

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

SPH e redução de modelos aplicados à dinâmica dos fluidos

Guilherme Seguro¹Departamento de Ciência da Computação, Instituto de Matemática, UFRJ, Rio de Janeiro, RJ
Marcello G. Teixeira²Departamento de Ciência da Computação, Instituto de Matemática, UFRJ, Rio de Janeiro, RJ
Thomas Lewiner³

Departamento de Matemática, PUC-RJ, Rio de Janeiro, RJ

Resumo. O estudo de escoamentos em dutos de placas paralelas é fundamental em várias áreas de engenharia e simulações numéricas facilitam sua compreensão. Neste trabalho, as equações regentes dos fluidos são simuladas pelo SPH (*Smoothed Particle Hydrodynamics*), um método lagrangiano e sem malha cujo interesse tem aumentado nos últimos anos. O método é discretizado em partículas que funcionam como estrutura física e computacional, tornando-o extremamente adaptativo, uma vantagem em problemas com deformações e fronteiras livres. Devido à popularização de simulações numéricas em processos industriais, grandes quantidades de dados são requeridas, e mesmo com computadores potentes esbarra-se nas limitações de memória e processador. A Decomposição Ortogonal Própria (POD) é um Método de Redução de Modelo (MRM) que processa grandes quantidades de dados e reproduz a solução com apenas parte destes, feitas as devidas decomposições na matriz de dados. A Decomposição em Valores Singulares (SVD) é o método POD escolhido para as decomposições e o SPH é acoplado a uma linearização do POD. Verificou-se que os métodos utilizados apresentaram resultados satisfatórios ao serem utilizados simultaneamente e apresentaram fisicamente coerentes para os problemas abordados.

Palavras-chave. SPH, POD, SVD, escoamento de Poiseuille

1 Introdução

Escoamentos laminares de fluidos viscosos incompressíveis e lentos em dutos são de grande interesse por aparecerem em processos industriais e biológicos. Portanto, soluções das equações de Navier-Stokes, que descrevem o comportamento de tais fluxos, são fundamentais para um melhor entendimento do problema.

O método SPH, apresentado em [2] para fluxos de gases interestelares, teve sua aplicação estendida a outros problemas dinâmicos, com as vantagens de incorporar facilmente novos termos físicos na formulação, a simplicidade do tratamento de fronteiras móveis e deformações, além do próprio tratamento computacional.

¹guilherme.seguro@ppgi.ufrj.br

²marcellogt@dcc.ufrj.br

³lewiner@gmail.com

Os métodos numéricos são uma importante ferramenta nos estudos de CFD por realizarem grandes simulações. Entretanto, mesmo com o desenvolvimento de novos *softwares* e aumento de memórias, problemas de controle ótimo para EDP's são difíceis de tratar numericamente surgindo a necessidade de novas técnicas. Os MRMs projetam o sistema dinâmico sobre subespaços consistidos de elementos de base com características da solução esperada, em exemplo de MRM é a Decomposição Ortogonal Própria (POD) [1, 3].

Portanto, a combinação do SPH como método sem malha em problemas de CFD aliado ao POD resulta em algo sinérgico, interessante e inovador.

2 SPH

O SPH é baseado em duas ideias, a primeira é que as propriedades do material em um ponto são aproximadas pela média ponderada das propriedades ao seu redor e a segunda é que o meio contínuo é aproximado por um número finito de partículas, que se movimentam livremente sob interação mútua e ação de qualquer força externa.

2.1 Representação integral

A representação integral de uma função $f : \Omega \subset \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ bem definida e contínua em Ω é feita pela convolução de uma função suave $W(x - x', h)$ chamada função de suavização (*smoothing function*) com $f(x')$:

$$f(x) = \int_{\Omega} f(x')W(x - x', h)dx', \quad (1)$$

onde h é o raio de suavização que define a influência de W . Além de suave, W deve ser positiva, simétrica, decrescente, ter suporte compacto e integral unitária em seu domínio. Usando o teorema da divergência e a compacidade do suporte de W obtém-se a representação integral de um operador diferencial de f :

$$\nabla f(x) = - \int_{\Omega} f(x')\nabla W(x - x', h)dx'. \quad (2)$$

A representação (2) permite que o gradiente seja determinado a partir do valor da função e do gradiente de W , isto é uma característica similar às formulações fracas de métodos como o MEF.

2.2 Aproximação por partícula de uma função

No SPH o sistema é representado por um número finito de partículas com massa e volume distribuídas no domínio do problema. A equação (1) é convertida na forma discreta de somatório sobre as partículas do domínio suporte, o volume infinitesimal dx' da partícula j é substituído pelo volume $\Delta V_j = \frac{m_j}{\rho_j}$, sendo m a massa e ρ a densidade:

$$f(x_i) = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(x_j)W_{ij} \quad ; \quad W_{ij} = W(x_i - x_j, h), \quad (3)$$

onde N é o número de partículas no domínio da partícula i , ou seja, o valor de f na partícula i é aproximado pela média dos valores em todas as partículas j do domínio ponderada pela função de suavização W .

Analogamente, obteríamos o operador ∇f , entretanto este se mostra impreciso por não obedecer às propriedades de conservação do modelo contínuo. O operador simétrico (4) se mostra mais adaptado ao problema e à definição matemática.

$$\nabla f_i = \rho_i \left[\sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{f_j}{\rho_j^2} + \frac{f_i}{\rho_i^2} \right) \nabla_i W_{ij} \right] \quad ; \quad \nabla_i W_{ij} = \frac{x_i - x_j}{\|x_i - x_j\|} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} = \frac{x_{ij}}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}}. \quad (4)$$

Como $\nabla_i W_{ij}$ é tomado em relação à i , o sinal negativo em (2) desaparece. Em (3) e (4) massa e densidade são introduzidas, algo conveniente em problemas onde ρ é uma variável de interesse.

2.3 SPH aplicado à dinâmica de fluidos

Considerando-se o fluido como um meio contínuo e as variáveis de interesse diferenciáveis, as equações de governabilidade (5) e (7) tomam a forma diferencial, já que a forma integral permite a presença de descontinuidades dentro do volume de controle do fluido.

A equação de continuidade (5) diz que a massa no volume de controle do elemento de fluido permanece inalterada mesmo sob alguma deformação.

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (5)$$

Um fluido é dito incompressível quando a densidade não é afetada pela variação da pressão ($\frac{D\rho}{Dt} = 0$). Assim (5) reduz-se a $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$, que é apenas uma restrição do campo de velocidades e não uma equação evolutiva. Aproximamos então a densidade em (6) aplicando ρ_i em (3). A simulação torna-se mais lenta por ρ ser calculado antes dos demais parâmetros.

$$\rho_i = \sum_{j=1}^N m_j W_{ij}. \quad (6)$$

A equação de momento (7) determina a variação do momento de uma partícula de fluido através da soma das forças de pressão, viscosidade e gravidade encontradas no lado direito da equação.

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla \mathbf{p} + \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{g}. \quad (7)$$

Consideraremos apenas $-\frac{1}{\rho} \nabla \mathbf{p}$ e (7) fica sob a forma conhecida como a equação de Euler. O operador simétrico (4) é usado e calcula-se a pressão pela equação de estado (8) introduzida em [8]:

$$p_i = c^2(\rho_i - \rho_0), \quad (8)$$

sendo c é a velocidade do som no meio. O objetivo de introduzir a compressibilidade artificial é produzir a derivada temporal da pressão que, de acordo com [6], o valor da variação de densidade δ_ρ deve obedecer a

$$\delta_\rho = \frac{\Delta\rho}{\rho_0} = \frac{|\rho - \rho_0|}{\rho_0} = \frac{V_b^2}{c^2} = M^2, \quad (9)$$

onde V_b é a velocidade média do fluido e M o número de Mach. Como c real é muito grande e M correspondente é muito pequeno, δ_ρ é desprezível. Portanto, para aproximar um fluido real como um artificialmente compressível, um valor menor que c real deve ser utilizado, porém grande o suficiente para que comporte-se como o fluido real.

3 Simulações

A derivada temporal em (7) é tratada pelo método de Euler avançado que calcula o instante seguinte, $t + \Delta t$, a partir do instante atual t . O integrador é eficiente pois necessita de apenas dois pontos, assim (7) fica:

$$\mathbf{u}_i^{t+1} = \mathbf{u}_i^t + \Delta t \left[- \sum_{j=1}^N m_j \left[\frac{c^2(\rho_i - \rho_0)}{\rho_i^2} + \frac{c^2(\rho_j - \rho_0)}{\rho_j^2} \right] \nabla_i W_{ij} \right]. \quad (10)$$

Os esquemas explícitos de integração estão sujeitos à condição de CFL para estabilidade, que estabelece que Δt deve ser proporcional à menor resolução espacial da partícula, dada por κh no SPH. A avaliação do domínio é relacionada às propriedades do material, caracterizado por c . Em termos matemáticos:

$$\Delta t < \frac{\kappa h}{c}. \quad (11)$$

A técnica do XSPH foi criada para dar um movimento mais suave às partículas próximas, ou seja, velocidades quase idênticas para uma porção do fluido. Em [6], a velocidade é corrigida pela média das velocidades vizinhas ponderada por uma constante $\varepsilon \in [0, 1]$ da seguinte forma:

$$\mathbf{u}_i \leftarrow \mathbf{u}_i + \varepsilon \sum_{j=1}^N \frac{2m_j}{\rho_i + \rho_j} (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) W_{ij}. \quad (12)$$

3.1 Resultados

O fluido foi distribuído em 20 colunas de 40 partículas, como em [4], num tubo 1×2.5 . Para todas as partículas tem-se $m = 1000$, $\rho_0 = 1000$ e velocidade horizontal $u = 1$, com exceção das partículas da borda onde $u = 0$, tais condições de contorno configuram um escoamento de Poiseuille [5]. O raio da partícula é dado para que caibam verticalmente no tubo ($R = 0.0125$) e $h = 2.5R$. O tempo inicial é $t_0 = 0$, o passo $\Delta t = 10^{-4}$ e $N_{passos} = 1000$. A função W é a função *B-spline* proposta em [7].

A ausência de termos dissipativos em (10) causa instabilidades numéricas [5] e os *batch tests* iniciais foram feitos para o ajuste de $\varepsilon = 0.3$ e $c = 1.45$, em um escoamento tranquilo. Devido a ausência do tratamento de fronteira no tubo, o XSPH funciona como uma viscosidade artificial. Vale ressaltar que as grandezas envolvidas não estão no SI.

A evolução temporal de velocidades da coluna central do fluido é dado na figura 1 enquanto seu perfil final é dado na figura 2. O perfil parabólico do escoamento de Poiseuille é obtido rapidamente, devido às condições de contorno e à simetria da pressão no escoamento. O decréscimo de velocidade se deve à suavização excessiva do XSPH. O tratamento de fluido quase-incompressível mostra-se bem reproduzido já que $92,32\% < \Delta\rho < 104,95\%$ que por (9) leva $0.2225 < M < 0.2771$, abaixo de 0.3 para um fluxo incompressível.

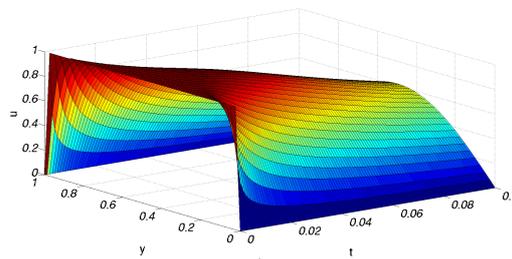


Figura 1: Superfície de velocidades

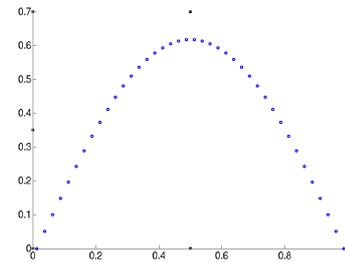


Figura 2: Perfil final da coluna central

3.2 Reprodução SPH via POD

Reproduziu-se o escoamento obtido usando a aproximação de posto reduzido do método POD [1]. As velocidades horizontais da coluna central foram armazenadas em uma matriz $A_{40 \times 1001}$. Em seguida, a Decomposição em Valores Singulares é feita sobre $A = U\Sigma V^H$. O posto de Σ é 37 e seus valores singulares decrescem rapidamente, $\sigma_1 \approx 41.25$ e σ_6 já na ordem de 10^{-2} . A tabela 1 relaciona a ordem da diferença das velocidades obtidas via SPH com as aproximações de posto reduzido de acordo com o número de valores singulares utilizados. Para posto 6 a diferença já se encontra na ordem de 10^{-3} .

Tabela 1: Ordem da diferença da aproximação em função do número de valores singulares utilizado

Ordem	10^{-1}	10^{-2}	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-8}
Posto	1	4	6	8	9	12	14	17

3.3 POD como extrapolação para os resultados SPH

Como resultado posterior, extrapolou-se os resultados obtidos com SPH-POD, usando as k primeiras colunas de A para reproduzir o escoamento. Fazemos uma linearização da redução de modelo, para obter o vetor de velocidades u_{j+1} ao longo do canal a partir

apenas do seu precedente u_j , algo semelhante ao método de Euler. Define-se então o operador T em (13) e obtém-se um método POD linearizado:

$$T = U\Sigma V^H DV\hat{\Sigma}U^H, \tag{13}$$

onde D é uma matriz nula com exceção dos elementos unitários abaixo da diagonal principal, isto é, $d_{i,i-1} = 1, i = 2, \dots, M$ e $\hat{\Sigma}$ atua como uma "matriz inversa" de Σ e será definida de acordo com a tolerância tol estabelecida para os valores singulares de Σ .

A tabela 2 apresenta o número de valores singulares utilizados de acordo com tol para a inversão dos valores singulares de $\hat{\Sigma}$:

Tabela 2: Número de valores singulares de acordo com a tolerância.

tol	10^{-1}	10^{-2}	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-8}
Número	6	8	9	12	14	16	17	20

A figura 3 compara os perfis de velocidade e a solução gerada em 1. A simulação SPH inicial passa entre os picos de oscilações da aproximação extrapolada, o que torna a linearização do POD com D e T um método coerente de resolução. A perda de eficiência da linearização se deve ao tamanho da matriz de dados decomposta e do tratamento da posição de cada partícula a cada passo da simulação. As extrapolações "explodem" com $tol = 10^{-8}$ e as diferenças até a metade do desenvolvimento se encontram na ordem de 10^{-1} para todas as tolerâncias observadas.

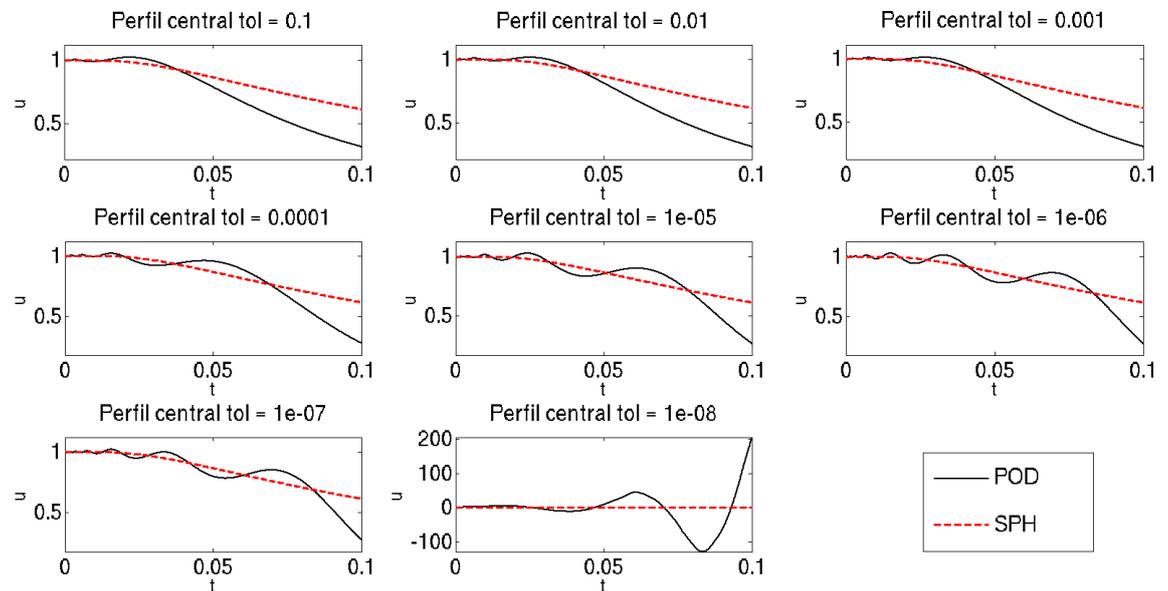


Figura 3: Comparação: velocidades SPH x velocidades extrapoladas com POD

4 Conclusões

Devido à complexidade do tratamento do método POD para equações lagrangianas, decidiu-se linearizá-lo antes de acoplá-lo ao SPH para verificar se os resultados mostrariam-se eficientes e coerentes com os resultados reais e ao final pode-se dizer que sim. Mesmo linearizado e extrapolado o POD obteve resultados coerentes para as simulações com SPH. Tal linearização cria uma oscilação crescente na solução, típica do integrador de Euler semelhante à linearização considerada. Entretanto, os valores intermediários dessas oscilações encontram-se próximos aos obtidas com o SPH. Por conta da linearização, esperava-se menos precisão do POD, embora sua acurácia não fosse tão afetada pois o tratamento da equação de momento é delicado devido aos termos não-lineares.

A contribuição deste trabalho é acoplamento SPH-POD com bons resultados para a reprodução e resultados satisfatórios para a extrapolação. Tal junção não tinha sido encontrada na literatura até então. Além disso, foram apresentados *batch tests* para o ajuste de parâmetros do SPH que contribuem para trabalhos que sigam nessa abordagem.

Referências

- [1] A. Chatterjee, An introduction to Proper Orthogonal Decomposition *Current Science* 78(7): 808-817, 2000.
- [2] R. A. Gingold and J. Monaghan, Smoothed Particle Hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 181: 375-389, 1977.
- [3] Y. C. Liang. Proper Orthogonal Decomposition and its applications - Part I, *Journal of Sound and Vibration*, 252(3): 527-544, 2002.
- [4] G. R. Liu and M. Liu. *Smoothed Particle Hydrodynamics, a meshfree particle method.* World Scientific Publishing, Singapore, 2003.
- [5] L. Lobovsky and J. Vimmir. Smoothed Partiple Hydrodynamics and finite volume modelling of incompressible fluid flow, *Mathematics and Computers in Simulation*, 76: 124-131, 2007.
- [6] J. J. Monaghan. Simulating free surface flows with SPH, *Journal of Computational Physics*, 110:399-406, 1994.
- [7] J. J. Monaghan and J. C. Lattanzio. A refined particle method for astrophysical problems, *Astron. Astrophys*, 149:135-143, 1985.
- [8] J. P. Morris, P. J. Fox and Y. Zhu. Modeling Low Reynolds Number Incompressible Flows Using SPH, *Journal of Computational Physics*, 136: 214-226, 1997.