamics based on the application of the Lagrangian numerical meshless SPH method in the numerical simulation of fluid and energy transport as an alternative to traditional mesh Eulerian methods. Although few decades of use, the SPH has advantages of applying the numerical solution of classical problems studied in engineering courses, by allowing better visualization of the spatio-temporal evolution of the flow (and fluid properties), a lower computational cost in the study of complex geometries and the obtaining of stable numerical solutions. Results were obtained for two classical engineering problems: the dam breaking and a incompressible fluid at rest inside a reservoir. The studies showed that the Lagrangian approach, currently little used in engineering courses in Brazil, can facilitate the physical understanding of the problems studied in the fluid dynamics computational courses.*

Key-words: *Computational fluid dynamics, Lagrangian SPH method, engineering education.*