

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA AMBIENTAL

ESTUDO DA FASE GRAVITACIONAL-INERCIAL DO
ESPALHAMENTO DE ÓLEO EM MAR CALMO
EMPREGANDO O MÉTODO LAGRANGIANO DE
PARTÍCULAS *SMOOTHED PARTICLE*
HYDRODYNAMICS

CARLOS ALBERTO DUTRA FRAGA FILHO
VITÓRIA, DEZEMBRO DE 2014.

CARLOS ALBERTO DUTRA FRAGA FILHO

ESTUDO DA FASE GRAVITACIONAL-INERCIAL DO
ESPALHAMENTO DE ÓLEO EM MAR CALMO
EMPREGANDO O MÉTODO LAGRANGIANO DE
PARTÍCULAS *SMOOTHED PARTICLE*
HYDRODYNAMICS

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Ambiental da Universidade Federal do Espírito Santo como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Ambiental.

ORIENTAÇÃO : PROF. DR. JULIO TOMÁS AQUIJE CHACALTANA

VITÓRIA, DEZEMBRO DE 2014.

Dados Internacionais de Catalogação-na-publicação (CIP)
(Biblioteca Setorial Tecnológica,
Universidade Federal do Espírito Santo, ES, Brasil)

F811e Fraga Filho, Carlos Alberto Dutra, 1974-
Estudo da fase gravitacional-inercial do espalhamento de
óleo em mar calmo empregando o método lagrangiano de
partículas *Smoothed Particle Hydrodynamics* / Carlos Alberto
Dutra Fraga Filho. – 2014.
163 f. : il.

Orientador: Julio Tomás Aquije Chacaltana.
Tese (Doutorado em Engenharia Ambiental) – Universidade
Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico.

1. Partículas. 2. SPH. 3. Espalhamento de óleo. 4. Pressão
modificada. 5. Restituição de energia cinética. I. Chacaltana, Julio
Tomás Aquije. II. Universidade Federal do Espírito Santo. Centro
Tecnológico. III. Título.

CDU: 628



UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO TECNOLÓGICO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL

“Estudo da Fase Gravitacional-Inercial do Espalhamento de Óleo em Mar Calmo Empregando o Método Lagrangiano de Partículas *Smoothed Particle Hydrodynamics*”

CARLOS ALBERTO DUTRA FRAGA FILHO

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Antônio Sérgio Ferreira Mendonça
Examinador Interno - DEA/CT/UFES

Prof. Dr. Daniel Rigo
Examinador Interno – DEA/CT/UFES

Prof. Dr. Geraldo de Freitas Maçiel
Examinador Externo – UNESP

Prof. Dr. Rigoberto Eleazar M. Morales
Examinador Externo – UTFPR

Coordenador do PPGEA: Prof. Dr. Edmilson Costa Teixeira
UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
Vitória, ES, 15 de dezembro de 2014.

À minha família.

Agradecimentos

Ao Professor Dr. Julio Tomás Aquije Chacaltana pela paciente orientação.

Aos Professores Drs. Regina de Pinho Keller e Edmilson Costa Teixeira pela atenção concedida a todas as etapas da pesquisa, enquanto Coordenadores do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental.

Aos Professores Drs. Jane Meri Santos e Gustavo Cesar Rachid Bodstein pelas considerações apresentadas no exame de qualificação, que contribuíram para a fase subsequente do trabalho de pesquisa.

Ao Professor Dr. Maxsuel Marcos Rocha Pereira pelo apoio sempre presente e pela colaboração na revisão dos resultados finais.

Ao Professor Dr. Fabiano Petronetto pelo diálogo e interesse no sucesso da pesquisa.

Ao Professor Dr. Benedict Rogers pela disponibilidade em atender-me, apresentando o atual estado das pesquisas empregando o método SPH na Universidade de Manchester.

Aos Professores Drs. Geraldo de Freitas Maciel, Rigoberto Eleazar Melgarejo Morales, Daniel Rigo e Antônio Sérgio Ferreira Mendonça pela aceitação em participação na banca examinadora e colaborações finais no trabalho.

À servidora Rose Leão, Secretária Administrativa do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental da UFES, por sempre atender aos alunos e dar andamento aos pedidos, indispensáveis ao prosseguimento dos estudos.

Aos alunos de graduação e pós-graduação dos cursos de Oceanografia, Matemática e En-

genharia Ambiental da Universidade Federal do Espírito Santo ao demonstrarem interesse pelo trabalho.

À Fundação de Amparo à Pesquisa e Inovação do Espírito Santo (FAPES) pelo suporte financeiro.

A Deus que me concedeu forças, saúde, determinação e espírito de perseverança para prosseguir até o final.

”Porque Deus amou o mundo de tal
maneira que deu o Seu Filho unigênito,
para todo aquele que nEle crê não
pereça mas tenha a vida eterna”.

Jesus Cristo

Resumo

O derramamento do óleo no mar tem-se apresentado como um grave problema ambiental. Pode ocorrer durante as várias etapas de perfuração de poços, operações de reparo ou durante o transporte. O espalhamento do óleo se deve à tendência que o poluente tem de escoar sobre si mesmo. O conhecimento de suas propriedades físicas durante o espalhamento, como velocidades e posições, permite a adoção de medidas de proteção ambiental. A modelagem deste processo físico - realizado por um balanço entre as forças gravitacional, inercial, viscosa e de tensão interfacial - remonta aos meados do século XX, com o ajuste de curvas, por Fay, aos resultados de experimentos realizados em condição de mar calmo. Estas curvas, definidas para condições teóricas idealizadas, continuam sendo utilizadas, com algumas modificações. Esta Tese de Doutorado apresenta o desenvolvimento e a implementação de um modelo puramente lagrangiano de partículas sem malhas, a partir dos fundamentos do método *Smoothed Particle Hydrodynamics* (SPH) para o estudo do espalhamento do óleo. A modelagem das colisões das partículas contra os contornos foi implementada, com a definição de um coeficiente de restituição de energia cinética. O modelo foi validado utilizando-se resultados para problemas clássicos da literatura: difusão de calor em uma placa plana, reservatório em repouso contendo um fluido incompressível e ruptura da barragem. Após a validação do modelo, realizou-se simulação numérica do espalhamento, em condições de mar calmo, em sua primeira fase (gravitacional-inercial). Houve concordância entre os resultados numéricos obtidos quando empregado um adequado coeficiente de restituição de energia cinética e os fornecidos pela curva ajustada proposta por Fay para o diâmetro da mancha ao final da fase estudada.

Abstract

Oil spill on the sea is considered a serious environmental problem. It can occur during oil well drilling, repair and transport operations. The spreading of oil is due to the tendency of the pollutant to flow over itself. Knowledge of oil physical properties during the spreading, like velocities and positions allows the adoption of environmental protection actions. The modelling of the physical process, due to a balance between gravitational, inertial, viscous and interfacial tension forces, started during the mid-twentieth century, when Fay adjusted curves to experimental data, considering a calm sea condition. These adjusted curves, defined for idealized theoretical conditions are still used, with some modifications. This Thesis presents the development and implementation of a purely Lagrangian meshless model, considering the fundamentals of the Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) method for the study of the spreading of oil. A model for the collisions between the particles and boundary was implemented, with the definition of a coefficient of restitution of kinetic energy. The model was validated by using results, from the literature, for classical problems: heat diffusion on a flat plate, static tank containing an incompressible fluid and dam breaking. After model validation, it was performed the numerical simulation of the spreading of oil on calm sea conditions, in its first phase (gravitational-inertial). There was agreement between the numerical results obtained with the use of an appropriate coefficient of restitution of kinetic energy and those provided by the adjusted curve proposed by Fay, for the diameter of the oil slick at the end of the studied phase.

Lista de Figuras

| | | |
|-----|---|----|
| 1.1 | Principais processos físico-químicos e biológicos que ocorrem a uma mancha de óleo no mar. Adaptado de ITOPF - <i>International Tanker Owners Federation</i> , [1]. | 27 |
| 2.1 | Fases do espalhamento em mar calmo, segundo Fay, para um vazamento de 10.000 toneladas de óleo. Adaptada de [13]. | 38 |
| 2.2 | Ponto material movendo-se no espaço transportando propriedades físicas (abordagem lagrangiana). | 43 |
| 4.1 | O <i>kernel</i> e seu domínio de influência. No gráfico, visualizam-se algumas propriedades (positividade, simetria, suporte compacto, convergência, decaimento e suavidade). Uma partícula fixa ' <i>i</i> ' e uma de suas vizinhas ' <i>j</i> ' são apresentadas. | 62 |
| 4.2 | Busca das partículas vizinhas. (a) De forma direta. (b) Com o emprego de uma grade. Adaptada de [9]. | 71 |
| 4.3 | Célula com 21 partículas no interior do domínio de influência. | 72 |
| 4.4 | Colisões sofridas por uma partícula em um passo de tempo. Adaptada de [50]. | 73 |
| 4.5 | 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 [4]. | 74 |
| 4.6 | Emprego das partículas virtuais na simulação da ruptura da barragem. Adaptada de [51]. | 75 |

| | | |
|------|---|-----|
| 4.7 | Implementação da condição de contorno de Neumann para as pressões nas partículas virtuais (problema da ruptura da barragem). Pressões no instante inicial e (b) 0,23 s após abertura da comporta. | 76 |
| 4.8 | Interação entre partículas fixas no contorno (círculos pretos) e uma partícula de fluido (círculo sem preenchimento). As partículas de contorno estão dispostas de uma maneira escalonada. Extraída de Gomez-Gesteira <i>et al.</i> (2010), [52]. | 77 |
| 4.9 | Condições de contornos dinâmicas. Aumento da massa específica e da pressão de uma partícula de contorno, com a diminuição da distância em relação a uma partícula de fluido. Adaptada de [52]. | 78 |
| 4.10 | Escoamento de lava sem e com a aplicação do XSPH, respectivamente. Sem o XSPH, a simulação explode. No outro caso, adquire um caráter estável. Extraída de Paiva (2007), [58]. | 82 |
| 4.11 | Instabilidade de tensão. Em (a) as partículas se aglomeram em forma de fileiras. Em (b) as partículas estão em uma distribuição razoavelmente uniforme, após a correção daquela. Extraída de [59]. | 82 |
| 4.12 | Domínio de influência para um caso unidimensional. (a) Completo e (b) incompleto. Em (b), a partícula é fixada perto do contorno e o truncamento do <i>kernel</i> ocorre. Adaptada de [4]. | 86 |
| 5.1 | Dimensões da placa plana homogênea. | 95 |
| 5.2 | Distribuição inicial de 50x50 partículas para as simulações SPH. | 98 |
| 5.3 | Maiores diferenças entre as temperaturas SPH e VFM em comparação com a solução analítica. | 99 |
| 5.4 | Efeito do aumento do número de partículas (as diferenças de temperaturas são reduzidas na maior parte do domínio). Resultados obtidos utilizando o <i>kernel spline</i> quíntico com (a) 2500, (b) 4900 e (c) 8100 partículas. | 102 |
| 5.5 | Distribuição inicial das partículas de fluido (vermelhas) e das partículas virtuais (azuis), as últimas em uma região expandida do domínio. | 107 |

| | | |
|------|--|-----|
| 5.6 | Coincidência das posições das partículas no instante inicial (circunferências em vermelho) e no instante 5,00 s (pontos pretos). As linhas azuis representam as paredes do reservatório. | 108 |
| 5.7 | Geometria do domínio computacional e discretização do fluido por partículas (disposição antes da abertura da comporta). | 110 |
| 5.8 | Deslocamento horizontal das frentes de onda. As imagens se referem às simulações do <i>SPHysics</i> (superior) e à deste trabalho. | 113 |
| 5.9 | Alturas atingidas pela onda no instante 0,80 s, segundo as simulações do <i>SPHysics</i> e inicial deste trabalho, respectivamente. | 114 |
| 5.10 | Desprendimento de partículas na primeira simulação desta pesquisa, no instante 1,70 s. | 115 |
| 5.11 | Deslocamento da onda no instante 0,40 s, para as simulações <i>SPHysics</i> e deste trabalho (com a implementação da viscosidade artificial), respectivamente. | 116 |
| 5.12 | Alturas atingidas pela onda no instante 0,80 s. Simulações <i>SPHysics</i> , na parte superior, e deste trabalho (com a implementação da viscosidade artificial). | 117 |
| 5.13 | Ruptura da barragem. Resultados do <i>SPHysics</i> e deste trabalho (sem e com a implementação da viscosidade artificial), nas 1 ^a , 2 ^a e 3 ^a linhas, respectivamente. | 118 |
| 5.14 | Evolução da superfície livre. Ajuste de curvas às posições dos centros de massa das partículas que definiam a superfície livre (até o instante de choque contra a parede direita do reservatório). | 120 |
| 5.15 | Áreas sob a superfície livre até o choque do fluido contra a parede do tanque. | 121 |
| 5.16 | Configuração das partículas no instante 6,00 s. Na primeira linha, a disposição das partículas. Na segunda linha, a identificação das partículas da superfície livre. | 122 |
| 5.17 | Dispositivo utilizado nos experimentos da ruptura da barragem. Adaptada de [63]. | 123 |
| 5.18 | Geometrias dos domínios computacionais e disposições iniciais das partículas. | 124 |

| | | |
|------|---|-----|
| 5.19 | Resultados experimentais e numéricos para a primeira geometria simulada, com a implementação da viscosidade artificial ($\alpha_\pi = 0,20$). | 126 |
| 5.20 | Resultados experimentais e numéricos para a primeira geometria simulada, com a implementação da viscosidade artificial ($\alpha_\pi = 0,30$). | 127 |
| 5.21 | Resultados experimentais e numéricos para a segunda geometria simulada, com a implementação da viscosidade artificial ($\alpha_\pi = 0,20$). | 128 |
| 5.22 | Resultados experimentais e numéricos para a segunda geometria simulada, com a implementação da viscosidade artificial ($\alpha_\pi = 0,30$). | 129 |
| 6.1 | Condição inicial para o volume de óleo nas visões em perspectiva e superior. | 134 |
| 6.2 | Secção meridional estudada (instante inicial). | 135 |
| 6.3 | Evolução da secção meridiana de óleo na 1ª fase do espalhamento. | 136 |
| 6.4 | Visão superior da evolução da mancha de óleo. | 138 |
| 6.5 | Diâmetros da mancha para diferentes coeficientes de restituição. | 141 |
| 6.6 | Diferenças entre os diâmetros da mancha (ΔD). | 142 |
| | Derivadas do <i>kernel</i> nas direções cartesianas. | 158 |
| | Fluxograma do código computacional implementado (SPH). | 163 |

Sumário

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Introdução | 26 |
| 1.1 | Objetivos | 31 |
| 1.2 | Estrutura da Tese | 31 |
| 2 | Revisão Bibliográfica | 33 |
| 2.1 | Modelagem Euleriana | 35 |
| 2.1.1 | Modelo de Blokker | 36 |
| 2.2 | Modelagem Empírica | 37 |
| 2.2.1 | Modelo de Fay | 37 |
| 2.2.2 | Revisão do Modelo de Fay | 41 |
| 2.3 | Modelos Híbridos | 42 |
| 2.4 | Modelos Puramente Lagrangianos | 44 |
| 2.4.1 | <i>Smoothed Particle Hydrodynamics</i> | 45 |
| 3 | Modelagem Matemática | 54 |
| 3.1 | Modelagem da Pressão | 56 |
| 3.1.1 | Equação de Estado | 56 |
| 3.1.2 | Pressão Modificada | 57 |
| 3.2 | Modelagem da Energia Interna Específica | 58 |
| 3.3 | Condições iniciais e de contorno | 58 |
| 4 | Modelagem SPH para as Equações de Conservação | 60 |
| 4.1 | Fundamentos do Método SPH | 60 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 4.1.1 | Aproximações para o Divergente de uma Função | 63 |
| 4.1.2 | Aproximações para o Gradiente de uma Função | 65 |
| 4.1.3 | Aproximação para o Laplaciano de uma Função | 67 |
| 4.1.4 | Aproximações SPH para as Equações de Conservação | 67 |
| 4.1.5 | Erro nas Aproximações SPH | 69 |
| 4.1.6 | Funções de Suavização | 69 |
| 4.1.7 | Busca de Partículas Vizinhas | 71 |
| 4.1.8 | Comprimento do Raio de Suporte | 71 |
| 4.1.9 | Tratamento dos Contornos | 73 |
| 4.1.10 | Viscosidade artificial | 79 |
| 4.1.11 | XSPH | 81 |
| 4.1.12 | Instabilidade de Tensão | 82 |
| 4.1.13 | Integração Temporal | 84 |
| 4.1.14 | Consistência do Método SPH | 85 |
| 4.1.15 | Filtro de Shepard | 90 |
| 4.1.16 | Correção do Gradiente de Pressão | 90 |
| 5 | Validação do Modelo Numérico | 92 |
| 5.1 | Introdução | 92 |
| 5.2 | Difusão de Calor | 93 |
| 5.2.1 | Simulações Numéricas | 96 |
| 5.3 | Reservatório estático preenchido com fluido incompressível | 105 |
| 5.3.1 | Simulações Numéricas | 105 |
| 5.4 | Ruptura da Barragem | 109 |
| 5.4.1 | Validação a partir do <i>SPHysics</i> | 110 |
| 5.4.2 | Validação Experimental | 123 |
| 6 | Estudo Numérico Puramente Lagrangiano para o Espalhamento do Óleo | 132 |
| 6.1 | Introdução | 132 |
| 6.2 | Geometria Computacional, Condições Iniciais e de Contorno | 133 |

| | |
|---|------------|
| 6.3 Resultados e Discussão | 140 |
| 7 Conclusões | 146 |
| 8 Considerações Finais e Sugestões | 148 |
| Referências Bibliográficas | 149 |
| Apêndices | 156 |
| Apêndice A - Obtenção da Aproximação para o Laplaciano (SPH) | 156 |
| Apêndice B - Código Computacional | 161 |

Lista de Tabelas

| | | |
|-----|---|-----|
| 2.1 | Diâmetros da mancha nas sucessivas fases do espalhamento (segundo Fay). | 40 |
| 4.1 | Alguns <i>Kernels</i> Aplicados no Método SPH | 70 |
| 5.1 | Configurações Iniciais de Partículas e Distâncias entre os Centros de Massa | 97 |
| 5.2 | Maiores Diferenças entre as Temperaturas Analíticas e SPH | 101 |
| 5.3 | Posições das Partículas onde Ocorreram as Maiores Diferenças entre as Temperaturas Analíticas e SPH | 101 |
| 5.4 | Tempo de Uso de CPU nas Simulações SPH | 104 |
| 5.5 | Diferenças Percentuais entre as Abcissas das Frentes de Onda (Resultados Experimentais e Numéricos) para a Primeira Geometria. | 130 |
| 5.6 | Diferenças Percentuais entre as Abcissas das Frentes de Onda (Resultados Experimentais e Numéricos) para a Segunda Geometria. | 130 |
| 6.1 | Diâmetros da Mancha ao Final da Fase Gravitacional-Inercial | 140 |
| 6.2 | Tempos de uso da CPU para diferentes coeficientes de restituição de energia cinética | 145 |

Nomenclatura

Variáveis e Termos com Letras Gregas

| | | |
|-------------------------------------|---|-------------|
| $\langle \nabla \cdot f(X) \rangle$ | aproximação para o divergente da função na posição X | |
| $\langle \nabla f(X) \rangle$ | aproximação para o gradiente da função na posição X | |
| $\delta(X - X')$ | função delta de Dirac avaliada na posição $(X - X')$ | |
| Δp | espaçamento médio entre as partículas vizinhas da partícula fixa | m |
| ΔT | maior diferença entre as temperaturas obtidas de forma analítica e pelo SPH | $^{\circ}C$ |
| Δt | passo de tempo | s |
| Δx | comprimento do lado do volume de controle na direção x | m |
| Δy | comprimento do lado do volume de controle na direção y | m |
| Δf_i | laplaciano da função na posição da partícula fixa | |
| ΔV_j | volume de cada partícula lagrangiana | m^3 |
| η | parâmetro utilizado na correção XSPH | |
| Γ | fronteira | |
| λ | parâmetro empregado no cálculo da pressão artificial | |
| $(\rho_i)_{filtrada}$ | massa específica da partícula fixa após a aplicação do Filtro de Shepard | kg/m^3 |

| | | |
|-----------------------------|--|--------------------------|
| $\mu \nabla^2 \vec{v}$ | forças viscosas, por unidade de volume | N/m^3 |
| μ | viscosidade dinâmica | $\text{Pa}\cdot\text{s}$ |
| $\nabla \cdot (K \nabla T)$ | taxa de calor gerado devido à difusão, por unidade de volume | W/m^3 |
| ∇P | força devida à pressão, por unidade de volume | N/m^3 |
| ∇ | operador matemático vetorial diferencial nabla | m^{-1} |
| Ω | domínio | |
| ϕ_b | fluxo difusivo de óleo para fora da base da mancha | kg/sm^2 |
| ϕ_s | fluxo difusivo de óleo para fora da superfície da mancha | kg/sm^2 |
| $\Psi(X_\Gamma)$ | propriedade física na posição X_Γ | |
| ρ' | massa específica do elemento infinitesimal de volume | kg/m^3 |
| $\rho \vec{g}$ | força devido à gravidade, por unidade de volume | N/m^3 |
| ρ_i | massa específica da partícula fixa | kg/m^3 |
| ρ | massa específica | kg/m^3 |
| ρ_o | massa específica de repouso do fluido | kg/m^3 |
| ρ_j | massa específica da partícula vizinha | kg |
| ρ_{oleo} | massa específica do óleo | kg/m^3 |
| ρ_w | massa específica da água | m^3/s |
| σ_{aw} | tensão na superfície ar-água | N/m^2 |
| σ_{oa} | tensão na superfície óleo-ar | N/m^2 |
| σ_{ow} | tensão na superfície óleo-água | N/m^2 |
| τ_{br} | tensão cisalhante na base da mancha de óleo, na direção radial | N/m^2 |

| | | |
|---|---|-----------------------|
| ν_i | viscosidade cinemática da partícula fixa | m^2/s |
| ν_w | viscosidade cinemática da água | m^2/s |
| φ^2 | fator utilizado no cálculo da viscosidade artificial para prevenir divergências numéricas quando há aproximação entre 2 partículas | m^2 |
| $P(\nabla \cdot \vec{v})$ | taxa de trabalho devido às forças de pressão, por unidade de volume | W/m^3 |
| α | difusividade térmica | m^2/s |
| $\delta_{l,t}$ | delta de Kronecker | |
| Δx_p | diferença percentual entre as abcissas das frentes de onda, obtidas experimentalmente e pelo SPH | |
| $\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x}\right)_i^*$ | componente do gradiente do <i>kernel</i> da partícula fixa, corrigida pelo método CSPM, por unidade de massa específica, na direção x | m/s^2 |
| $\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y}\right)_i^*$ | componente do gradiente do <i>kernel</i> da partícula fixa, corrigida pelo método CSPM, por unidade de massa específica, na direção y | m/s^2 |
| ∇P_{mod} | força devido à pressão modificada, por unidade de volume | N/m^3 |
| ε_v | taxa de dissipação de energia, por unidade de volume | W/m^3 |
| m_j | massa da partícula vizinha | kg |
| α_π | coeficiente empregado no cálculo da viscosidade artificial | |
| β_π | coeficiente empregado no cálculo da viscosidade artificial | |
| $\nabla \cdot f_i$ | divergente da função na partícula fixa | |
| ∇f_i | gradiente da função na partícula fixa | |
| α_i | difusividade térmica da partícula fixa | m^2/s |

π_{ij} viscosidade artificial $\text{m}^5/\text{s}^2\text{kg}$

Variáveis e Termos com Letras Romanas

c_v calor específico a volume constante J/kgK

$\langle f(X) \rangle$ aproximação obtida para a função f na posição X

ΔT_p maior diferença percentual entre as temperaturas, obtidas analiticamente e pelo SPH $^{\circ}\text{C}$

\vec{g} aceleração da gravidade m/s^2

\vec{v} velocidade m/s

V volume do óleo derramado m^3

h_o altura inicial do óleo m

h espessura local da mancha de óleo m

r direção radial m

U magnitude da velocidade radial do óleo kg/m^3

v_p magnitude da velocidade da partícula antes da colisão m/s

\vec{n} vetor unitário normal à superfície

B termo relacionado às flutuações das massas específicas do fluido Pa

c magnitude da velocidade de propagação do som no fluido m/s

c_i velocidade do som na partícula i m

c_j velocidade do som na partícula j m

C_{te} valor conhecido no contorno

CR coeficiente de restituição da energia cinética

| | | |
|---------------|---|---------|
| $d\vec{S}$ | é o elemento infinitesimal de superfície | m^2 |
| dX' | elemento infinitesimal de área | m^2 |
| e | energia interna específica | J/kg |
| e_i | energia interna específica da partícula i | J/kg |
| $f'(X)$ | derivada da função, definida na posição X | |
| $f(X')$ | função avaliada na posição do ponto variável | |
| $f(X)$ | função avaliada na posição do ponto fixo | |
| f_i | valor aproximado da função na posição da partícula i | |
| f_j | valor aproximado da função na posição da partícula vizinha | |
| f_n | força de tensão superficial resultante, por unidade de comprimento, atuando no contorno lateral da mancha | N/m |
| g | magnitude da aceleração da gravidade | m/s^2 |
| $G(X_\Gamma)$ | função na posição X_Γ | |
| H | altura do fluido no reservatório | m |
| h | raio de suporte | m |
| h_i | raio de suporte da partícula i | m |
| h_j | raio de suporte da partícula j | m |
| I | representa o centro do volume de controle | |
| i | partícula fixa ou de referência | |
| J | representa o centro do volume de controle adjacente ao de centro I | |
| j | partícula vizinha | |

| | | |
|------------------|--|----------------|
| K | condutibilidade térmica | W/mK |
| k | fator de escala depende do <i>kernel</i> empregado | |
| m | iteração atual | |
| m' | massa do elemento infinitesimal de volume | kg |
| $m + 1$ | iteração para o tempo avançado | |
| M_N | momento do <i>kernel</i> de ordem N | |
| Ma | número de Mach | |
| n | número de partículas vizinhas | |
| n_d | número de dimensões do problema | |
| P | pressão absoluta | Pa |
| P_0 | pressão de referência | Pa |
| P_i | pressão da partícula i | Pa |
| P_j | pressão da partícula j | Pa |
| P_{mod} | pressão modificada | Pa |
| Q | comprimento do eixo menor da elipse | m |
| R | comprimento do eixo maior da elipse | m |
| S | superfície de integração | m ² |
| T | temperatura absoluta | K |
| t | tempo | s |
| t_0 | instante inicial | s |
| T_{an} | temperatura obtida pela solução analítica | °C |

| | | |
|---------------------------|---|-------------|
| T_{SPH} | temperatura obtida pelo SPH | $^{\circ}C$ |
| $W'(X' - X, h)$ | derivada do <i>kernel</i> avaliada na posição $(X' - X)$ | m^{-3} |
| $W(X - X', h)$ | <i>Kernel</i> , ou Função de Suavização, avaliado na posição $(X - X')$ | m^{-2} |
| $W(X_i - X_j, h)$ | <i>Kernel</i> ou Função de Suavização avaliado na posição $X_i - X_j$ | m^{-2} |
| X | posição do ponto fixo | m |
| X' | posição do ponto variável | m |
| X_{Γ} | ponto pertencente à fronteira | |
| $\frac{D\vec{v}_i}{Dt}^*$ | aceleração da partícula, após adicionado o termo relacionado à viscosidade artificial | m/s^2 |
| \dot{q} | taxa de calor fornecido pela fonte, por unidade de volume | W/m^3 |
| $Re(h^2)$ | erro de 2ª ordem, após o truncamento da série de Taylor | |
| A_f | área final da mancha | m^2 |
| D | diâmetro da mancha | m |
| E | constante | |
| F | constante | |
| x_{SPH} | abscissa da frente de onda obtida pelo SPH | m |
| x_{exp} | abscissa da frente de onda obtida experimentalmente | m |
| \vec{V}_{ij} | velocidade relativa entre as partículas i e j | m/s |
| h_m | espessura média da mancha | m |
| $P_{mod\ i}$ | pressão modificada na partícula i | Pa |
| $P_{mod\ j}$ | pressão modificada na partícula j | Pa |

| | | |
|----------------|--|-----|
| v | magnitude da velocidade do escoamento | m/s |
| n_p | número de partículas dispostas por cada lado do domínio | |
| $R_n (X' - X)$ | resto da expansão da série de Taylor | |
| X_i | posição da partícula fixa | m |
| X_j | posição da partícula vizinha | m |
| $(v_{col})_x$ | magnitude da componente horizontal da velocidade da partícula após a colisão | m/s |
| $(v_{col})_y$ | magnitude da componente vertical da velocidade da partícula após a colisão | m/s |
| \vec{V}_i | velocidade da partícula i | m/s |
| \vec{V}_i^* | velocidade da partícula i , após a aplicação do XSPH | m/s |
| \vec{V}_j | velocidade da partícula j | m/s |
| m_i | massa da partícula i | kg |
| v_{Px} | magnitude da componente horizontal da velocidade da partícula antes da colisão | m/s |
| v_{Py} | magnitude da componente vertical da velocidade da partícula antes da colisão | m/s |
| v_{col} | magnitude da velocidade da partícula após a colisão | m/s |
| x_i | abscissa da partícula fixa | m |
| x_j | abscissa da partícula vizinha | m |
| y_i | ordenada da partícula fixa | m |
| y_j | ordenada da partícula vizinha | m |

Capítulo 1

Introdução

O derramamento do óleo no mar tem-se apresentado como um grave problema ambiental. Pode ocorrer durante as várias etapas de perfuração de poços e operações de reparo, quando o óleo está sendo produzido a partir de operações no mar, manipulados e armazenados temporariamente ou, ainda, quando o mesmo está sendo transportado no mar, através de linhas de fluxo, submarinas, ou por navio. O conhecimento das propriedades físicas relacionadas ao transporte do poluente, como velocidades e posições é de fundamental importância para a adoção de medidas tempestivas para proteção do meio ambiente.

Após o acidente ambiental, processos de transporte e de destino ocorrem com o óleo. Aqueles que governam a trajetória da mancha são denominados processos de transporte. Nesta classe estão a dispersão horizontal do óleo (espalhamento) e o arraste, causado pelas correntes marinhas e pelos ventos. Os processos de destino modificam as propriedades do poluente e provocam a transferência de sua massa para a atmosfera. São processos físico-químicos como a evaporação, dispersão vertical, emulsificação, foto-oxidação, dissolução, biodegração e sedimentação. Na Figura 1.1 são apresentados esquematicamente os processos que ocorrem com o óleo após o derrame.

O espalhamento do óleo se deve à tendência que o poluente tem de escoar sobre si mesmo. É o processo de transporte mais relevante nas primeiras horas após o derrame, afetando diretamente outros processos que ocorrem com o óleo como, por exemplo, a evaporação, ligada diretamente à área da mancha. Forças mecânicas como a gravitacional,

inercial, viscosa e de tensão superficial provocam a dispersão horizontal do hidrocarboneto. A compreensão e a quantificação deste processo adquirem grande importância no contexto das medidas relacionadas com a preservação ambiental.

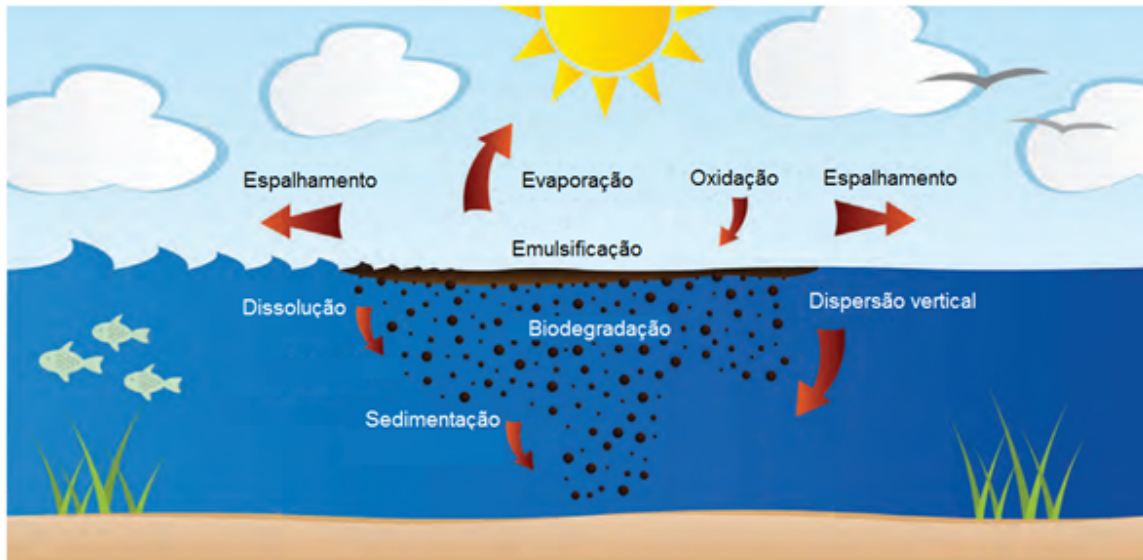


Figura 1.1: Principais processos físico-químicos e biológicos que ocorrem a uma mancha de óleo no mar. Adaptado de ITOPF - *International Tanker Owners Federation*, [1].

Derrames de óleo causam grande e negativo impacto em ecossistemas costeiros como manguezais, marismas, praias, costões rochosos, planícies de marés, recifes de coral e fundos arenosos/ rochosos, que apresentam elevada riqueza biológica e complexidade trófica, interagindo entre si, através de transferência de energia, nutrientes, de migrações e do ciclo reprodutivo de espécies. Com o espalhamento do óleo sobre a água do mar, as manchas podem atingir, por exemplo, a zona entre-marés dos manguezais, causando severos impactos (CETESB, 2010), [2]. Os organismos que vivem na superfície da água são os primeiros a serem atingidos (plâncton, na cadeia da base trófica). Ao atingirem o litoral ou costa, os resíduos de petróleo interagem com sedimentos, como areia da praia e cascalho, pedras e rochas, vegetação e *habitats* terrestres de animais selvagens e seres humanos, causando erosão e contaminação (Water Encyclopedia, 2010), [3]. A preservação dos ambientes costeiros em todos os seus aspectos - fauna e flora, sociais, econômicos,

saúde pública, lazer, entre outros - é preocupação ambiental existente. Para que se alcance êxito, o estudo do espalhamento do óleo, com a obtenção de previsões para o alcance da mancha ao longo do tempo, permite a realização de operações de contenção o mais imediatas possíveis, para a proteção das regiões costeiras, com suas fauna e flora.

O emprego de um método numérico adequado permite a previsão da trajetória do óleo ao longo do tempo, fornecendo resultados consistentes que auxiliam na adoção de medidas de contenção, visando a minimização da área atingida e dos efeitos negativos do poluente sobre o meio ambiente. Resultados de simulações auxiliam ainda a elaboração de planos de contingência e de emergência individuais (PEI's), que são exigidos pela lei.

No que se refere à modelagem empregada na solução de problemas em Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD), historicamente, os métodos eulerianos das diferenças finitas (MDF), volumes finitos (MVF) e elementos finitos (MEF) foram amplamente aplicados. Tratam-se de métodos numéricos com malhas, sendo muito úteis para resolver as formulações integrais ou diferenciais das equações que governam os escoamentos dos fluidos, (Liu e Liu, 2010), [4]. Atualmente, permanecem sendo dominantes nas simulações para a resolução de problemas práticos em engenharia e ciência, porém, apresentam limitações para aplicações em vários tipos de problemas complicados (que apresentam geometrias complexas, superfícies livres, interfaces móveis ou mudanças topológicas). Nestes casos, torna-se necessária a geração de uma malha, pré-requisito para a simulação numérica de qualidade, a cada nova iteração numérica. Trata-se do chamado remalhamento, um processo difícil, demorado e computacionalmente caro, e que deve, portanto, ser evitado.

Na área ambiental, encontram-se problemas com aquelas características. Podem ser elencados: o escoamento de óleo-água com superfícies livres (em que pelo menos uma das fases encontra-se sob a ação da pressão atmosférica); a propagação de ondas de choque; a agitação de fluidos que impactam contra as paredes dos recipientes que os contêm (*sloshing*); as rupturas de barragens, entre outros. A simulação de tais sistemas utilizando métodos baseados em malhas não é uma boa escolha, pelos motivos expostos. A necessidade de atualização das malhas em problemas envolvendo descontinuidades,

mudanças topológicas e geometrias complexas tornam o processo caro e complicado.

Ao longo dos últimos anos, os métodos sem malha (*meshless*) têm sido uma alternativa aplicada nas pesquisas, apontando para uma nova geração de métodos computacionais mais eficazes para a solução de problemas mais complexos. Métodos de partículas se enquadram nesta categoria, fornecendo soluções numéricas estáveis e acuradas para equações integrais ou equações diferenciais parciais. Huerta *et al.* (2004), [5], fazem uma boa apresentação dos métodos de partículas iniciando com o *Smoothed Particle Hydrodynamics* (SPH), seguindo com o método dos mínimos quadrados móveis (MLS) e o método de Galerkin. Nos trabalhos de Belytschko *et al.*, (1996), Gui-Rong Liu (2002), Li e Liu (2002), Liu e Liu (2003), Liu e Gu (2005), Idelson e Onate (2006) e Nguyen *et al.* (2008), [6] a [12], são apresentados a história, o desenvolvimento, a teoria e as aplicações da maioria dos métodos sem malhas existentes.

Na Dinâmica dos Fluidos, o método lagrangiano de partículas sem malhas *Smoothed Particle Hydrodynamics*, tem-se mostrado uma alternativa para a solução de problemas modelados pelas equações de conservação da massa, balanço da quantidade de movimento e transporte de energia. No trabalho de Liu e Liu (2003), [9], são encontradas discussões detalhadas dos métodos de partículas sem malhas, especificamente voltadas para o SPH e algumas de suas variações.

Atualmente, a maior parte dos modelos utilizados na previsão do alcance da mancha de óleo em espalhamento baseia-se nas expressões das curvas ajustadas por Fay (1969, 1971), [13] e [14], a resultados experimentais, com modificações implementadas para a consideração dos efeitos cisalhantes dos ventos na superfície do óleo. Reconhece-se que o espalhamento do óleo, em condições reais, não pode ser explicado plenamente por essas equações, uma vez que foram deduzidas para situações teóricas, onde a mancha de óleo encontra-se em águas calmas, apresentando um formato circular. Por outro lado, modelos híbridos são também empregados. Utilizam malhas (na modelagem euleriana da água) e partículas para a discretização do óleo. Nestes modelos numéricos, geralmente é empregada a equação de Langevin. Métodos puramente lagrangianos de partículas

sem malhas são incipientes nos estudos científicos sobre o espalhamento, constituindo-se em uma nova e promissora classe de métodos para o estudo do assunto, pelas vantagens existentes em relação aos eulerianos. No entanto, por serem de recentes aplicações na solução de problemas, é requerido bastante esforço no entendimento de seus fundamentos e em sua implementação numérica.

Nesta Tese de Doutorado é aplicado o método lagrangiano de partículas sem malhas SPH no estudo da dispersão horizontal do óleo em mar calmo. Um código numérico será desenvolvido e implementado, baseado nas equações de conservação, que modelam o escoamento dos fluidos (água e óleo), objetivando-se a obtenção de soluções concordantes com as fornecidas pelas curvas ajustadas por Fay aos resultados experimentais, [13] e [14].

Na primeira fase do espalhamento, a previsão do diâmetro da mancha de óleo não é comumente realizada por modelos eulerianos. Normalmente, o diâmetro final é calculado a partir da curva ajustada por Fay aos dados experimentais. Os modelos empregados na simulação numérica do espalhamento, em sua maior parte híbridos, iniciam a simulação a partir da segunda fase (gravitacional-viscosa).

O modelo puramente lagrangiano de partículas implementado neste trabalho é uma alternativa para a solução do problema do espalhamento do óleo em condições teóricas idealizadas de mar calmo, a partir da solução das equações de conservação, com o emprego do método SPH. O estudo é direcionado ao entendimento da primeira fase do espalhamento, ou gravitacional-inercial, para a qual não há no meio científico registros do emprego de métodos puramente lagrangianos na previsão do diâmetro da mancha do óleo derramado.

1.1 Objetivos

Esta pesquisa se desenvolveu visando atingir os seguintes objetivos:

Objetivo geral:

Propositura de um modelo matemático-numérico para o lançamento de poluente em mar calmo, baseado em um método puramente lagrangiano de partículas.

Objetivos específicos:

1. Entender o espalhamento do óleo em condição de mar calmo, independentemente dos demais processos físico-químicos ocorrentes;
2. Desenvolver e implementar um código numérico, empregando o método SPH, a partir da modelagem matemático-numérica puramente lagrangiana, para a simulação da fase gravitacional-inercial do espalhamento em mar calmo;
3. Verificar os resultados das simulações, a partir de resultados provenientes da solução das equações de Fay, visando a validação do modelo lagrangiano de partículas implementado.

1.2 Estrutura da Tese

Este primeiro capítulo contém uma breve introdução, apresentando as motivações e os objetivos da pesquisa. A estrutura da Tese de Doutorado é também nele apresentada.

No capítulo 2, apresenta-se a revisão bibliográfica a respeito do problema do espalhamento do óleo em mar calmo e dos modelos eulerianos e lagrangianos cientificamente empregados, a partir de 1960 até a presente data, para seu estudo. Ainda neste capítulo, encontra-se a revisão bibliográfica do método lagrangiano de partículas *Smoothed Particle Hydrodynamics*, empregado no presente estudo.

O capítulo 3 apresenta a modelagem matemática do escoamento de fluidos e transporte de energia nas visões euleriana e lagrangiana, esta a ser empregada neste trabalho na

solução do espalhamento do óleo.

O capítulo 4 é dedicado à apresentação do método SPH e às dificuldades encontradas em sua implementação numérica. Nele se discorre sobre seus fundamentos matemáticos, expressões empregadas nas aproximações das equações de conservação e transporte de energia, formas de tratamento dos contornos, equação de estado empregada para a previsão da pressão, instrumentos numéricos implementados em trabalhos anteriores existentes na literatura para a garantia da estabilidade e convergência (viscosidade artificial, pressão artificial e XSPH), esquemas de integração numérica de possível aplicabilidade e restauração da consistência em regiões de contornos.

O capítulo 5 é dedicado aos testes de validação do código numérico implementado. A partir dos resultados existentes na literatura para os problemas da difusão de calor em uma placa plana homogênea, de um reservatório em repouso contendo fluido incompressível e do colapso de uma barragem, foram efetuadas as verificações dos resultados numéricos obtidos com o emprego do código computacional.

O estudo numérico do espalhamento do óleo em mar calmo e seus resultados são apresentados e discutidos no capítulo 6.

No capítulo 7, são apresentadas as conclusões atingidas ao final do estudo .

Considerações finais e sugestões para trabalhos futuros compõem o capítulo 8.

Na sequência, são apresentadas as referências da literatura e os apêndices.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

A abordagem euleriana das equações de conservação da massa, balanço da quantidade de movimento e transporte de energia foi empregada nos primeiros modelos propostos para o estudo do espalhamento do óleo. Blokker apresentou um modelo que considerava os efeitos da gravidade como motrizes para o espalhamento (Stolzenbach *et al.*, 1977), [15]. Também foi considerada a perda de massa da mancha de óleo, causada pelo processo de evaporação. No entanto, negligenciava os efeitos da tensão superficial das forças viscosas. A equação da conservação da massa foi integrada sobre a área da mancha, obtendo-se uma expressão para a taxa de variação do volume do óleo derramado com o tempo. O pesquisador propôs uma segunda equação básica, baseada em uma hipótese empírica para a taxa de variação do diâmetro da mancha com o tempo. Entretanto, seus resultados não foram concordantes com os dados de campo, devido à negligência das forças viscosas e de tensão superficial em sua modelagem.

Fay (1969), [13], realizou uma análise física das forças atuantes no espalhamento do óleo em um mar totalmente calmo, concluindo quais delas significativamente atuavam ao longo do processo. O pesquisador estimou o diâmetro da mancha de óleo, apresentando expressões matemáticas para o processo, dividido em três fases distintas, onde as forças gravitacional, inercial, viscosa e de tensão superficial são as responsáveis pelo movimento do óleo sobre a água. Em suas considerações não foram adicionados o cisalhamento na superfície do óleo devido à ação do vento, as forças advectivas e a difusão turbulenta.

Devido à inexistência de ventos, correntes e ondas, a forma obtida para a mancha de óleo ao espalhar-se foi circular, em um deslocamento que apresentava uma simetria radial. Dados de campo foram empregados na obtenção de coeficientes de proporcionalidade para as equações propostas para as três fases do espalhamento. Os trabalhos de Fay mostram-se de grande importância no estudo do espalhamento, tendo sido aperfeiçoados por outros pesquisadores ao longo das décadas, no que se refere à implementação do efeito dos ventos, que em condições reais, provoca o aparecimento de uma forma elíptica para a mancha de óleo.

Posteriormente, modelos híbridos foram desenvolvidos, em que a modelagem do óleo é efetuada pela aplicação da discretização do óleo por meio de partículas e a solução da parte hidrodinâmica se faz geralmente por um método euleriano com uso de malhas. Esta classe de modelos de forma geral se baseiam na solução da equação de Langevin para a previsão das posições das partículas de óleo no tempo, conforme apresenta Guo *et al.*, (2010), [16].

Modelos puramente lagrangianos de partículas, que tratam o problema do espalhamento segundo uma visão lagrangiana para as duas fases envolvidas (óleo e água), são incipientes no meio científico. Violeau *et al.* (2007), [17], e Yang e Liu (2013), [18], apresentaram suas modelagens e resultados empregando essa abordagem para o caso da contenção do derrame do óleo por bóias flutuantes.

A seguir, serão apresentados os modelos anteriormente citados, já empregados na solução do espalhamento do óleo e a modelagem puramente lagrangiana empregando o método *Smoothed Particle Hydrodynamics* (SPH), proposta neste trabalho.

2.1 Modelagem Euleriana

Segundo a visão euleriana, as equações de conservação da massa e balanço da quantidade de movimento, são escritas no sistema de coordenadas polares da seguinte forma, [15]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial (rUh)}{\partial r} = -\frac{1}{\rho_o} (\phi_s + \phi_b), \\ \frac{\partial U}{\partial t} + U \frac{\partial U}{\partial r} = -g\Delta_w \frac{\partial h}{\partial r} - \frac{\tau_{br}}{\rho_{oleo}h}, \\ f_n = \sigma_{aw} - \sigma_{oa} - \sigma_{ow}. \end{array} \right. \quad (2.1)$$

$$\Delta_w = \frac{\rho_w - \rho_{oleo}}{\rho_w}. \quad (2.2)$$

onde:

h é a espessura local da mancha de óleo

t é o tempo

r é a direção radial

U é a magnitude da velocidade radial do óleo

ρ_{oleo} é a massa específica do óleo

ρ_w é a massa específica da água

g é a magnitude da aceleração da gravidade

τ_{br} é a tensão cisalhante na base da mancha de óleo, na direção radial

f_n é a força de tensão superficial resultante, por unidade de comprimento, atuando no contorno lateral da mancha

σ_{aw} é a tensão na superfície ar-água

σ_{oa} é a tensão na superfície óleo-ar

σ_{ow} é a tensão na superfície óleo-água

ϕ_s é o fluxo difusivo de óleo para fora da superfície da mancha

ϕ_b é o fluxo difusivo de óleo para fora da base da mancha

As considerações que garantem a validade das Eqs. (2.1) são:

- O óleo é composto por um único componente e possui massa específica uniforme;
- Não há cisalhamento na superfície da mancha pela ação do vento;
- Os efeitos da força de Coriolis são desprezados;
- A mancha possui simetria radial.

O modelo a seguir fundamenta-se na abordagem euleriana para as equações de conservação.

2.1.1 Modelo de Blokker

No modelo apresentado por Blokker, os efeitos da gravidade são considerados motrizes para o espalhamento, [15]. A perda de massa do óleo derramado por evaporação é considerada e os efeitos da tensão superficial e das forças viscosas são negligenciados.

A equação de conservação da massa foi integrada sobre a área da mancha, resultando na Eq. (2.3), que mostra a mudança no volume do óleo derramado com o tempo:

$$\frac{dV}{dt} = -\frac{1}{\rho_{\text{oleo}}}(\phi_s + \phi_b)\pi\frac{D^2}{4}, \quad (2.3)$$

onde:

D é o diâmetro da mancha

V é o volume do óleo derramado

A segunda equação básica do modelo de Blokker não foi baseada na equação do balanço da quantidade de movimento, mas em uma hipótese puramente empírica:

$$\frac{dD}{dt} \sim (\rho_w - \rho_{\text{oleo}})h \sim (\rho_w - \rho_{\text{oleo}})\frac{V}{D^2}. \quad (2.4)$$

Com esta equação, Blokker tentou representar o espalhamento causado pelas forças gravitacionais. Porém, seus resultados não foram concordantes com os dados de campo,

pela negligência dos termos de tensão superficial e das forças viscosas, [15].

A seguir serão apresentados modelos denominados empíricos, por terem empregado resultados de experimentos para o ajuste das curvas que descrevem o espalhamento.

2.2 Modelagem Empírica

2.2.1 Modelo de Fay

Fay (1969), [13], apresentou os resultados de seu estudo para o espalhamento do óleo em águas totalmente calmas. São características de seu modelo desconsiderar as perdas de massa, o cisalhamento na superfície do óleo (causado pela ação do vento), as forças advectivas e a difusão turbulenta.

Fay realizou uma análise física das forças atuantes no espalhamento do óleo, dividindo o processo em três fases, a seguir apresentadas:

1. No início do espalhamento, logo após o derrame, predomina a ação da força de gravidade como motriz, balanceada pela força de inércia, resistente ao movimento. Esta primeira fase tem sua duração como uma função do volume do óleo derramado, sendo chamada de espalhamento gravitacional-inercial;
2. A segunda fase se inicia quando a espessura da mancha atinge um valor crítico, momento a partir do qual o efeito das forças viscosas sobrepõem o efeito das forças de inércia, como efeito resistente ao movimento. Esta fase é denominada espalhamento viscoso-gravitacional e pode durar semanas, em um derrame com um volume de óleo em proporções reais;
3. Na terceira fase, a espessura está tão fina que a força de tensão superficial torna-se a motriz, sendo balanceada pelas forças viscosas. Esta fase é chamada de espalhamento superficial-viscoso.

Na análise de forças atuantes no espalhamento, o pesquisador empregou a hipótese de que, à medida em que se espalha, o óleo arrasta consigo uma fina camada de água. A espessura da camada mais superficial da água foi definida como uma função da viscosidade cinemática deste fluido e do tempo. Essa viscosidade foi empregada na estimativa da ordem de grandeza das forças envolvidas na dispersão horizontal do óleo, [13].

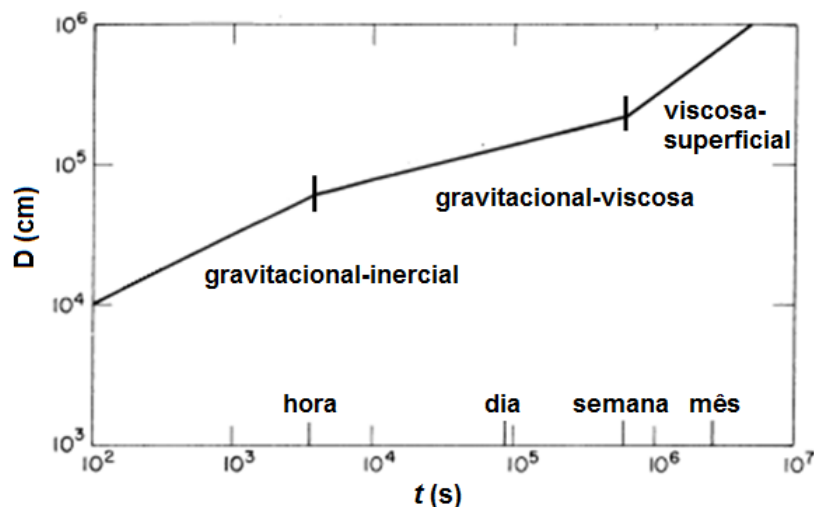


Figura 2.1: Fases do espalhamento em mar calmo, segundo Fay, para um vazamento de 10.000 toneladas de óleo. Adaptada de [13].

A Figura 2.1 apresenta as fases do espalhamento em mar calmo segundo a visão de Fay, para o vazamento de dez mil toneladas de óleo, com diâmetro inicial do volume de 100 m.

Para o início da primeira fase do espalhamento, considera-se o óleo inicialmente em repouso, com um volume cuja altura h é aproximadamente igual ao diâmetro D , [15]. Devido à diferença de massas específicas entre este fluido e a água, ocorre o colapso do volume de óleo, de forma similar ao problema clássico da quebra da barragem. A borda do volume de óleo de diâmetro D se move com a velocidade:

$$\frac{dD}{dt} \sim \sqrt{g\Delta_w h_0}, \quad (2.5)$$

onde h_0 é a altura inicial do óleo.

Se a espessura média da mancha, $h_m \sim V/D^2$, substituir h_o na Eq. (2.5), a taxa de crescimento do diâmetro tornar-se-á:

$$\frac{dD}{dt} \sim \frac{1}{D} \sqrt{g\Delta_w V}, \quad (2.6)$$

Que conduz a um diâmetro instantâneo:

$$D \sim \sqrt[4]{\Delta_w g V t^2}. \quad (2.7)$$

Esta fase do espalhamento dura até o tempo t , na qual a altura do volume de óleo, em seu centro, começa a decrescer devido à necessidade de conservação da massa:

$$t = \sqrt{\frac{h_o}{g\Delta_w}}, \quad (2.8)$$

O diâmetro da mancha de óleo no instante de tempo obtido através da Eq. (2.8) é empregado como inicial para o estudo da segunda fase do espalhamento.

A taxa de espalhamento para esta segunda fase é:

$$\frac{dD}{dt} \sim \Delta_w g \frac{h_m^2}{D} \sqrt{\frac{t}{\nu_w}}, \quad (2.9)$$

onde:

h_m é a espessura média da mancha

t é o tempo desde que se iniciou o espalhamento na primeira fase

ν_w é a viscosidade cinemática da água

Substituindo-se a espessura média da mancha ($h_m \sim V/D^2$) na Eq. (2.9) e integrando-a, obtém-se uma aproximação para o diâmetro da mancha:

$$D \sim \left(\Delta_w \frac{gV^2}{\sqrt{\nu_w}} \right)^{\frac{1}{6}} t^{\frac{1}{4}}, \quad (2.10)$$

A última fase (espalhamento superficial-viscoso) ocorre quando a mancha se torna fina

o suficiente de tal forma que a tensão superficial torna-se dominante. O balanço entre a força de tensão superficial e as forças viscosas conduzem à taxa de espalhamento:

$$\frac{dD}{dt} \sim \frac{f_n}{\rho_w} \sqrt{\frac{t}{v_w}} \frac{1}{D}, \quad (2.11)$$

O diâmetro instantâneo da mancha tem como aproximação:

$$D \sim \left(\frac{f_n}{\rho_w \sqrt{v_w}} \right)^{\frac{1}{2}} t^{\frac{3}{4}}. \quad (2.12)$$

Fay (1971), [14], baseado em resultados experimentais, apresentou coeficientes de proporcionalidade para as Eqs. (2.7), (2.10) e (2.12), permitindo sua direta aplicação na previsão do diâmetro da mancha. A Tabela 2.1 apresenta resumo das equações propostas pelo pesquisador, com os citados coeficientes.

Tabela 2.1: Diâmetros da mancha nas sucessivas fases do espalhamento (segundo Fay).

| Fase | Força motriz | Força retardadora | Diâmetro da mancha |
|------|-------------------|-------------------|--|
| 1 | Gravitacional | Inercial | $D = 2k_1(\Delta_w g V t^2)^{\frac{1}{4}}$ |
| 2 | Gravitacional | Viscosa | $D = 2k_2 \left(\frac{V^2 g \Delta_w t^{\frac{3}{2}}}{v_w^{\frac{1}{2}}} \right)^{\frac{1}{6}}$ |
| 3 | Força superficial | Viscosa | $D = 2k_3 \left(\frac{f_n^2 t^3}{\rho_w^2 v_w} \right)^{\frac{1}{4}}$ |

onde $k_1 = 1, 14$; $k_2 = 1, 45$ e $k_3 = 2, 30$.

Adicionalmente aos resultados empíricos apresentados na Tabela 2.1, Fay propôs que as mudanças nas propriedades químicas do óleo exposto ao ambiente (intemperismo) causam o eventual término do espalhamento e apresentou uma correlação, baseada em

observações empíricas, entre a área final da mancha, A_f , e o volume do óleo derramado.

$$A_f(\text{m}^2) = 10^5 V^{\frac{3}{4}}(\text{m}^3). \quad (2.13)$$

onde A_f é a área final da mancha.

As equações empíricas de Fay se mostram adequadas ao tratamento do espalhamento em mar calmo. Porém, seus resultados necessitam de aprimoramento em situações de vazamentos reais (onde há ventos, correntes e ondas). Nestas, o cisalhamento da superfície da mancha pelo vento provoca a mudança da forma circular da mancha para uma forma geométrica elíptica. Na maioria dos casos relatados na literatura, as equações propostas por Fay subestimaram a área da mancha nos vazamentos em condições reais (Lehr *et al.*, 1984a, 1984b), [19] e [20].

Em situações reais, a simulação do espalhamento do óleo é comumente realizada até a fase gravitacional-viscosa. Na última fase, a previsão do espalhamento não conduz a resultados satisfatórios, pois a ação dos ventos provoca a divisão da mancha em outras menores.

2.2.2 Revisão do Modelo de Fay

Devido à não consideração dos efeitos do vento, o espalhamento horizontal do óleo previsto pelas equações de Fay tem-se mostrado menor do que em condições reais de vazamentos ([19] e [20]). De forma a considerar os efeitos dos ventos, estes pesquisadores propuseram uma revisão das equações propostas por Fay. Uma série de testes foi realizada em regiões do Golfo da Arábia adjacente à linha de costa da Arábia Saudita. Os resultados mostraram que a mancha de óleo se espalha segundo uma forma não radialmente simétrica, aproximadamente elíptica, cujo eixo maior é paralelo à direção do vento. A partir da comparação com dados de campo, verificaram que as equações de Fay subestimaram o crescimento da mancha.

Considerando apenas a fase gravitacional-viscosa, foi proposta a estimativa da área da

mancha pela seguinte equação, [19] e [20]:

$$Q = 1,7\Delta_w^{\frac{1}{3}}V_b^{\frac{1}{3}}t^{\frac{1}{4}}, \quad (2.14)$$

$$R = Q + 0,03V_w^{\frac{4}{3}}t^{\frac{3}{4}}, \quad (2.15)$$

$$A_e = \frac{\pi}{4}QR = 2,27\Delta_w^{\frac{2}{3}}V_b^{\frac{2}{3}}t^{\frac{1}{2}} + 0,04\Delta_w^{\frac{1}{3}}V_w^{\frac{4}{3}}t. \quad (2.16)$$

onde:

Q é o comprimento do eixo menor da elipse (m)

R é o comprimento do eixo maior da elipse (m)

V_b é o volume inicial do óleo derramado (barris)

V_w é a velocidade do vento (nós)

t é o tempo (min)

A_e é a área da elipse (10^3 m^2)

2.3 Modelos Híbridos

Nos dias atuais, muitas simulações de manchas de óleo são baseadas em modelos lagrangianos de partículas. Algoritmos lagrangianos de partículas que empregam o movimento browniano são os mais utilizados para a solução do problema de transporte do óleo derramado. Para a aplicação de tais modelos para o poluente necessita-se do conhecimento de grandezas do escoamento da água, que podem ser obtidas por uma modelagem euleriana desta fase. Assim, caracteriza-se um modelo híbrido, onde a modelagem da água é realizada de forma euleriana, enquanto a do poluente de acordo com a modelagem lagrangiana.

Os modelos lagrangianos são geralmente baseados na hipótese de que a mancha pode ser dividida em pequenas parcelas que não interagem umas com outras. A trajetória destas parcelas é calculada a partir de uma velocidade total de arraste que é função da

velocidade do vento e das correntes (Paladino, 2000), [21].

O óleo é dividido em um conjunto discreto de partículas de iguais massas (elementos lagrangianos). Cada partícula recebe as coordenadas que definem sua posição no espaço. Assume-se que as partículas discretas que representam o óleo derramado sofrem advecção (movimentando-se ao longo do corpo da água) e difusão (como resultado de um processo randômico - difusão turbulenta).

Na Figura 2.2 estão ilustrados o escoamento da água e as partículas lagrangianas, que são acompanhadas no tempo.

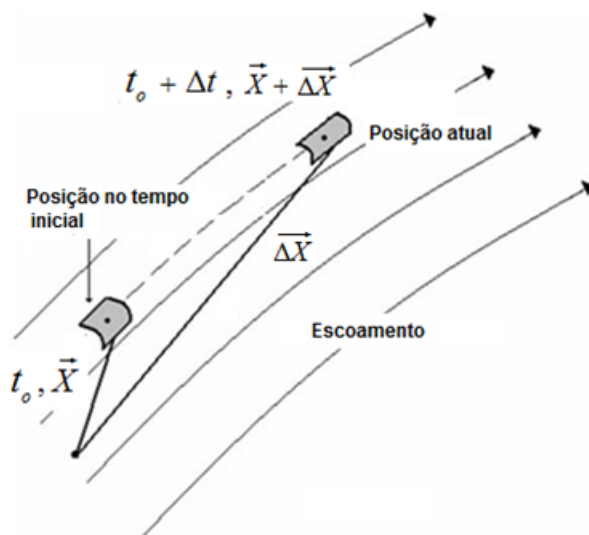


Figura 2.2: Ponto material movendo-se no espaço transportando propriedades físicas (abordagem lagrangiana).

Representa-se o movimento da partícula em um campo de velocidades, por um processo de deslocamento aleatório que remonta ao estudo de Albert Einstein sobre o movimento browniano. Nos Modelos Lagrangianos de Partículas ou Modelos Estocásticos Lagrangianos, o movimento da partícula em um escoamento turbulento é análogo ao movimento browniano. O deslocamento das partículas é descrito a partir de uma parcela determinística que representa a advecção e uma parcela aleatória representativa da difusão turbulenta.

No movimento browniano, as moléculas de um fluido estão em constante movimento e colidindo umas com as outras. Por analogia, o movimento de partículas pela difusão turbulenta consiste de uma série de passos aleatórios que pode ser estudado estatisticamente.

Quando tratada em termos estatísticos, a descrição matemática do problema é baseada em uma distribuição de probabilidade da posição das partículas. Desta forma, cada partícula é tratada independentemente uma da outra, não havendo correlação entre elas.

No modelo lagrangiano de partículas, a difusão molecular é desprezível quando comparada com a difusão turbulenta. O movimento das partículas pode ser descrito matematicamente pela equação de Langevin.

2.4 Modelos Puramente Lagrangianos

Mais recentemente, passaram a ser empregados modelos puramente lagrangianos, que tratam tanto a parte hidrodinâmica, quanto o poluente segundo a visão lagrangiana.

A seguir, são apresentadas algumas vantagens da utilização desse tipo de modelo em relação aos modelos híbridos:

- Simplicidade computacional;
- Não necessitam de malhas;
- Facilidade no tratamento de superfícies livres e mudanças topológicas. Quando estas ocorrem não há necessidade de proceder ao custoso trabalho de remalhamento;
- Menor custo computacional em geometrias complexas;
- Não são produzidas oscilações numéricas nem concentrações negativas.

O método de interpolação SPH, quando aplicado aos escoamentos tanto da água quanto do óleo, caracteriza um destes modelos puramente lagrangianos, sendo a proposta deste trabalho o seu emprego para a simulação do espalhamento do óleo.

Na sequência, será apresentada a revisão bibliográfica do método *Smoothed Particle Hydrodynamics*.

2.4.1 *Smoothed Particle Hydrodynamics*

A Dinâmica dos Fluidos Computacional propõe métodos para a solução numérica das equações de conservação da massa e da energia, e do balanço da quantidade de movimento. Dentre os métodos numéricos que conduzem às soluções numéricas almejadas, poucos conduzem a resultados satisfatórios, quando aplicados aos escoamentos com superfícies livres. Problemas com interfaces móveis são um problema para o emprego de métodos que utilizam malhas. Os métodos que discretizam o domínio por meio de uma malha fixa no espaço apresentam dificuldades na captura das superfícies livres dos fluidos que são dinâmicas e sofrem alterações ao longo do tempo, conduzindo à necessidade de criação de uma nova malha a cada novo instante de tempo. Por outro lado, métodos lagrangianos com malhas não-estruturadas, que se movimentam com o fluido, também apresentam dificuldades na captura das superfícies livres, principalmente quando essas sofrem mudanças topológicas (quando se utiliza um método com malha, tem-se o trabalho adicional de gerá-la novamente toda vez que ocorre uma alteração nas fronteiras).

Um dos métodos que conduz a uma solução satisfatória para o problema de escoamento com superfície livre, ou interface, e que vem sendo cada vez mais empregado é o método puramente lagrangiano sem malhas SPH. O método discretiza facilmente geometrias complexas, refina mais facilmente o domínio e captura facilmente superfícies livres e suas mudanças topológicas. A discretização do domínio é realizada por um conjunto finito de partículas de fluido e, para a obtenção dos resultados numéricos para as grandezas relevantes do sistema (massa específica, velocidade, aceleração etc.) utiliza-se uma função de suavização que funciona como uma função de interpolação. Interpolando-se ponderadamente os valores das grandezas de interesse nas partículas vizinhas (definidas dentro de um domínio de influência) são obtidos os valores das grandezas físicas em cada partícula individualmente.

Como o SPH utiliza partículas lagrangianas, a conservação da massa é garantida. Ele pode ser utilizado para a simulação de escoamentos de fluidos compressíveis e incompressíveis, newtonianos e não-newtonianos.

Na área ambiental, o conhecimento das grandezas físicas relacionadas ao transporte do poluente é de fundamental importância. Por exemplo, a simulação computacional permite a previsão das velocidades das partículas dos poluentes, bem como as posições que as mesmas ocuparão ao longo do tempo, permitindo a adoção de medidas contedoras da dispersão dos mesmos nas áreas afetadas. Para isso, os resultados numéricos devem ser consistentes e descritivos do fenômeno real. O método lagrangiano sem malhas SPH vem sendo aplicado para esse fim, conduzindo a resultados numéricos mais precisos que outros métodos que utilizam malhas para a discretização do domínio. A partir do próximo parágrafo, estará sendo apresentada uma revisão bibliográfica do método, para aplicações em Dinâmica dos Fluidos Computacional.

Originalmente, o SPH foi desenvolvido no final da década de 70 do século XX, por Lucy (1977) e Monaghan e Gingold (1977), [22] e [23], para a modelagem de fenômenos astrofísicos. Com o passar do tempo, sua aplicação estendeu-se às áreas da mecânica dos sólidos e dos fluidos em vasta gama de aplicações, devido à sua habilidade de incorporar a complexidade dos problemas físicos. Especialmente, devido às complexas geometrias envolvidas, em problemas com superfícies livres e com interações fluido-estrutura, o método tem atraído cada vez um maior número de pesquisas.

Monaghan (1994), [24], realizou as primeiras simulações para escoamentos de fluidos compressíveis com superfícies livres, no problema do colapso de uma barragem. Em seu trabalho, o autor empregou as equações de conservação da massa e balanço da quantidade de movimento, num domínio discretizado por partículas, juntamente com uma equação de estado para previsão da pressão e condições de contornos repulsivas (em uma analogia às forças moleculares de Lennard-Jones), obtendo resultados numéricos concordantes com os alcançados experimentalmente.

Colagrossi e Landrini (2003), [25], estudaram a quebra da barragem efetuando a modelagem da interface água/ar. As equações de conservação foram solucionadas, com a aplicação da reinicialização da massa específica periodicamente e da viscosidade artificial (para atenuar as oscilações numéricas). Os resultados mostraram-se concordantes com os existentes na literatura.

Lo e Shao (2002), [26], simularam ondas mecânicas solitárias próximas à costa, utilizando um método SPH para fluidos incompressíveis. A previsão da pressão para as partículas foi realizada pela equação de Poisson e a modelagem da turbulência pelo LES (Simulação Numérica das Grandes Escalas). O tratamento dos contornos utilizou partículas-espelho fixadas nas paredes associadas a partículas virtuais, em posições exteriores ao domínio. A identificação das partículas na superfície livre foi realizada a partir da flutuação de suas massas específicas. Na superfície livre, esta propriedade apresenta diminuição, pois não existem outras partículas sobre as que estão formando esta região do domínio. Caso uma partícula viesse a apresentar uma flutuação em sua massa específica maior que 1% em relação às sofridas pelas partículas no interior do fluido, era identificada como pertencente à superfície e era lhe atribuída a pressão nula (condição de contorno de Dirichlet). Pela aplicação do modelo numérico para a quebra, *run-up* e *run-down* das ondas solitárias, foram alcançados resultados com boa concordância com os experimentais, tomados como referência.

Shao e Gotoh (2004), [27], desenvolveram um modelo numérico baseado no SPH, com tratamento da turbulência realizado pelo LES para a investigação da interação das ondas com um quebramar flutuante do tipo *curtain-wall*, instalado com o objetivo de reduzir a altura da onda incidente e proteger a linha de costa. A modelagem matemática foi realizada através das equações de Navier-Stokes. Partículas móveis foram empregadas para simular o quebramar, que se movimentou a partir da ação das ondas, ao mesmo tempo que partículas fixas foram utilizadas na simulação do leito, evitando a penetração do fluido no contorno inferior. Os perfis de onda e as forças hidrodinâmicas obtidos como resultados mostraram boa concordância com os relatados na literatura.

Shao (2006), [28], Shao estudou a quebra e o *overtopping* da onda para um fluido incompressível sobre uma parede inclinada, mediante a solução das equações da conservação da massa e balanço da quantidade de movimento. Foram empregados a equação de Poisson para a previsão do campo de pressões e a modelagem da turbulência pelo modelo κ -*epsilon*. O rastreamento das partículas na superfície livre foi efetuado a partir da análise da flutuação das massas específicas. No que diz respeito aos contornos sólidos, foram fixadas partículas no leito e em uma parede inclinada, que impediram que as partículas de fluido ultrapassassem as fronteiras. Uma força de repulsão entre as partículas de contornos e de fluido, segundo um par ação e reação, foi implementada. Uma boa concordância entre os resultados alcançados nas simulações e dados numéricos e experimentais conduziram à validação do modelo para o problema apresentado.

Shao e Ji (2006), [29], utilizaram o LES e o modelo de Smagorinsky, juntamente com uma escala de sub-partículas bidimensional (SPS), para o estudo da turbulência na quebra de ondas mergulhantes. A modelagem numérica implementada com o SPH conduziu a resultados concordantes com dados da literatura e com os obtidos com a utilização do modelo κ -*epsilon*, mostrando-se melhores que os alcançados com o emprego do modelo RANS (*Reynolds-Averaged Navier-Stokes Equations*).

Cleary e Prakash (2004), [30], mostraram o potencial de aplicação do método SPH em três dimensões. Foram realizadas simulações de uma inundação causada pela ruptura de uma barragem, da geração de uma onda de tsunami por um batedor de ondas e a consequente inundação da linha de costa pela mesma, do escoamento de lava de um vulcão e de um deslizamento de terra a partir do pico de uma montanha. Os autores apontaram para as vantagens do método de partículas sem malhas e algumas de suas possíveis aplicações.

Gomez-Gesteira e Dalrymple (2003), [31], empregaram um método SPH tridimensional no estudo do impacto das ondas sobre uma estrutura. Os autores analisaram a propagação de uma onda longa e a força por ela exercida sobre uma estrutura sólida vertical. o domínio consistia de um tanque com uma estrutura sólida localizada em seu interior, onde

ocorria a ruptura de uma barragem. Velocidades e forças foram obtidos numericamente e mostraram boa concordância com experimentos de laboratório, mostrando que o método SPH pode ser utilizado com êxito para estudar problemas de ondas tridimensionais, como as relacionadas com a colisão entre ondas e estruturas. O emprego de códigos numéricos paralelos foi sugerido pelos autores como forma de se obter uma execução computacional mais rápida.

O método SPH foi empregado por Iglesias *et al.* (2004), [32], para projetar tanques de estabilização para navios de pesca. O líquido no interior do tanque sofre o fenômeno do *sloshing* e a escolha de um método sem malhas para o estudo do problema se deve à grande deformação sofrida pela superfície livre. As equações de Navier-Stokes foram empregadas na modelagem do fluido. Um modelo de colisão inelástica foi implementado para as colisões entre o fluido e as paredes do tanque. Os resultados das simulações foram concordantes com testes experimentais. Apesar dos resultados promissores, os pesquisadores alertaram da necessidade de uma mais profunda investigação científica no que se refere às condições de contorno aplicadas, à condição de incompressibilidade do fluido e ao emprego da viscosidade artificial. Simulações de problemas de agitação de fluidos (*sloshing*) utilizando o método SPH são bastante promissoras e diversos pesquisadores apresentaram resultados sobre o tema recentemente Itibar *et al.* (2012) e Cao *et al.* (2014), [33] e [34].

Ghazali e Kamsin (2008), [35], realizaram uma modelagem de risco de inundação com simulação em tempo real. O problema da inundação é um dos principais sofridos pelos malasianos, daí a importância e a motivação do estudo realizado. Os autores simularam a inundação ocorrida em Kuala Lumpur (capital da Malásia), em Junho de 2007, em 3 dimensões. Uma das limitações encontradas foi o consumo de memória computacional, o que os fez restringir a uma área à possível de ser simulada utilizando doze mil partículas - máximo número empregado nas simulações. Concluiu-se sobre a aplicabilidade do SPH ao problema da inundação, sendo porém necessário o emprego de um *hardware* capaz de simular maiores áreas.

Bui *et al.* (2007), [36], implementaram um modelo numérico para a interação entre o solo e a água. O fluido foi considerado viscoso e compressível e o solo um material elasto-plástico perfeito. Foram realizadas simulações de escavação do solo seco e saturado por um jato de água. Os resultados demonstraram que a grande deformação sofrida e as descontinuidades do solo podem ser tratadas pelo SPH sem dificuldades. O efeito da pressão da água nos poros e a força de infiltração podem também ser simulados através do SPH. Os resultados numéricos não foram validados com dados experimentais, porém, foram encorajadores. As vantagens apresentadas que justificam o uso do método no estudo foram a robustez, a simplicidade conceitual, a facilidade de incorporar novos conceitos físicos e, principalmente, o potencial para lidar com grandes deformações e falhas.

O método foi aplicado, adicionalmente, na simulação de escoamentos em meios porosos. Zhu *et al.* (1999), [37], apresentaram um modelo numérico na escala dos poros para escoamentos bidimensionais de fluidos monofásicos. Neste estudo, o meio poroso era composto espacialmente por quadrados periódicos e arranjos hexagonais de cilindros. Os resultados encontrados mostraram uma boa concordância com as soluções obtidas através da aplicação da modelagem por elementos finitos e outras soluções encontradas na literatura. Shao (2010), [38], utilizou um método SPH para fluidos incompressíveis (denominado ISPH) para simular a interação entre ondas e meios porosos. A presença do meio poroso foi implementada através da adição de termos referentes a forças de fricção às equações de Navier-Stokes, empregadas na modelagem do escoamento. O modelo implementado foi validado através da simulação de ondas solitárias e regulares sendo amortecidas por um leito poroso e por ondas solitárias interagindo com um quebra-mar submerso coberto por um material com poros. Os resultados obtidos apontam para a utilização do método ISPH como uma promissora ferramenta de simulação para aplicações costeiras.

No estudo da difusão de calor, o SPH tem sido amplamente apresentado na literatura, com diferentes abordagens no que se refere à modelagem numérica utilizada. Jeong *et al.* (2003), [39], efetuaram a decomposição de uma equação diferencial parcial (EDP) de segunda ordem em duas EDP's de primeira ordem e empregaram partículas-fantasma

para o tratamento dos contornos. Os resultados obtidos com o emprego do algoritmo proposto pelos autores apresentou boa concordância com soluções obtidas analiticamente e pelo método das diferenças finitas, para problemas uni ou bidimensionais, respectivamente. Cleary e Monaghan (1999), [40], propuseram uma pequena alteração em relação à modelagem SPH padrão, no que se refere à predição do fluxo de calor nos contornos. Os resultados encontrados foram concordantes com os fornecidos pela solução exata. Chen *et al.* (1999), [41], mostraram a influência dos contornos nos resultados obtidos pelo SPH nos problemas de condução de calor e propuseram um método de correção para as aproximações SPH em posições próximas às fronteiras, a partir da expansão da série de Taylor. Este método é conhecido como CSPM (*Corrective Smoothed Particle Method*). Rook *et al.* (2003), [42], utilizaram um operador laplaciano para o estudo da difusão de calor em um domínio bidimensional em regime transiente. Duas formulações, uma explícita e outra implícita foram usadas nas simulações numéricas, assim como a técnica de integração de Crank-Nicolson. Os resultados das simulações utilizando o SPH mostraram boa concordância com os obtidos pelo método dos volumes finitos. Schwaigher (2008), [43], apresentou uma nova formulação corrigida para o operador laplaciano, de forma a minimizar os erros nas regiões próximas aos contornos, onde a inconsistência para as propriedades aproximadas com o emprego da modelagem com o SPH é notada. O autor mostrou a redução dos erros nas aproximações das propriedades físicas, quando foi implementado o operador laplaciano corrigido.

Vorobyev (2013), [44], apresentou resultados para o problema hidrostático de um reservatório preenchido por um fluido uniforme, incompressível e isotérmico. Inicialmente, as partículas foram dispostas de forma equidistantes no domínio bidimensional, com a definição de suas massas específicas e pressões, que permaneceram constantes na simulação. O tratamento dos contornos foi realizado com o emprego de partículas-fantasmas, fixadas nas paredes do reservatório que, ao interagirem com as partículas de fluido, as repeliam pela ação de uma força calculada através de uma analogia à força molecular de Lennard-Jones. Os resultados encontrados com o emprego do SPH mostraram a mudança das posições das partículas (uma descida vagarosa) devido à ação da força gravitacional.

Visando amortecer as oscilações nas posições dos elementos lagrangianos, o pesquisador propôs distintas modelagens para o termo viscoso da equação do balanço da quantidade de movimento. Foi adicionada a viscosidade artificial a esta equação, obtendo-se como resultado o amortecimento das oscilações numéricas e a estabilização da superfície livre do fluido, porém não se impedindo a oscilação das posições das partículas no reservatório. Em uma segunda modelagem, foi implementada a modelagem laminar para o termo viscoso da equação do balanço da quantidade de movimento, como proposta por Morris *et al.* (1997), [45]. Verificou-se haver um amortecimento nas oscilações, mas não o suficiente para extingui-las. Vorobyev ainda empregou uma terceira modelagem que combinava as duas anteriores, porém sem ainda alcançar resultados precisos no que se refere ao não movimento das partículas no interior do reservatório, mesmo após o término do regime transiente.

No que se refere ao estudo do derramamento e espalhamento do óleo no mar, trata-se de assunto ainda incipiente com o emprego do SPH. Trabalhos pioneiros foram recentemente publicados, entre os quais o de Violeau *et al.* (2007), [17], que apresentou modelagem visando a contenção daquele poluente com o emprego de bóias flutuantes. Um modelo numérico para um fluido multifásico e turbulento foi implementado. Dispositivo experimental foi utilizado para obtenção de dados empregados na validação do código computacional. Dois tipos de escoamentos turbulentos foram estudados, quais sejam: estacionário em canal aberto e ondas regulares em uma calha. Para ambos os métodos, o risco de vazamento foi mensurado. Os resultados numéricos do escoamento turbulento em regime estacionário apresentaram boa concordância com os experimentais. Porém, uma maior quantidade de testes deve ser efetuada para uma estimativa mais precisa de parâmetros como a velocidade crítica e o efeito da profundidade da água no vazamento do óleo. Ainda devem ser investigados o efeito da implementação de um modelo de fechamento da turbulência, como o κ -*epsilon*, a ação das ondas e correntes, bem como ser realizada a modelagem da tensão superficial. Para o segundo tipo de escoamento turbulento, não foi possível a validação dos resultados.

Yang e Liu (2013), [18], modelaram a contenção do vazamento de óleo por bóias flutuantes, empregando um método SPH modificado, incluindo um novo *kernel* proposto pelos autores, o emprego de equações para um escoamento bifásico e um peculiar tratamento dos contornos. Resultados qualitativos foram encontrados, permitindo-se concluir que a falha na contenção acontece principalmente quando estão envolvidos óleos pesados, altas velocidades da bóia e ângulo negativo de sua saia, bem como quando há presença de ondas.

A modelagem puramente lagrangiana de partículas e o método SPH ainda não foram empregados no estudo do espalhamento do óleo. Durante a ocorrência deste processo de transporte é de fundamental importância a previsão das posições e velocidades do poluente para a adoção de medidas de contenção e preservação ambiental. O presente trabalho propõe o desenvolvimento e implementação de um código computacional que empregue esta modelagem, juntamente com o método SPH, e seja capaz de prever o alcance do hidrocarboneto ao longo do tempo (inicialmente para o estudo da primeira fase do espalhamento, na condição de mar calmo). Almeja-se que o código computacional se torne uma alternativa às ferramentas computacionais existentes (códigos que empregam, em sua maioria, a modelagem euleriana-lagrangiana) para a simulação do espalhamento do óleo.

Capítulo 3

Modelagem Matemática

A modelagem matemática do escoamento de fluidos e transporte de energia é efetuada pelas equações de conservação da massa, balanço da quantidade de movimento e conservação da energia. O escoamento do fluido é descrito por um campo de velocidades, um campo de massas específicas e um campo de pressões. A distribuição de energia é descrita por um campo de temperaturas.

A evolução dos campos de massas específicas, velocidades e energia ao longo do tempo é definida, segundo a visão lagrangiana, pelas Eqs. (3.1), (3.2) e (3.3) - conservação da massa, balanço da quantidade de movimento e conservação da energia, respectivamente, a seguir apresentadas:

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \vec{v} = 0, \quad (3.1)$$

onde:

ρ é a massa específica

\vec{v} é a velocidade

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\nabla P + \mu \nabla^2 \vec{v} - \frac{2}{3} \nabla (\mu \nabla \cdot \vec{v}) + \rho \vec{g}, \quad (3.2)$$

onde:

P é a pressão absoluta

μ é a viscosidade absoluta

\vec{g} é a aceleração da gravidade

$\mu \nabla^2 \vec{v}$ são as forças viscosas, por unidade de volume

∇P é a força devida à pressão, por unidade de volume

$\rho \vec{g}$ é força devida à gravidade, por unidade de volume

$$\rho \frac{De}{Dt} = -P(\nabla \cdot \vec{v}) + \varepsilon_v + \nabla \cdot (K \nabla T) + \dot{q}. \quad (3.3)$$

onde:

e é a energia interna específica

ε_v é a taxa de dissipação de energia, por unidade de volume

K é a condutibilidade térmica

T é a temperatura absoluta

$P(\nabla \cdot \vec{v})$ é a taxa de trabalho devida às forças de pressão, por unidade de volume

$\nabla \cdot (K \nabla T)$ é a taxa de calor gerado devido à difusão, por unidade de volume

\dot{q} é a taxa de calor fornecido pela fonte, por unidade de volume

As equações anteriores estão escritas para um fluido newtoniano.

Efetuando-se análise das equações de conservação, em um domínio 3D:

- A lei da conservação da massa é composta por uma equação, que apresenta uma única incógnita: a massa específica.
- O balanço da quantidade de movimento é constituído por três equações (uma em cada direção cartesiana), apresentando quatro incógnitas: as três componentes da velocidade e a pressão (viscosidade absoluta e aceleração da gravidade são consideradas conhecidas e constantes). Para que possa ser solucionada, é empregada uma equação de estado para o cálculo da pressão, apresentada na próxima seção.

- Existem duas incógnitas na lei da conservação da energia: a energia específica e a temperatura. A condutibilidade térmica, o termo de dissipação de energia por unidade de volume e o calor gerado pelas fontes, por unidade de volume, são considerados constantes e conhecidos. Desta forma, têm-se uma equação e duas incógnitas. A energia interna específica precisa ser modelada, como apresentado na seção 3.2, para que possa ser solucionada a Eq. (3.3).

3.1 Modelagem da Pressão

3.1.1 Equação de Estado

O fluido compressível é aproximado a um fluido incompressível por meio de uma modelagem de fluido quase-compressível, e a pressão é calculada através de uma equação de estado, conhecida como equação de Tait, sugerida em Batchelor (2000), [46]:

$$P = B \left(\left(\frac{\rho}{\rho_o} \right)^\gamma - 1 \right), \quad (3.4)$$

onde:

B é o termo relacionado às flutuações das massas específicas do fluido

ρ_o é a massa específica de repouso do fluido

Ma é o número de Mach

$\gamma=7$

Para que a equação de Tait possa ser aplicada na previsão do campo de pressões do fluido, o valor máximo do número de Mach deve ser 0,1.

$$Ma = \frac{v}{c} \leq 0,1. \quad (3.5)$$

onde:

v é a magnitude da velocidade do escoamento

c é a magnitude da velocidade de propagação do som no fluido

Na modelagem matemática empregada nesta Tese de Doutorado, também foi empregado o conceito da pressão modificada, apresentado a seguir.

3.1.2 Pressão Modificada

Batchelor (2000), [46], introduziu o conceito da pressão modificada, definido como a parte remanescente da pressão que supera a parcela suficiente para balancear a ação da força gravitacional, provocando o movimento do fluido. A Eq. (3.6) o apresenta de forma matemática:

$$P_{\text{mod}} = (P - P_0) - \rho g(H - y), \quad (3.6)$$

onde:

P_{mod} é a pressão modificada

y é a ordenada da posição ocupado pelo fluido

O emprego da pressão modificada altera a forma da equação do balanço da quantidade de movimento:

$$\rho \frac{D \vec{v}}{Dt} = -\nabla P_{\text{mod}} + \mu \nabla^2 \vec{v}. \quad (3.7)$$

Este conceito pode ser aplicado para casos de estática ou dinâmica de fluidos. Em situações de hidrostática a pressão modificada é nula. Já em casos dinâmicos, é a diferença entre a pressão dinâmica do fluido e o termo $\rho g(H - y)$.

3.2 Modelagem da Energia Interna Específica

Para escoamentos de fluidos incompressíveis, define-se o calor específico a volume constante (c_v):

$$c_v \equiv \left(\frac{\partial e}{\partial T} \right)_v, \quad (3.8)$$

Observada a consideração anterior, a energia interna específica é função apenas da temperatura, o que conduz à relação:

$$c_v = \frac{De}{DT} \Rightarrow De = c_v DT. \quad (3.9)$$

3.3 Condições iniciais e de contorno

Em um problema de valor inicial, especificam-se os valores da função e de suas derivadas no instante inicial (t_0).

Quando são impostas condições sobre o valor da função e de suas derivadas nas fronteiras temos um problema de contorno. Normalmente, a solução de um sistema de equações diferenciais requer o conhecimento de condições iniciais e de contorno.

As condições de contorno podem ser definidas pela equação:

$$E \frac{\partial \Psi(X_\Gamma)}{\partial n_\Psi} + F \Psi(X_\Gamma) = G(X_\Gamma). \quad (3.10)$$

onde:

Γ é a fronteira

X_Γ é um ponto pertencente à fronteira

$\Psi(X_\Gamma)$ é a propriedade física na posição (X_Γ)

n_Ψ é a direção normal à fronteira

E e F são constantes

$G(X_\Gamma)$ é uma função na posição (X_Γ)

As condições de contorno podem ser de três tipos:

1. Condição de contorno de Dirichlet, na qual os valores da função são conhecidos nas fronteiras do problema:

$$F\Psi(X_\Gamma) = C_{te}, \quad (3.11)$$

onde C_{te} é um valor conhecido no contorno.

2. Condição de contorno de Neumann, quando nas fronteiras se conhecem os valores da derivada primeira da função:

$$E \frac{\partial \Psi(X_\Gamma)}{\partial n_\Psi} = G(X_\Gamma). \quad (3.12)$$

3. Condição de contorno de Robin ou mista, onde são conhecidos valores da função e de suas derivadas nas fronteiras. Neste caso, a Eq. (3.10) não sofre simplificações.

Capítulo 4

Modelagem SPH para as Equações de Conservação

4.1 Fundamentos do Método SPH

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

$$f(X) = \int_{\Omega} f(X')\delta(X - X')dX' , \quad (4.1)$$

$$\delta(X - X') = \begin{cases} 1, & \text{se } X = X', \\ 0, & \text{c.c.} \end{cases} \quad (4.2)$$

onde:

$X = (x, y)$ é a posição do ponto fixo

$X' = (x', y')$ é a posição do ponto variável

$f(X)$ é a função avaliada na posição do ponto fixo

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

Ω é o domínio

dX' é um elemento infinitesimal de volume

Ao se substituir o delta de Dirac pelo *kernel* ou Função de Suavização, W , obtém-se a

aproximação para a função f na posição X :

$$\langle f(X) \rangle = \int_{\Omega} f(X')W(X - X', h)dX' , \quad (4.3)$$

onde:

$\langle f(X) \rangle$ é a aproximação obtida para a função f na posição X

h é o raio de suporte

$W(X - X', h)$ é o *Kernel* avaliado na posição $(X - X')$

O *Kernel* satisfaz algumas propriedades:

- **Positividade:** $W(X - X', h) \geq 0$,
- **Par(simetria):** $W(X - X', h) = W(X' - X, h)$,
- **Normalização:** $\int_{\Omega} W(X - X', h)dX' = 1$,
- **Suporte compacto:** $W(X - X', h) = 0$, quando $|X - X'| > kh$, onde kh é o raio do domínio de influência,
- **Convergência:** $\lim_{h \rightarrow 0} W(X - X', h) = \delta(X - X')$.
- **Decaimento:**
Seu valor decresce monotonicamente à medida que o ponto avaliado se afasta do ponto central do domínio de influência.
- **Suavidade.**

Qualquer função que respeite as propriedades anteriores pode ser empregada como uma Função de Suavização no método SPH.

A essência do método consiste em discretizar o domínio contínuo em um número finito de partículas e nestas obter os valores das grandezas de interesse a partir de uma interpolação ponderada do valor das grandezas definidas nas partículas vizinhas. Apenas as partículas vizinhas, que se encontram a uma distância máxima definida (dentro do domínio de influência) da partícula fixa considerada, contribuirão para o comportamento

desta.

A Figura 4.1 apresenta o gráfico do *kernel* e o domínio de influência (circunferência de raio kh), onde podem ser visualizadas algumas de suas propriedades e a discretização empregando partículas lagrangianas.

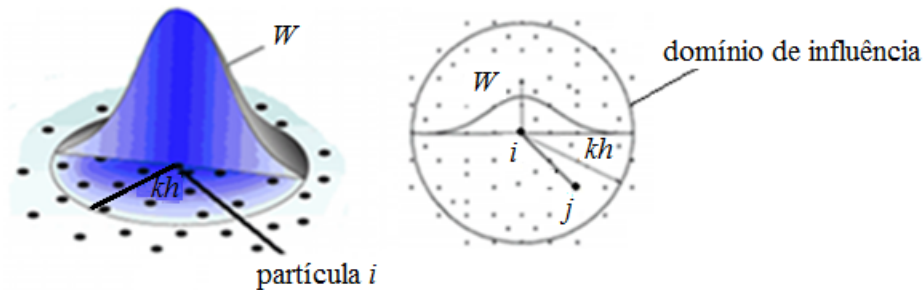


Figura 4.1: O *kernel* e seu domínio de influência. No gráfico, visualizam-se algumas propriedades (positividade, simetria, suporte compacto, convergência, decaimento e suavidade). Uma partícula fixa ' i ' e uma de suas vizinhas ' j ' são apresentadas.

Discretizando-se o domínio por partículas, o valor da função f será conhecido em alguns pontos do domínio (posições dos centros de massas dos elementos lagrangianos). O elemento infinitesimal de volume é definido como $dX' = (m'/\rho')$.

A Eq. (4.3), escrita após efetuada a discretização por partículas, conduz à expressão geral para o método SPH:

$$f_i = \sum_{j=1}^n m_j \frac{f_j}{\rho_j} W(X_i - X_j, h). \quad (4.4)$$

onde:

f_i é o valor aproximado da função na posição da partícula i

f_j é o valor aproximado da função na posição da partícula vizinha

m_j é a massa da partícula vizinha

ρ_j é a massa específica da partícula vizinha

X_i é a posição da partícula fixa

X_j é a posição da partícula vizinha

$W(X_i - X_j, h)$ é o *Kernel*, ou Função de Suavização, avaliado na posição $X_i - X_j$

n é o número de partículas vizinhas

Devido à propriedade de suporte compacto, o somatório está limitado ao número de partículas vizinhas, e não a todo o domínio computacional.

4.1.1 Aproximações para o Divergente de uma Função

Para se obter uma aproximação para o divergente de uma função vetorial, substitui-se $f(X)$ por $\nabla \cdot f(X)$, na Eq. (4.3):

$$\langle \nabla \cdot f(X) \rangle = \int_{\Omega} [\nabla \cdot f(X')] W(X - X', h) dX', \quad (4.5)$$

onde:

$\langle \nabla \cdot f(X) \rangle$ é a aproximação para o divergente da função na posição X

$f(X')$ é a função avaliada na posição do ponto variável

Sabe-se que:

$$[\nabla \cdot f(X')] W(X - X', h) = \nabla \cdot [f(X') W(X - X', h)] - f(X') \cdot \nabla W(X - X', h), \quad (4.6)$$

Combinando as Eqs. (4.3) e (4.6):

$$\langle \nabla \cdot f(X) \rangle = \int_{\Omega} \nabla \cdot [f(X') W(X - X', h)] dX' - \int_{\Omega} f(X') \cdot \nabla W(X - X', h) dX', \quad (4.7)$$

Aplicando-se o teorema da divergência (ou de Gauss) ao primeiro termo do lado direito da equação anterior:

$$\langle \nabla \cdot f(X) \rangle = \int_s f(X') W(X - X', h) \vec{n} \cdot d\vec{S} - \int_{\Omega} f(X') \cdot \nabla W(X - X', h) dX', \quad (4.8)$$

onde:

S é a superfície de integração

$d\vec{S}$ é o elemento infinitesimal de superfície

\vec{n} é o vetor unitário normal à superfície

Devido à propriedade de suporte compacto do *kernel*:

$$\langle \nabla \cdot f(X) \rangle = - \int_{\Omega} f(X') \cdot \nabla W(X - X', h) dX', \quad (4.9)$$

E, após a discretização por partículas, tem-se:

$$\nabla \cdot f_i = - \sum_{j=1}^n f_j \cdot \nabla W(X_i - X_j, h) \frac{m_j}{\rho_j}. \quad (4.10)$$

onde $\nabla \cdot f_i$ é o divergente da função na partícula fixa.

Esta é a forma básica para a aproximação do divergente no método SPH.

A utilização da aproximação na forma básica para o divergente, Eq. (4.10) não conduz aos melhores resultados em aplicações de escoamentos de fluidos (Petronetto, 2008), [47]. Monaghan (1992), [48], obteve uma segunda forma para a aproximação do divergente a partir da utilização da identidade matemática:

$$\nabla \cdot f = \frac{1}{\rho} [\nabla \cdot (\rho f) - f \nabla \cdot \rho], \quad (4.11)$$

O que conduziu a uma nova aproximação para o divergente de uma função:

$$\nabla \cdot f_i = \frac{1}{\rho_i} \sum_{j=1}^n (f_j - f_i) \cdot \nabla W(X_i - X_j, h) m_j, \quad (4.12)$$

onde ρ_i é a massa específica da partícula fixa.

4.1.2 Aproximações para o Gradiente de uma Função

De forma análoga ao procedimento realizado para a obtenção da aproximação para o divergente de uma função com o método SPH, chega-se à aproximação para o gradiente:

$$\langle \nabla f(X) \rangle = - \int_{\Omega} f(X') \nabla W(X - X', h) dX', \quad (4.13)$$

onde $\langle \nabla f(X) \rangle$ é a aproximação para o gradiente da função na posição X

Na forma discretizada, empregada no método SPH, tem-se:

$$\nabla f_i = - \sum_{j=1}^n f_j \nabla W(X_i - X_j, h) \frac{m_j}{\rho_j}, \quad (4.14)$$

onde ∇f_i é o gradiente da função na partícula fixa

Esta é a forma básica para a aproximação do gradiente de uma função no SPH.

Outras formas para essa aproximação, mais precisas, no que se refere à obediência das propriedades de conservação, associadas às equações aplicadas na simulação de fluidos são encontradas na literatura, [47]. Em 1992, Monaghan propôs escrever o gradiente de um campo escalar usando a regra da derivada do produto, [48]:

$$\nabla f = \frac{1}{\rho} [\nabla(\rho f) - f \nabla \rho], \quad (4.15)$$

Empregando-se a Eq. (4.14), obtém-se:

$$\nabla f_i = - \frac{1}{\rho_i} \sum_{j=1}^n (f_j - f_i) \nabla W(X_i - X_j, h) m_j, \quad (4.16)$$

Em situações em que a interação entre duas partículas deve ser simétrica, tem sido empregada uma terceira forma para a aproximação do gradiente de uma função. Isto ocorre em casos, como na aproximação do gradiente de pressão, em que duas partículas,

ocupando posições distintas no espaço, possuem diferentes pressões num certo instante de tempo. Ao utilizar a aproximação simétrica, conforme será apresentada a seguir, garante-se que as forças exercidas entre um par de partículas tenham a mesma magnitude. Partindo-se da identidade matemática:

$$\nabla \left(\frac{f(X)}{\rho} \right) = \frac{\nabla f(X)}{\rho} + \frac{f(X)}{\rho^2} \nabla \rho \quad \Rightarrow \quad (4.17)$$

$$\frac{\nabla f(X)}{\rho} = \nabla \left(\frac{f(X)}{\rho} \right) - \frac{f(X)}{\rho^2} \nabla \rho, \quad (4.18)$$

Obtendo-se as aproximações pelo SPH para os dois termos do lado direito da equação anterior, a partir da Eq. (4.14), tem-se:

$$\nabla \left(\frac{f(X)}{\rho} \right)_i = - \sum_{j=1}^n m_j \left(\frac{f_j}{\rho_j^2} \right) \nabla W(X_i - X_j, h) \quad (4.19)$$

$$\left(\frac{f(X)}{\rho^2} \nabla \rho \right)_i = - \sum_{j=1}^n \frac{f_i}{\rho_i^2} m_j \nabla W(X_i - X_j, h) \quad (4.20)$$

Finalmente, substituindo-se as Eqs. (4.19) e (4.20) na Eq. (4.18), obtém-se a expressão para a aproximação simétrica do gradiente de uma função, em uma partícula lagrangiana i :

$$\nabla f_i = -\rho_i \sum_{j=1}^n m_j \left(\frac{f_i}{\rho_i^2} + \frac{f_j}{\rho_j^2} \right) \nabla W(X_i - X_j, h). \quad (4.21)$$

A forma simétrica para a aproximação do gradiente foi a empregada neste trabalho.

4.1.3 Aproximação para o Laplaciano de uma Função

A aproximação do laplaciano de uma função empregando o método SPH fo obtida a partir da expansão da série de Taylor em torno um ponto espacial fixo.

No sistema de coordenadas cartesianas, a expressão para o laplaciano de uma função apresenta a seguinte forma:

$$\Delta f_i = \left(\frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f_i}{\partial y^2} \right) = 2 \sum_{j=1}^n \frac{m_j}{\rho_j} (f_i - f_j) \Delta X_{ij} \cdot \nabla W(X_i - X_j, h), \quad (4.22)$$

$$\Delta X_{ij} = \frac{X_i - X_j}{|X_i - X_j|^2}. \quad (4.23)$$

onde Δf_i é o laplaciano da função na posição da partícula fixa.

A dedução da aproximação do laplaciano está apresentada em detalhes no Apêndice A.

4.1.4 Aproximações SPH para as Equações de Conservação

A partir das aproximações obtidas para o divergente, gradiente e laplaciano de uma função, obtiveram-se as aproximações para as equações de conservação a serem solucionadas pelo método SPH:

Conservação da massa:

$$\frac{D\rho_i}{Dt} = \sum_{j=1}^n m_j \left(\vec{v}_i - \vec{v}_j \right) \cdot \nabla W(X_i - X_j, h). \quad (4.24)$$

\vec{v}_i é a velocidade da partícula fixa

\vec{v}_j é a velocidade da partícula vizinha

Balço da Quantidade de Movimento:

$$\begin{aligned} \frac{D\vec{v}_i}{Dt} = & - \sum_{j=1}^n m_j \left[\frac{P_i}{(\rho_i)^2} + \frac{P_j}{(\rho_j)^2} \right] \nabla W(X_i - X_j, h) + \\ & 2v_i \sum_{j=1}^n \frac{m_j}{\rho_j} \left(\vec{v}_i - \vec{v}_j \right) \frac{(X_i - X_j)}{|X_i - X_j|^2} \cdot \nabla W(X_i - X_j, h) + \vec{g}. \end{aligned} \quad (4.25)$$

onde:

P_i é a pressão da partícula fixa

P_j é a pressão da partícula vizinha

v_i é a viscosidade cinemática da partícula fixa

Conservação da Energia:

$$\frac{De_i}{Dt} = -P_i \sum_{j=1}^n m_j \left(\vec{v}_i - \vec{v}_j \right) \cdot \nabla W(X_i - X_j, h) + \varepsilon_v + \nabla \cdot \vec{q} + q_H. \quad (4.26)$$

onde e_i é a energia interna específica da partícula fixa.

Nesta Tese de Doutorado, apesar de serem tratados escoamentos de fluidos incompressíveis, foi solucionada a equação de conservação da massa em sua forma compressível no problema da ruptura da barragem (a ser tratada na seção 6.4) pois, devido à presença de domínios de influência incompletos em regiões próximas aos contornos, ocorreu a inconsistência do método SPH nestas áreas (tratada de forma detalhada na subseção 4.1.14). Como consequência, houve variação da massa específica de algumas partículas de fluido, o que foi solucionado com a renormalização desta propriedade, conforme explicado na mesma subseção.

4.1.5 Erro nas Aproximações SPH

Aplicando a expansão da série de Taylor para a função f , diferenciável no domínio, em torno da posição fixa X :

$$\langle f(X) \rangle = \int_{\Omega} [f(X') + f'(X)(X' - X) + \text{Re}(X' - X)]W(X - X', h)dX', \quad (4.27)$$

$$\langle f(X) \rangle = \int_{\Omega} f(X')W(X - X', h)dX' + f'(X) \int_{\Omega} (X' - X)W(X - X', h)dX' + \text{Re}(h^2). \quad (4.28)$$

onde:

$f'(X)$ é a derivada da função, definida na posição X

$\text{Re}(h^2)$ é o erro de 2ª ordem, após o truncamento da série de Taylor

Devido ao *kernel* ser uma função par, alcança-se a expressão apresentada na Eq. (4.3) para a aproximação da função f . Ou seja, existe um erro de 2ª ordem, oriundo do truncamento da série de Taylor, como mostrado nesta subseção, quando é utilizada a Eq. (4.3) para a obtenção da aproximação de uma função pelo método SPH.

4.1.6 Funções de Suavização

Diferentes *kernels* podem ser empregados nas interpolações no método SPH. Liu e Liu (2010), [4], propuseram o uso do *kernel spline* cúbico devido a seu comportamento matemático, assim como de suas derivadas. Outros *kernels* são constantemente empregados nas interpolações. A Tabela 4.1 apresenta alguns deles, para domínios bidimensionais.

Tabela 4.1: Alguns *Kernels* Aplicados no Método SPH

| <i>Kernel</i> | $W(X_i - X_j, h) \text{ (m}^{-2}\text{)}$ | | |
|---------------|---|---|--------|
| 1 | $\frac{15}{7\pi h^2}$ | $\begin{cases} \left(\frac{2}{3} - q^2 + \frac{1}{2}q^3\right), 0 \leq q \leq 1 \\ \left(\frac{1}{6}(2 - q^3)\right), 1 < q \leq 2 \\ 0, \text{ c.c.} \end{cases}$ | (4.29) |
| 2 | $\frac{5}{\pi h^2}$ | $\begin{cases} (1 + 3q)(1 - q)^3, 0 \leq q \leq 1 \\ 0, \text{ c.c.} \end{cases}$ | (4.30) |
| 3 | $\frac{15}{7\pi h^2}$ | $\begin{cases} \left(\frac{2}{3} - \frac{9}{8}q^2 + \frac{19}{24}q^3 - \frac{5}{32}q^4\right), 0 \leq q \leq 2 \\ 0, \text{ c.c.} \end{cases}$ | (4.31) |
| 4 | $\frac{7}{478\pi h^2}$ | $\begin{cases} (3 - q)^5 - 6(2 - q)^5 + 15(1 - q)^5, 0 \leq q \leq 1 \\ (3 - q)^5 - 6(2 - q)^5, 1 < q \leq 2 \\ (3 - q)^5, 2 < q \leq 3 \\ 0, \text{ c.c.} \end{cases}$ | (4.32) |

¹ *Kernel spline* cúbico (Liu e Liu, 2010), [4]² *Kernel* quártico (Lucy, 1977), [22]³ Novo *kernel* quártico (Liu *et al.*, 2003), [49]⁴ *Kernel spline* quántico (Morris *et al.*, 1997), [45]

$$q = \left(\frac{|X_i - X_j|}{h}\right)$$

4.1.7 Busca de Partículas Vizinhas

A busca de partículas vizinhas pode ser realizada de maneira direta ou com o auxílio de grades, que conduzem a um menor número de operações matemáticas e reduzem o custo computacional [9]. A Figura 4.2 mostra a busca direta (todas os pares de partículas ' ij ' do domínio terão as distâncias calculadas e comparadas com o valor de kh) e a busca realizada com emprego de uma grade (apenas as partículas dentro da região sombreada serão objetos da procura).

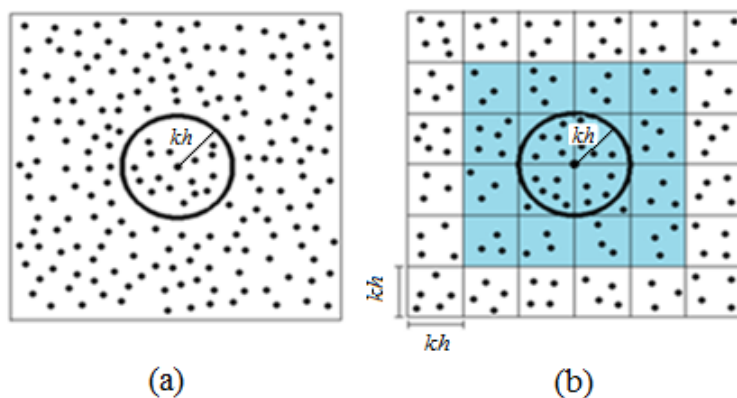


Figura 4.2: Busca das partículas vizinhas. (a) De forma direta.
(b) Com o emprego de uma grade. Adaptada de [9].

4.1.8 Comprimento do Raio de Suporte

O comprimento do raio de suporte e, conseqüentemente, do domínio de influência, é muito importante no método SPH, influenciando a eficiência dos cálculos e a precisão das soluções. Se o domínio de influência for demasiadamente pequeno ou grande, os resultados não serão consistentes com o problema físico estudado.

O sucesso nas aproximações também depende de se possuir um número suficiente e adequado de partículas dentro do domínio de influência (kh). Para que as interpolações sejam representativas no domínio discretizado, o número mínimo de partículas vizinhas

dentro do domínio de influência, deve ser de 5, 21 e 57 em casos 1D, 2D e 3D, respectivamente, [9].

A Figura 4.3 apresenta uma célula 2D cujo domínio de influência possui 21 partículas. Testes numéricos foram realizados e comprovaram ser este o número mínimo de partículas necessário para garantir que as propriedades do *kernel* sejam respeitadas.

Na simulação de choques ou impactos, onde há variação súbita da massa específica localmente, é preciso variar o raio de suporte (h), de tal forma que o número de partículas vizinhas se mantenha próximo de um valor constante. A necessidade de aplicar a correção do raio de suporte a cada iteração numérica ocorre, por exemplo na simulação de rupturas de barragens. Neste trabalho foi empregada a seguinte forma de correção proposta por Liu e Liu (2003), [9]:

$$\frac{Dh}{Dt} = -\frac{1}{n_d} \frac{h}{\rho} \frac{D\rho}{Dt}. \quad (4.33)$$

onde n_d é o número de dimensões do domínio.

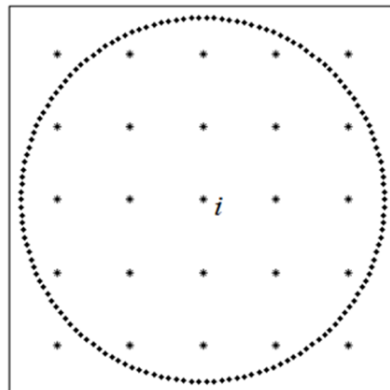


Figura 4.3: Célula com 21 partículas no interior do domínio de influência.

4.1.9 Tratamento dos Contornos

O tratamento dos contornos é uma das maiores dificuldades apresentadas pelo método SPH. Pela importância e influência direta dos contornos na obtenção de resultados consistentes, esta subseção foi reservada para a apresentação das diferentes formas de tratamento das fronteiras no método SPH.

De forma geral, as condições de contorno aplicadas são classificadas como geométricas, repulsivas, dinâmicas ou semi-analíticas.

A forma mais simples de tratar contornos fixos e planos é através da reflexão geométrica das partículas nas paredes (consideradas como planos bem definidos). As colisões contra os planos são tratadas por meio de reflexões geométricas. A elasticidade dos choques é definida por meio de um coeficiente de restituição de energia cinética, permitindo que sejam consideradas as perdas de energia nas colisões. A Figura 4.4 mostra as posições inicial (C_0) e final (C_f) do centro de massa de uma partícula, após colidir sucessivamente com dois planos - A e B - em uma iteração numérica (Nobrega, 2007), [50]. O ponto C_1 corresponde à posição final que seria atingida pelo centro de massa da partícula caso não houvessem paredes delimitando o domínio.

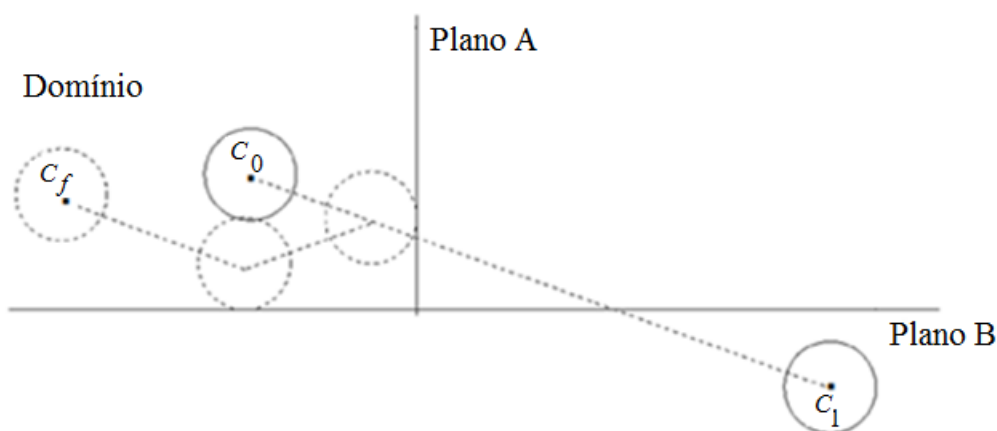


Figura 4.4: Colisões sofridas por uma partícula em um passo de tempo. Adaptada de [50].

Uma analogia à dinâmica molecular é também empregada no tratamento repulsivo dos contornos no SPH. As áreas com contornos sólidos são preenchidas com partículas congeladas (partículas fantasmas 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. Estas partículas exercem uma força de repulsão sobre as partículas 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, [9].

Às partículas virtuais, após sua disposição inicial nas regiões dos contornos, podem ser impostas propriedades físicas de interesse para o estudo de problemas físicos definidos. A partir das propriedades iniciais das partículas fantasmas são alcançadas propriedades aproximadas pela interpolação SPH para as partículas reais do fluido. A força repulsiva de Lennard-Jones não é sempre necessária de ser implementada, ficando isto em função do problema estudado.

A Figura 4.5 apresenta o emprego de ambos os tipos de partículas fantasmas, na simulação das paredes sólidas.

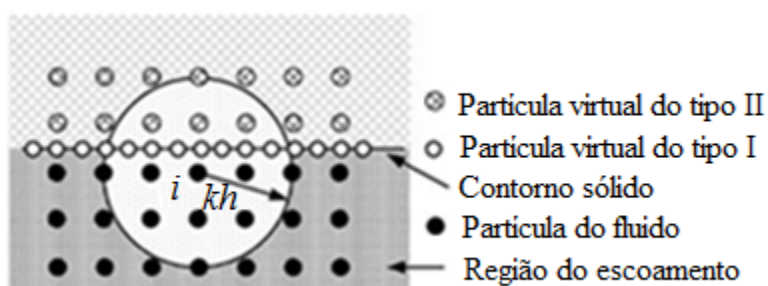


Figura 4.5: Ilustração esquemática da região do contorno sólido. Disposição das partículas virtuais em linha (tipo I). Além do contorno, estão as partículas virtuais do tipo II. Adaptada de [4].

A Figura 4.6 apresenta o emprego de partículas virtuais dos tipos I e II na simulação do clássico problema da quebra de barragem. Fileiras de partículas são fixadas no instante inicial nas paredes (tipo I) ou adjacentermente às paredes (tipo II), como uma extensão do domínio. As velocidades destas partículas são nulas durante todo o tempo simulado. É aplicada a condição de contorno de Neumann para as pressões nas partículas virtuais, ou seja, pressões idênticas àquelas existentes nas partículas do tipo I são conduzidas a cada intervalo de tempo de iteração às partículas virtuais normais às paredes sólidas (Lee *et al.*, 2008), [51].

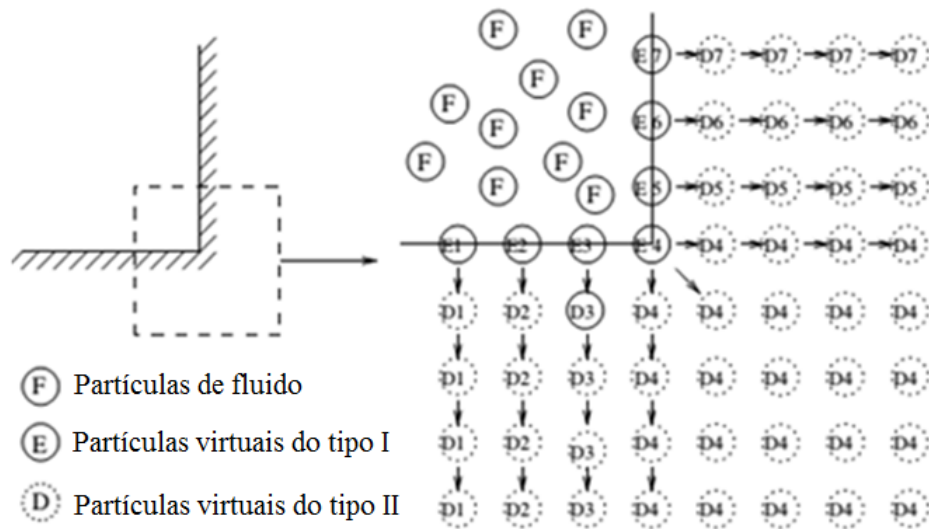


Figura 4.6: Emprego das partículas virtuais na simulação da ruptura da barragem. Adaptada de [51].

A Figura 4.7 apresenta a implementação das condições de contorno de Neumann para a simulação da quebra da barragem no instante inicial e a evolução do campo de pressões no instante 0,23 segundos.

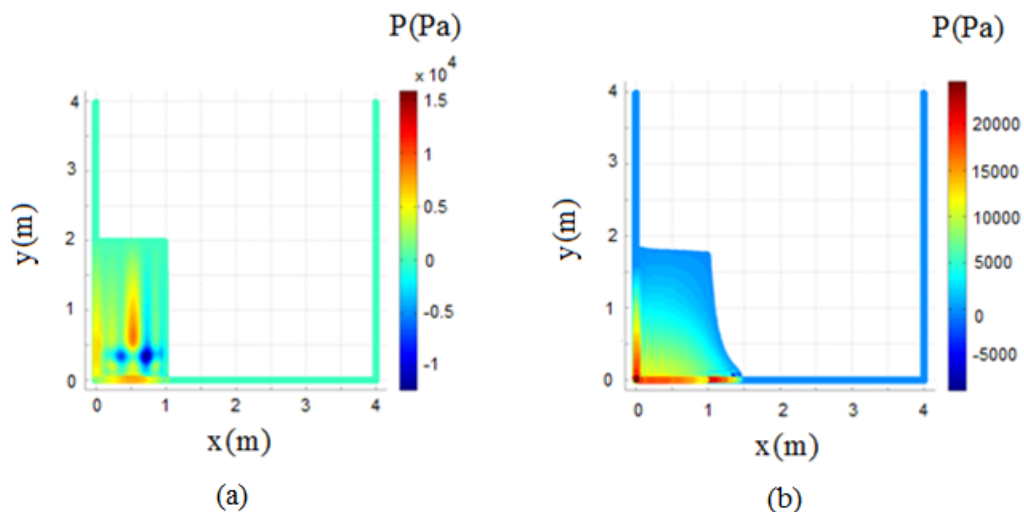


Figura 4.7: Implementação da condição de contorno de Neumann para as pressões nas partículas virtuais (problema da ruptura da barragem). Pressões no instante inicial e (b) 0,23 s após abertura da comporta.

Nas condições de contornos dinâmicas, as partículas dispostas nos contornos são forçadas a satisfazer as equações de conservação da massa, balanço da quantidade de movimento e conservação da energia - Eqs. (3.1), (3.2) e (3.3), respectivamente - e a equação de Tait, Eq. (3.4), para a previsão das pressões, da mesma forma que se faz para com as partículas do fluido.

A Figura 4.8 mostra a interação entre partículas fixas no contorno (círculos na cor preta) e uma partícula de fluido aproximando-se da fronteira (círculo sem preenchimento).

As partículas fixas nos contornos dinâmicos podem ser imóveis (velocidades nulas) ou possuírem movimento, regido por uma função externa imposta (no caso da existência de batedores de ondas e comportas, entre outros).

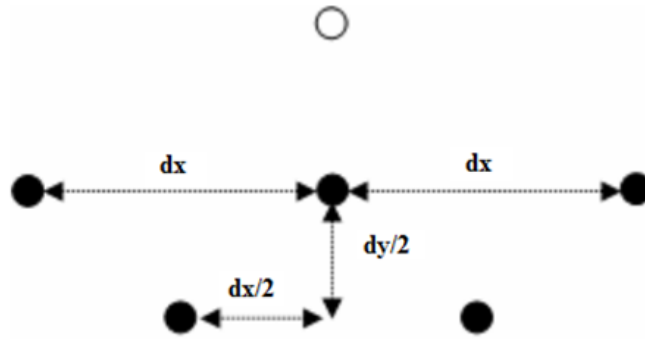


Figura 4.8: Interação entre partículas fixas no contorno (círculos pretos) e uma partícula de fluido (círculo sem preenchimento). As partículas de contorno estão dispostas de uma maneira escalonada. Extraída de Gomez-Gesteira *et al.* (2010), [52].

A Figura 4.9 mostra o aumento da massa específica e da pressão de uma partícula fixa no contorno, à medida que uma partícula de fluido se aproxima da fronteira. Quando uma partícula de fluido se aproxima do contorno, a massa específica e a pressão das partículas posicionadas nas fronteiras aumenta, em obediência às Eqs. (4.25) e (3.4). Isto resulta em um aumento na magnitude da força de repulsão exercida sobre o fluido, devido ao aumento do valor do termo $\left(\frac{P}{\rho^2}\right)$ na equação do balanço da quantidade de movimento. Como resultado, o fluido mantém-se no interior do domínio (Gomez-Gesteira *et al.*, 2012), [53].

Kulasegaram *et al.* (2004), [54], apresentaram as condições de contornos semi-analíticas, baseadas em uma derivação variacional que garante a obediência às leis de conservação. Estas condições de contornos levavam em conta o truncamento do *kernel* próximo aos contornos, sendo efetuada a renormalização; sendo eficazes, porém, apenas para certas geometrias.

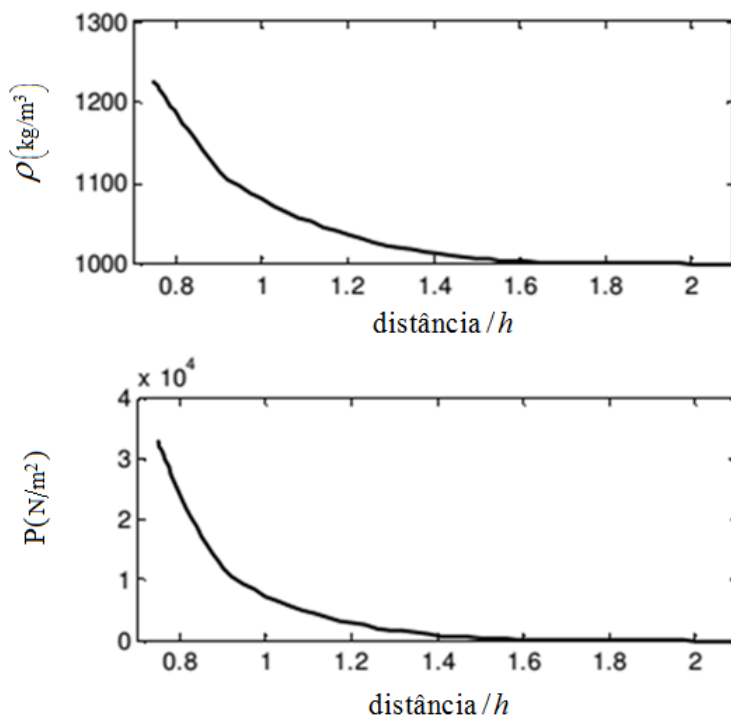


Figura 4.9: Condições de contornos dinâmicas. Aumento da massa específica e da pressão de uma partícula de contorno, com a diminuição da distância em relação a uma partícula de fluido. Adaptada de [52].

Ferrand *et al.* (2012), [55], aperfeiçoaram estas condições com um esquema de integração temporal que permitiu a renormalização para quaisquer geometrias, implementação de campos de pressão próximos aos contornos, obtenção de gradientes de pressão e termos viscosos fisicamente corretos com uma nova formulação dos operadores diferenciais, possibilitando sua aplicação em escoamentos turbulentos.

Leroy *et al.* (2012), [56], efetuaram a imposição das denominadas condições de contorno unificadas semi-analíticas na parede (*unified semi-analytical wall boundary conditions*) através da implementação de um novo operador Laplaciano. Os autores realizaram vários estudos de casos nos regimes laminar (problema da cavidade - *lid driven cavity* -; escoamento de fluido viscoso ao redor de uma série infinita de cilindros no interior de um canal; quebra da barragem sobre uma aresta triangular; escoamento em uma roda d'água)

e turbulento. O modelo de turbulência κ - ϵ em dois escoamentos: um primeiro em canal (escoamento de Poiseuille) e um segundo, através de um sistema periódico de passagem para peixes. A validação das condições de contorno implementadas foi efetuada, com excelente concordância com os resultados existentes na literatura.

A periodicidade também é implementada no SPH quando há contornos abertos, de forma a manter as partículas dentro do domínio definido ao longo de todo o tempo da simulação.

Nos problemas tratados neste trabalho, foram empregadas partículas virtuais, e a condição de contorno geométrica, com coeficientes de restituição de energia no tratamento dos contornos.

4.1.10 Viscosidade artificial

A transformação da energia cinética em calor ocorre em problemas que envolvem principalmente ondas de choque e precisa ser mensurado, o que não acontece empregando-se as aproximações para as equações de conservação nas formas apresentadas nas Eqs. (4.25) e (4.26).

Aquela transformação de energia pode ser representada como uma forma de dissipação viscosa. Esta idéia levou Von Neumann-Richtmyer ao desenvolvimento da viscosidade artificial, em 1950. Sua aplicação nas simulações tem como objetivo evitar instabilidades numéricas, bem como a interpenetração entre as partículas. A formulação empregada na modelagem da viscosidade artificial é apresentada a seguir, [9]:

$$\pi_{ij} = \begin{cases} \frac{-\alpha_{\pi} c_{ij} \chi_{ij} + \beta_{\pi} \chi_{ij}^2}{\bar{\rho}_{ij}}, & \vec{v}_{ij} \cdot X_{ij} < 0 \\ 0, & \vec{v}_{ij} \cdot X_{ij} > 0 \end{cases} \quad (4.34)$$

$$\chi_{ij} = \frac{h_{ij} \vec{v}_{ij} \cdot X_{ij}}{|X_{ij}|^2 + \varphi^2}, \quad (4.35)$$

$$c_{ij} = \frac{c_i + c_j}{2}, \quad (4.36)$$

$$\bar{\rho}_{ij} = \frac{\rho_i + \rho_j}{2}, \quad (4.37)$$

$$h_{ij} = \frac{h_i + h_j}{2}, \quad (4.38)$$

$$\vec{v}_{ij} = \vec{v}_i - \vec{v}_j. \quad (4.39)$$

onde:

π_{ij} é a viscosidade artificial

α_π é um dos coeficientes empregados no cálculo da viscosidade artificial

β_π é um coeficiente empregado no cálculo da viscosidade artificial

c_i e c_j são as velocidades do som para as partículas fixa e vizinha, respectivamente

h_i e h_j são os raios de suporte das partículas fixa e vizinha, respectivamente

\vec{v}_{ij} é a velocidade relativa entre as partículas i e j

φ^2 é um fator que previne divergências numéricas quando duas partículas se aproximam

Nas equações anteriores, α_π e β_π são constantes cujos valores variam em função do problema estudado e o fator φ^2 é definido como $0.01h_{ij}^2$.

O termo relacionado à viscosidade artificial é adicionado aos termos de pressão existentes nas Eqs. (4.25) e (4.26) - aproximações para o balanço da quantidade de movimento e conservação de energia. Após a adição à equação do balanço da quantidade de movimento, obtém-se a seguinte equação para a aceleração da partícula:

$$\frac{D\vec{v}_i^*}{Dt} = \frac{D\vec{v}_i}{Dt} - \sum_{j=1}^n m_j \pi_{ij} \nabla W(X_i - X_j, h), \quad (4.40)$$

onde $\frac{D\vec{v}_i^*}{Dt}$ é a aceleração da partícula fixa, após a adição do termo relacionado à viscosidade artificial à equação do balanço da quantidade de movimento.

O primeiro termo do lado direito da Eq. (4.40) é calculado a partir da Eq. (4.25).

Analogamente, faz-se a adição do termo de viscosidade artificial para a equação de conservação da energia:

$$\frac{De_i^*}{Dt} = \frac{De_i}{Dt} + \sum_{j=1}^n m_j \pi_{ij} (\vec{v}_i - \vec{v}_j) \cdot \nabla W(X_i - X_j, h). \quad (4.41)$$

onde $\frac{De_i^*}{Dt}$ é a taxa de variação energia interna específica da partícula fixa, após a adição do termo relacionado à viscosidade artificial à equação de conservação da energia.

O primeiro termo do lado direito da equação anterior é calculado com o emprego da Eq. (4.26).

4.1.11 XSPH

A fim de evitar a interpenetração das partículas, com a formação de aglomerados instáveis, e melhorar a estabilidade numérica das simulações, Monaghan (1989), [57], propôs uma correção para as velocidades das partículas conhecida como XSPH, através da qual mantém-se um movimento mais ordenado das mesmas.

Nesta correção, utilizam-se as velocidades médias das partículas vizinhas para o cálculo da velocidade da partícula fixa, conforme mostra a Eq. (4.42):

$$\vec{v}_i^* = \vec{v}_i + \eta \sum_{j=1}^n \frac{2m_j}{\rho_i + \rho_j} (\vec{v}_j - \vec{v}_i) W(X_i - X_j, h). \quad (4.42)$$

onde:

\vec{v}_i^* é a velocidade da partícula fixa, após a aplicação do XSPH

η é um parâmetro que varia entre 0 e 1,0, sendo comumente usado como 0,5, [52].

A Figura 4.10 ilustra o efeito da aplicação da correção XSPH em um escoamento de fluido.

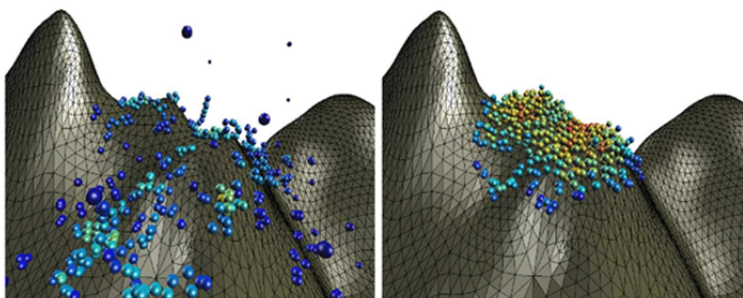


Figura 4.10: escoamento de lava sem e com a aplicação do XSPH, respectivamente.

Sem o XSPH, a simulação explode. No outro caso, adquire um caráter estável.

Extraída de Paiva (2007), [58].

4.1.12 Instabilidade de Tensão

A instabilidade de tensão resulta na formação de aglomerados de partículas, em um comportamento que não é físico, ocorre em regiões onde as partículas apresentam pressões negativas, provenientes da estimativa da equação de estado para a pressão.

A Figura 4.11 mostra a ocorrência da instabilidade de tensão, com a aglomeração das partículas em fileiras, em um escoamento de fluido ao redor de um prisma.

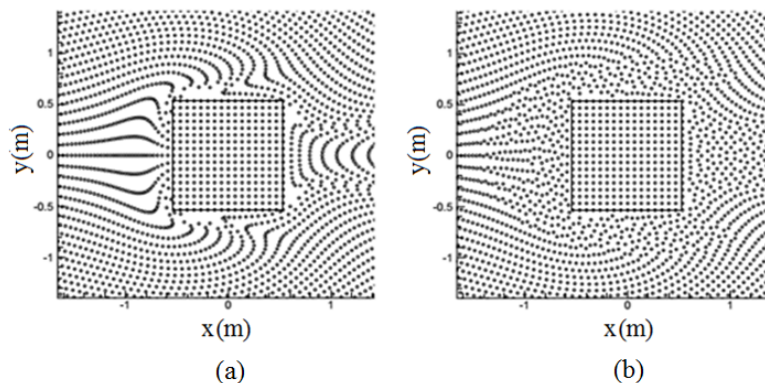


Figura 4.11: Instabilidade de tensão. Em (a) as partículas se aglomeram em forma de fileiras. Em (b) as partículas estão em uma distribuição razoavelmente uniforme, após a correção daquela. Extraída de [59].

As forças de repulsão entre duas partículas devem aumentar quando a distância entre elas diminui. Após realizar simulações cujos resultados mostraram boa concordância com os experimentos, Monaghan propôs a adição de um novo termo à equação do balanço da quantidade de movimento, similar a uma pressão artificial, a fim de promover a repulsão entre as partículas e evitar a instabilidade de tensão (Monaghan, 2000), [60].

O termo a ser adicionado à Eq. (4.25) é:

$$- \sum_{j=1}^n m_j R(f_{ij})^a \nabla W(X_i - X_j, h), \quad (4.43)$$

$$R(f_{ij})^a = R \left[\frac{W(X_i - X_j, h)}{W(\Delta p, h)} \right]^a, \quad (4.44)$$

onde:

Δp é o espaçamento médio entre as partículas na vizinhança da partícula fixa a assume o valor 4, para simulações em dinâmica dos fluidos, [60].

$$R = R_i + R_j, \quad (4.45)$$

$$R_i = \begin{cases} \lambda \frac{|P_i|}{\rho_i^2}, & \text{se } P_i < 0 \\ 0, & \text{c.c.} \end{cases} \quad (4.46)$$

$$R_j = \begin{cases} \lambda \frac{|P_j|}{\rho_j^2}, & \text{se } P_j < 0 \\ 0, & \text{c.c.} \end{cases} \quad (4.47)$$

onde λ é um parâmetro cujo valor depende de h , a e n_p .

4.1.13 Integração Temporal

Através de métodos de integração numérica, realizou-se a atualização das propriedades das partículas no tempo (posição, velocidade, energia e outras). Dentre os métodos na integração temporal estão Runge-Kutta de 1ª ordem (Euler), *Leap-Frog* e algoritmos mais elaborados como o preditor-corretor, Verlet, symplectic ou Beeman, [52].

A estabilidade da integração depende da escolha do passo de tempo Δt . Aplicou-se o critério de estabilidade numérica CFL (condição de Courant-Friedrichs-Lewy) para a garantia da convergência dos resultados (Courant *et al.*, 1967), [61], (Liu e Liu, 2003), [9].

A seguir serão apresentados os esquemas de integração dos métodos de Euler - empregado neste trabalho - e *Leap Frog*, também de grande implementação em modelos numéricos.

4.1.13.1 Método de Euler

Neste método, o mais simples, a velocidade e a posição são atualizadas paralelamente da seguinte maneira:

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t) + \frac{D\vec{v}}{Dt}(\Delta t) \\ X(t + \Delta t) = X(t) + \Delta t \vec{v}(t + \Delta t) \end{array} \right. \quad (4.48)$$

onde Δt é o passo de tempo.

Como ponto negativo, esclarece-se que o método de Euler apresenta uma precisão de primeira ordem e pode se tornar bastante instável em certas circunstâncias, o que pode ser corrigido ao se tomar um passo de tempo Δt muito pequeno.

4.1.13.2 Integrador *Leap Frog*

Neste método, a velocidade é calculada nos pontos médios dos intervalos de tempo. Desta forma, a posição e a velocidade são avaliados intercaladamente.

$$\begin{cases} \vec{v}(t + \frac{1}{2}\Delta t) = \vec{v}(t - \frac{1}{2}\Delta t) + \frac{D\vec{v}}{Dt}(\Delta t) \\ X(t + \Delta t) = X(t) + \Delta t \vec{v}(t + \frac{1}{2}\Delta t) \end{cases} \quad (4.49)$$

A velocidade é calculada como a média entre as velocidades nos instantes anterior e posterior:

$$\vec{v}(t) = \frac{1}{2} \left[\vec{v}(t + \frac{1}{2}\Delta t) + \vec{v}(t - \frac{1}{2}\Delta t) \right], \quad (4.50)$$

A inicialização do método requer um cálculo inicial da velocidade $\vec{v}_i(-1/2)$ pelo método de Euler:

$$\vec{v}(-1/2) = \vec{v}(0) - \frac{1}{2} \frac{D\vec{v}}{Dt} \Big|_{t=0} \Delta t. \quad (4.51)$$

4.1.14 Consistência do Método SPH

Segundo o teorema da equivalência de Lax-Richtmeyer, sabe-se que, se um modelo numérico é estável, a convergência da solução para o problema bem-colocado será determinada pela consistência da função de aproximação. No método SPH, a consistência depende, além da função de aproximação empregada, do domínio de influência, do número de partículas e da distribuição no seu interior.

Analisando-se a aproximação de uma função pelo método SPH, obtida pela expansão da série de Taylor, Eq. (4.3), obtém-se um conjunto de condições para os momentos do *kernel* até a N-ésima ordem (M_N), [9].

$$\left\{ \begin{array}{l} M_0 = \int_{\Omega} W(X - X', h) dX' = 1, \\ M_1 = \int_{\Omega} (X - X') W(X - X', h) dX' = 0, \\ M_2 = \int_{\Omega} (X - X')^2 W(X - X', h) dX' = 0, \\ \quad \quad \quad \cdot \\ \quad \quad \quad \cdot \\ \quad \quad \quad \cdot \\ M_N = \int_{\Omega} (X - X')^N W(X - X', h) dX' = 0. \end{array} \right. \quad (4.52)$$

As consistências de ordens 0 e 1 (C^0 e C^1 , respectivamente) são garantidas ao *kernel* se os valores dos momentos de ordem 0 e 1 (M_0 e M_1) forem os apresentados nas Eqs.(4.52). Em um domínio de influência contínuo e sem truncamento, isto ocorre, devido às propriedades de normalização e simetria do *kernel*. Entretanto, quando as aproximações são estendidas para regiões truncadas pelos contornos não é garantida nem mesmo a consistência de ordem 0 para a função de suavização empregada. Além disso, a satisfação das condições de consistência para o *kernel* não significa necessariamente que a consistência do método SPH é válida.

A Figura 4.12 mostra como ocorre o truncamento do domínio de influência (a partícula fixa está preenchida com a cor negra).

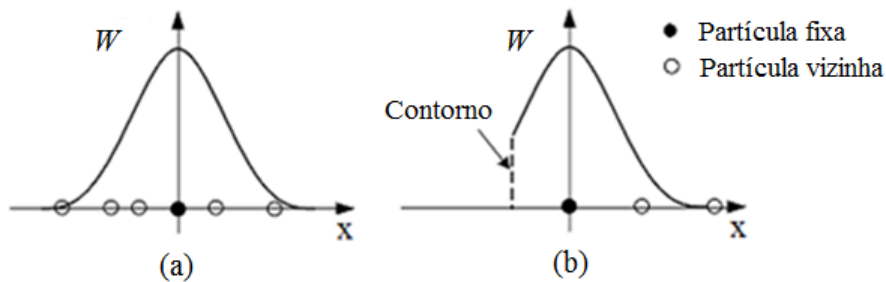


Figura 4.12: Domínio de influência para um caso unidimensional. (a) Completo e (b) incompleto. Em (b), a partícula é fixada perto do contorno e o truncamento do *kernel* ocorre. Adaptada de [4].

Em regiões de contornos, como mostrado na Figura 4.12 (b), a consistência do *kernel* não é garantida. Além disso, também há a existência de um número de partículas que não ocupa todo o domínio de influência. Este fenômeno é conhecido em métodos de partículas sem malhas como inconsistência das partículas e conduz à obtenção de aproximações menos precisas, [4].

As contrapartidas discretas para as expressões dos momentos de ordens 0 e 1 são:

$$\sum_{j=1}^n W(X_i - X_j, h) \Delta V_j = 1, \quad (4.53)$$

$$\sum_{j=1}^n (X_i - X_j) W(X_i - X_j, h) \Delta V_j = 0. \quad (4.54)$$

onde ΔV_j é volume de cada partícula lagrangiana.

Estas duas condições de consistência da discretização geralmente não são satisfeitas. Um exemplo simples é o apresentado na Figura 4.12 (a). Devido ao desbalanceamento das partículas, o lado esquerdo da Eq. (4.53) é menor do que 1 e o da Eq. (4.54) será não nulo. O mesmo ocorrerá na situação apresentada na Figura 4.12 (b), devido ao truncamento da função de suavização.

O emprego do raio de suporte adequado influencia a consistência do método SPH. Com a função de suavização *spline* cúbica e as partículas interiores ao domínio de influência uniformemente distribuídas, verificou-se que o método SPH possui consistência se o raio de suporte for tomado exatamente como o espaçamento entre os centros das partículas, desde que as Eqs. (4.53) e (4.54) sejam satisfeitas. Todavia, ao se variar o comprimento de suavização, isto poderá resultar na não satisfação das citadas equações, levando a uma pouca precisão do método SPH. Esta é a razão pela qual, muitas vezes, é necessário analisar a influência do comprimento de suavização nas aproximações pelo SPH, [4].

4.1.14.1 Restauração da Consistência do Método SPH

Uma proposta de correção da consistência no método SPH foi apresentada por Chen *et al.* (1999), [41]. O método foi denominado CSPM (*Corrective Smoothed Particle Method*) e teve como ponto de partida a expansão da série de Taylor em torno da posição fixa X .

$$f(X') = f(X) + f'(X)(X' - X) + \dots \quad (4.55)$$

Multiplicando ambos os lados pelo *kernel* e integrando no domínio:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} f(X')W(X' - X, h)dX' &= f(X) \int_{\Omega} W(X' - X, h)dX' + \\ f'(X) \int_{\Omega} (X' - X)W(X' - X, h)dX' &+ \dots \end{aligned} \quad (4.56)$$

Desprezando-se todos os termos com derivadas da expansão de Taylor, chega-se a uma forma para a correção de $f(X)$:

$$f(X) = \frac{\int_{\Omega} f(X')W(X' - X, h)dX'}{\int_{\Omega} W(X' - X, h)dX'}, \quad (4.57)$$

Ao se substituir $W(X' - X, h)$, na Eq. (4.56), por $W'(X' - X, h)$ e negligenciar-se as derivadas de segunda ordem e superiores, uma correção para a primeira derivada de f é encontrada:

$$f'(X) = \frac{\int_{\Omega} [f(X') - f(X)] W'(X' - X, h)dX'}{\int_{\Omega} (X' - X)W'(X' - X, h)dX'}. \quad (4.58)$$

onde $W'(X' - X, h)$ é a derivada do *kernel* avaliada na posição $(X' - X)$.

Após efetuada a discretização por partículas, encontram-se as formas propostas pelos autores para a correção da função f e de suas derivadas.

$$f_i = \frac{\sum_{j=1}^n f_j W(X_i - X_j, h) \frac{m_j}{\rho_j}}{\sum_{j=1}^n W(X_i - X_j, h) \frac{m_j}{\rho_j}}, \quad (4.59)$$

$$f'_i = \frac{\sum_{j=1}^n (f_j - f_i) W'(X_i - X_j, h) \frac{m_j}{\rho_j}}{\sum_{j=1}^n W'(X_i - X_j, h) (X_j - X_i) \frac{m_j}{\rho_j}}. \quad (4.60)$$

Comparando-se as Eqs. (4.3) e (4.57), verifica-se que, para as regiões interiores do domínio estudado, as aproximações dos *kernels* no método SPH original (sem correção) e o com correção CSPM são realmente os mesmos, devido à satisfação da condição de normalização. Para as regiões de contornos, uma vez que a integral da função de suavização é truncada pela fronteira, a condição de normalização não pode ser satisfeita.

Com a implementação do CSPM para a correção da função inicialmente aproximada pelo SPH, promove-se a restauração da consistência de ordem zero, pois o denominador da Eq. (4.57) tem um valor diferente da unidade.

No que se refere às aproximações CSPM para as derivadas de f , salvo para os casos em que há distribuição uniforme das partículas no interior do domínio de influência (o que define uma consistência de primeira ordem nesta região), existe consistência de ordem zero tanto nas regiões interiores quanto nas fronteiras.

4.1.15 Filtro de Shepard

No SPH, as partículas podem sofrer grandes variações de pressão, o que é particularmente importante próximo às fronteiras e da superfície livre. Uma maneira simples e de suavizar computacionalmente as flutuações de pressão é filtrar as massas específicas das partículas, a partir das massas específicas das vizinhas, e reiniciando estas propriedades após transcorrido um número de iterações próximo a trinta, [53].

O Filtro de Shepard efetua uma correção para a massa específica da partícula a partir da aplicação da Eq. (4.59):

$$\begin{aligned}
 (\rho_i)_{filtrada} &= \frac{\sum_{j=1}^n \rho_j W(X_i - X_j, h) \frac{m_j}{\rho_j}}{\sum_{j=1}^n W(X_i - X_j, h) \frac{m_j}{\rho_j}} \Rightarrow \\
 (\rho_i)_{filtrada} &= \frac{\sum_{j=1}^n m_j W(X_i - X_j, h)}{\sum_{j=1}^n W(X_i - X_j, h) \frac{m_j}{\rho_j}}. \tag{4.61}
 \end{aligned}$$

onde $(\rho_i)_{filtrada}$ é a massa específica da partícula fixa após a aplicação do Filtro de Shepard.

Ao se analisar a Eq. (4.61), conclui-se que se está realizando uma renormalização das massas específicas das partículas, obtidas a partir da solução da equação da conservação da massa periodicamente na simulação.

4.1.16 Correção do Gradiente de Pressão

As correções das componentes do gradiente de pressão, visando anular o efeito dos contornos e o truncamento do *kernel*, são efetuadas pelo método CSPM, [41], a partir das equações a seguir:

$$\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial \mathbf{x}} \right)_i^* = \frac{\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial \mathbf{x}} \right)_i}{\sum_{j=1}^n \frac{\partial W(X_i - X_j, h)}{\partial \mathbf{x}} (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) \frac{m_j}{\rho_j}}, \tag{4.62}$$

$$\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y}\right)_i^* = \frac{\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y}\right)_i}{\sum_{j=1}^n \frac{\partial W(X_i - X_j, h)}{\partial y} (y_j - y_i) \frac{m_j}{\rho_j}}. \quad (4.63)$$

onde:

$\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x}\right)_i^*$ é a componente do gradiente do *kernel* da partícula fixa, corrigida pelo método CSPM, por unidade de massa, na direção x

$\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y}\right)_i^*$ é a componente do gradiente do *kernel* da partícula fixa, corrigida pelo método CSPM, por unidade de massa, na direção y

x_i é a abcissa da partícula fixa

x_j é a abcissa da partícula vizinha

y_i é a ordenada da partícula fixa

y_j é a ordenada da partícula vizinha

Neste trabalho, as aproximações para os numeradores das Eqs. (4.62) e (4.63) foram obtidos a partir da Eq. (4.21) - aproximação SPH simétrica para o gradiente de uma função (nesta situação, a propriedade física pressão).

Durante o desenvolvimento desta Tese, houve a implementação de um código computacional sequencial, na linguagem Fortran, aplicado para a solução do problema do espalhamento do óleo. No Apêndice B, um fluxograma deste código é apresentado e suas etapas são brevemente explicadas.

Capítulo 5

Validação do Modelo Numérico

5.1 Introdução

A validação é etapa indispensável para a verificação da acurácia dos resultados numéricos obtidos com o emprego do código computacional desenvolvido neste trabalho.

Durante a implementação do código numérico para investigar a solução do problema do espalhamento do óleo em mar calmo, adotou-se a estratégia de se realizar o aferimento de cada termo implementado pelo SPH nas equações de conservação para fluidos viscosos e incompressíveis (equações de Navier-Stokes) e comparar os resultados com os existentes na literatura.

Ao longo de sua implementação, o código foi utilizado na solução de determinados problemas físicos. Pela análise das soluções numéricas alcançadas, mediante suas comparações com os resultados da literatura, foi possível concluir-se sobre a correta aplicação de conceitos físicos, resultados matemáticos e instrumentos numéricos no algoritmo computacional. A seguir, são apresentados os problemas físicos simulados e o objetivo de cada estudo.

1. Foi simulada a difusão de calor em uma placa plana homogênea com o objetivo de se verificar o efeito do número de partículas que discretizam o domínio, bem como a influência dos contornos na solução. A avaliação da aplicabilidade do operador

laplaciano, conforme apresentado no capítulo 4, para a aproximação de equações diferenciais parciais de segunda ordem também necessitava ser realizada.

2. Estudo de um reservatório contendo fluido uniforme, incompressível e isotérmico em repouso (equilíbrio hidrostático), objetivando-se verificar nas simulações qual o efeito da aplicação da pressão modificada, conforme proposta em Batchelor (2000), [46]. Resultados de pesquisa anterior apresentada por Vorobyev (2013), [44], mostram a permanência do movimento das partículas de fluido, mesmo após encerrado o período transiente.
3. Estudo numérico da ruptura da barragem; foram testados os contornos geométricos e a reflexão das partículas de fluido nas paredes sólidas do tanque que o continha (tratamento apresentado na subseção 4.1.10), a restauração da consistência nas regiões próximas aos contornos, realizada através do método CSPM - *Corrective Smoothed Particle Method* -, conforme apresentado na subseção 4.1.15, a influência da implementação da viscosidade artificial e a análise da interpenetração das partículas durante a simulação.

Os resultados encontrados para cada um dos testes serão apresentados a seguir.

5.2 Difusão de Calor

A equação de conservação da energia, Eq. (3.3), na ausência de campos de pressão e dissipação de energia é escrita da forma a seguir:

$$\frac{1}{\alpha} \frac{DT}{Dt} = \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + \frac{\dot{q}}{K}, \quad (5.1)$$

$$\alpha = \frac{K}{\rho c_v}. \quad (5.2)$$

Na situação em que o material é homogêneo, com propriedades uniformes, e não existam fontes de calor, a equação anterior se simplifica:

$$\frac{1}{\alpha} \frac{DT}{Dt} = \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \quad (5.3)$$

onde α é a difusividade térmica.

No regime permanente, a Eq. (5.3) torna-se:

$$\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) = 0. \quad (5.4)$$

A placa e suas dimensões são apresentadas na Figura 5.1. Todo o domínio possuía no instante inicial uma temperatura T_0 , ou seja, a temperatura inicial era uniforme. Nos contornos foram prescritas temperaturas nulas, exceto no inferior, ao qual foi atribuída uma temperatura de $100^\circ C$.

As condições iniciais e de contorno são apresentadas a seguir:

Condições iniciais:

$$T(x, y) = T_0, (0 < x < 1 \text{ e } 0 < y < 1),$$

Condições de contorno:

$$T(0, y) = 0^\circ C, (0 \leq y \leq 1),$$

$$T(1, y) = 0^\circ C, (0 \leq y \leq 1),$$

$$T(x, 0) = T_S = 100^\circ C, (0 \leq x \leq 1),$$

$$T(x, 1) = 0^\circ C, (0 \leq x \leq 1).$$

Foram empregados os métodos dos Volumes Finitos (VFM) e *Smoothed Particle Hydrodynamics* para a solução da equação da difusão de calor, a partir do regime transiente, até que fosse atingido o estado estacionário.

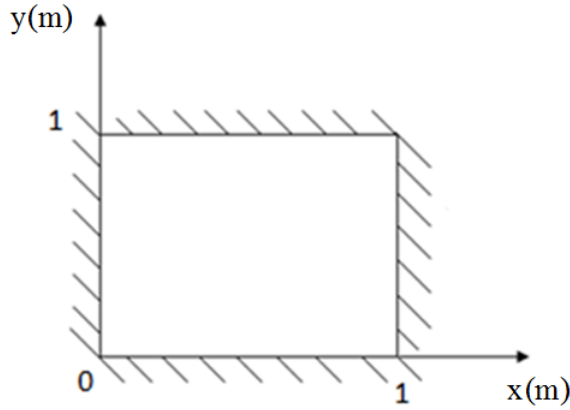


Figura 5.1: Dimensões da placa plana homogênea.

A Eq.(5.5) apresenta a expressão SPH empregada para a obtenção do laplaciano da temperatura:

$$\left(\frac{\partial^2 T_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_i}{\partial y^2} \right) = 2\alpha_i \sum_b \frac{m_j}{\rho_j} (T_i - T_j) \frac{X_i - X_j}{|X_i - X_j|^2} \cdot \nabla W(X_i - X_j, h), \quad (5.5)$$

Numericamente, a previsão da temperatura das partículas para o tempo avançado foi realizada pelo método de integração numérica de Euler:

$$T^{m+1} = T^m + \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right)^m \Delta t, \quad (5.6)$$

No Método dos Volumes Finitos, o esquema numérico utilizado foi:

$$\begin{aligned} T_{I,J}^{m+1} = T_{I,J}^m + \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta y} & \left(-\alpha \left(\frac{T_{I,J}^m - T_{I,J-1}^m}{\Delta y} \right) \Delta x + \alpha \left(\frac{T_{I+1,J}^m - T_{I,J}^m}{\Delta x} \right) \Delta y + \right. \\ & \left. \alpha \left(\frac{T_{I,J+1}^m - T_{I,J}^m}{\Delta y} \right) \Delta x - \alpha \left(\frac{T_{I,J}^m - T_{I-1,J}^m}{\Delta x} \right) \Delta y \right), \end{aligned} \quad (5.7)$$

onde:

I representa o centro do volume de controle

J representa o centro do volume de controle adjacente ao de centro I

Δx é o comprimento do lado do volume de controle na direção x

Δy é o comprimento do lado do volume de controle na direção y

A solução tomada como referência para a comparação dos resultados obtidos pelos dois métodos anteriores foi a encontrada mediante a Técnica de Separação de Variáveis aplicada à Eq. (5.4), para o regime estacionário, conforme apresentada por Pletcher *et al.* (2013), [62]. A temperatura em um ponto da placa foi obtida mediante a expressão:

$$T(x, y) = \sum_{d=1}^{\infty} A_d \sin(d\pi x) \sinh[d\pi(y - 1)], \quad (5.8)$$

$$A_d = \frac{2T_S}{d} \frac{[(-1)^d - 1]}{\sinh(d)}. \quad (5.9)$$

Foram empregados os noventa primeiros termos na série apresentada na Eq. (5.8) para a obtenção da distribuição da temperatura na placa plana estudada.

5.2.1 Simulações Numéricas

O domínio computacional consistiu em uma região quadrada com 1,00 m de lado representativa da placa plana onde ocorreu a difusão de calor.

No modelo numérico empregando o SPH, o domínio foi discretizado por partículas em forma de círculos, dispostas inicialmente no domínio de maneira que tangenciavam-se. Os centros de massa de cada partícula estiveram separados lateralmente por uma distância $dx = dy = 1/n_p$, onde n_p é o número de partículas dispostas por cada lado do domínio.

Foram definidas diferentes configurações iniciais de partículas, visando a verificação do efeito do número de partículas empregado na discretização do domínio no resultado da simulação. A Tabela 5.1 apresenta os números de partículas por lado do domínio e as respectivas distâncias laterais entre os centros de massa.

Tabela 5.1: Configurações Iniciais de Partículas e Distâncias entre os Centros de Massa

| N.º de partículas por lado | Distância lateral (m) |
|----------------------------|-----------------------|
| 50 | 0,0200 |
| 60 | 0,0167 |
| 70 | 0,0143 |
| 80 | 0,0125 |
| 90 | 0,0111 |

No tratamento dos contornos nas simulações SPH, 100 (cem) partículas virtuais foram dispostas em cada um dos lados da placa.

A distribuição inicial de 50 partículas por lado do domínio e as partículas virtuais fixadas nos contornos, com suas respectivas temperaturas, são mostradas na Figura 5.2.

Após a distribuição inicial, foram atribuídas propriedades físicas às partículas (massa específica, temperatura e difusividade térmica). As temperaturas nos contornos superior, direito e esquerdo foram de $0^{\circ}C$ e no contorno inferior de $100^{\circ}C$. A difusividade térmica empregada foi de $1,00 \text{ m}^2/\text{s}$, para efeitos de simplificação dos cálculos numéricos, da mesma forma encontrada em Rook *et al.* (2007), [42]. O passo de tempo de simulação para o qual ocorreu a convergência da simulação foi de $1,00 \cdot 10^{-5} \text{ s}$. Todas as partículas permaneceram imóveis (com velocidades nulas) durante a simulação. As partículas virtuais não sofreram alterações em quaisquer de suas propriedades físicas durante o tempo estudado.

Quatro tipos de *kernels* foram empregados nas simulações SPH: *spline* cúbico, quártico de Lucy, novo quártico e *spline* quártico, apresentados na Tabela 4.1.

O término das simulações ocorreu quando o erro máximo alcançado, nas simulações SPH e VFM, foi inferior a $1,00 \cdot 10^{-6} \text{ }^{\circ}C$, calculado da seguinte forma:

$$|T^{m+1} - T^k| < \text{erro.} \quad (5.10)$$

Os pontos de grade para as simulações que empregaram o Método dos Volumes Finitos e a Técnica de Separação de Variáveis foram coincidentes com as posições iniciais das partículas no SPH. As distribuições de temperaturas obtidas no regime estacionário pelos três métodos foram comparadas adotando-se a solução analítica (Técnica de Separação de Variáveis) como referência.

Na análise dos resultados, notou-se de forma clara o efeito dos contornos na solução obtida pelo SPH. O truncamento da função de suavização nas fronteiras conduziu às maiores diferenças entre as temperaturas das partículas e as encontradas nos nós da grade da solução analítica (tomada como referência) nessas regiões.

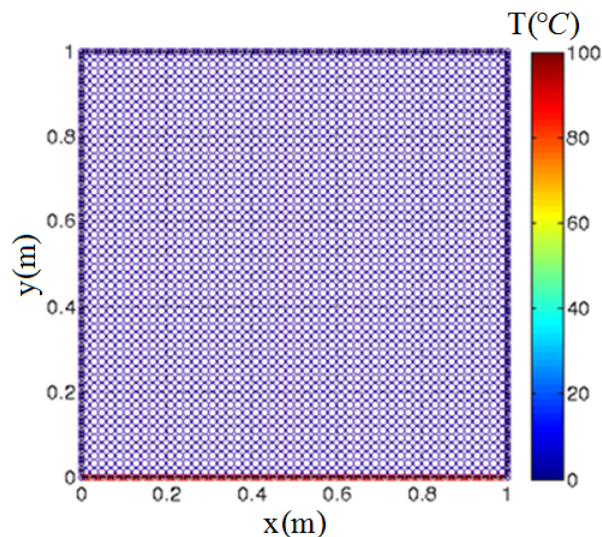


Figura 5.2: Distribuição inicial de 50x50 partículas para as simulações SPH.

O efeito do número de partículas no domínio também foi observado: à medida que se aumentava o número de partículas, as diferenças entre as temperaturas diminuía para regiões cada vez mais amplas do domínio, aumentando, no entanto, nos cantos da placa. Este comportamento foi visto para todos os *kernels* empregados.

A Figura 5.3 apresenta as maiores diferenças de temperaturas encontradas nas simulações realizadas pelo método SPH e pelo VFM.

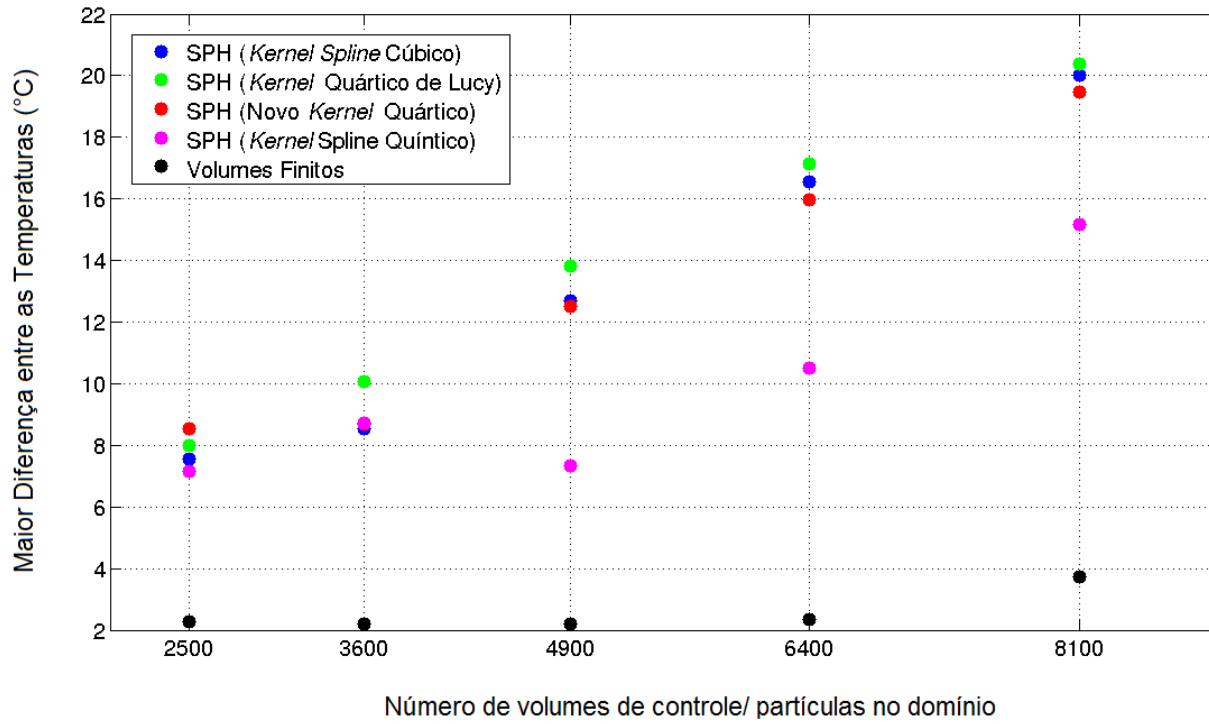


Figura 5.3: Maiores diferenças entre as temperaturas SPH e VFM em comparação com a solução analítica.

A Tabela 5.2 apresenta as maiores diferenças entre as temperaturas (ΔT) obtidas de forma analítica e pelo SPH. Estas diferenças também são apresentadas na forma percentual, calculadas a partir da expressão:

$$\Delta T_p = \left(\frac{T_{an} - T_{SPH}}{T_{an}} \right) 100 = \left(\frac{\Delta T}{T_{an}} \right) 100. \quad (5.11)$$

onde:

T_{an} é a temperatura obtida analiticamente

T_{SPH} é a temperatura obtida pelo SPH

ΔT_p é a maior diferença percentual entre as temperaturas, obtidas analiticamente e pelo SPH

Na Tabela 5.3, estão as posições das partículas onde ocorreram as maiores diferenças entre as temperaturas (apresentadas na Tabela 5.2).

A partir da análise das Tabelas 5.2 e 5.3, conclui-se que as maiores diferenças de temperaturas ocorreram em posições próximas aos cantos inferiores da placa, onde foram vistos os maiores gradientes de temperatura.

A quantidade de partículas no domínio exerceu uma influência significativa nos resultados encontrados. Notou-se que as diferenças entre as temperaturas tornaram-se menores em áreas cada vez maiores, à medida que o número de partículas no domínio era incrementado, como mostra a Figura 5.4 para o *kernel* de quinto grau.

Os pontos onde ocorreram aumentos das diferenças entre as temperaturas estavam localizados bastante próximos aos cantos, onde se encontravam, por sua vez, as descontinuidades de temperaturas entre os contornos (encontro dos lados direito e esquerdo com o inferior). Estas regiões são críticas e necessitam de correções nos valores das temperaturas, para a obtenção de uma solução mais precisa. Outra variável que influenciou a solução SPH foi a função de suavização empregada. Para um mesmo número de partículas que discretizavam o domínio, as menores diferenças de temperaturas foram obtidas quando empregado o *kernel* de maior grau.

Tabela 5.2: Maiores Diferenças entre as Temperaturas Analíticas e SPH

| N° partículas | <i>Kernel</i> | | | | | | | | | | | |
|---------------|----------------------|-----------------------|------------------|----------------------|-----------------------|------------------|----------------------|-----------------------|------------------|------------------------|-----------------------|------------------|
| | <i>Spline</i> Cúbico | | | Quártico de Lucy | | | Novo Quártico | | | <i>Spline</i> Quíntico | | |
| | $T_{SPH}(^{\circ}C)$ | $\Delta T(^{\circ}C)$ | $\Delta T_p(\%)$ | $T_{SPH}(^{\circ}C)$ | $\Delta T(^{\circ}C)$ | $\Delta T_p(\%)$ | $T_{SPH}(^{\circ}C)$ | $\Delta T(^{\circ}C)$ | $\Delta T_p(\%)$ | $T_{SPH}(^{\circ}C)$ | $\Delta T(^{\circ}C)$ | $\Delta T_p(\%)$ |
| 50x50 | 17,9739 | 7,5735 | 29,65 | 17,5502 | 7,9972 | 31,30 | 17,0137 | 8,5337 | 33,40 | 13,3070 | 7,1435 | 34,93 |
| 60x60 | 17,0814 | 8,5357 | 33,32 | 68,6934 | 10,0822 | 12,80 | 16,9479 | 8,6692 | 33,84 | 16,9108 | 8,7063 | 33,99 |
| 70x70 | 65,8531 | 12,6761 | 16,14 | 64,7027 | 13,8265 | 17,61 | 66,0121 | 12,5171 | 15,94 | 18,3173 | 7,3419 | 28,61 |
| 80x80 | 62,7139 | 16,5570 | 20,88 | 62,1542 | 17,1167 | 21,59 | 63,3062 | 15,9647 | 20,14 | 15,1684 | 10,5182 | 40,95 |
| 90x90 | 60,5852 | 20,0315 | 24,85 | 60,2273 | 20,3904 | 25,29 | 61,1515 | 19,4662 | 24,15 | 65,4389 | 15,1788 | 18,83 |

Tabela 5.3: Posições das Partículas onde Ocorreram as Maiores Diferenças entre as Temperaturas Analíticas e SPH

| N° partículas | <i>Kernel</i> | | | | | | | |
|---------------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|------------------------|----------------------|
| | <i>Spline</i> Cúbico | | Quártico de Lucy | | Novo Quártico | | <i>Spline</i> Quíntico | |
| | x(m) | y(m) | x(m) | y(m) | x(m) | y(m) | x(m) | y(m) |
| 50x50 | $3,00 \cdot 10^{-2}$ | $7,00 \cdot 10^{-2}$ | $3,00 \cdot 10^{-2}$ | $1,00 \cdot 10^{-2}$ | $3,00 \cdot 10^{-2}$ | $1,00 \cdot 10^{-2}$ | $3,00 \cdot 10^{-2}$ | $1,00 \cdot 10^{-3}$ |
| 60x60 | $2,50 \cdot 10^{-2}$ | $5,83 \cdot 10^{-2}$ | $2,50 \cdot 10^{-2}$ | $8,33 \cdot 10^{-2}$ | $2,50 \cdot 10^{-2}$ | $5,33 \cdot 10^{-2}$ | $2,50 \cdot 10^{-2}$ | $5,83 \cdot 10^{-2}$ |
| 70x70 | $2,14 \cdot 10^{-2}$ | $7,14 \cdot 10^{-3}$ | $2,14 \cdot 10^{-2}$ | $7,14 \cdot 10^{-3}$ | $2,14 \cdot 10^{-2}$ | $7,14 \cdot 10^{-3}$ | $2,14 \cdot 10^{-2}$ | $7,14 \cdot 10^{-3}$ |
| 80x80 | $9,81 \cdot 10^{-1}$ | $6,25 \cdot 10^{-3}$ | $9,81 \cdot 10^{-1}$ | $6,25 \cdot 10^{-3}$ | $9,81 \cdot 10^{-1}$ | $6,25 \cdot 10^{-3}$ | $1,88 \cdot 10^{-2}$ | $4,38 \cdot 10^{-2}$ |
| 90x90 | $9,83 \cdot 10^{-1}$ | $5,56 \cdot 10^{-3}$ | $9,83 \cdot 10^{-1}$ | $5,56 \cdot 10^{-3}$ | $9,83 \cdot 10^{-1}$ | $5,56 \cdot 10^{-3}$ | $1,67 \cdot 10^{-2}$ | $5,56 \cdot 10^{-3}$ |

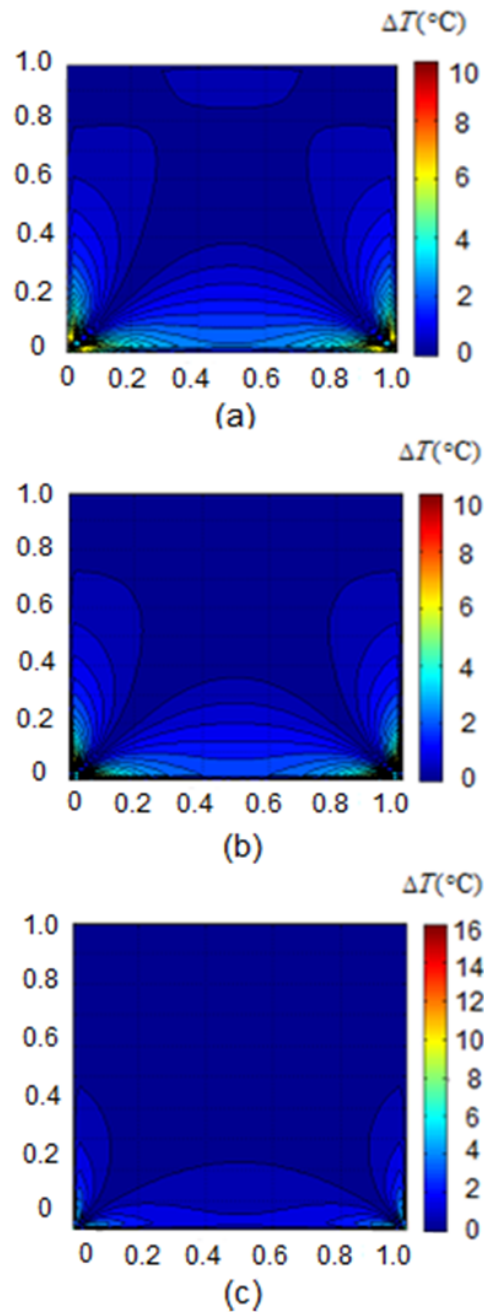


Figura 5.4: Efeito do aumento do número de partículas (as diferenças de temperaturas são reduzidas na maior parte do domínio). Resultados obtidos utilizando o *kernel spline* quíntico com (a) 2500, (b) 4900 e (c) 8100 partículas.

A expressão empregada para a aproximação do laplaciano de temperatura apresentou excelentes resultados nas regiões interiores do domínio, onde não ocorreu o truncamento da função de suavização e, conseqüentemente, não foi vista a inconsistência do método SPH. A aplicação da Eq. (5.5) para a aproximação do laplaciano de uma grandeza física mostrou-se adequada e foi validada a partir dos resultados encontrados em regiões afastadas dos contornos.

O tempo de uso de CPU foi medido em todas as simulações efetuadas nesta Tese de Doutorado, na qual foi empregado o sistema operacional Linux (distribuição openSuse 13.1), um processador Intel i5-2450M (2ª geração) e uma máquina com 8GB de memória RAM. O código numérico utilizou processamento serial.

A Tabela 5.4 apresenta os tempos de processamento para as simulações numéricas da difusão de calor em placa plana que utilizaram o método SPH.

Nas simulações que empregaram o método dos Volumes Finitos, os tempos de processamento foram de 10 min e 52 s, 8 min e 15 s, 8 min e 18 s, 7 min e 8 s e 17 min e 4 s, quando empregados 2500, 3600, 4900, 6400 e 8100 volumes de controle, respectivamente.

O tempo de ocorrência da difusão de calor, a partir do regime transiente até se alcançar o regime estacionário, esteve entre 0,43140 s e 0,45366 s nas simulações SPH e entre 0,45530 s e 0,45339 s nas simulações VFM. Isto mostra uma boa concordância entre ambos os métodos na simulação do fenômeno físico, ressaltando-se, entretanto, o maior custo computacional apresentado em todas as simulações SPH.

Tabela 5.4: Tempo de Uso de CPU nas Simulações SPH

| Nºpartículas | <i>Kernel</i> | | | |
|--------------|----------------------|--------------------|--------------------|------------------------|
| | <i>Spline</i> Cúbico | Quártico de Lucy | Novo Quártico | <i>Spline</i> Quíntico |
| 50x50 | 23 min 2,45 s | 23 min 54,94 s | 24 min 33,79 s | 24 min 53,05 s |
| 60x60 | 33 min 48,90 s | 34 min 19,43 s | 34 min 9,22 s | 36 min 16,07 s |
| 70x70 | 46 min 45,78 s | 47 min 53,91s | 46 min 33,96 s | 51 min 56,13 s |
| 80x80 | 1h 2 min 58,52 s | 1h 5 min 10,74 s | 1 h 4 min 5,81 s | 1 h 11 min 20,98 s |
| 90x90 | 1 h 23 min 43,43 s | 1 h 17 min 35,02 s | 1 h 27 min 20,13 s | 1 h 39 min 23,86 s |

5.3 Reservatório estático preenchido com fluido incompressível

Este problema de hidrostática consiste em um tanque aberto, em repouso, preenchido por um líquido uniforme e incompressível.

As leis físicas de conservação da massa e balanço da quantidade de movimento são obedecidas para o caso estudado. A solução se resumiu à obtenção de uma solução para a equação do balanço da quantidade de movimento, por serem empregadas partículas lagrangianas incompressíveis. A análise foi realizada para um domínio 2D.

A equação do balanço da quantidade de movimento integrada na direção vertical (y) conduz a:

$$P = P_0 + \rho g(H - y) \quad (5.12)$$

onde:

P_0 é a pressão de referência

H é a altura do fluido no reservatório

A origem do referencial, com sentido positivo da direção vertical aponta para cima, está no fundo do tanque e P_0 é a pressão atmosférica.

No estudo deste problema hidrostático, foi aplicado o conceito da pressão modificada (apresentado na subseção 3.2), visando a análise de sua aplicabilidade nesta pesquisa.

5.3.1 Simulações Numéricas

A seguir será apresentada a modelagem numérica efetuada pelo método SPH, com a aplicação do conceito da pressão modificada.

No caso em que o fluido está em repouso, a pressão modificada tem valor nulo:

$$P_{\text{mod}} = (P - P_0) - \rho g(H - y) = 0 \Rightarrow P_{\text{mod}} = 0 \quad (5.13)$$

O que implica que o gradiente da pressão modificada também seja nulo:

$$\frac{\nabla P_{\text{mod}}}{\rho} = 0. \quad (5.14)$$

Através do método SPH, foi obtida a expressão para a aproximação do gradiente da pressão modificada:

$$\left(\frac{\nabla P_{\text{mod}}}{\rho} \right)_i = - \sum_{j=1}^n m_j \left(\frac{P_{\text{mod } i}}{\rho_i^2} + \frac{P_{\text{mod } j}}{\rho_j^2} \right) \nabla W(X_i - X_j, h), \quad (5.15)$$

onde:

$P_{\text{mod } i}$ é a pressão modificada na partícula i

$P_{\text{mod } j}$ é a pressão modificada na partícula j

Foi solucionada a equação do balanço da quantidade de movimento, escrita de uma forma alternativa, agregando-se o conceito da pressão modificada:

$$\frac{D\vec{v}_i}{Dt} = - \left(\frac{\nabla P_{\text{mod}}}{\rho} \right)_i + 2v_i \sum_{j=1}^n \frac{m_j}{\rho_j} (\vec{v}_i - \vec{v}_j) \frac{(X_i - X_j)}{|X_i - X_j|^2} \cdot \nabla W(X_i - X_j, h). \quad (5.16)$$

A distribuição inicial das partículas no domínio foi feita de forma regular com 50 partículas por lado do tanque com dimensões 1,00 m x 1,00 m, ou seja, 2500 partículas de fluido. O número de partículas vizinhas de uma partícula fixa foi de 21 (vinte e um), pelos motivos apresentados na subseção 4.1.8. A Figura 5.5 mostra a distribuição inicial das partículas no domínio.

O tratamento dos contornos se deu com a utilização de partículas virtuais. Foram adicionadas três linhas e três colunas deste tipo de partículas nas laterais do domínio, no total um total de 636 (seiscentos e trinta e seis), garantindo-se que não haveria o truncamento do *kernel* - uma melhor explicação deste assunto está na seção 4.1.10. Objetivava-se assegurar que todas as partículas possuíssem um domínio de influência completo o que, combinado à regular distribuição destas no domínio físico do problema,

evitaria a inconsistência do método nas regiões de fronteiras.

O campo de pressões modificadas foi inicializado com o valor zero.

O passo de tempo empregado foi de $1,00 \cdot 10^{-4}$ s.

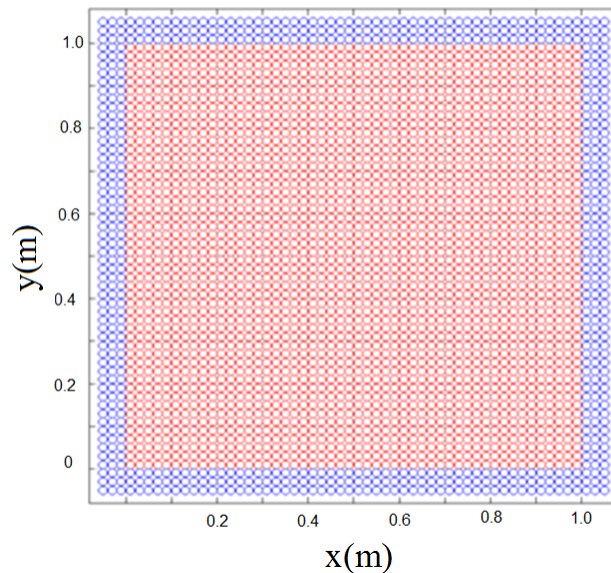


Figura 5.5: Distribuição inicial das partículas de fluido (vermelhas) e das partículas virtuais (azuis), as últimas em uma região expandida do domínio.

Após a solução da Eq. (5.16) e atualização das posições e velocidades das partículas pela integração temporal, verificou-se que as mesmas mantiveram-se inalteradas, com a manutenção do equilíbrio hidrostático. Desta forma, para o campo de pressões modificadas foi renovado o valor nulo, haja vista que as partículas permaneceram em repouso.

Sabe-se que o SPH possui um erro de 2ª ordem, oriundo do truncamento da série de Taylor (subseção 4.1.5). Quando o método é aplicado para se aproximar a força de pressão, à qual é adicionado o termo da força gravitacional (na equação do balanço da quantidade de movimento), sem o emprego da pressão modificada, restam pequenos erros que, apesar de suas pequenas ordens de grandeza, adicionam-se e se propagam ao longo da simulação, resultando no aparecimento dos movimentos das partículas, como mostra a

literatura, [44].

Empregando a pressão modificada, foi evitada a obtenção de resultados aproximados para os termos da equação do balanço da quantidade de movimento, os erros se tornaram inexistentes e uma solução consistente com o problema físico foi obtida. Após 50.000 (cinquenta mil) iterações numéricas, que conduziram a um tempo de processamento de 10 horas, 50 minutos e 18,61 segundos, verificou-se a coincidência das posições iniciais das partículas com as obtidas no instante de tempo 5,00 segundos, conforme mostra a Figura 5.6.

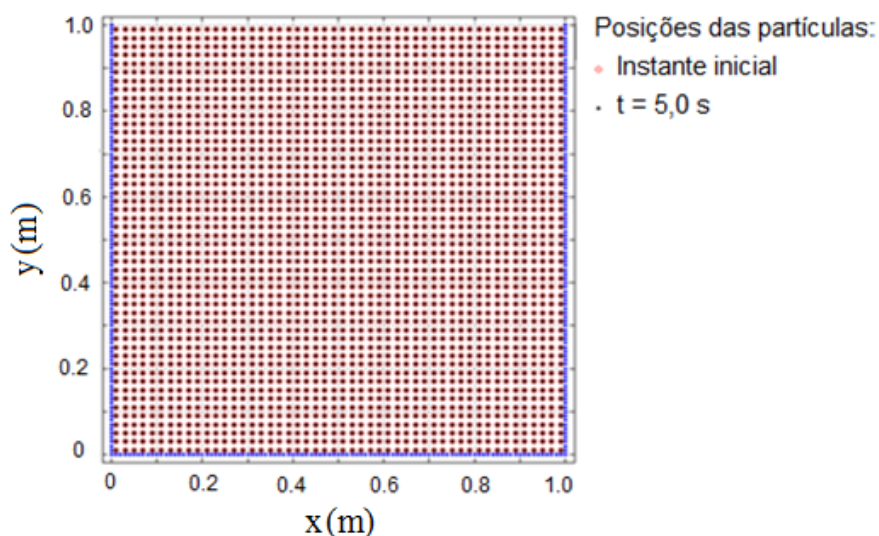


Figura 5.6: Coincidência das posições das partículas no instante inicial (circunferências em vermelho) e no instante 5,00 s (pontos pretos).

As linhas azuis representam as paredes do reservatório.

No presente trabalho, o emprego da pressão modificada para o caso hidrostático conduziu a um excelente resultado, onde não se vê o movimento das partículas na simulação. Este problema apresentava uma grande dificuldade na sua solução, o que se encontra exposto na literatura. Em estudo recente, Vorobyev, no ano de 2013, apresentou resultados em que a oscilação das posições das partículas se mostrava presente, mesmo após o término do regime transiente, [44]. Com a implementação do conceito da pressão

modificada, a solução numérica concordante com a solução analítica para o problema foi alcançada. Isto demonstra a aplicabilidade deste conceito em problemas da Dinâmica dos Fluidos, para fluidos incompressíveis, o que foi realizado neste trabalho.

5.4 Ruptura da Barragem

Na modelagem do problema da quebra de barragem, garantiu-se a obediência às leis da conservação da massa e balanço da quantidade de movimento - Eqs. (3.1) e (3.2).

A validação do código numérico desenvolvido neste trabalho, para a simulação da ruptura da barragem, foi efetuada em duas etapas. Primeiramente, utilizou-se como referência uma simulação apresentada por Gomez-Gesteira *et al.* no guia de utilização do código numérico aberto *SPHysics*, [52], previamente validado a partir de resultados experimentais. A validação do código prosseguiu com a comparação direta com os resultados experimentais apresentados no trabalho de Cruchaga *et al.* (2007), [63].

Ao final da validação foi possível aferir: 1) os contornos geométricos e a reflexão das partículas nas paredes sólidas do tanque; 2) a restauração da consistência nas regiões próximas aos contornos (realizada através do método CSPM - *Corrective Smoothed Particle Method*); 3) a influência da implementação da viscosidade artificial; e 4) a ocorrência da interpenetração das partículas, durante a simulação realizada empregando código desta pesquisa.

As duas etapas da validação são apresentadas a seguir.

5.4.1 Validação a partir do *SPHysics*

O código numérico *SPHysics* foi validado para utilização na simulação da ruptura da barragem a partir de experimentos de laboratório realizados por Kleefsman *et al.* (2008), [64], conforme publicações realizadas por Crespo *et al.* (2011) e Gomez-Gesteira *et al.* (2012), [65] e [66]. Os instrumentos numéricos apresentados na subseção 4.1.11 (viscosidade artificial, XSPH, o Filtro de Shepard e a pressão artificial) foram implementados pelos autores naquela simulação.

As condições de contorno empregadas foram as dinâmicas conforme apresentadas por Gomez-Gesteira *et al.* (2012), [53], cujos princípios foram apresentados na subseção 4.1.10.

O domínio computacional consistia em um tanque de 4,00 m de comprimento e 4,00 m de altura, contendo inicialmente fluido, que ocupava inicialmente uma área retangular de dimensões de 2,00 m x 1,00 m. A Figura 5.7 mostra a geometria do domínio computacional, bem como a discretização do fluido por partículas.

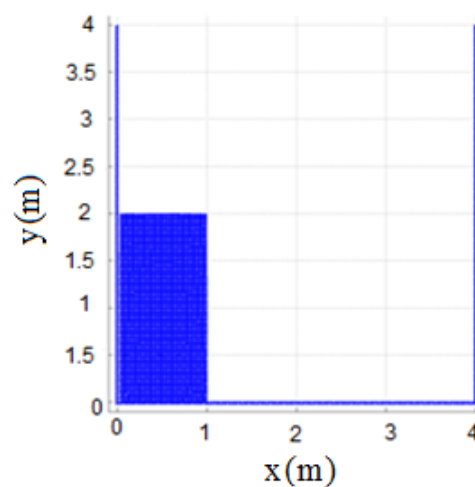


Figura 5.7: Geometria do domínio computacional e discretização do fluido por partículas (disposição antes da abertura da comporta).

Nos parágrafos a seguir serão apresentados os parâmetros das simulações efetuadas pelo código numérico aberto *SPHysics* e pelo código computacional que se desejava validar.

No *SPHysics*, as partículas foram dispostas com uma separação inicial entre seus centros de massa de 3,00 cm. O passo de tempo empregado foi iniciado como $1,00 \cdot 10^{-4} s$, sendo variável e calculado pelo critério apresentado por Gomez-Gesteira *et al.* (2010), [52]. A equação de Tait foi utilizada na previsão do campo de pressões das partículas. Foi implementada a viscosidade artificial com os coeficientes $\alpha_\pi = 0,30$ e $\beta_\pi = 0,00$, e aplicado o Filtro de Shepard para a reinicialização da massa específica. O tratamento das fronteiras se deu através das condições de contornos dinâmicas. Não houve correções para os gradientes de pressão. Para se evitar a instabilidade de tensão, o *SPHysics* aplicou a pressão artificial proposta por Monaghan (2000), [60], apresentada na subseção 4.1.13. O *kernel* empregado foi uma função cúbica, também denominada *spline* cúbico pelos autores do código numérico:

$$W(X_i - X_j, h) = \frac{10}{7\pi h^2} \begin{cases} \left(1 - \frac{3}{2}q^2 + \frac{3}{4}q^3\right), 0 \leq q \leq 1 \\ \left(\frac{1}{4}(2 - q^3)\right), 1 < q \leq 2 \\ 0, \text{c.c.} \end{cases} \quad (5.17)$$

Nas primeiras simulações deste trabalho, foi empregada uma modelagem matemática para as forças viscosas laminares no fluido. A separação lateral inicial entre os centros de massa das partículas foi de 2,86 cm, tendo sido empregadas 2556 partículas na discretização do volume de água. O passo de tempo foi de $1,00 \cdot 10^{-4} s$, mantido este valor para toda a simulação. No tratamento da superfície livre, as partículas que a constituíam foram marcadas e a elas aplicadas a condição de pressão nula e constante. Para o tratamento dos contornos sólidos, foram empregados planos onde ocorriam reflexões das partículas, com um coeficiente de restituição da energia cinética igual a 1,00 (choques elásticos das partículas contra os planos). O *kernel* empregado foi o *spline* cúbico apresentado por Liu e Liu (2010), [4], conforme a Eq. (4.29), a seguir transcrita:

$$W(X_i - X_j, h) = \frac{15}{7\pi h^2} \begin{cases} \left(\frac{2}{3} - q^2 + \frac{1}{2}q^3\right), 0 \leq q \leq 1 \\ \left(\frac{1}{6}(2 - q^3)\right), 1 < q \leq 2 \\ 0, \text{c.c.} \end{cases}$$

O campo de pressões foi estimado com o emprego da equação de Tait, com o termo B , no valor de $0,85 \cdot 10^5$ Pa. O Filtro de Shepard foi aplicado para a renormalização da massa específica. Foi empregado o método CSPM (Método de Partículas Suavizadas Corrigido) para a correção dos gradientes de pressão a cada iteração. Nesta fase, não houve o emprego da viscosidade artificial, do XSPH e da pressão artificial (para evitar a interpenetração das partículas). Em todas as simulações desta seção, a velocidade do som no fluido foi definida como 62,60 m/s.

Verificou-se uma boa concordância entre os resultados, principalmente no que se refere ao deslocamento horizontal das frentes de onda, com defasagem de 14,30 cm entre elas (com adiantamento da simulação desta pesquisa), no instante 0,40 s, conforme mostra a Figura 5.8. Em termos percentuais, há uma diferença entre os deslocamentos de 6,40%.

No instante 0,80 s foi visto que, após atingir a parede direita do tanque a onda atingiu uma altura aproximada de 1,50 m na simulação deste trabalho, enquanto que na simulação que empregou o *SPHysics* esta altura foi de 0,60 m. A Figura 5.9 apresenta graficamente estes resultados.

Em 1,70 s, a simulação mostrou a ocorrência do desprendimento de partículas, o que veio a provocar a interrupção prematura da simulação, pelo aparecimento de partículas fixas sem vizinhas detectadas em seus respectivos domínios de influência. Este comportamento é visto na Figura 5.10.

Devido aos resultados anteriores não satisfatórios, uma nova simulação foi efetuada, com a implementação da viscosidade artificial (com os coeficientes $\alpha_\pi = 0,30$ e $\beta_\pi = 0,00$) em conjunto com a modelagem das forças viscosas laminares no fluido, mantidas as demais implementações da simulação anterior. Os resultados alcançados foram mais concordantes com o *SPHysics* no que se refere ao alcance da frente da onda em todo o período simulado, à altura atingida pela onda após colidir com a parede do tanque, bem como à posição da superfície livre, do instante inicial até o tempo de 1,70 s.

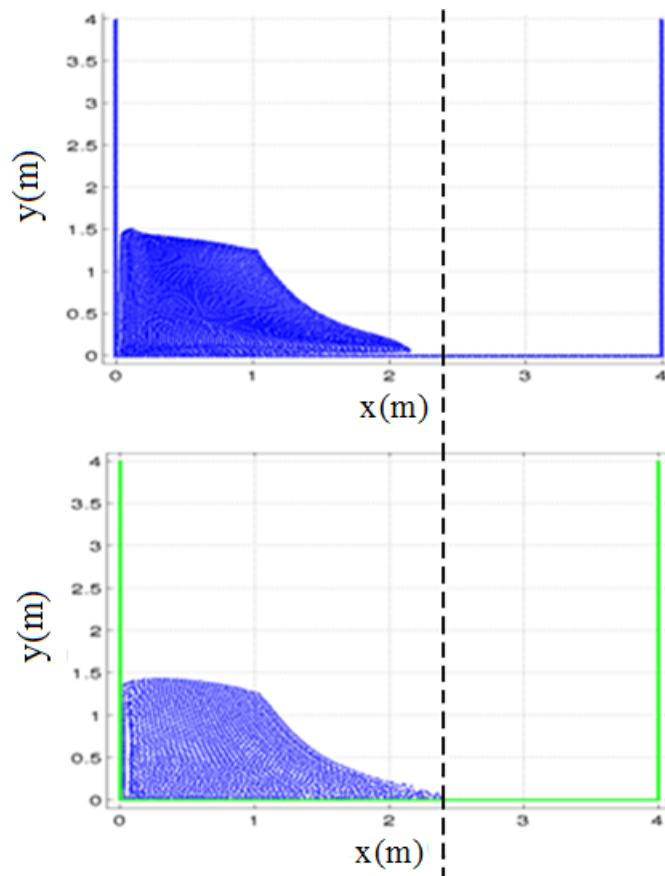


Figura 5.8: Deslocamento horizontal das frentes de onda. As imagens se referem às simulações do *SPHysics* (superior) e à deste trabalho.

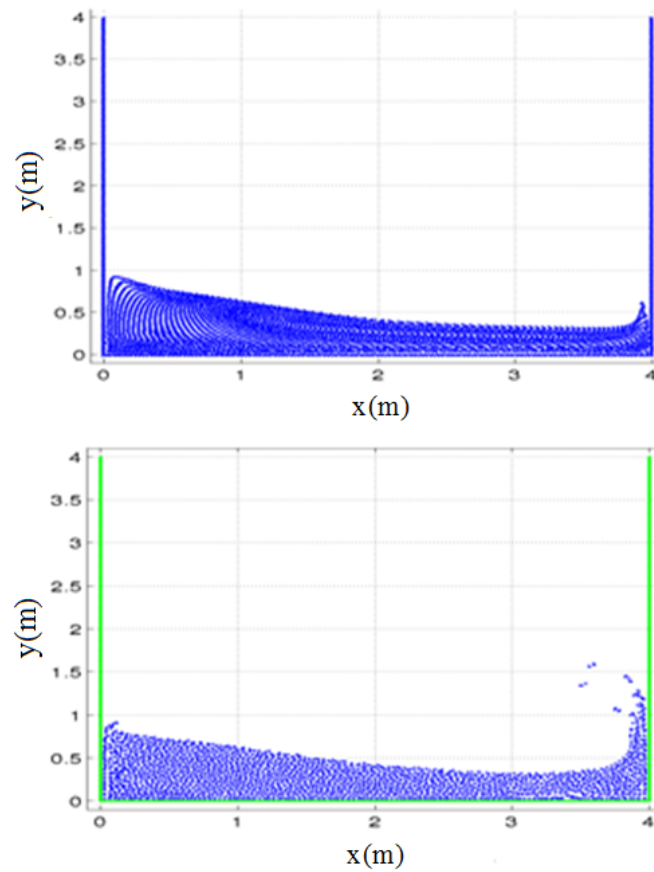


Figura 5.9: Alturas atingidas pela onda no instante 0,80 s, segundo as simulações do *SPHysics* e inicial deste trabalho, respectivamente.

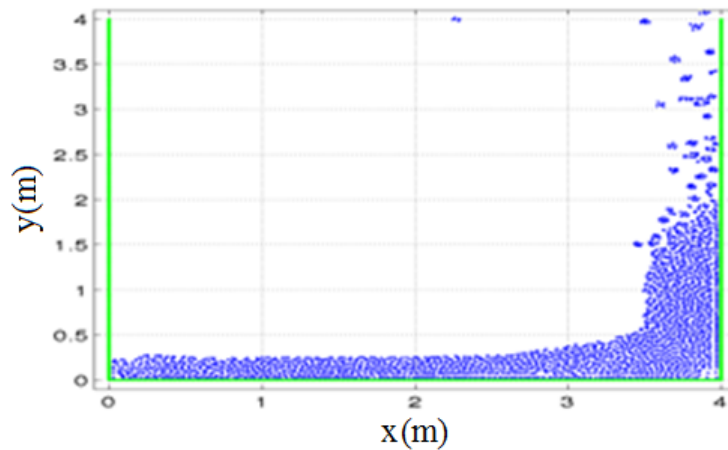


Figura 5.10: Desprendimento de partículas na primeira simulação desta pesquisa, no instante 1,70 s.

A defasagem entre as frentes de onda (*SPHysics* e da simulação atual), no instante 0,40 s, reduziu-se para 2,86 cm, o que equivale a uma diferença percentual de 2,5 % entre os deslocamentos. A Figura 5.11 mostra a redução da defasagem entre os deslocamentos, alcançada com o emprego da viscosidade artificial.

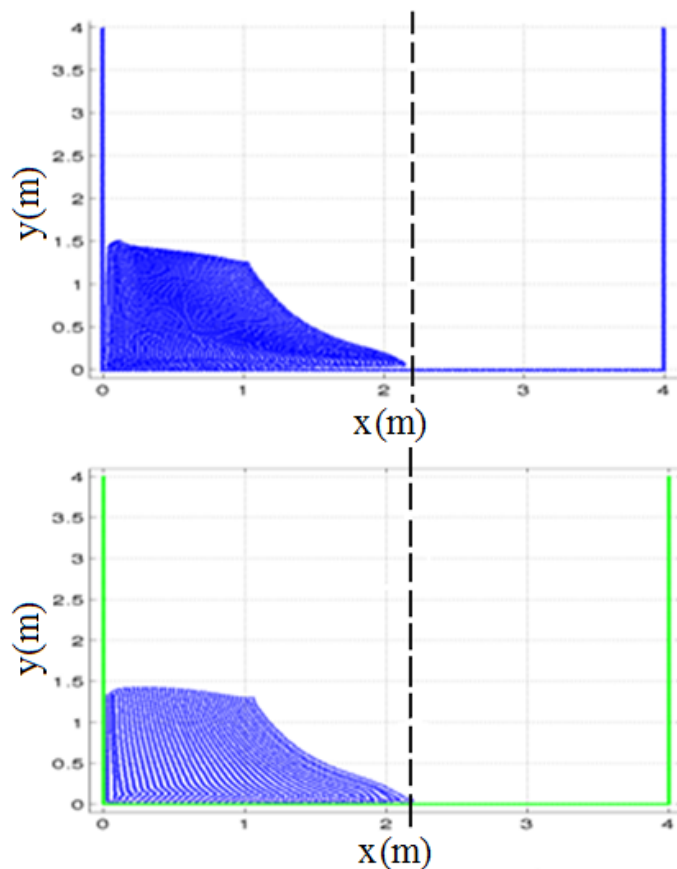


Figura 5.11: Deslocamento da onda no instante 0,40 s, para as simulações *SPHysics* e deste trabalho (com a implementação da viscosidade artificial), respectivamente.

No instante 0,80 s foi visto que a altura da onda se reduziu para 0,50 m, conforme apresenta a Figura 5.12, aproximando-se da altura de 0,60 m da simulação tomada como referência (a diferença percentual entre elas foi de 16,66%).

Com a implementação da viscosidade artificial, houve também uma redução no desprendimento de partículas, e a simulação pode ser estendida até o tempo 6 segundos.

Na Figura 5.13 é mostrada graficamente a ruptura da barragem, com o emprego do código *SPhysics* e das duas versões deste trabalho (com e sem a implementação da viscosidade artificial).

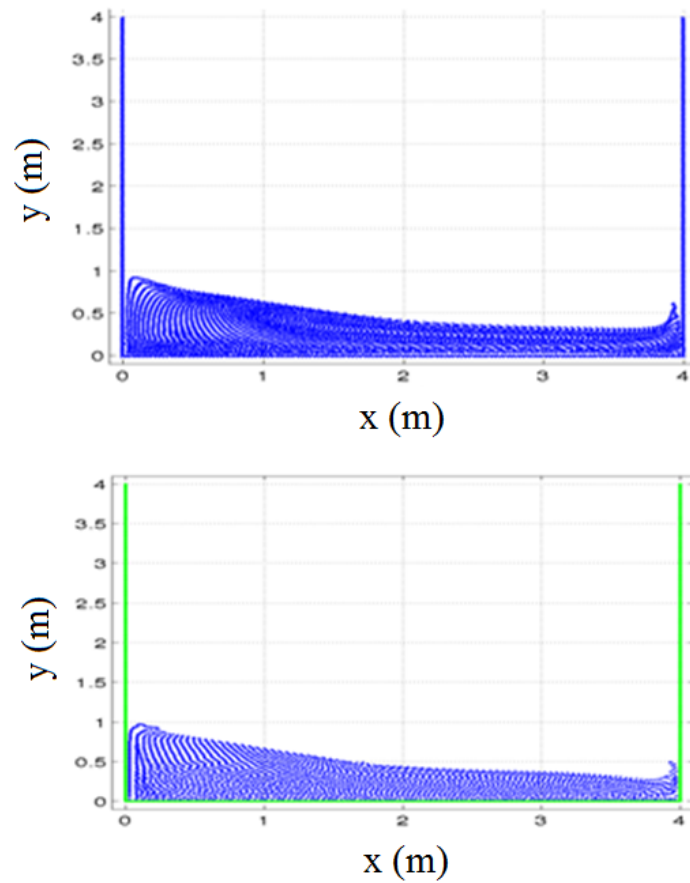


Figura 5.12: Alturas atingidas pela onda no instante 0,80 s. Simulações *SPHysics*, na parte superior, e deste trabalho (com a implementação da viscosidade artificial).

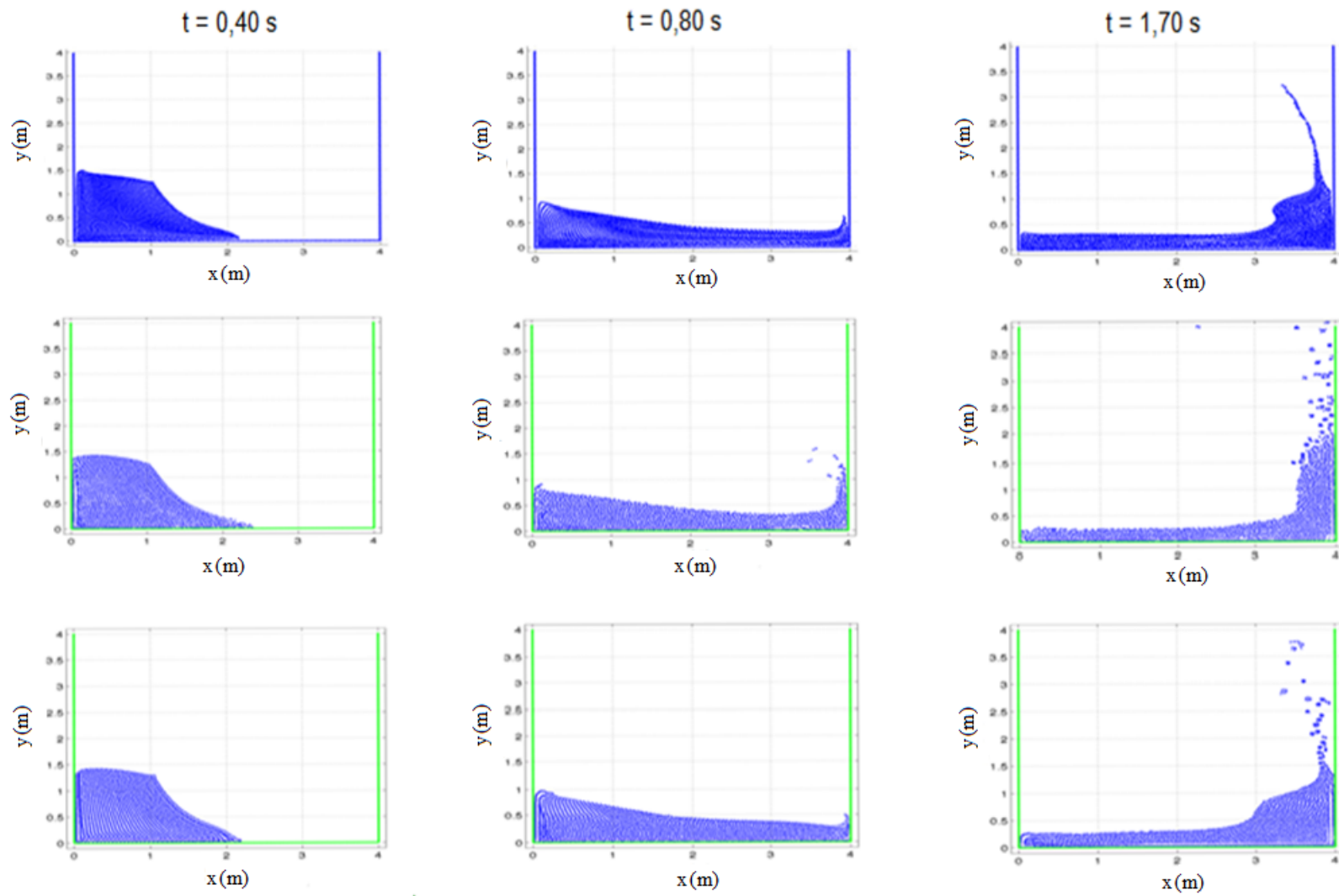


Figura 5.13: Ruptura da barragem. Resultados do *SPHysics* e deste trabalho (sem e com a implementação da viscosidade artificial), nas 1^a, 2^a e 3^a linhas, respectivamente.

As partículas que formavam a superfície livre, marcadas no início da simulação, foram monitoradas até o momento da colisão contra a parede direita do tanque. Isto permitiu a quantificação da interpenetração das partículas, problema existente nas simulações SPH, pela obtenção de valores para as áreas sob a superfície livre. Foi empregado o seguinte procedimento: 1) emprego do método dos mínimos quadrados no ajuste de um polinômio interpolador aos dados (pontos espaciais definidos pelos centros de massa das partículas da superfície livre); 2) integração numérica para obtenção da área sob a curva ajustada.

A Figura 5.14 apresenta as partículas que definiram a superfície livre em diferentes momentos da simulação e as curvas ajustadas pelo método dos mínimos quadrados.

A Figura 5.15 apresenta os valores encontrados para as áreas, do instante inicial até o momento de colisão contra a parede direita do tanque. No instante 0,55 s, o máximo valor alcançado mostrou uma variação positiva em relação ao início da simulação de 10,23%. No instante de contato do fluido com a parede direita do tanque, verificou-se um acréscimo de 4,40% na área. Tais resultados mostraram que o efeito de interpenetração não foi significativo no período de tempo estudado.

Devido à diminuição do desprendimento de partículas na simulação onde foi implementada a viscosidade artificial, foi possível serem realizadas simulações para tempos maiores, próximos do momento de repouso do fluido. A Figura 5.16 apresenta os resultados encontrados pelo *SPHysics* e pelo código desenvolvido neste trabalho para um momento de quase-repouso do fluido. Na primeira linha estão apresentadas as posições das partículas no fundo do tanque e na segunda linha a superfície livre no instante 6,00 s.

Mediante o cálculo da área ocupada pelas partículas no instante 6,00 s, usando a mesma metodologia anterior, foram encontrados os seguintes valores percentuais de variação das áreas em relação à inicial: para o *SPHysics*, redução de 6,05% e, para o código numérico deste trabalho, aumento de 21,64%.

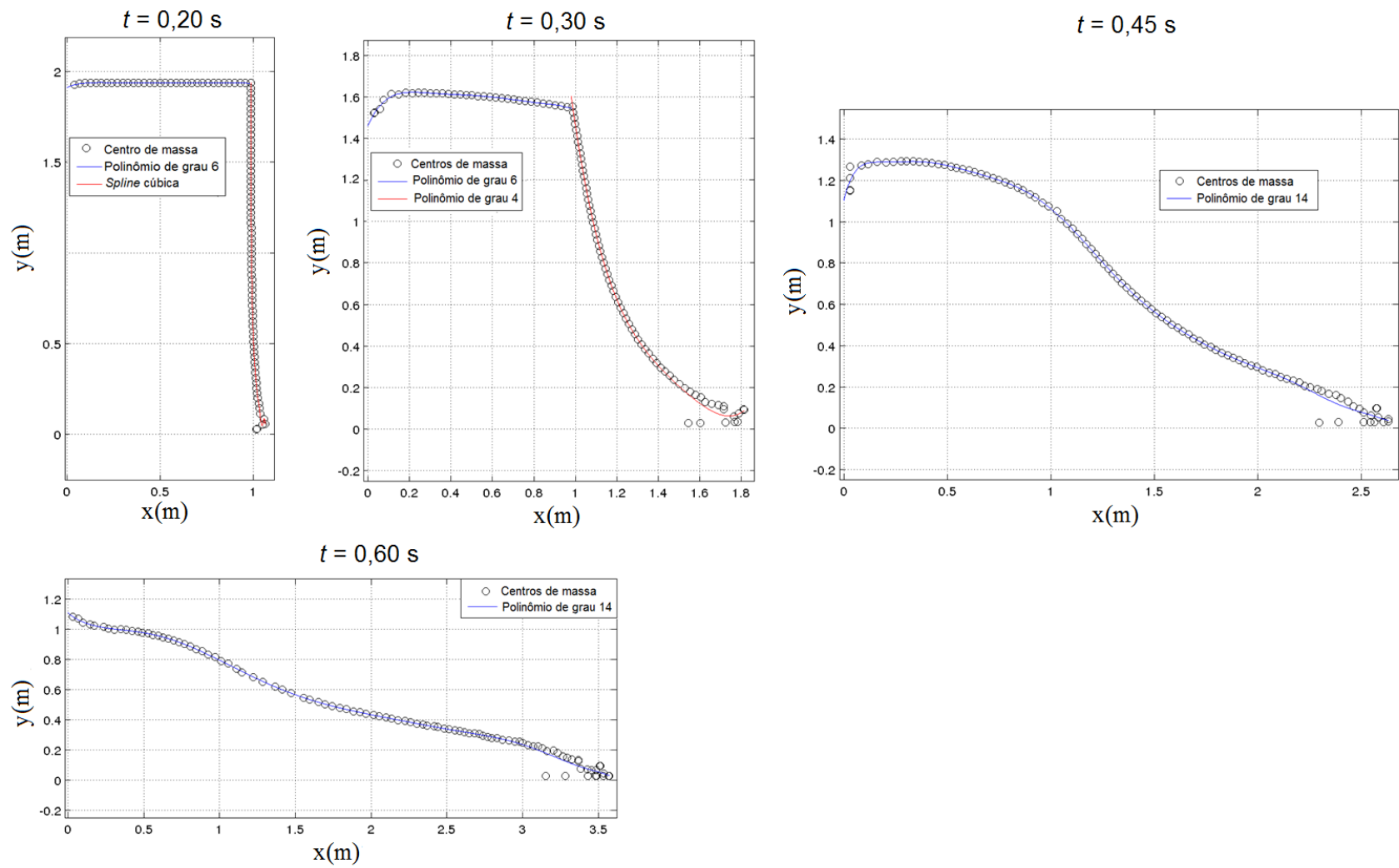


Figura 5.14: Evolução da superfície livre. Ajuste de curvas às posições dos centros de massa das partículas que definiam a superfície livre (até o instante de choque contra a parede direita do reservatório).

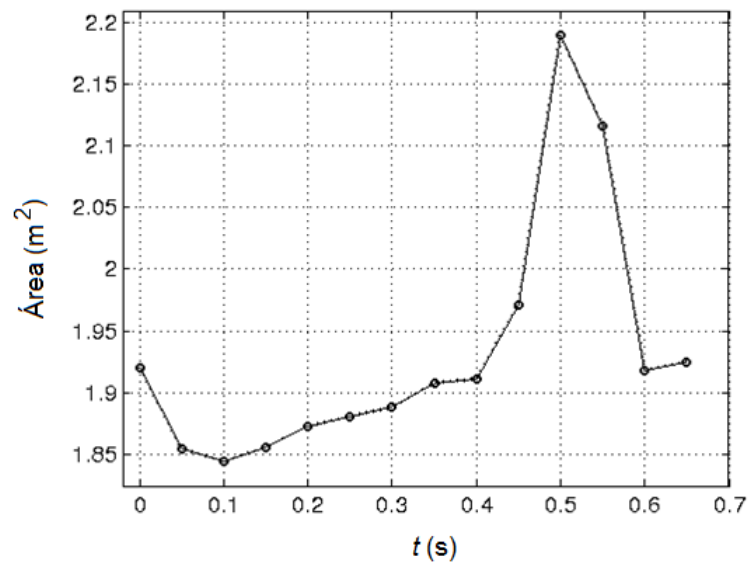


Figura 5.15: Áreas sob a superfície livre até o choque do fluido contra a parede do tanque.

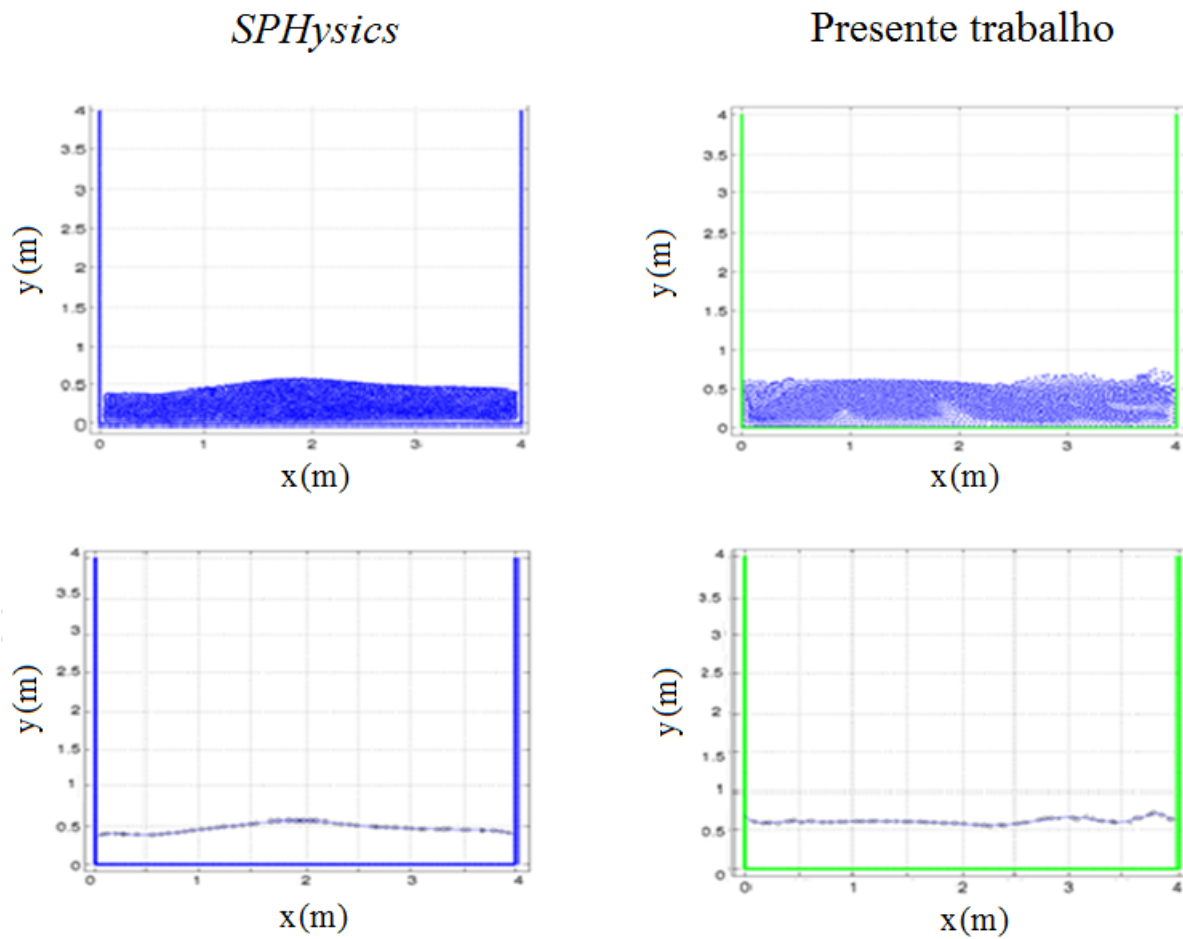


Figura 5.16: Configuração das partículas no instante 6,00 s. Na primeira linha, a disposição das partículas. Na segunda linha, a identificação das partículas da superfície livre.

Os tempos de processamento (uso de CPU) medidos nas simulações, sem e com o emprego da viscosidade artificial, foram 5 horas, 34 minutos e 15,79 segundos; e 5 horas, 35 minutos e 57,75 segundos, respectivamente.

5.4.2 Validação Experimental

A validação do código para a simulação da ruptura da barragem teve como etapa final a comparação com os resultados experimentais apresentados por Cruchaga *et al.* (2007), [63]. A Figura 5.17 mostra o dispositivo experimental utilizado pelos pesquisadores.

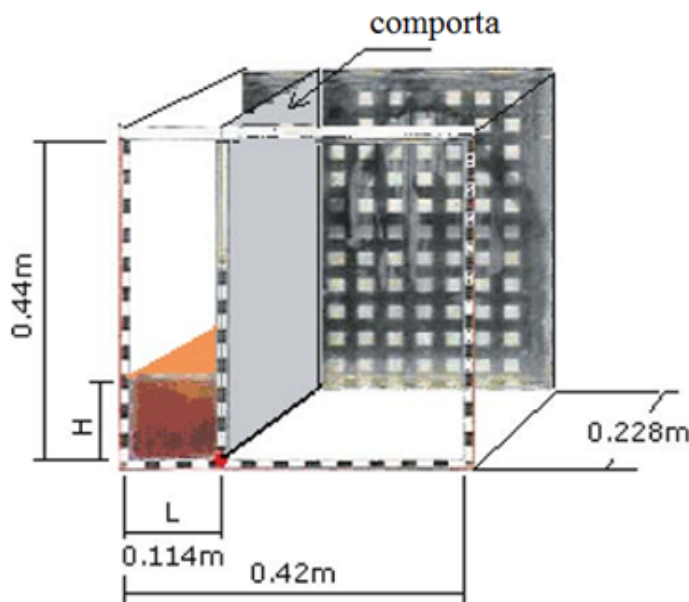
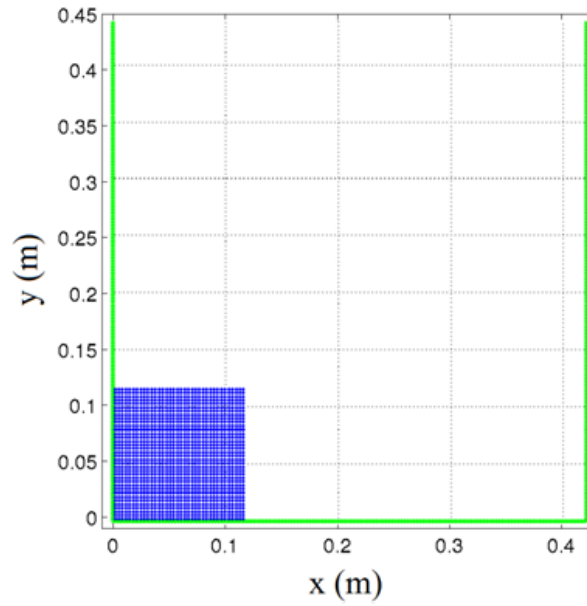


Figura 5.17: Dispositivo utilizado nos experimentos da ruptura da barragem. Adaptada de [63].

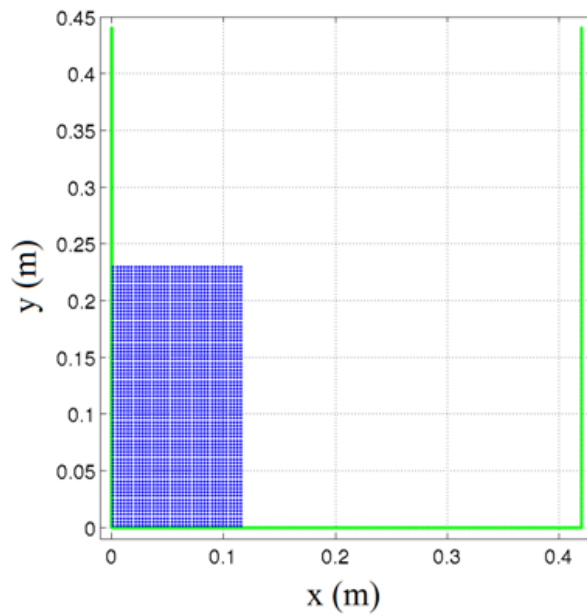
Simulações numéricas foram realizadas para duas geometrias, a seguir descritas:

1. Área quadrada com lados 0,114m, preenchida por fluido e discretizada por 1296 partículas, com distâncias laterais entre seus centros de massa de 3,26 mm;
2. Área retangular com lados 0,228m e 0,114m, preenchida por fluido e discretizada por 2556 partículas, cujos centros de massa estavam separados lateralmente por 3,26 mm.

A Figura 5.18 apresenta as geometrias dos domínios computacionais e as distribuições iniciais das partículas.



(a)



(b)

Figura 5.18: Geometrias dos domínios computacionais e disposições iniciais das partículas.

Os parâmetros empregados nas simulações foram: modelagem matemática das tensões laminares do fluido, implementação da viscosidade artificial, estimativa do campo de pressões com o emprego da equação de Tait (termo B com o valor de $0,85 \cdot 10^5$), emprego do método CSPM para a correção dos gradientes de pressão das partículas próximas dos contornos e do Filtro de Shepard para renormalização da massa específica, interpolações SPH empregando o *kernel spline* cúbico - Eq. (4.29) -, tratamento dos contornos com o emprego de planos fixos (contra os quais ocorriam colisões totalmente elásticas das partículas, ou seja, coeficiente de restituição de energia cinética igual a 1,00), integração numérica com o método de Euler e passo de tempo de simulação de $1,00 \cdot 10^{-5}$. As simulações numéricas foram efetuadas até o tempo físico de 0,50 s, num total de 50000 iterações. Em ambas as geometrias simuladas, foi implementada a viscosidade artificial com os coeficientes α_π recebendo os valores 0,20 e 0,30, e β_π o valor 0,00.

As Figuras 5.19 e 5.20 apresentam os resultados experimentais e numéricos para a primeira geometria simulada, com o coeficiente α_π recebendo os valores 0,20 e 0,30, respectivamente.

Nas Figuras 5.21 e 5.22 são mostrados os resultados para a segunda geometria simulada, com o coeficiente α_π recebendo os valores 0,20 e 0,30.

Nas Tabelas 5.5 e 5.6 são apresentadas as diferenças percentuais entre as abcissas das frentes de onda, obtidas numericamente e experimentalmente, para todas as simulações realizadas, obtidas a partir da expressão:

$$\Delta x_p = \left(\frac{x_{\text{exp}} - x_{\text{SPH}}}{x_{\text{exp}}} \right) 100. \quad (5.18)$$

onde:

Δx_p é a diferença percentual entre as abcissas das frentes de onda, obtidas experimentalmente e pelo SPH

x_{exp} é a abcissa da frente de onda obtida experimentalmente

x_{SPH} é a abcissa da frente de onda obtida pelo SPH

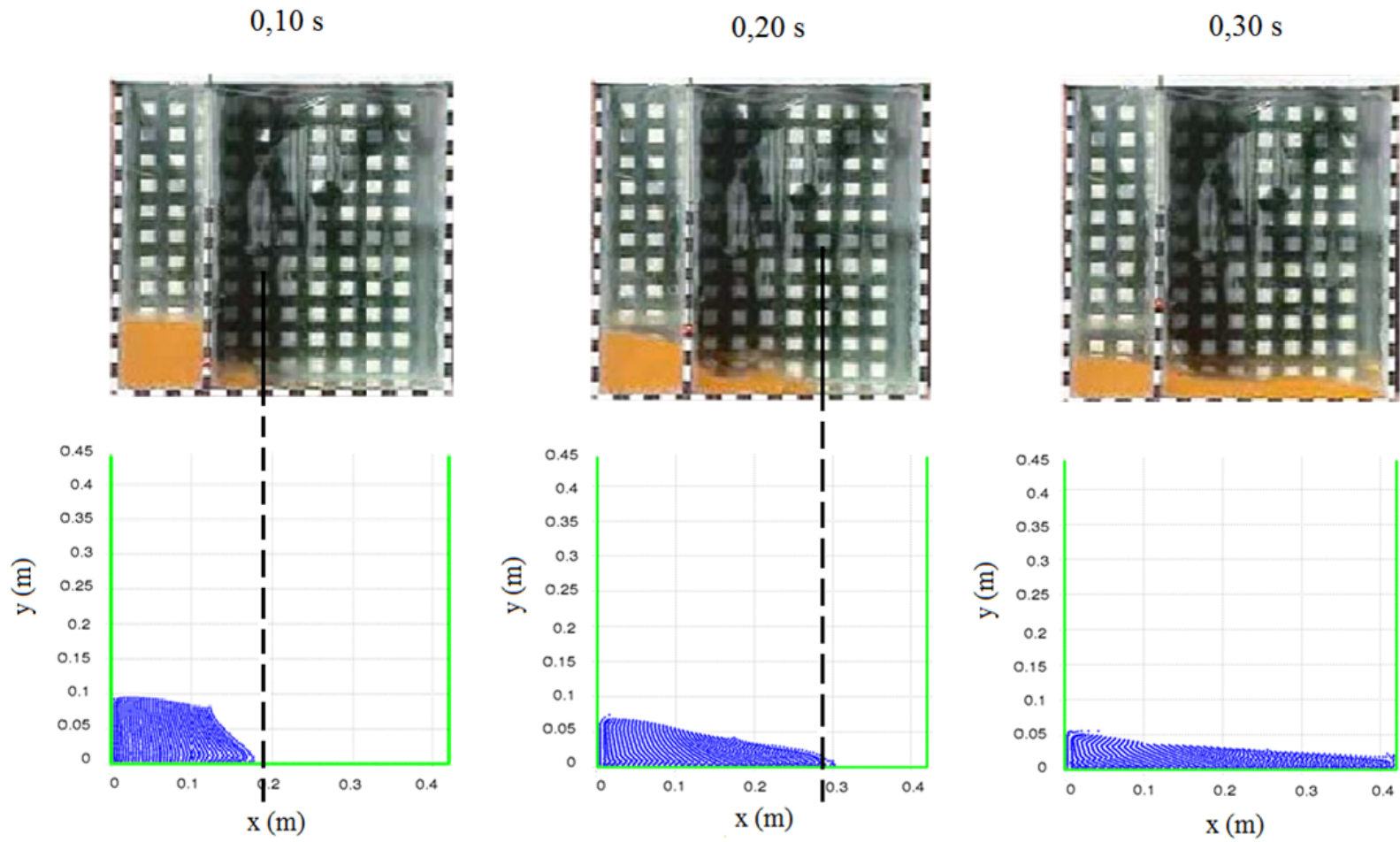


Figura 5.19: Resultados experimentais e numéricos para a primeira geometria simulada, com a implementação da viscosidade artificial ($\alpha_\pi = 0,20$).

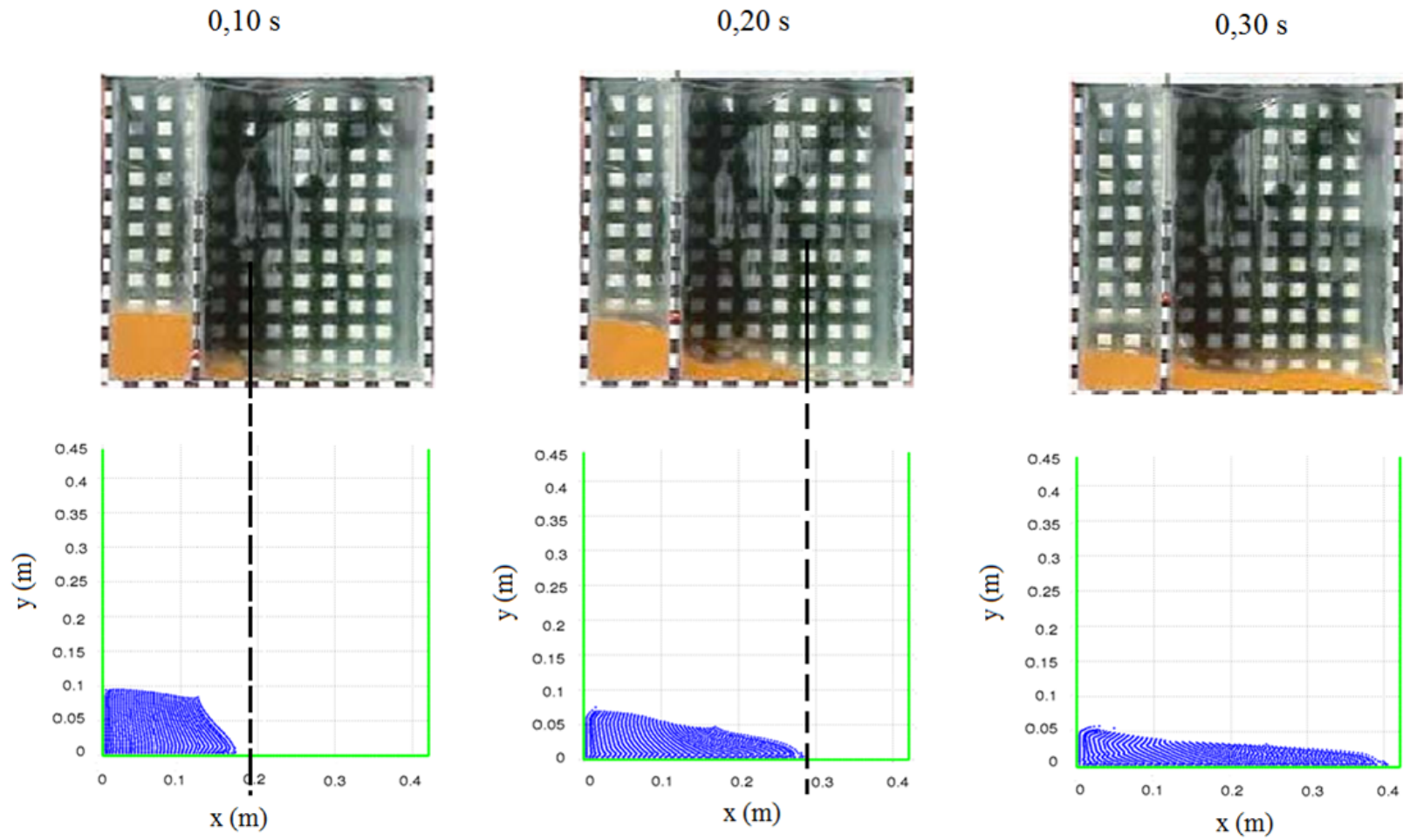


Figura 5.20: Resultados experimentais e numéricos para a primeira geometria simulada, com a implementação da viscosidade artificial ($\alpha_\pi = 0,30$).

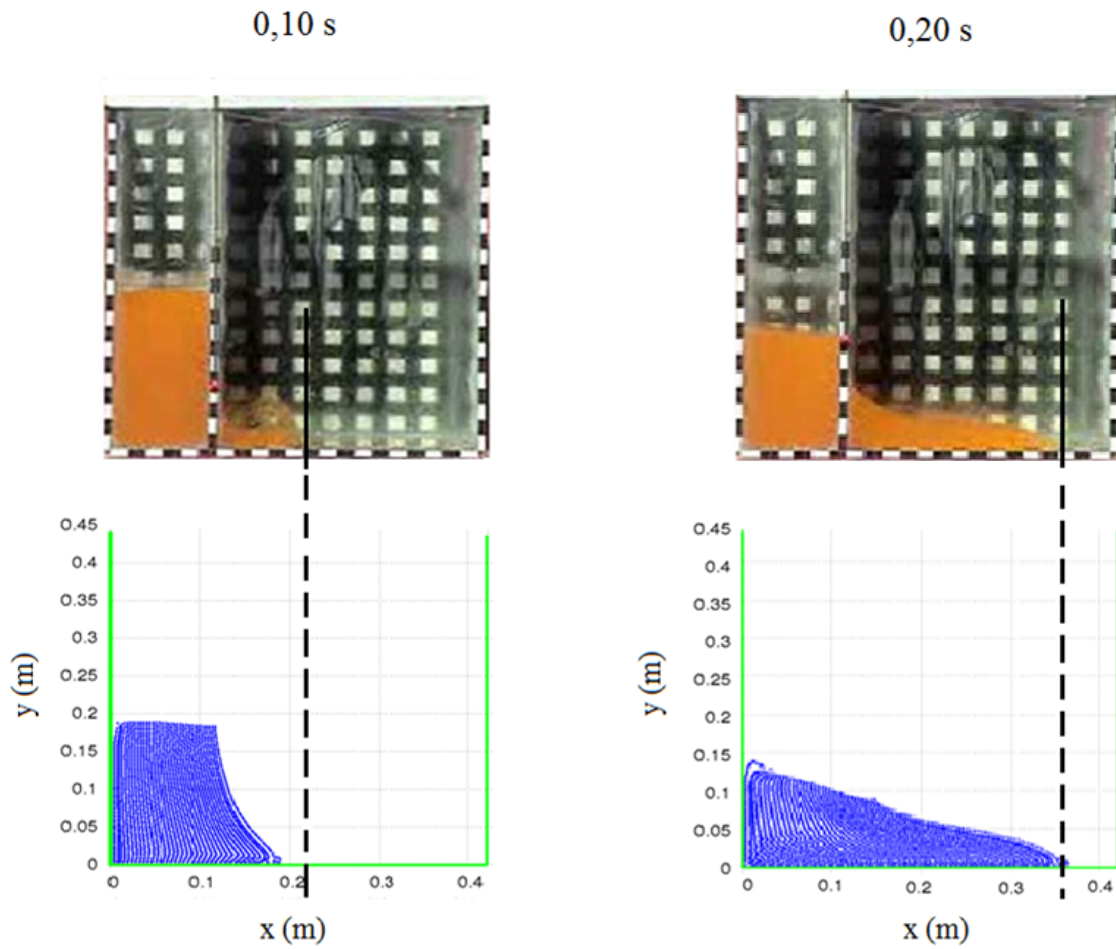


Figura 5.21: Resultados experimentais e numéricos para a segunda geometria simulada, com a implementação da viscosidade artificial ($\alpha_\pi = 0,20$).

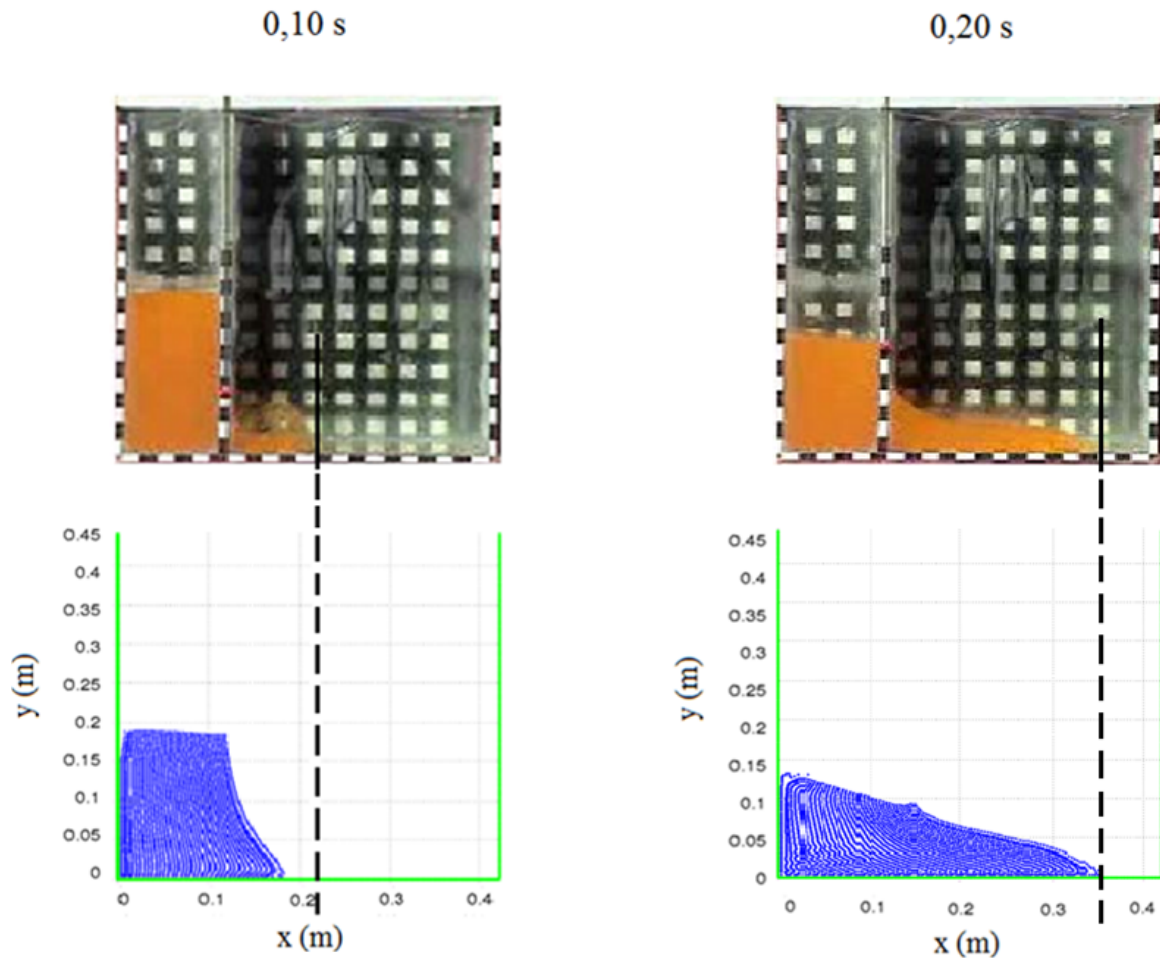


Figura 5.22: Resultados experimentais e numéricos para a segunda geometria simulada, com a implementação da viscosidade artificial ($\alpha_\pi = 0,30$).

Tabela 5.5: Diferenças Percentuais entre as Abcissas das Frentes de Onda (Resultados Experimentais e Numéricos) para a Primeira Geometria.

| α_π | t(s) | x_{exp} (m) | x_{SPH} (m) | Δx_p (%) |
|--------------|------|----------------------|----------------------|------------------|
| 0,20 | 0,10 | 19,00 | 18,07 | 4,89 |
| | 0,20 | 29,00 | 30,28 | -4,41 |
| 0,30 | 0,10 | 19,00 | 17,58 | 7,47 |
| | 0,20 | 29,00 | 28,70 | 1,03 |

Tabela 5.6: Diferenças Percentuais entre as Abcissas das Frentes de Onda (Resultados Experimentais e Numéricos) para a Segunda Geometria.

| α_π | t(s) | x_{exp} (m) | x_{SPH} (m) | Δx_p (%) |
|--------------|------|----------------------|----------------------|------------------|
| 0,20 | 0,10 | 22,00 | 19,00 | 13,64 |
| | 0,20 | 36,00 | 37,00 | -2,78 |
| 0,30 | 0,10 | 22,00 | 18,07 | 17,86 |
| | 0,20 | 36,00 | 35,16 | 2,33 |

A partir da análise das Tabelas 5.5 e 5.6, verificou-se que as maiores diferenças entre as posições das frentes de onda (quando comparados os resultados experimentais e numéricos) ocorreram nos momentos iniciais da ruptura da barragem. À medida que o tempo transcorreu aquelas diferenças diminuíram, como se vê no instante 0,30 s, tendo sido encontradas as menores defasagens entre as frentes de onda - 1,03% na primeira e 2,33% na segunda geometria - quando empregado o coeficiente α_π com o valor 0,30.

Os tempos de processamento nas simulações da primeira geometria foram 2 horas, 21 minutos e 24,34 segundos ($\alpha_\pi = 0,20$) e 2 horas, 22 minutos e 40,32 segundos, para $\alpha_\pi = 0,30$. Nas simulações da segunda geometria, aqueles tempos foram de 4 horas, 49 minutos e 7,92 segundos ($\alpha_\pi = 0,20$) e 4 horas, 49 minutos e 30,56 segundos, para $\alpha_\pi = 0,30$.

Ao final da fase que buscava a validação do código numérico implementado para a simulação do problema da ruptura da barragem, concluiu-se que os resultados numéricos a partir daquele encontrados foram notadamente concordantes com os alcançados pelo código *SPHysics* e pelos experimentos realizados por Cruchaga *et al.* (2007), [63].

A validação do código ocorreu para tempos anteriores ao primeiro choque do fluido contra a parede do tanque. Foram empregados contornos geométricos e a reflexão das partículas de fluido nas paredes sólidas do tanque, bem como a restauração da consistência nas regiões próximas às fronteiras (através do método CSPM). Foi adicionado o termo relacionado à viscosidade artificial à modelagem matemática para as forças viscosas laminares no fluido, conforme apresentado na subseção 4.1.10. No que se refere à ocorrência da interpenetração das partículas, verificou-se ser insignificante, concluindo-se não ser necessária qualquer tipo de correção para esse efeito.

Capítulo 6

Estudo Numérico Puramente

Lagrangiano para o Espalhamento do Óleo

6.1 Introdução

Uma vez validado o código numérico implementado nesta pesquisa, apresentado no Apêndice B, efetuou-se sua aplicação no espalhamento do óleo em mar calmo, independentemente dos demais processos físico-químicos ocorrentes.

Os processos que governam a trajetória da mancha são denominados Processos de Transporte. Os demais processos físicos, químicos e biológicos que estão ocorrendo no óleo derramado, paralelamente ao espalhamento formam o que se chamam de processos de destino, que não serão levados em conta neste trabalho. Incluem evaporação, entranhamento, foto-oxidação, emulsificação, sedimentação, biodegradação, entre outros (Paladino, 2000; Sebastião e Soares, 1995), [21] e [67].

Na 1ª fase do espalhamento, prevalecem as forças inercial e gravitacional e o movimento inicial do óleo derramado é análogo ao de uma ruptura de barragem. Dessa forma, a modelagem empregada para a ruptura da barragem (seção 5.4), baseada nas equações de conservação da massa e balanço da quantidade de movimento, foi aplicada para o óleo na

1ª fase do espalhamento. Os resultados oriundos da solução da equação de Fay foram empregadas na verificação dos resultados numéricos obtidos.

6.2 Geometria Computacional, Condições Iniciais e de Contorno

O domínio simulado foi constituído por um tanque de dimensões 20,00 m de comprimento, 20,00 m de largura e 1,50 m de altura, com um nível de água de 0,50 m, e um volume de óleo inicialmente disposto, em seu centro, na forma de um cilindro com altura e diâmetro de 1,00 m (portanto, um volume inicial de $0,7854 \text{ m}^3$). A Figura 6.1 apresenta o tanque e a disposição das partículas, nas visões em perspectiva e superior.

O óleo foi considerado um fluido homogêneo, uniforme e isotrópico. As simulações foram realizadas para um óleo leve, com massa específica $850,00 \text{ kg/m}^3$ e viscosidade absoluta $3,32 \cdot 10^{-3} \text{ Pa.s}$. Foi escolhido um óleo leve para o estudo, pois a maioria dos derrames ocorridos no Brasil envolve este tipo de hidrocarboneto. As propriedades físicas do poluente foram obtidas a partir do estudo de Yang e Liu (2013), [18].

Na condição de mar calmo, a mancha se espalha em um formato circular (simetria radial). Foi realizada análise bidimensional do problema na qual uma secção meridional do volume do óleo foi objeto de estudo. As posições das partículas de óleo ao longo da direção horizontal foram monitoradas a cada iteração numérica. O espaçamento lateral inicial entre os centros de massas das partículas foi de $2,00 \cdot 10^{-2} \text{ m}$, tendo sido empregadas na discretização do domínio 2500 partículas de óleo e 26.000 partículas de água (massa específica $1000,00 \text{ kg/m}^3$ e viscosidade absoluta $1,00 \cdot 10^{-3} \text{ Pa.s}$). O passo de tempo empregado em todas as simulações, definido a partir do critério CFL para estabilidade foi de $1,41 \cdot 10^{-4} \text{ s}$. As partículas de água foram mantidas imóveis durante as simulações. A partir da Eq. (2.8) foi encontrado um tempo de duração do espalhamento, em sua 1ª fase, de 0,82 s, definindo um total de 5815 iterações numéricas.

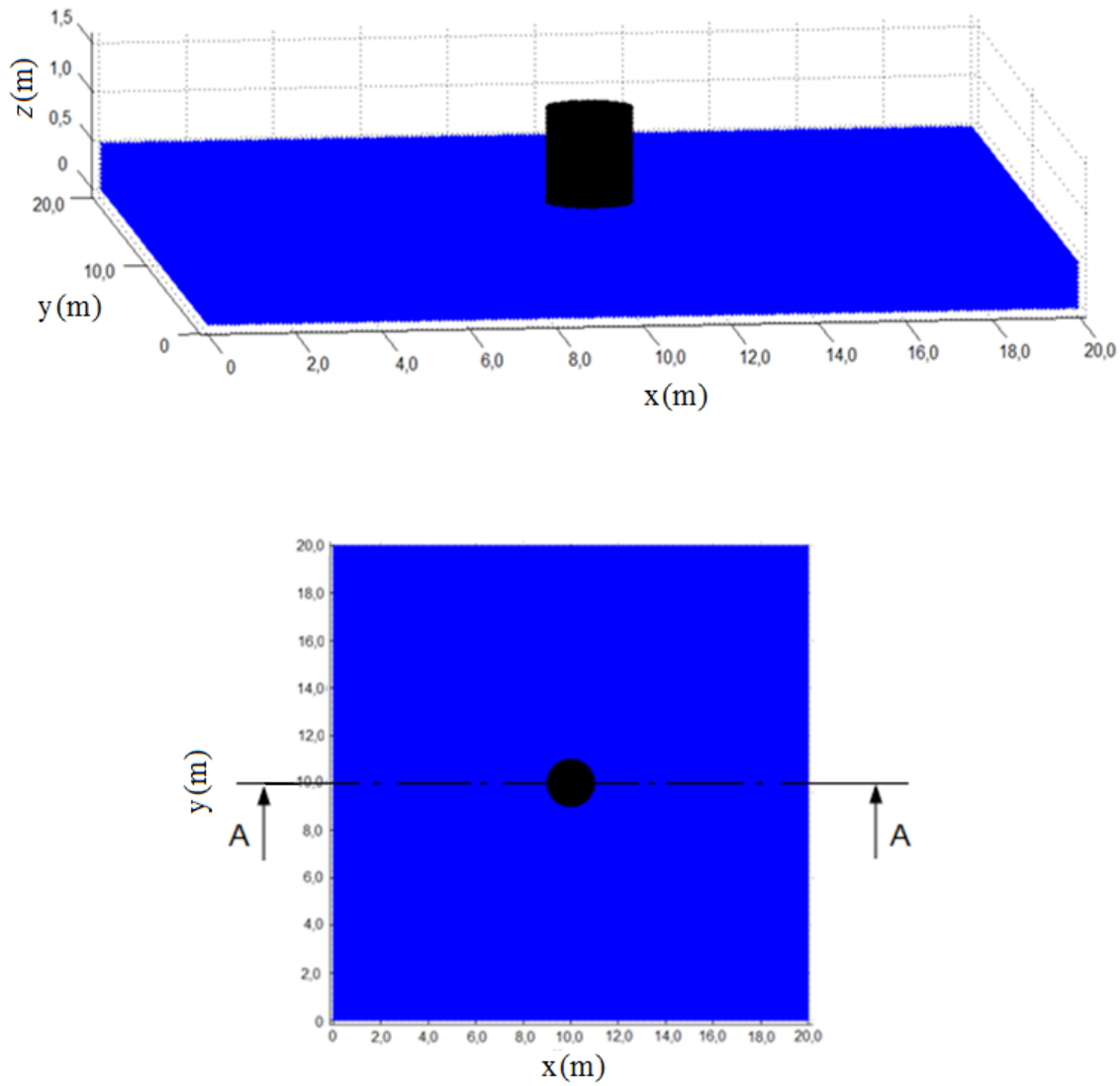


Figura 6.1: Condição inicial para o volume de óleo nas visões em perspectiva e superior.

As Figuras 6.2 e 6.3 apresentam a secção meridional do óleo (corte AA da Figura 6.1) e a evolução desta secção ao longo da 1ª fase do espalhamento, respectivamente.

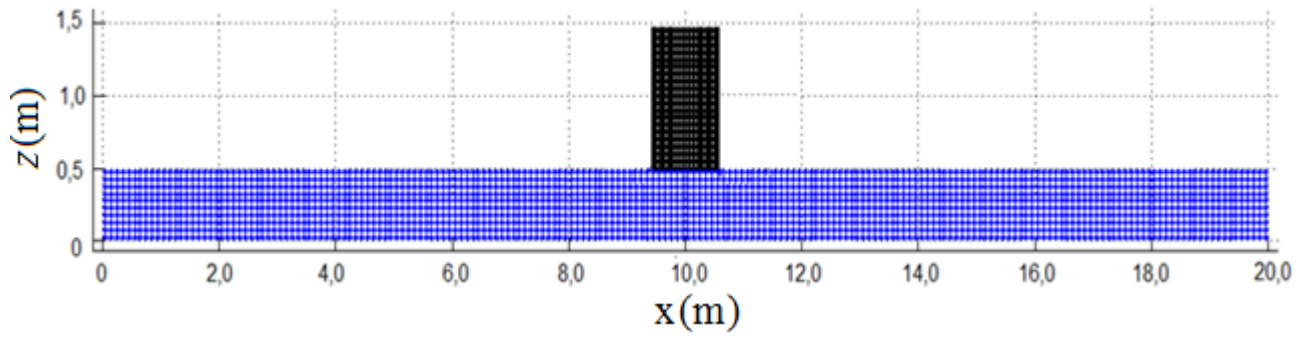


Figura 6.2: Secção meridional estudada (instante inicial).

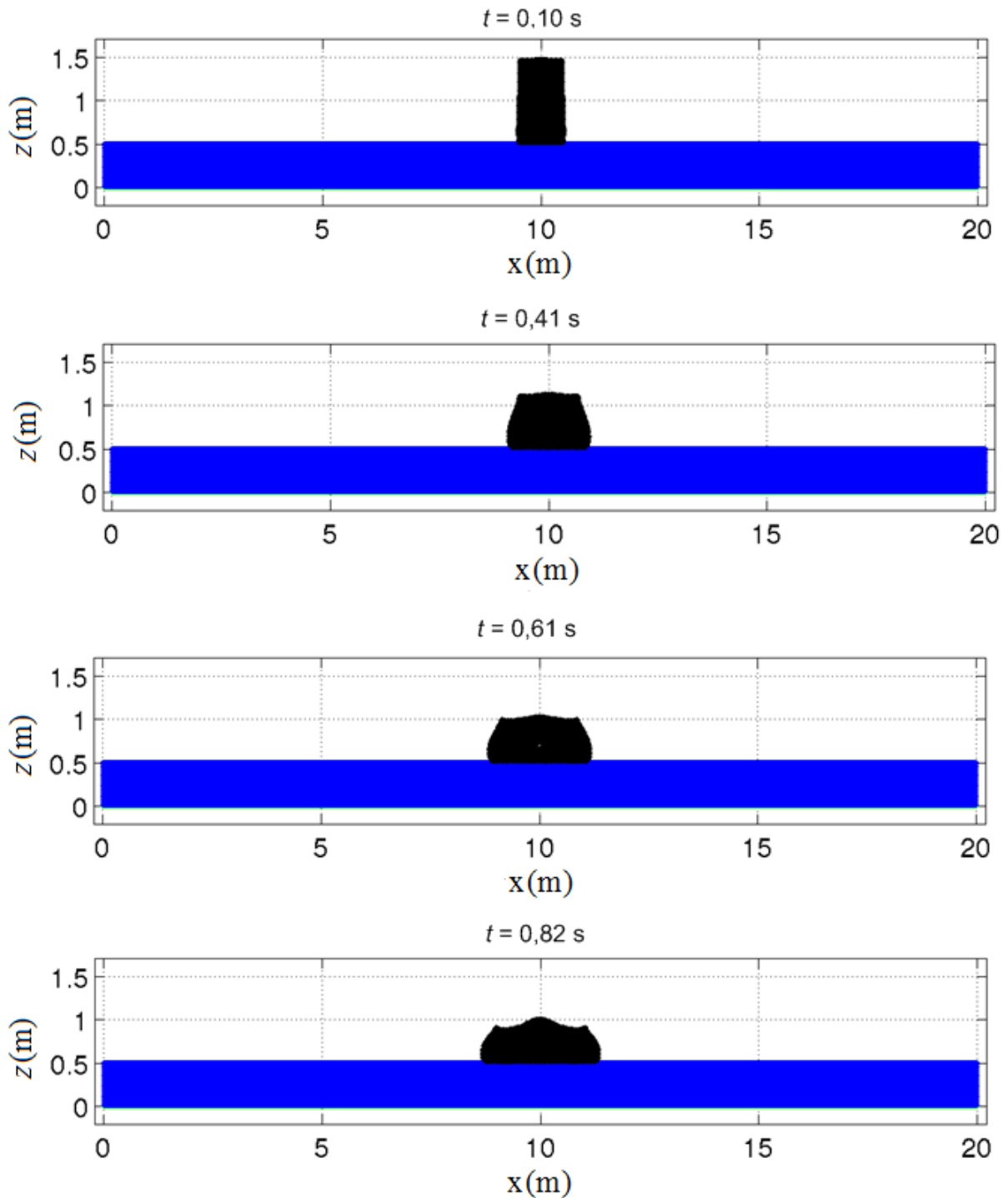


Figura 6.3: Evolução da secção meridiana de óleo na 1ª fase do espalhamento.

A análise gráfica dos resultados foi efetuada por meio da visão da mancha segundo um plano superior. A evolução das partículas de óleo foi monitorada ao longo da simulação. Com o emprego da simetria radial ao final de cada iteração, foram construídas circunferências com raios definidos pelas maiores distâncias horizontais (plano xy) existentes entre as posições ocupadas pelas partículas de óleo e a posição (10,00 m; 10,00 m; 0,50 m). A Figura 6.4 apresenta resultados para a evolução da mancha de óleo, no plano horizontal, obtidos com a implementação do procedimento acima exposto.

Nas simulações efetuadas neste estudo, as seguintes considerações foram realizadas:

1. busca das partículas realizada de forma direta;
2. emprego da viscosidade artificial (com os coeficientes $\alpha_\pi = 0,30$ e $\beta_\pi = 0,00$);
3. aplicação do Filtro de Shepard para renormalização da massa específica do óleo;
4. emprego da equação de Tait para previsão do campo de pressões dinâmicas do óleo (com o parâmetro B , no valor de $0,85 \cdot 10^5$ Pa);
5. aplicação do conceito da pressão modificada para ambas as fases (óleo e água);
6. aplicação da correção CSPM para os gradientes de pressão;
7. interpolações efetuadas com o *kernel spline* cúbico, [4];
8. variação do raio de suporte ao longo do tempo, obtida pela aplicação da Eq. (4.33);
9. tratamento dos contornos de forma geométrica (definição de um plano no nível da superfície da água) e das colisões contra os contornos mediante emprego de coeficientes de restituição de energia cinética;
10. integração temporal efetuada pelo método de Euler;
11. passo de tempo definido com obediência ao critério de estabilidade de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL).

Devido à imobilidade imposta às partículas de água, o campo de pressões modificadas para esta fase foi mantido com valor nulo durante todo o tempo de simulação.

Foi definido um domínio computacional com dimensões que garantissem a ocorrência das colisões das partículas de óleo apenas com o plano fixo no nível da água. Desta forma, o código numérico validado para a ruptura da barragem (seção 5.4) pôde ser utilizado na simulação.

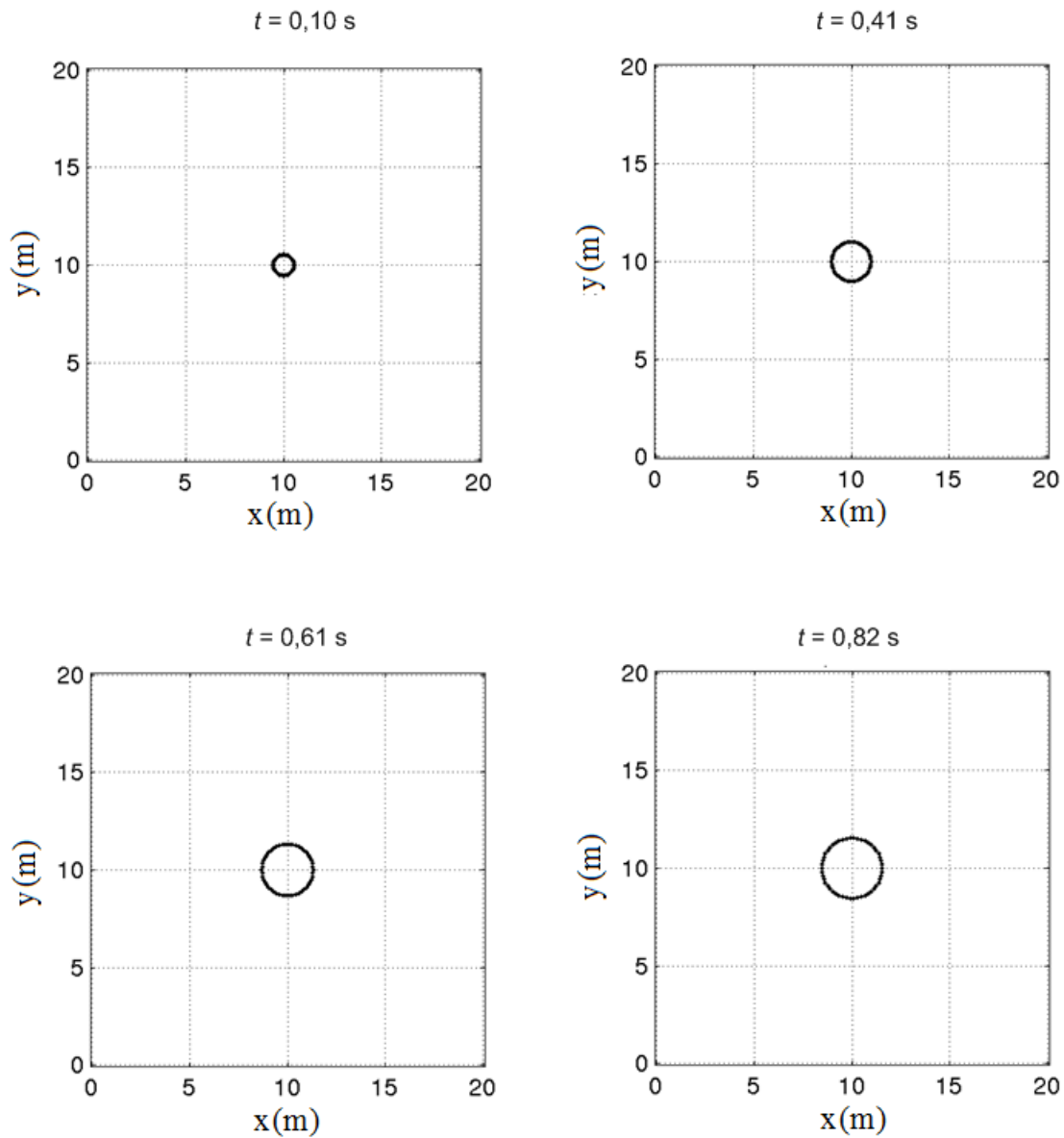


Figura 6.4: Visão superior da evolução da mancha de óleo.

O coeficiente de restituição (CR) foi empregado de forma a mensurar a perda da energia cinética na colisão das partículas contra o plano definido. Frise-se que o SPH é um modelo de uma partícula, ou seja, as colisões entre as partículas não são consideradas. Após a obtenção do campo de velocidades das partículas de óleo com o SPH, foram detectados, pela análise das trajetórias dos elementos lagrangianos, os choques ocorridos contra o plano horizontal definido no nível da água. Realizou-se a correção das velocidades das partículas que colidiram contra este contorno, da seguinte forma:

$$v_{\text{col}} = CR \cdot v_p, \quad (6.1)$$

onde:

v_p é a magnitude da velocidade da partícula antes da colisão

v_{col} é a magnitude da velocidade da partícula após a colisão

O coeficiente de restituição foi aplicado para as direções cartesianas x e y :

$$(v_{\text{col}})_x = CR \cdot v_{p_x}, \quad (6.2)$$

onde:

v_{p_x} é a magnitude da componente horizontal da velocidade da partícula antes da colisão

$(v_{\text{col}})_x$ é a magnitude da componente horizontal da velocidade da partícula após a colisão

$$(v_{\text{col}})_y = CR \cdot v_{p_y}. \quad (6.3)$$

onde:

v_{p_y} é a magnitude da componente vertical da velocidade da partícula antes da colisão

$(v_{\text{col}})_y$ é a magnitude da componente vertical da velocidade da partícula após a colisão

Após a colisão, o sentido da componente da velocidade da partícula na direção y sofreu alteração. A componente na direção x manteve seu sentido inalterado.

6.3 Resultados e Discussão

Os resultados numéricos alcançados foram verificados a partir da comparação com a solução da equação proposta por Fay para a fase gravitacional-inercial (apresentada na subseção 2.2.2, Tabela 2.1, Fase 1).

A Tabela 6.1 apresenta os diâmetros da mancha obtidos pelo SPH (para os diferentes coeficientes de restituição empregados nas simulações) e pela equação de Fay ao final da fase estudada. Também são apresentadas as diferenças entre os resultados encontrados pela equação de Fay e numéricos.

Tabela 6.1: Diâmetros da Mancha ao Final da Fase Gravitacional-Inercial

| CR | Diâmetro da mancha (m) | | Diferença entre diâmetros - $\Delta D(m)$ |
|------|------------------------|--------|---|
| | SPH | Fay | |
| 0,70 | 2,2583 | 3,0971 | 0,8388 |
| 0,80 | 2,2703 | 3,0971 | 0,8268 |
| 0,90 | 2,9824 | 3,0971 | 0,1147 |
| 0,92 | 3,0980 | 3,0971 | -0,0009 |

Na Figura 6.5 estão plotados gráficos que mostram a evolução dos diâmetros da mancha do óleo, para diferentes coeficientes de restituição de energia cinética. Nos gráficos, também estão plotados os resultados oriundos da solução da equação de Fay para o diâmetro da mancha no tempo.

A Figura 6.6 mostra as diferenças entre os resultados (Fay e SPH) ao longo do tempo, para os diferentes coeficientes de restituição de energia cinética utilizados.

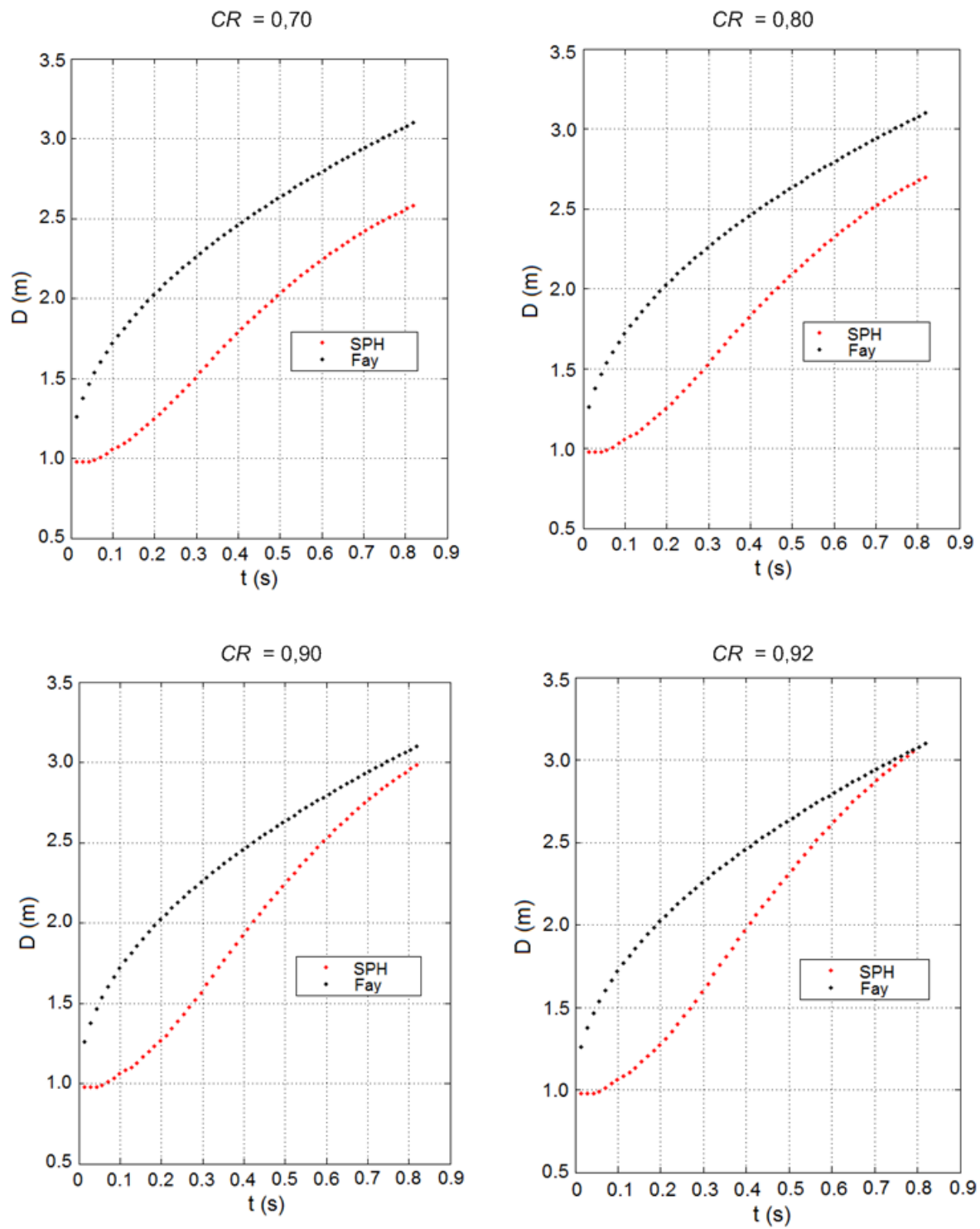


Figura 6.5: Diâmetros da mancha para diferentes coeficientes de restituição.

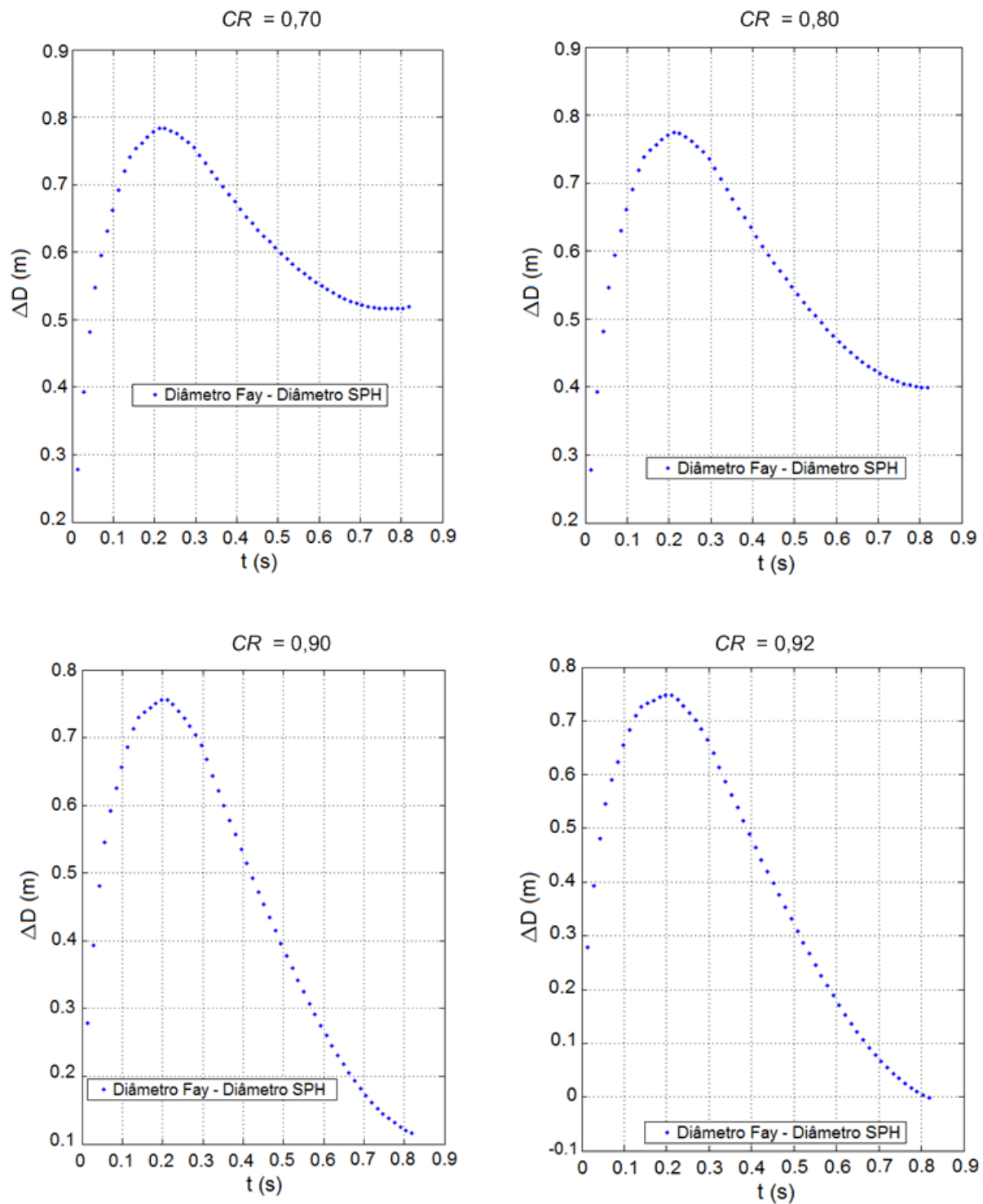


Figura 6.6: Diferenças entre os diâmetros da mancha (ΔD).

Nas aproximações do SPH para os gradientes das pressões modificadas atuantes nas partículas de óleo, Eq. (5.15), foram utilizados os valores das pressões modificadas para as partículas de ambos os fluidos (óleo e água). Nas regiões próximas à interface, viu-se o aparecimento de uma pequena curvatura na secção meridiana do óleo, como mostrado na Figura 6.3, devido à interação entre os dois campos de pressão, onde aquele relacionado à água recebeu uma hipótese simplificadora. Na simulação, não se considerou o efeito do espalhamento do óleo sobre a água, que permaneceu sem movimento e alteração de nível (onde foi fixado o plano contra o qual as colisões das partículas do poluente).

Nos primeiros instantes das simulações SPH, notou-se, com todos os coeficientes de restituição empregados, uma maior resistência ao movimento do óleo, até que o instante aproximado de 0,04 s fosse alcançado (conforme mostra a Figura 6.5). Neste período de tempo, o diâmetro da mancha apresentou a tendência de permanecer constante. Ultrapassado esse primeiro período, observou-se um crescimento da mancha até que fosse atingido um ponto de inflexão na curva (plotada em vermelho) no instante aproximado de 0,12 s. Deste momento até o final da simulação, uma taxa de crescimento positiva foi visto para o diâmetro da mancha.

O coeficiente de restituição de energia reflete o percentual de dissipação da energia cinética das partículas durante a colisão. A calibração do modelo numérico proposto se fez a partir de valores atribuídos a este coeficiente.

A partir da análise dos gráficos, pôde-se ver que, à medida em que se aumentou o coeficiente de restituição de energia, a partir de 0,70, o diâmetro da mancha, no método SPH, aumentou a uma taxa superior ao do modelo de Fay. Ao atingir-se o valor de 0,92 para o coeficiente de restituição, alcançou-se um diâmetro da mancha coincidente ao final da 1ª fase do espalhamento nos dois modelos.

Falar-se em perda de um percentual da energia cinética da partícula na colisão significa dizer fisicamente que a superfície da água age sobre as partículas de óleo no contato, retardando seus movimentos. Isto não ocorre com todas as partículas de óleo, mas sim com as que colidem com a água, ou seja, apenas nas regiões próximas à interface dos

fluidos.

Devido à consideração de que as partículas de água permaneceram imóveis durante a simulação, a pressão modificada para este fluido manteve-se nula durante todo o tempo de ocorrência do espalhamento do óleo. Por sua vez, as pressões modificadas para as partículas de óleo foram calculadas a partir da diferença entre as pressões dinâmicas (obtidas a partir da equação de Tait) e o termo $\rho g(H - y)$, conforme apresentado na subseção 3.1.2.

O coeficiente de restituição para o qual se garantiu a concordância entre os resultados alcançados pela modelagem puramente lagrangiana e pela curva proposta por Fay ao final da fase gravitacional-inercial do espalhamento, apresentou o valor 0,92, que caracteriza colisões com baixa dissipação de energia, mas que necessita ser corretamente definido para que se atinja o correto valor para o diâmetro da mancha.

A simulação foi realizada para um volume de óleo pequeno, o que resultou em um tempo de duração da 1ª fase do espalhamento também pequeno. Os experimentos de Fay empregaram maiores volumes de óleo, porém não há em seu trabalho restrições quanto ao volume do óleo derramado e a utilização de suas curvas ajustadas na previsão do diâmetro da mancha, o que viabilizou a realização desta pesquisa, sobretudo devido às configurações de *hardware* disponíveis (que permitiram a simulação de um pequeno volume de óleo).

Uma consideração que geralmente não é feita no estudo numérico do espalhamento do óleo é a primeira fase do processo, que geralmente não é modelada ou simulada, por ser muito curta (cerca de 1 hora, para um derrame de 10.000 toneladas de óleo - conforme resultado apresentado por Fay, [13]). Uma resposta para o diâmetro da mancha de óleo ao final desta fase, necessária para códigos numéricos que simulam a fase de maior duração do espalhamento (gravitacional-viscosa) é, geralmente, obtida mediante uma previsão, pela aplicação de uma curva ajustada aos dados de campo.

Neste trabalho, através da aplicação do método lagrangiano SPH às equações de conservação da massa e balanço da quantidade de movimento, obtiveram-se resultados concordantes com os alcançados por Fay, em sua curva ajustada (Tabela 2.1, Fase 1), para

o diâmetro da mancha de óleo ao final da 1ª fase do espalhamento. Não há registros na literatura do emprego de métodos puramente lagrangianos para o estudo do espalhamento do óleo, no que se refere à previsão do diâmetro da mancha do óleo derramado. O código numérico desenvolvido é capaz de apresentar uma solução para a 1ª fase da dispersão horizontal do óleo, apresentando-se como uma nova ferramenta capaz de ser empregada nas pesquisas.

Visando mensurar a eficiência computacional foram medidos os tempos de uso da CPU (unidade central de processamento). A Tabela 6.2 apresenta os tempos encontrados para diferentes coeficientes de restituição de energia cinética, mantidas as mesmas condições e parâmetros para todas as simulações.

Tabela 6.2: Tempos de uso da CPU para diferentes coeficientes de restituição de energia cinética

| CR | Tempo de CPU |
|------|--------------------|
| 0,70 | 6 h 5 min 5,54 s |
| 0,80 | 5 h 46 min 18,76 s |
| 0,90 | 5 h 44 min 3,57 s |
| 0,92 | 5 h 43 min 31,17 s |

A partir da análise da Tabela 6.2, concluiu-se que os maiores tempos de processamento ocorreram quando foram empregados menores coeficientes de restituição. Isto se deve ao fato de estas partículas serem mantidas no domínio (após reflexão imposta pelo contorno) e continuarem a sofrer colisões ao longo da simulação com frequência maior do que quando foram implementados coeficientes de restituição de energia maiores. Em uma linguagem computacional, uma maior quantidade de operações foi efetuada nos casos em que houve um maior número de colisões (menor CR), aumentando o tempo de processamento.

As simulações foram realizadas para um óleo leve. Para outros tipos de óleo, com propriedades características (massa específica, viscosidade) outro valor para o coeficiente de restituição poderá ser encontrado.

Capítulo 7

Conclusões

Neste trabalho, foi desenvolvido e implementado o modelo puramente lagrangiano de partículas, utilizando o método SPH, para a solução das equações de conservação da massa e balanço da quantidade de movimento, no estudo do espalhamento do óleo na fase gravitacional-inercial, em condições de mar calmo.

Simulações foram realizadas e coeficientes de restituição de energia cinética foram testados nas colisões das partículas de óleo contra a superfície da água. Após terem sido empregados diferentes coeficientes, foi possível se obter um resultado para o diâmetro da mancha, ao final da fase estudada, concordante com a solução fornecida pela equação de Fay, para um coeficiente de restituição 0,92. Este resultado alcançado se mostra relevante, por ser uma solução ainda não alcançada por outros métodos numéricos para o primeiro estágio do espalhamento.

Durante as fases de implementação do modelo numérico, vários testes de validação foram realizados, o que permitiu a compreensão dos conceitos do método SPH, bem como as dificuldades numéricas que apresentava.

Nos testes realizados, o conceito da pressão modificada foi empregado para a solução de um problema ainda não satisfatoriamente solucionado pelo *Smoothed Particle Hydrodynamics*: o de um tanque em repouso preenchido por um fluido com propriedades uniformes e incompressível (um problema de hidrostática). Os resultados alcançados mostraram-se

concordantes com a solução analítica do problema (em que não há movimento do fluido). Verificou-se que, com o emprego da pressão modificada, não ocorreu mudança nas posições das partículas em todo o tempo simulado, com a exclusão completa de qualquer movimento oscilatório existente após ter sido atingido o regime estacionário. A recente pesquisa de Vorobyev (2013), [44], apresentou resultados que não alcançaram a solução adequada para este problema, pois ainda se notava o movimento oscilatório das partículas no interior do reservatório, mesmo após ter sido atingido o estado estacionário. Devido aos bons resultados encontrados para o problema estático, a pressão modificada foi implementada para a simulação do espalhamento do óleo sobre a água (em um caso dinâmico).

A curvatura apresentada pela secção meridiana do óleo em espalhamento, nas proximidades da interface óleo-água, deveu-se à hipótese simplificadora empregada para o campo de pressões modificadas da água (onde o valor nulo foi implementado e mantido constante durante a simulação). Este fluido permaneceu sem movimento e sem alteração em seu nível durante o espalhamento do óleo.

Ao final da presente pesquisa, o modelo empregado se mostrou adequado ao estudo da primeira fase do espalhamento.

A modelagem puramente lagrangiana de partículas se apresenta como uma ferramenta promissora no estudo das demais fases do espalhamento em mar calmo. Além disso, o método também poderá ser aplicado em condições reais, com a presença de ventos, correntes e ondas, pois a atribuição das propriedades físicas dos agentes externos (ventos, correntes) é efetuada diretamente às partículas que discretizam o domínio.

Relativamente à eficiência das simulações, o tempo de processamento (uso de CPU) medido foi significativo. No estudo de áreas maiores se torna necessária a busca de sua redução, o que poderá ser obtido a partir da paralelização do código numérico.

Desta maneira, a partir dos resultados obtidos na pesquisa, está sendo apresentada à comunidade científica uma modelagem puramente lagrangiana sem malhas, empregando o método SPH, que fornece resultados validados a partir da comparação com soluções analíticas, para problemas que até este momento não apresentavam soluções satisfatórias.

Capítulo 8

Considerações Finais e Sugestões

O emprego do conceito da pressão modificada para o caso hidrostático mostrou-se exato. No caso dinâmico, conduziu a erros menores nas operações numéricas, e que se propagaram com menor velocidade no tempo. Isto aponta para o seu emprego na Dinâmica de Fluidos Computacional, com a obtenção de resultados mais precisos.

O avanço natural da pesquisa é a implementação da modelagem de espalhamento do óleo em mar calmo, a partir das equações de conservação e do método SPH, para a segunda fase, onde predominam as ações das forças gravitacional e viscosa.

Os métodos de partículas requerem grandes quantidades de memória e tempos de uso da CPU. Outra sugestão para futuros trabalhos é o emprego da paralelização do código computacional, com a diminuição do tempo de processamento, pela divisão das operações de cálculos efetuadas entre os processadores. Este trabalho se torna importante pela necessidade de uso de maiores quantidades de partículas no estudo de regiões físicas mais amplas, bem como para que o modelo numérico seja atrativo, no que se refere ao tempo gasto nas simulações.

Referências Bibliográficas

- [1] INTERNATIONAL TANKER OWNERS POLLUTION FEDERATION. *Fate of Marine Oil Spills*. Technical Information Paper nº 2, 2002.
- [2] CETESB - COMPANHIA AMBIENTAL DO ESTADO DE SÃO PAULO. *Ecosistemas costeiros - impactos*. Disponível em: <<http://www.cetesb.sp.gov.br/emergencia/acidentes/vazamento/impactos/ecossistemas.asp>> Acesso em: 09 maio 2010.
- [3] WATER ENCYCLOPEDIA. *Oil Spills: Impact on the Ocean*. Disponível em: <<http://www.waterencyclopedia.com/Oc-Po/Oil-Spills-Impact-on-the-Ocean.html>>. Acesso em: 09 maio 2010.
- [4] LIU M.B., G.R. LIU. *Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH): an Overview and Recent Developments*. Arch. Comput. Methods Eng, 17: 25-76, 2010.
- [5] HUERTA A., BELYTSCHKO T., FERNÁNDEZ-MÉNDEZ S., RABCZUK T. *Meshfree Methods. Encyclopedia of Computational Mechanics*. John Wiley Sons, Ltd. 2004.
- [6] BELYTSCHKO T., KRONGAUZ Y., ORGAN D., FLEMING M., KRYSL P. *Meshless Methods: an Overview and Recent Developments*. Comput. Methods Appl. Mech. Eng., 139(1-4):3-47, 1996.
- [7] LIU G.R. *Meshfree Methods: Moving Beyond the Finite Element Method*. CRC Press, Boca Raton, 2002.
- [8] LI S., LIU W.K. *Meshfree and Particle Methods and their Applications*. Appl Mech Rev, 55(1):1-34, 2002.

- [9] LIU G.R., LIU M.B. *Smoothed Particle Hydrodynamics: a Meshfree Particle Method*. World Scientific, Singapore, 2003.
- [10] LIU G.R., GU Y.T. *An Introduction to Meshfree Methods and their Programming*. Springer, p. 479., Dordrecht, 2005.
- [11] IDELSOHN S.R., ONATE E. *To Mesh or not to Mesh? That is the Question*. Comput. Methods Appl. Mech. Eng., 195(37-40):4681-4696, 2006.
- [12] NGUYEN V.P., RABCZUK T., BORDAS S., DUFLOT M. *Meshless Methods: a Review and Computer Implementation Aspects*, Math. Comput. Simul., 79(3):763-813, 2008.
- [13] FAY J.A. *The Spread of Oil Slicks on a Calm Sea*. Oil on the Sea, Plenum Press, pp.53-64, 1969.
- [14] FAY J.A. *Physical Processes in the Spread of Oil on a Water Surface*. International Oil Spill Conference Proceedings, pp. 463-467, 1971.
- [15] STOLZENBACH K.D., MADSEN O.S., ADAMS E.E., POLLACK A.M., COOPER C.K. *A Review and Evaluation of Basic Techniques for Predicting the Behavior of Surface Oil Slicks*. Massachusetts Institute of Technology, 1977.
- [16] GUO M., SHI P., LIU X. *A Three Dimensional Transport Model for Oil Spills in Coastal Waters Based on Particle Approach*. 2010 Sixth International Conference on Natural Computation, 2010.
- [17] VIOLEAU D., BUVAT C., ABED-MERAÏM K. *Numerical Modelling of Boom and Oil Spill with SPH*, Coastal Engineering, 12:895-913,2007.
- [18] YANG, X., LIU, M. *Numerical Modeling of Oil Spill Containment by Boom using SPH*. Physics, Mechanics & Astronomy, (56):2, 315-321, 2013.
- [19] LEHR W.J., FRAGA R.J., BELEN M.S., CEKIRGE H.M. *A New Technique to Estimate Initial Spill Size Using a Modified Fay-Type Spreading Formula*. Mar. Pollution Bull., 15: 326-329, 1984.

- [20] LEHR W.J., CEKIRGE H.M., FRAGA R.J., BELEN M.S. *Empirical Studies of the Spreading of Oil Spills*. Oil and Petrochemical Pollution, 2:7-12, 1984.
- [21] PALADINO E.P. *Modelagem Matemática e Simulação Numérica de Trajetórias de Derrames de Petróleo no Mar*. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina, 2000.
- [22] LUCY L.B. *Numerical Approach to Testing the Fission Hypothesis*. Astronomical Journal, 82:1013-1024, 1977.
- [23] 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.
- [24] MONAGHAN J.J. *Simulating free surface flows with SPH*. J. Comput. Phys., 110(2):399-406, 1994.
- [25] COLAGROSSI A., LANDRINI M. *Numerical simulation of interfacial flows by smoothed particle hydrodynamics*. Journal of Computational Physics 191(2):448-475, 2003.
- [26] LO Y.M.E., SHAO S. *Simulation of Near-Shore Solitary Wave Mechanics by an Incompressible SPH Method*. Appl. Ocean Res., 24(5):275-286, 2002.
- [27] SHAO S.D., GOTOH H. *Simulating Coupled Motion of Progressive Wave and Floating Curtain-Wall by SPH-LES Model*. Coast. Eng. J., 46(2):171-202, 2004.
- [28] SHAO S. *Incompressible SPH Simulation of Wave Breaking and Overtopping with Turbulence Modelling*. Int. J. Numer. Methods Fluids, 50(5), 2006.
- [29] SHAO S., JI C. *SPH Computation of Plunging Waves Using a 2-D Sub-Particle Scale (SPS) Turbulence Model*. Int. J. Numer. Methods Fluids, 51(8), 2006.
- [30] CLEARY P.W., PRAKASH M. *Discrete-Element Modelling and Smoothed Particle Hydrodynamics: Potential in the Environmental Sciences*. Philos. Trans. R. Soc. A, 362(1822):2003-2030, 2004.

- [31] GOMEZ-GESTEIRA M., DALRYMPLE R.A. *Using a Three-Dimensional Smoothed Particle Hydrodynamics Method for Wave Impact on a Tall Structure*. J. Waterway Port. C., 130(2):63-69, 2003.
- [32] IGLESIAS A.S., ROJAS L.P., RODRIGUEZ R.Z. *Simulation of Anti-Roll Tanks and Sloshing Type Problems with Smoothed Particle Hydrodynamics*. Ocean Eng., 31(8-9):1169-1192, 2004.
- [33] ITIBAR M.D., ÜNAL N.E., AKYILDIZ H. *Numerical Simulation of Sloshing with SPH*. Proceedings of the Twenty-second International Offshore and Polar Engineering Conference, Greece, 2012.
- [34] CAO X.Y., MING F.R., ZHANG A.M. *Sloshing in a rectangular tank based on SPH simulation*. Applied Ocean Research, 47:241-254, 2014.
- [35] GHAZALI J.N., KAMSIN A. *A Real Time Simulation and Modeling of Flood Hazard*. 12th WSEAS International Conference on Systems, Heraklion, Greece, 2008.
- [36] BUI H.H., SAKO K., FUKAGAWA R. *Numerical Simulation of Soil-Water Interaction Using Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) Method*. J. Terramech., 44(5):339-346, 2007.
- [37] ZHU Y., FOX P.J., MORRIS J.P. *A Pore-Scale Numerical Model for Flow through Porous Media*. Int. J. Numer. Anal. Methods, 23(9):881-904, 1999.
- [38] SHAO S. *Incompressible SPH flow model for wave interactions with porous media*. Coastal Engineering, 57(3):304-316, 2010.
- [39] JEONG J.H., JHON M.S., HALOW J.S., VAN OSDOL J. *Smoothed Particle Hydrodynamics: Applications to Heat Conduction*. Computer Physics Communications, 153: 71-84, 2003.
- [40] CLEARY, P.W., MONAGHAN J.J. *Conduction Modelling Using Smoothed Particle Hydrodynamics*. Journal of Computational Physics, 148: 227-264, 1999.

- [41] 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.
- [42] ROOK R., YILDIZ M., DOST S. *Modeling Transient Heat Transfer Using SPH and Implicit Time Integration*. Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals, 51:1, 1-23, 2007.
- [43] SCHWAIGER H.F. *An implicit corrected SPH formulation for thermal diffusion with linear free surface boundary conditions*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 75: 647-671, 2008.
- [44] VOROBYEV A. *A Smoothed Particle Hydrodynamics Method for the Simulation of Centralized Sloshing Experiments*. KIT Scientific Publishing, Germany, 2013.
- [45] MORRIS J.P., FOX, P.J., ZHU, Y. *Modeling Low Reynolds Number Incompressible Flows Using SPH*. Journal of Computational Physics, 136: 214-226, 1997.
- [46] BATCHELOR, G.K. *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, 3rd edition, 2000.
- [47] PETRONETTO, F. *A Equação de Poisson e a Decomposição de Helmholtz-Hodge com Operadores SPH*. Tese de Doutorado. Programa de Pós-graduação em Matemática Aplicada da Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2008.
- [48] MONAGHAN J.J. *Smoothed particle hydrodynamics*. Annual Review of Astronomy and Astrophysics, 30:543-574, 1992.
- [49] LIU M.B., LIU G.R., LAM K.Y. *Constructing smoothing functions in smoothed particle hydrodynamics with applications*. Journal of Computational and Applied Mathematics, 155: 263-284, 2003.
- [50] NOBREGA, T.H.C. *Sistema de Partículas para Modelagem e Simulação Interativa de Fluidos*. Trabalho de Conclusão de Curso de Ciências da Computação. Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, 2007.

- [51] LEE E.-S., MOULINEC C., XU R., VIOLEAU D., LAURENCE D., STANSBY P. *Comparisons of weakly compressible and truly incompressible algorithms for the SPH mesh free particle method*. Journal of Computational Physics, 227(18):8417-8436, 2008.
- [52] GOMEZ-GESTEIRA M., ROGERS B.D., CRESPO A.J.C., DALRYMPLE R.A., NARAYANASWAMY M. *User Guide for SPHysics Code*, 2010. Disponível em: <https://wiki.manchester.ac.uk/sphysics/images/SPHysics_v2.2.000_GUIDE.pdf> Acesso em: 10 setembro 2014.
- [53] GOMEZ-GESTEIRA M., ROGERS B.D., CRESPO A.J.C., DALRYMPLE R.A., NARAYANASWAMY M., DOMINGUEZ, J.M. *SPHysics - development of a free surface fluid solver - Part 1: Theory and formulations*. Computers & Geosciences, 48:289-299, 2012.
- [54] KULASEGARAM S., BONET J., LEWIS R., PROFIT M. *A variational formulation based contact algorithm for rigid boundaries in two-dimensional SPH applications*. Computational Mechanics, 33(4):316-325, 2004.
- [55] FERRAND M., LAURENCE D. R., ROGERS B. D., VIOLEAU D., KASSIOTIS C. *Unified semi-analytical wall boundary conditions for inviscid, laminar or turbulent flows in the meshless SPH method*. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 71(4):446-472, 2013.
- [56] LEROY, A., VIOLEAU D., FERRAND M., KASSIOTIS C. *Unified semi-analytical wall boundary conditions applied to 2-D incompressible SPH*. Journal of Computational Physics, 261:106-129, 2014.
- [57] MONAGHAN J.J. *On the problem of penetration in particle methods*. Journal of Computational Physics, 82:1-15, 1989.
- [58] PAIVA A. *Uma abordagem lagrangeana para simulação de escoamentos de fluidos viscoplásticos e multifásicos*. Tese de Doutorado, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2007.

- [59] HOSSEINI, S. M., FENG, J. J. *Pressure boundary conditions for computing incompressible flows with SPH*. J. Comput. Phys. 230:7473-7487, 2011.
- [60] MONAGHAN, J.J. *SPH without tensile instability*. Journal of Computational Physics, 159: 290-311, 2000.
- [61] COURANT R., FRIEDRICHS K., LEWY H. *On the partial difference equations of mathematical physics*. IBM Journal, 11:215-234, 1967.
- [62] PLETCHER, R.H., TANEHILL, J. C., ANDERSON D. A. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. CRC Press, 3rd Edition, 2013.
- [63] CRUCHAGA M.A., CELENTANO D.J., TEZDUYAR T.E. *Collapse of a liquid column: numerical simulation and experimental validation*. Comput. Mech., 39: 453476, 2007.
- [64] KLEEFSMAN K.M.T., FEKKEN G., VELDMAN A.E.P., IWANOWSKI B., BUCHNER B. *A Volume-of-Fluid based simulation method for wave impact problems*. J. Comput. Phys. 206:363-393, 2008.
- [65] CRESPO A.J.C., DOMINGUEZ J.M., BARREIRO A., GOMEZ-GESTEIRA M., ROGERS B.D. *GPUs, a new tool of acceleration in CFD: efficiency and reliability on Smoothed Particle Hydrodynamics methods*. PLoS ONE 6 (6), 2011.
- [66] GOMEZ-GESTEIRA M., CRESPO A.J.C., ROGERS B.D., DALRYMPLE R.A., DOMINGUEZ J.M., BARREIRO A. *SPHysics development of a free-surface fluid solver Part 2: Efficiency and test cases*. Computers & Geosciences, 48:300-307, 2012.
- [67] SEBASTIÃO P., SOARES, C. G. *Modeling the Fate of Oil Spills at Sea*. Spill Science and Technology Bulletin, vol. 2, No. 2/3, pp. 121-131, 1995.

APÊNDICE A - Obtenção da Aproximação para o Laplaciano (SPH)

Neste apêndice é apresentada a dedução da expressão matemática para a aproximação do laplaciano de uma função, com o emprego do método SPH. Esta aproximação foi verificada a partir de resultados analíticos para a difusão de calor em uma placa plana homogênea (seção 5.2) e implementada no código numérico desenvolvido nesta Tese de Doutorado, para a aproximação do termo de forças viscosas no balanço da quantidade de movimento.

Para a aproximação do laplaciano de uma função, utilizou-se a expansão da série de Taylor. Em um domínio bidimensional, é possível determinar o valor de uma função em um ponto $X' = (x', y')$, em torno de um ponto fixo $X = (x, y)$:

$$\begin{aligned} f(x', y') &= f(x, y) + (x' - x) \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{(x,y)} + \\ &(y' - y) \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{(x,y)} + \frac{1}{2} \left[(x' - x)^2 \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{(x,y)} + \right. \\ &\left. (y' - y)^2 \left. \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right|_{(x,y)} \right] + (x' - x)(y' - y) \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \right|_{(x,y)} + \\ &R_n(X' - X). \end{aligned} \tag{0.1}$$

Assumindo um erro de ordem 3 na aproximação, multiplicando a Eq. (0.1), truncada, por $\frac{(X - X')}{|X - X'|^2} \nabla W(X - X', h)$, e integrando-a:

$$\begin{aligned}
 & \int_{\Omega} \overbrace{f(x', y') \Delta X \cdot \nabla W(X - X', h)}^A dX' = \\
 & \int_{\Omega} \overbrace{f(x, y) \Delta X \cdot \nabla W(X - X', h)}^B dX' + \int_{\Omega} \overbrace{\left(x' - x\right) \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{(x, y)} \Delta X \cdot \nabla W(X - X', h)}^C dX' + \\
 & \int_{\Omega} \overbrace{\left(y' - y\right) \frac{\partial f}{\partial y} \Big|_{(x, y)} \Delta X \cdot \nabla W(X - X', h)}^D dX' + \\
 & \int_{\Omega} \overbrace{\frac{1}{2} \left(\left(x' - x\right)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \Big|_{(x, y)} + \left(y' - y\right)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \Big|_{(x, y)} \right) \Delta X \cdot \nabla W(X - X', h)}^E dX' + \\
 & \int_{\Omega} \overbrace{\frac{1}{2} \left(x' - x\right) \left(y' - y\right) \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \Big|_{(x, y)} \Delta X \cdot \nabla W(X - X', h)}^F dX'. \tag{0.2}
 \end{aligned}$$

onde $\Delta X = \frac{(X - X')}{|X - X'|^2}$.

O gradiente do *kernel* possui as propriedades de anti-simetria e não-normalização:

$$\int_{\Omega} \left(X' - X\right)_p \Delta X \cdot \nabla W \left(X' - X, h\right) dX' = 0, \tag{0.3}$$

$$\int_{\Omega} \left(X' - X\right)_l \left(X' - X\right)_t \Delta X \cdot \nabla W \left(X' - X, h\right) dX' = -\delta_{l,t}. \tag{0.4}$$

onde:

$$l = (1, 2), \quad t = (1, 2), \quad p = (1, 2),$$

$$(X' - X)_1 = (x' - x, 0),$$

$$(X' - X)_2 = (0, y' - y).$$

$\delta_{l,t}$ é o delta de Kronecker.

Na Figura a seguir, são apresentados os gráficos das derivadas do *kernel*, permitindo a visualização da propriedade de anti-simetria.

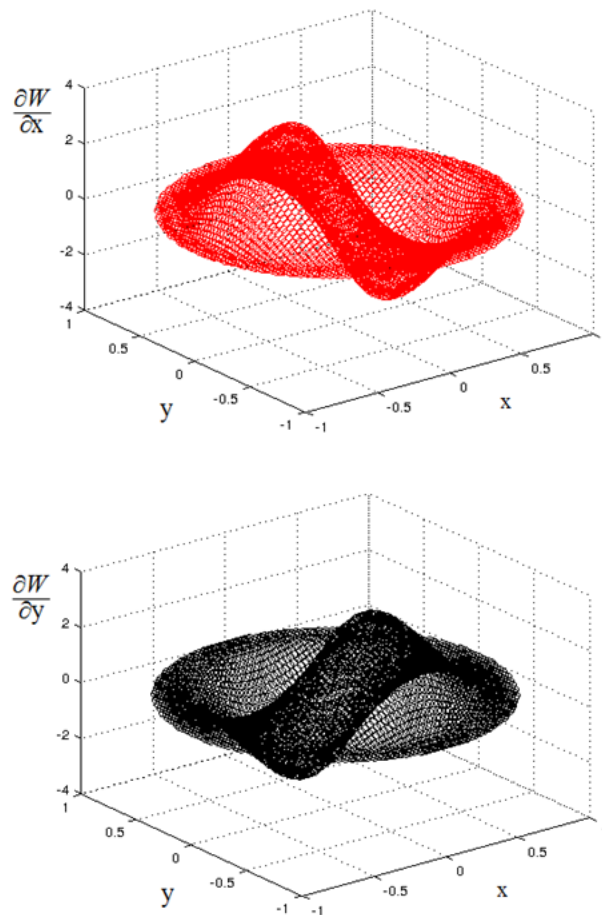


Figura : Derivadas do *kernel* nas direções cartesianas.

Aplicando-se as propriedades do *kernel*, conclui-se:

$$\int_{\Omega} \overbrace{\left(x' - x \right) \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{(x,y)}}^C \Delta X \cdot \nabla W(X - X', h) dX' = 0, \quad (0.5)$$

$$\int_{\Omega} \overbrace{\left(y' - y \right) \frac{\partial f}{\partial y} \Big|_{(x,y)}}^D \Delta X \cdot \nabla W(X - X', h) dX' = 0, \quad (0.6)$$

$$\int_{\Omega} \overbrace{\frac{1}{2} \left(\left(x' - x \right)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \Big|_{(x,y)} + \left(y' - y \right)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \Big|_{(x,y)} \right)}^E \Delta X \cdot \nabla W(X - X', h) dX' =$$

$$-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right) \Big|_{(x,y)}, \quad (0.7)$$

$$\int_{\Omega} \overbrace{\left(x' - x \right) \left(y' - y \right) \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \Big|_{(x,y)}}^F \Delta X \cdot \nabla W(X - X', h) dX' = 0, \quad (0.8)$$

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right) \Big|_{(x,y)} =$$

$$-2 \int_{\Omega} f \left[\left(x', y' \right) - f(x, y) \right] \Delta X \cdot \nabla W \left(X - X', h \right) dX'. \quad (0.9)$$

onde $\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right) \Big|_{(x,y)}$ é o laplaciano da função, avaliado na posição X .

Após a discretização do domínio por partículas, chega-se à seguinte expressão para a aproximação do laplaciano da função f , empregando o método SPH:

$$\left(\frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f_i}{\partial y^2} \right) = 2 \sum_{j=1}^n m_j \frac{m_j}{\rho_j} (f_i - f_j) \Delta X_{ij} \cdot \nabla W(X_i - X_j, h), \quad (0.10)$$

onde:

i é a partícula fixa, onde está sendo avaliado o laplaciano da função f ;

j é cada uma das partículas vizinhas da partícula fixa, no interior do domínio de influência;

$\left(\frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f_i}{\partial y^2}\right)$ é a aproximação SPH para o laplaciano da função f , avaliado na posição da partícula i ;

$$\Delta X_{ij} = \frac{X_i - X_j}{|X_i - X_j|^2}.$$

APÊNDICE B - Código

Computacional

Nesta pesquisa, um código computacional sequencial foi desenvolvido e implementado para a solução do problema do espalhamento do óleo. A seguir, as etapas deste código são brevemente explicadas.

1. As posições iniciais, velocidades, massas específicas, temperaturas, raio de suporte e demais propriedades físicas das partículas do fluido são definidas para o início da simulação;
2. As condições de contorno são definidas (plano geométrico com reflexão ou repulsivas). As partículas dos contornos têm suas propriedades definidas;
3. A busca de partículas vizinhas de uma determinada partícula fixa pode variar com o tempo e deve ser efetuada a cada iteração numérica;
4. Antes de calcular a aproximação para as forças internas agindo nas partículas do fluido, torna-se necessário atualizar o campo de pressões mediante o emprego da Equação de Tait;
5. O *kernel* empregado nas interpolações das propriedades das partículas é definido;
6. O cálculo da massa específica de cada partícula é realizado a partir da solução da equação de conservação da massa. A renormalização da massa específica é efetuada para partículas com domínio de influência incompleto (Filtro de Shepard, subseção 4.1.15);

7. São obtidas, numericamente, aproximações para as forças de superfície (de pressão e viscosas), respectivamente. A correção dos gradientes de pressão é efetuado para partículas com domínio de influência incompleto, a partir da aplicação do *Corrective Smoothed Particle Method*, subseção 4.1.16;
8. A força de corpo gravitacional é aplicada diretamente às partículas do fluido;
9. Com as aproximações obtidas para as forças de superfície e a força de corpo, as acelerações das partículas são calculadas com o emprego equação do balanço da quantidade de movimento;
10. Procede-se à integração temporal para previsão das propriedades das partículas no instante de tempo posterior. O critério de estabilidade de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) é aplicado na definição do passo de tempo que garanta a estabilidade e convergência dos resultados;
11. Arquivos de saída são obtidos ao final de cada iteração, a partir dos quais são geradas as representações gráficas para as propriedades físicas do fluido;
12. Verifica-se, finalmente, se a precisão desejada foi alcançada ou se o tempo será incrementado para a próxima iteração.

A Figura a seguir apresenta um fluxograma do código implementado.

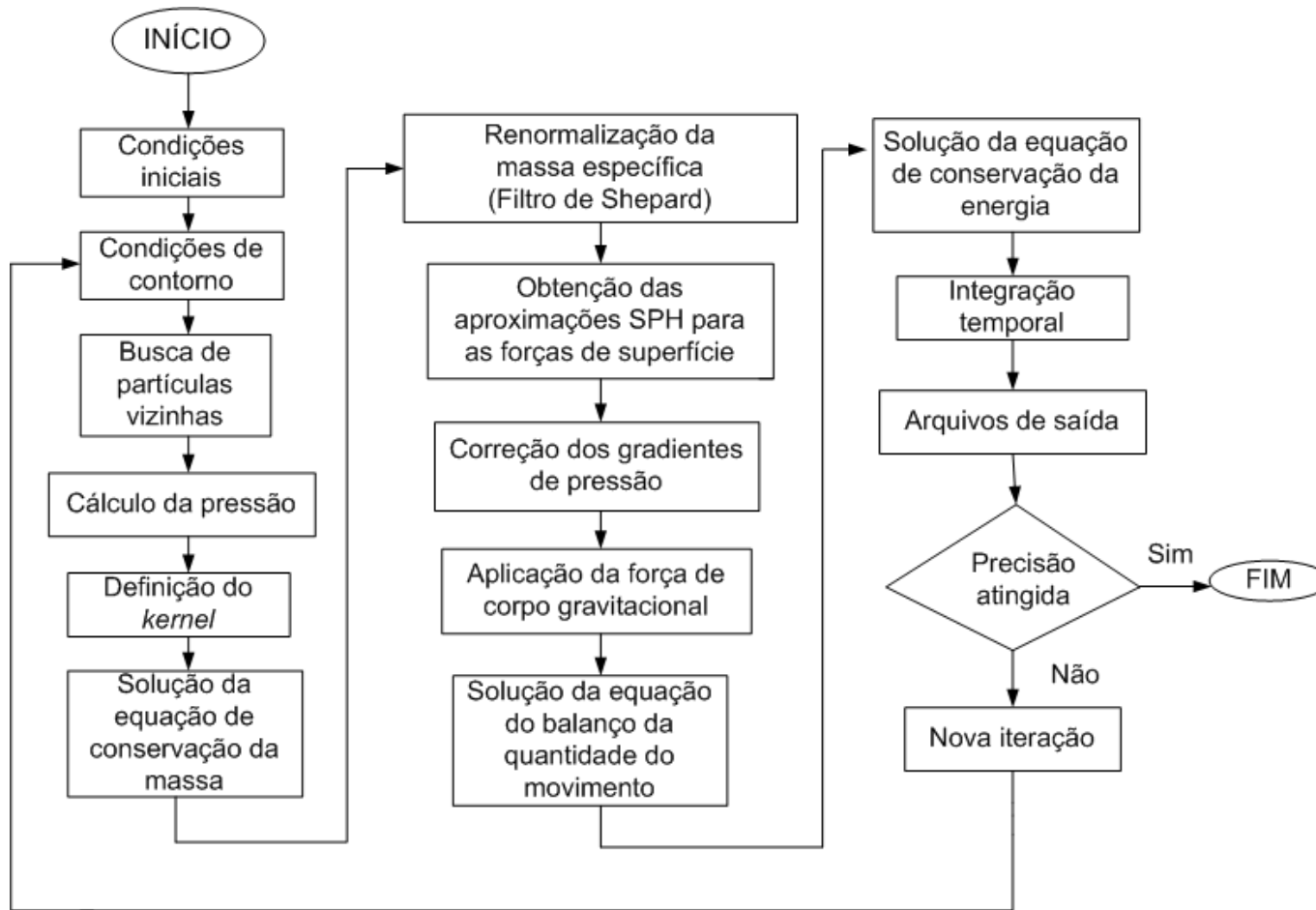


Figura : Fluxograma do código computacional implementado (SPH).