

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA
CENTRO DE PESQUISA E DESENVOLVIMENTO EM ENGENHARIA ELÉTRICA

**Utilização do Método da Hidrodinâmica de Partículas
Suavizadas Aplicado à Resolução de Problemas
Eletromagnéticos**

Miguel Lima Mendes

Dissertação de mestrado submetida à Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica da Universidade Federal de Minas Gerais, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Elétrica.

Orientador: Prof. Renato Cardoso Mesquita

Belo Horizonte, 20 de Agosto de 2010

Resumo

A resolução de sistemas de equações diferenciais parciais tem um papel importante na simulação computacional de problemas em engenharia. Diversos métodos numéricos foram desenvolvidos ao longo de décadas para resolver tais sistemas. Embora já existam hoje métodos considerados estáveis e precisos, os métodos mais tradicionalmente utilizados ainda exigem muito trabalho humano, principalmente no que refere-se a geração de malhas, que são um bloco de construção para tais métodos.

Com o advento de novos métodos onde malhas não são necessárias, intensas pesquisas têm sido desenvolvidas na tentativa de torná-los aplicáveis a todo tipo de problemas, buscando sempre maior precisão e velocidade nas simulações sem a necessidade da intervenção humana no processo.

Nesta dissertação é apresentado e avaliado um dos primeiros métodos sem malha, criado inicialmente para simulações de dinâmica dos fluidos, conhecido como Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas, mas que hoje é aplicado em diversos problemas de engenharia. Este método é aplicado na resolução das equações de Maxwell, tornando assim possível sua aplicação a problemas de eletromagnetismo. Aspectos como a ordem de consistência ou a forma de imposição de condições de contorno são discutidas e um algoritmo computacional paralelo é proposto.

A fim de validar a formulação do método, são apresentados resultados de testes de execução feitos a partir de uma implementação computacional que utiliza processamento paralelo. A eficiência da paralelização para o método

proposto é avaliada a fim de atestar sua capacidade de solução rápida para problemas de grande escala. Finalmente, são mostradas também algumas dificuldades que surgem quando escolhe-se este método para simulações de propagação de ondas eletromagnéticas.

Abstract

The solution of partial differential equations has an important role in the computational simulation of engineering problems. Many numerical methods to solve such kind of problems were developed through decades. Although there exist precise and stable methods nowadays, the traditional methods still require a lot of human effort, specially in what refers to mesh generation. Meshes are a building block for such traditional methods.

With the advent of new methods where meshes are no longer necessary, intensive research have being developed as a tentative of making them applicable to any kind of problems, always trying to reach better precision and speed on simulations without human interaction in the process.

In this work it is presented and studied one of the first meshless methods which is known as Smoothed Particle Hydrodynamics. This method was created for the simulation of fluid hydrodynamics but it is now also used for other kind of engineering problems. Relevant aspects of the method such as the consistency order or the imposition of boundary conditions are discussed and a computacional parallel algorithm is proposed.

In order to validate the method's formulation, the results obtained for simple problems using a parallel computacional implementation are presented. The efficiency of the parallelization of the method is verified to attest its capacity for fast solution of large scale problems. Finally, it is also pointed out some difficulties that arise when using the Smoothed Particle Hydrodynamics.

Agradecimentos

Primeiramente a Deus por me proteger e permitir que concluísse essa importante etapa de minha vida.

Ao meu orientador Renato Mesquita pela oportunidade que me foi dada e pelo auxílio valioso.

Aos amigos do GOPAC (Grupo de Otimização e Projeto Assistido por Computador) pelo companheirismo e pela ajuda na superação dos diversos obstáculos. Em especial: Luciano Pimenta, Felipe Terra, Leonardo Mozelli e Alexandre Ramos Fonseca.

Ao Professor Elson Silva pela disponibilidade e paciência sempre que surgiram dúvidas.

À toda minha família, à minha namorada Patrícia e aos meus amigos por sempre me apoiarem e incentivarem para que eu chegasse até o final desta jornada.

À minha amiga Bernadete Mendonça que sempre me deu bons conselhos e ajudou a superar muitas dificuldades.

A todos que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho.

A todos vocês, muito obrigado!

Sumário

Lista de Figuras	vii
Lista de Tabelas	viii
1 Introdução	1
1.1 Motivação	1
1.2 Métodos com Malha	3
1.3 Métodos sem Malha	5
1.4 Histórico do SPH	7
1.5 Objetivos	9
2 Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas	10
2.1 Representação Integral de uma Função	11
2.1.1 Aproximação da Representação Integral	11
2.1.2 Propriedades da Função Peso	13
2.1.3 Escolha da Função Peso	14
2.2 Aproximação por Partículas	16
2.3 Consistência no SPH	19
2.3.1 Consistência na Representação Integral	19
2.3.2 Consistência na aproximação por partículas	21
2.3.3 Imposição de Consistência	24
3 SPH para Problemas de Eletromagnetismo	29
3.1 SPH aplicado a Problemas de Propagação	30
3.1.1 Equações de Maxwell Dependentes do Tempo	30
3.1.2 Aplicando o SPH nas Equações de Maxwell	31
3.1.3 Resolvendo as Derivadas Temporais	32
3.1.4 Condições de Contorno no SPEM	34
3.1.5 A falta da Propriedade do Delta de Kronecker no SPH	40
3.2 Detalhes Computacionais	43
3.2.1 Algoritmo para o SPEM	43

3.2.2	Algoritmo SPEM paralelo	45
4	Testes e Resultados	49
4.1	Implementação	49
4.2	Problema de Propagação 1D	50
4.3	Pulso 2D	55
4.4	Guia de Onda em 2D	57
4.5	Problemas onde não foram obtidos bons resultados	60
4.6	Eficiência da Implementação Paralela	63
5	Conclusões e Trabalhos Futuros	65
5.1	Trabalhos futuros	68
5.2	Produção bibliográfica durante o período do mestrado	70
	Referências Bibliográficas	71

Lista de Figuras

1.1	Etapas na resolução de problemas usando métodos numéricos.	7
2.1	Spline Cúbica e derivadas.	16
2.2	Aproximação por partículas no SPH.	18
2.3	Spline cúbica 1D para diferentes raios de suavização com $\alpha = 2$.	21
2.4	Função núcleo próxima ao contorno do problema.	22
2.5	Inconsistência na aproximação por partículas não uniforme.	23
3.1	Distribuição não uniforme de partículas no SPEM.	34
3.2	Meios PML para absorção.	37
3.3	Fluxo de execução do SPEM paralelo.	46
3.4	Distribuição sequencial de partículas.	46
3.5	Distribuição alternada de partículas.	47
3.6	Distribuição aleatória de partículas.	47
3.7	Distribuição de partículas por tamanho da vizinhança.	48
4.1	Definição do problema 1D com fonte na partícula central.	52
4.2	Comparação entre aproximação do SPH e solução analítica.	53
4.3	Comparação entre SPH e solução analítica ampliada.	54
4.4	Aproximação do SPH com relação h/dr alterada.	55
4.5	SPH com 20 partículas por comprimento de onda.	56
4.6	Comparação entre aproximação do SPH e solução analítica.	57
4.7	Erro percentual no problema do pulso 2D.	58
4.8	Guia de onda formado por placas paralelas infinitas.	59
4.9	Resultados da simulação do guia de ondas.	60
4.10	Foto da simulação do guia de ondas.	60
4.11	Partículas no problema de propagação de onda plana.	61
4.12	Simulação de propagação de onda plana.	62
4.13	Comparação entre linhas paralelas no problema da onda plana.	62

Lista de Tabelas

4.1	Speedup para implementação paralela	63
-----	---	----

Lista de Símbolos

α	Fator de escala
Δt	Intervalo de tempo entre iterações
Δx	Distância entre partículas
δ	Função delta de Dirac
ϵ_0	Permissividade elétrica no vácuo
Γ	Interface de um domínio
∞	Símbolo de infinitude
μ_0	Permeabilidade magnética no vácuo
∇	Gradiente
Ω	Domínio de integração
ω_j	Volume da partícula j
σ	Condutividade elétrica
σ^*	Condutividade magnética
θ	Ângulo de incidência da onda plana
ξ	Posição em um domínio
C^0	Ordem de consistência 0
C^1	Ordem de consistência 1
C^2	Ordem de consistência 2
dr	Passo espacial de deslocamento (entre partículas)

dt	Passo de tempo
E	Campo vetorial elétrico
E_z	Componente z do campo elétrico
H	Campo vetorial magnético
h	Raio de suavização
H_x	Componente x do campo magnético
H_y	Componente y do campo magnético
$u''(x)$	Derivada segunda da função $u(x)$
$u'(x)$	Derivada primeira da função $u(x)$
$u^h(x)$	Aproximação da função u
W	Função núcleo
x_I	Posição da partícula I

Capítulo 1

Introdução

1.1 Motivação

Fenômenos físicos que podem ser descritos através de equações diferenciais parciais (EDPs) são tipicamente simulados em computadores através de métodos numéricos. Tais métodos são usados para modelar fenômenos físicos de interesse, como a dinâmica dos fluidos, condução de calor, deformação de materiais ou problemas de eletromagnetismo como a propagação de ondas e cálculo de campos estáticos ou quase-estáticos, entre muitos outros. A dinâmica dos fluidos é usada por exemplo para solução de problemas de astrofísica (Gingold & Monaghan 1977), testes simulados em túneis de vento, estudo de escoamento de fluidos, etc. O estudo da propagação de ondas é de interesse no estudo de antenas, enquanto o cálculo de problemas estáticos e quase-estáticos é de interesse por exemplo no estudo de máquinas elétricas e outros dispositivos eletromagnéticos.

A busca de novos métodos e o aperfeiçoamento dos métodos já existentes tem sido alvo de pesquisas nas mais diversas áreas. Embora as aplicações sejam as mais variadas, a constante evolução destes métodos tem aumentado

sua aplicabilidade a problemas cada vez mais complexos. Alguns métodos hoje consagrados são baseados em malhas, como o método de elementos finitos (FEM - finite element method), método das diferenças finitas (FDM - finite difference method), entre outros. Já os métodos sem malha têm ganhado importância apenas nos últimos anos, como é o caso da hidrodinâmica de partículas suavizadas (SPH - smoothed particle hydrodynamics)(Gingold & Monaghan 1977), o método de Galerkin livre de elementos (EFG - element free Galerkin)(Belytschko, Lu & Gu 1994), entre outros. O FEM e o FDM são considerados métodos tradicionais por já possuírem uma vasta gama de trabalhos publicados e se encontrarem hoje em um estágio de maturidade, sendo aplicados para grande parte dos problemas de engenharia.

Recentemente, métodos menos tradicionais que são usados para solução de problemas específicos, como o SPH, têm ganhado notoriedade. Suas características específicas garantem a obtenção de melhores resultados, de forma mais automática e se aproveitando melhor de novas tecnologias, favorecendo, por exemplo, o processamento paralelo em computadores com processadores de múltiplos núcleos ou naqueles com múltiplos processadores.

O método SPH tem como vantagem sobre os métodos com malha o fato de que não é preciso a geração de uma malha de elementos para se realizar os cálculos. A geração de malhas de forma totalmente automática é hoje motivação de pesquisas intensas e representam um gargalo na utilização dos métodos tradicionais como o FEM, especialmente para problemas tridimensionais com geometria complexa.

1.2 Métodos com Malha

Nos métodos com malha, como o FEM, o FDM, e o método de volumes finitos (FDM - finite volume method), o domínio contínuo é dividido em pequenos subdomínios discretizados, através de um processo de construção da malha. Uma *malha* é definida como o conjunto dos espaços abertos ou interseções entre as vertentes de uma rede formada por nós conectados de uma forma pré-definida. Esta malha, que no FEM é definida pelos elementos (triângulos, por exemplo), no FDM pelo grid, e pelas células no FVM, provê um certo relacionamento entre os nós, que é a base da formulação dos métodos numéricos tradicionais com malhas. Baseado numa malha pré-definida apropriadamente, as equações governantes podem ser convertidas para um conjunto de equações algébricas com parâmetros nodais para as variáveis de campo.

Atualmente os métodos de malha são a opção de escolha na resolução de problemas de engenharia. Apesar de seu sucesso, estes métodos sofrem com dificuldades oriundas do uso das malhas. Especificamente, problemas que envolvam superfícies livres, contornos deformáveis e interfaces móveis, como por exemplo em problemas de hidrodinâmica que envolvem explosões e altas velocidades. Além disso, existem ainda os problemas com geometria complexa, onde a geração de uma malha com qualidade é difícil e consome tempo.

Em métodos numéricos com malhas, a construção destas é um pré-requisito para as simulações. A construção de um grid regular para domínios irregulares, como ocorre no FDM, nunca foi uma tarefa fácil e exige tipicamente transformações matemáticas tão complexas que podem ser ainda mais custosas do que a resolução do problema numérico em si. Já no FEM, é a geração da malha que é um gargalo, especialmente para problemas tridi-

mensionais com geometrias complexas. Além disso, o tratamento para transformações extremamente grandes consome muito tempo e adiciona imprecisão numérica à solução.

O FEM tem sido largamente utilizado para solução de problemas em engenharia, envolvendo deformação de materiais, escoamento de fluidos ou cálculo de campo eletromagnético. Além disso, este método já possui um grande número de pacotes comercialmente disponíveis e em alto grau de desenvolvimento. Porém, como já foi dito, a criação de uma malha é um pré-requisito no FEM. Usualmente, um analista gasta a maior parte de seu tempo na criação da malha e isto se torna o componente de custo majoritário num projeto de simulação, uma vez que o custo de processamento computacional decai rapidamente. O ideal seria que o processo de geração de malhas fosse totalmente automático, feito por um algoritmo eficiente, sem intervenção humana. Embora já existam tais algoritmos, eles são totalmente robustos apenas para problemas de até duas dimensões, falhando para algumas geometrias tridimensionais.

Já o FDM, embora também já seja usado em um grande número de problemas, sofre com o fato de que ele necessita de uma malha de nós regularmente distribuídos. Por isso grandes esforços têm sido feitos na tentativa de relaxar esta necessidade, mas este é um trabalho que ainda está em andamento.

As dificuldades relacionadas ao FEM revelam a origem dos problemas: a necessidade de se utilizar elementos, que são blocos de construção do FEM. A idéia de se eliminar a necessidade deles nasceu, então, naturalmente.

1.3 Métodos sem Malha

Nos métodos sem malha (MFree - mesh free), o sistema de equações governantes de um determinado fenômeno é resolvido sem a utilização de uma malha, ou seja, sem impor qualquer conectividade ou relação entre os nós para a solução deste sistema. Ao invés disso, é utilizado um conjunto de nós distribuídos arbitrariamente sobre o domínio do problema e em suas bordas, de forma a representá-lo (não discretizá-lo). Tais métodos têm sido o foco principal de pesquisas em direção a uma nova geração de métodos computacionais mais efetivos e para problemas mais complexos. O histórico, o desenvolvimento, a teoria e as aplicações dos métodos já existentes foram mostrados em monografias e artigos de revisão, como em (V.P.Nguyen, Rabczuk, Bordas & Duflot 2008), onde além de uma revisão, aspectos computacionais das implementações destes métodos são discutidos. Um histórico e uma revisão mais completos podem ser vistos em (Liu & Liu 2010).

Já existem vários métodos sem malha, como o EFG, o método Petrov-Galerkin local sem malha (MLPG - meshless local Petrov-Galerkin) (Atluri & Zhu 1998), o método de interpolação por pontos (PIM - point interpolation method), o SPH, o método de partículas com reprodução de núcleo (RKPM - reproducing kernel particle method) que é um SPH melhorado, entre outros.

Para que um método seja considerado um método sem malha, o mínimo que se exige do mesmo é que não seja necessária a criação de uma malha, pelo menos não para a interpolação das variáveis de campo. Idealmente, espera-se que nenhum tipo de malha seja necessário em nenhum processo destes métodos. Mas a realidade é que os métodos sem malha atuais não são realmente ideais. No EFG, por exemplo, existe a necessidade de células de fundo para integração das matrizes derivadas a partir da forma fraca sobre o domínio do problema. Já o MLPG exige a criação de células de fundo

para efetuar integrações locais. Já os métodos de partículas, como o SPH e o RKPM, exigem a predefinição dos volumes ou massas das partículas, além da necessidade de distribuir as partículas sobre o domínio. Um outro problema relacionado aos métodos de partículas é a imposição de condições de contorno, que é mais difícil nestes métodos.

Os métodos sem malha tem grande potencial para resolver as dificuldades relacionadas aos métodos com malhas. Nestes métodos não é necessário prover a priori nenhum tipo de informação de conectividade dos nós, permitindo uma flexibilidade para adição ou remoção de partículas ou nós sempre que necessário. Além disso, o refinamento de partículas/nós é feito de forma eficiente para problemas 2D ou 3D, incluindo problemas de análise estática ou dinâmica, lineares ou não-lineares.

Graças à eliminação da necessidade de criação de malhas, e graças ao fato de que os nós podem ser gerados de forma totalmente automática, o tempo que um analista gastaria na geração de malhas é economizado, resultando em custos e tempo significativamente menores na modelagem e projetos de simulação (Liu 2003).

Tanto em métodos com malha como em métodos sem malha, o processo de simulação funciona a princípio de forma semelhante. A figura 1.1 ilustra o processo de simulação do FEM e o compara com o processo para os métodos sem malha. Os métodos divergem no estágio de criação de malhas e sua diferença fundamental é na forma como são construídas as *funções de forma*. Enquanto no FEM estas funções são construídas a partir dos elementos, nos métodos MFree elas são construídas para cada nó e podem ser diferentes de acordo com a posição deste nó ou por outras características locais.

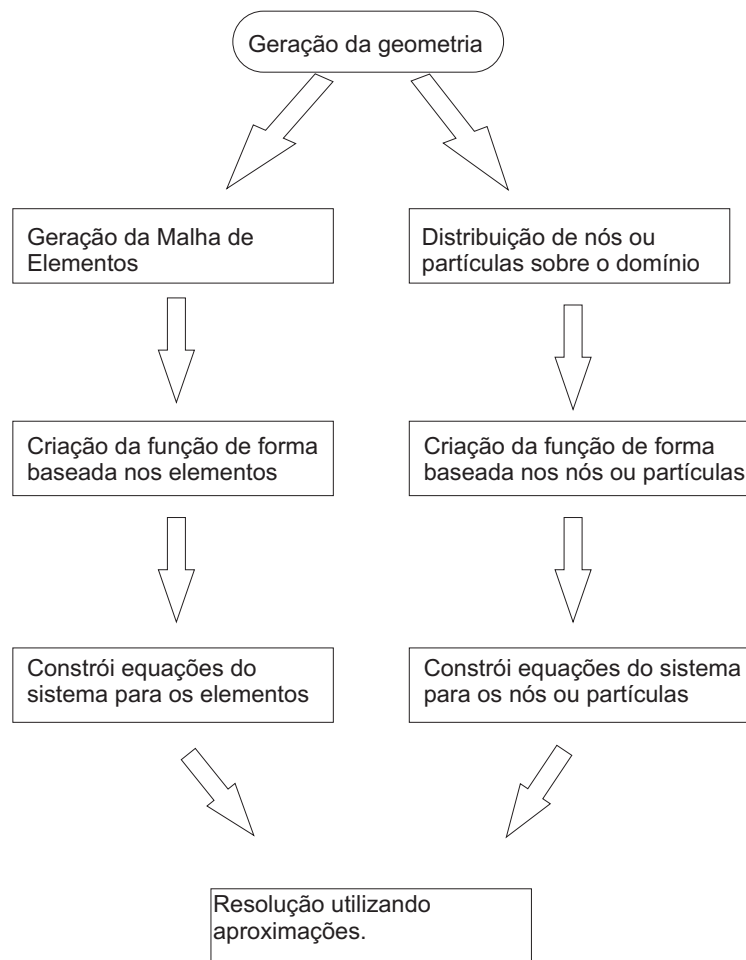


Figura 1.1: Etapas na resolução de problemas usando métodos numéricos.

1.4 Histórico do SPH

O método de Hidrodinâmica de Partículas suavizadas pode ser considerado como o mais antigo método moderno de partículas livre de malhas. Ele é considerado um método verdadeiramente livre de malhas, pois não precisa nem sequer de malhas auxiliares para realizar integrações, como ocorre em outros métodos. Originalmente utilizado para aplicações de escala contínua, foi inventado para solução de problemas tridimensionais de astrofísica no espaço aberto, uma vez que o movimento coletivo das estrelas é semelhante

ao movimento das partículas de um líquido ou um gás, e pode ser modelado pelas equações hidrodinâmicas Newtonianas clássicas.

O SPH tem várias vantagens sobre os métodos numéricos tradicionais. As superfícies livres, interface de materiais e contornos em movimento são traçados de forma natural durante a simulação. Além disso o SPH não precisa de utilizar qualquer tipo de grid ou malha, possibilitando o correto tratamento de grandes deformações, uma vez que não existe conectividade pré-definida entre os nós. Finalmente, o método tem fácil implementação e é mais natural desenvolver modelos tridimensionais com ele.

Muitas pesquisas foram desenvolvidas no sentido de apurar a precisão, estabilidade e convergência do método. Nos últimos anos, diferentes modificações ou correções foram apresentados para melhorar sua precisão. Chen e outros propuseram o método SPH corretivo (CSPM - Corrective Smoothed Particle Method) (Chen, Beraun & Carney 1999) que melhora a precisão da simulação dentro do domínio e próximo às bordas. Liu e outros ainda fizeram melhorias no CSPM, melhorando sua performance na consistência de partículas, dando origem a um Método de Partículas Finitas (FPM - Finite Particle Method) (Liu & Liu 2006). Outras modificações notáveis ou correções, incluem o Moving Least Square Particle Hydrodynamics (MLSPH) (GA 1999, GA 2000), o RKPM (Liu & Zhang 1995), e muitas outras abordagens de restauração de consistência de partículas. Além destas evoluções, Belytschko e seus colegas conduziram uma série de análises de estabilidade e convergência para métodos sem malha, e algumas técnicas e análises podem ser aplicados ao SPH (Belytschko, Krongauz, Dolbow & Gerlach 1998, Belytschko, Guo, W.K.Liu & Xiao 2000).

Embora historicamente o SPH tenha sido concebido para resolução de problemas envolvendo mecânica de sólidos e (principalmente) fluidos, alguns

trabalhos também tentaram utilizar o método para solução de problemas de eletromagnetismo (Ala, Francomano, Tortorici, Toscano & Viola 2006a). Este trabalho é o ponto de partida desta dissertação.

1.5 Objetivos

O objeto de estudo desta pesquisa é a avaliação da possibilidade de utilização do método SPH na resolução de problemas de eletromagnetismo. Pretende-se fazer uma análise profunda sobre este método, incluindo a análise de sua consistência, formas de imposição de condições contorno e identificação dos seus pontos negativos e positivos quando comparado a métodos com malha.

Tendo em vista que o principal avanço nas unidades de processamento central de computadores (CPU - central processing unit) atuais é o aumento no número de núcleos de processamento (Bischof, Mey, Terboven & Sarholz 2007), pretende-se também estudar e avaliar a capacidade do método de se beneficiar desta tecnologia a fim de se acelerar as simulações através de processamento paralelo.

Capítulo 2

Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas

O método de hidrodinâmica de partículas suavizadas (SPH - smoothed particle hydrodynamics) foi desenvolvido simultaneamente por (Lucy 1977) e (Gingold & Monaghan 1977) como um método para resolução de problemas da astrofísica que eram modelados como um problema de hidrodinâmica. Posteriormente o método foi generalizado para resolução de problemas de valor inicial de natureza não hidrodinâmica. Tal método foi denominado Interpolação por Partículas Suavizadas (SPI - smoothed particle interpolation) (Laguna 1995). Nessa nova abordagem o SPH passou a ser visto estritamente como um esquema de interpolação, o que veio a permitir posteriormente sua aplicação nos mais diversos tipos de problemas.

Neste capítulo será mostrada a formulação SPI, as idéias básicas de seu funcionamento e como é feita uma aproximação do SPI para funções. Muitas vezes o SPI será referenciado como SPH, tendo em vista que o primeiro método é apenas uma generalização do segundo e que sua base de funcionamento é a mesma. Desta forma dá-se o devido crédito à pesquisa realizada

em (Lucy 1977) e (Gingold & Monaghan 1977), onde o método foi de fato desenvolvido.

2.1 Representação Integral de uma Função

O SPH é baseado na representação integral de uma função u qualquer, definida por:

$$u(x) = \int_{-\infty}^{\infty} u(\xi)\delta(\xi - x)d\xi \quad (2.1)$$

onde x representa o ponto onde a função u está sendo avaliada (independentemente do número de dimensões) e δ é a função delta de Dirac definida por:

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty & \text{se } x = 0 \\ 0 & \text{se } x \neq 0 \end{cases} \quad (2.2)$$

e com propriedade:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)dx = 1 \quad (2.3)$$

2.1.1 Aproximação da Representação Integral

A representação integral mostrada na equação (2.1) é *exata*, porém não pode ser representada exatamente por um algoritmo numérico devido à incapacidade de representação do conceito matemático de infinitude. A representação exata precisa ser então substituída por uma aproximação que possa ser calculada por um algoritmo numérico. Em (Gingold & Monaghan 1977) e (Lucy 1977), esta aproximação é expressa por:

$$u^h(x) = \int_{\Omega} u(\xi)W(\xi - x, h)d\xi \quad (2.4)$$

onde $u^h(x)$ representa uma aproximação da função $u(x)$, $W(x - \xi, h)$ é chamada de função núcleo, peso ou função de suavização e h é chamado de comprimento ou raio de suavização do SPH. O raio de suavização h define o domínio de suporte compacto Ω que é referenciado no SPH como *domínio de influência* ou *domínio de suavização*. É possível mostrar que a aproximação mostrada na equação (2.4) tem precisão de segunda ordem, ou seja, $u^h(x) = u(x) + O(h^2)$ (Laguna 1995).

O procedimento de aproximação na equação (2.4) pode ser usado também para calcular derivadas espaciais nas posições das partículas. Assim, para calcular o gradiente da função u temos que resolver:

$$\nabla u^h(x) = \int_{\Omega} \nabla u(\xi)W(\xi - x, h)d\xi \quad (2.5)$$

Após algumas manipulações e utilizando-se o teorema da divergência, a equação (2.5) leva à equação:

$$\nabla u^h(x) = \int_{\Gamma} u(\xi)W(\xi - x, h)\vec{n}d\Gamma - \int_{\Omega} u(\xi)\nabla W(\xi - x, h)d\xi \quad (2.6)$$

onde Γ é a interface (superfície ou borda) da região Ω .

A função W é escolhida de maneira a ter um suporte local, ou seja, ela é não nula apenas em uma região limitada. Se este suporte local for interior a Ω , então a integral de superfície em (2.6) se anula, e obtemos:

$$\nabla u^h(x) = - \int_{\Omega} u(\xi)\nabla W(\xi - x, h)d\xi \quad (2.7)$$

onde ∇u é o gradiente da função u .

A equação (2.7) é simplesmente a afirmação de que a derivada da aproximação da função é igual à aproximação da derivada da mesma, ou seja, que $\nabla(u^h(x)) = (\nabla u(x))^h$. Da mesma forma, não é difícil mostrar que, para uma função vetorial $\mathbf{v}(x)$ a aproximação de seu divergente é dada por $(\nabla \cdot \mathbf{v}(x))^h = \nabla \cdot \mathbf{v}^h(x)$, ou seja:

$$(\nabla \cdot \mathbf{v}(x))^h = \int_{\Omega} \mathbf{v}(\xi) \cdot \nabla W(\xi - x, h) d\xi \quad (2.8)$$

A aproximação para derivadas de segunda ordem pode ser obtida através das propriedades $(\nabla \cdot \mathbf{v}(x))^h = \nabla \cdot \mathbf{v}^h(x)$ e $\nabla(u^h(x)) = (\nabla u(x))^h$ discutidas acima.

2.1.2 Propriedades da Função Peso

Comparando-se a representação exata na equação (2.1) com a aproximação na equação (2.4) nota-se que a função núcleo tem como papel fazer uma aproximação da função δ em um domínio finito. Esta é uma condição que deve ser imposta sobre a função peso, referenciada como propriedade *Delta de Dirac*. Para que ela desempenhe bem seu papel e para que a aproximação na equação (2.4) seja convergente deve-se satisfazer este e alguns critérios básicos (Gingold & Monaghan 1982). Em suma, cinco critérios devem ser satisfeitos:

$$W(\xi - x, h) > 0 \text{ sobre } \Omega \quad \text{Positividade}$$

$$W(\xi - x, h) = 0 \text{ fora de } \Omega \quad \text{Suporte Compacto}$$

$$\int_{\Omega} W(\xi - x, h) d\xi = 1 \quad \text{Unicidade}$$

$$W \text{ é monotônica decrescente} \quad \text{Decaimento}$$

$$W(\xi - x, h)_{h \rightarrow 0} \longrightarrow \delta \quad \text{Delta de Dirac}$$

A *positividade*, embora não seja necessária do ponto de vista matemático, é importante para garantir a representação de alguns fenômenos físicos de

forma consistente (ou estável). Em problemas de dinâmica dos fluidos, por exemplo, a densidade não poderia ser jamais negativa, mas não teríamos garantias disso sem esta propriedade. Existem outras versões do SPH onde esta propriedade não precisa ser imposta, como no *Reproducing Kernel Particle Method* (RKPM) (Liu & Zhang 1995), que garante uma reprodução de maior ordem da função e suas derivadas.

O *Supporte Compacto* é importante no SPH porque permite que a aproximação seja gerada a partir de informação local. Com informação local, é possível por exemplo distribuir o processamento (como será visto) de forma eficiente entre diversos processadores ou núcleos de processamento, se eles estiverem disponíveis.

A *unicidade* garante a consistência C^0 da representação integral de uma função contínua, mostrada na equação (2.1), mas é importante notar que não garante a consistência de ordem C^0 da forma discreta aproximada, como será mostrado posteriormente na seção 2.3, onde é feita uma discussão sobre o que é a ordem de consistência e como impor a mesma para o SPH.

A condição de *decaimento* também não é uma exigência matemática para convergência, mas é imposta para determinar que a influência que uma partícula exerce sobre outras sempre diminui quando aumenta-se a distância entre elas.

2.1.3 Escolha da Função Peso

Existem muitas possíveis escolhas para a função peso que satisfazem as condições mostradas em 2.1.2. A maioria das funções de peso em métodos MFree são funções em “forma de chapéu”, como a *spline cúbica* mostrada na figura 2.3. Algumas das mais frequentemente usadas serão mostradas aqui.

A função peso *spline cúbica*:

$$W(x_i - x) = W(\bar{d}) = \begin{cases} \frac{2}{3} - 4\bar{d}^2 + 4\bar{d}^3 & \text{para } \bar{d} \leq \frac{1}{2} \\ \frac{4}{3} - 4\bar{d} + 4\bar{d}^2 - \frac{4}{3}\bar{d}^3 & \text{para } \frac{1}{2} \leq \bar{d} \leq 1 \\ 0 & \text{para } \bar{d} > 1 \end{cases} \quad (2.9)$$

A função peso *spline quadrática*:

$$W(x_i - x) = W(\bar{d}) \begin{cases} 1 - 6\bar{d}^2 + 8\bar{d}^3 - 3\bar{d}^4 & \text{para } \bar{d} \leq 1 \\ 0 & \text{para } \bar{d} > 1 \end{cases} \quad (2.10)$$

Nas equações (2.9) e (2.10), o valor de \bar{d} é definido por:

$$\bar{d} = \frac{|x_I - x|}{d_W} = \frac{r}{d_W} \quad (2.11)$$

onde r é a distância entre x e x_I , e d_W está diretamente relacionado ao raio de suavização h . Esta relação direta é definida por:

$$d_W = \alpha h \quad (2.12)$$

onde α é uma constante referenciada como *fator de escala*. A escolha desse fator pode variar de acordo com a função núcleo sendo utilizada. Valores típicos para este fator estão na faixa de 2 a 5, dependendo da função núcleo sendo utilizada e da densidade de partículas no domínio. Na prática, d_W define o tamanho da região de influência de um nó sobre seus vizinhos.

Outra opção para função peso é a *gaussiana* (Laguna 1995):

$$W(r) = \frac{1}{\pi^{d/2} h^d} \begin{cases} e^{-(\frac{r}{h})^2} & \text{para } \frac{r}{h} \leq \alpha \\ 0 & \text{para } \frac{r}{h} > \alpha \end{cases}. \quad (2.13)$$

onde $r = |x_I - x|$ é a distância e $d = 1, 2, 3$ denota o número de dimensões do problema.

As funções peso nas equações (2.9) e (2.10) têm a vantagem de serem computacionalmente mais leves e facilmente calculadas quando comparadas a (2.13), pois esta última precisa de um fator de escala maior, tipicamente $\alpha \sim 5$ (Laguna 1995). A vantagem da *gaussiana* é que ela é suave até uma ordem infinita de derivadas, enquanto as duas primeiras são suaves até um número finito de derivações, como mostra a figura 2.1.

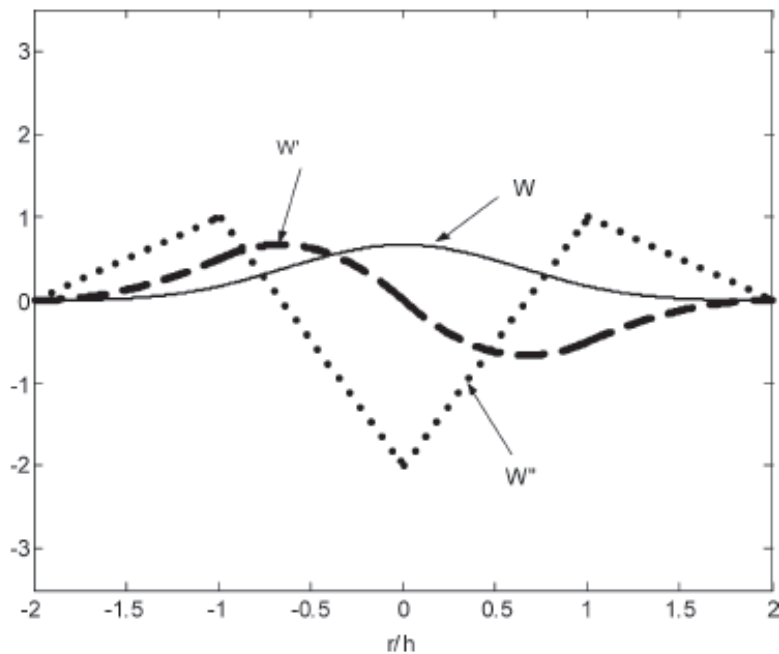


Figura 2.1: Spline cúbica e suas derivadas de primeira e segunda ordem com $\alpha = 2$. (Liu 2003)

2.2 Aproximação por Partículas

Para discretizar a equação (2.4) é usada uma quadratura nodal conhecida como *aproximação por partículas*. A integração é substituída por uma soma

sobre um conjunto de partículas espalhadas no domínio. A equação é reescrita como:

$$u^h(x) = \sum_j^N W(x_j - x, h)u(x_j)\omega_j \quad (2.14)$$

onde x_j é a posição da partícula j , h é o raio de suavização definido para a posição x e ω_j é uma medida do domínio de suporte da partícula j ou *volume* desta partícula, definido por:

$$\omega_i = \frac{1}{\sum_j^N W(x_j - x_i, h)} \quad (2.15)$$

A figura 2.2 ilustra uma distribuição de partículas em um domínio Ω . A região de raio αh em torno da partícula na posição x contém o conjunto de partículas denominado como partículas vizinhas mais próximas ou NNP (nearest-neighboring particles). O somatório em 2.14 é sobre este conjunto de partículas e N é, portanto, o número de partículas vizinhas à posição x . Assim fica claro que quanto maior for o raio de suavização ou o fator de escala, maior o número de termos naquela soma e portanto maior é o custo computacional na aproximação.

As partículas podem ser espalhadas de forma uniforme ou não uniforme sobre o domínio. É por isso que é importante ressaltar que na equação (2.14) cada partícula pode (e muitas vezes deve) ter valores diferentes para o raio de suavização. Uma distribuição não uniforme de partículas permite que se aumente a concentração das partículas em áreas críticas, onde existem grandes variações na função sendo aproximada.

A aproximação por partículas é uma aproximação para equação (2.4) e portanto esta é a segunda aproximação que fazemos no SPH. Quando esta

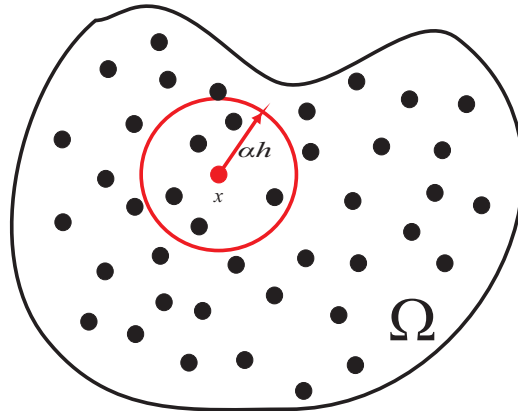


Figura 2.2: Aproximação por partículas no SPH

aproximação é usada, o erro de integração gerado pela discretização depende da distribuição das partículas. O menor erro é obtido com uma distribuição uniforme das partículas. Neste caso, o erro ϵ para uma derivada de ordem n é dado por :

$$\epsilon = O\left(h^{-n} \left(\frac{\Delta x}{h}\right)^2\right) \quad (2.16)$$

onde Δx é a distância entre as partículas. Levando também em conta o erro da aproximação da representação integral conclui-se que o erro do SPH é dado por $h^2 + h^{-n}(\Delta x/h)^2$. Em (Laguna 1995) é mostrado que o erro de aproximação da formulação do SPH tem a mesma ordem do FD usando uma distribuição uniforme de partículas e o erro absoluto de aproximação será exatamente o mesmo se para cada ponto do grid de FD criarmos três partículas do SPH.

2.3 Consistência no SPH

A *ordem de consistência* de uma aproximação de uma função é uma importante medida de quão bem um método pode aproximar funções. Um método é dito de consistência C^0 se pode reproduzir com exatidão uma função constante, consistência C^1 se pode reproduzir um polinômio de grau um, consistência C^2 se pode reproduzir um polinômio de grau dois, e assim por diante. Quanto maior for a ordem de consistência, mais robusta será a aproximação em questão.

Nesta seção é apresentada uma discussão sobre a imposição de consistência no SPH. Primeiramente é necessário observar que foram feitas duas aproximações. A primeira é a utilização de uma função Kernel para aproximar a função Delta de Dirac, na representação integral da função. A segunda é na aproximação por partículas, ou seja, na etapa de integração. A imposição de consistência será avaliada separadamente para cada um destes casos.

2.3.1 Consistência na Representação Integral

A aproximação do SPH é dada pela equação (2.4). Para que esta aproximação tenha consistência de ordem zero é necessário que ela reproduza uma constante c . Portanto queremos $u^h = c$. Substituindo em (2.4) obtém-se:

$$\begin{aligned} u(x)^h = c &\iff \int_{\Omega} cW(\xi - x, h_{\xi})d\xi = c \\ &\iff c \int_{\Omega} W(\xi - x, h)d\xi = c \\ &\iff \int_{\Omega} W(\xi - x, h)d\xi = 1 \end{aligned} \tag{2.17}$$

Na equação em (2.17) temos uma condição que já havíamos exigido como característica da função núcleo na seção 2.1.2. Portanto, a aproximação que use como função núcleo qualquer uma das funções mostradas na seção 2.1.3

tem consistência de ordem zero (C^0).

Para impor a consistência C^1 , a aproximação SPH deverá ser capaz de reproduzir uma função linear $u(x) = c_0 + c_1x$. Novamente substituindo na equação (2.4):

$$\begin{aligned}
 u(x)^h = c_0 + c_1x &\iff \int_{\Omega} (c_0 + c_1\xi)W(\xi - x, h)d\xi = c_0 + c_1x \\
 &\iff c_0 \int_{\Omega} W(\xi - x, h)d\xi \\
 &\quad + c_1 \int_{\Omega} \xi W(\xi - x, h)d\xi = c_0 + c_1x \quad (2.18) \\
 &\iff \begin{cases} \int_{\Omega} W(\xi - x, h)d\xi = 1 \\ \int_{\Omega} \xi W(\xi - x, h)d\xi = x \end{cases}
 \end{aligned}$$

A primeira imposição na equação (2.18) é a mesma imposta na equação (2.17) e que já é satisfeita pela função núcleo. Ainda é preciso garantir que a segunda imposição na equação (2.18) seja satisfeita. Multiplicando a equação (2.17) por x obtém-se:

$$\int_{\Omega} xW(\xi - x, h)d\xi = x \quad (2.19)$$

Agora, subtraindo da segunda condição imposta na equação (2.18) a equação (2.19) obtém-se:

$$\int_{\Omega} (\xi - x)W(\xi - x, h)d\xi = 0 \quad (2.20)$$

A equação (2.20) mostra que o primeiro momento da função núcleo deve se anular. Para que tal condição seja satisfeita, é necessário que a função núcleo seja simétrica em torno da origem, ou seja, ela deve ser par. Pela figura 2.3 percebe-se claramente que esta condição é satisfeita. Portanto a função tem consistência de primeira ordem no interior do domínio. No entanto, perto dos contornos da região Ω isso não ocorre. Nos contornos, a

função núcleo é truncada e vale 0, deixando portanto de ser uma função par, como ilustrado na figura 2.4.

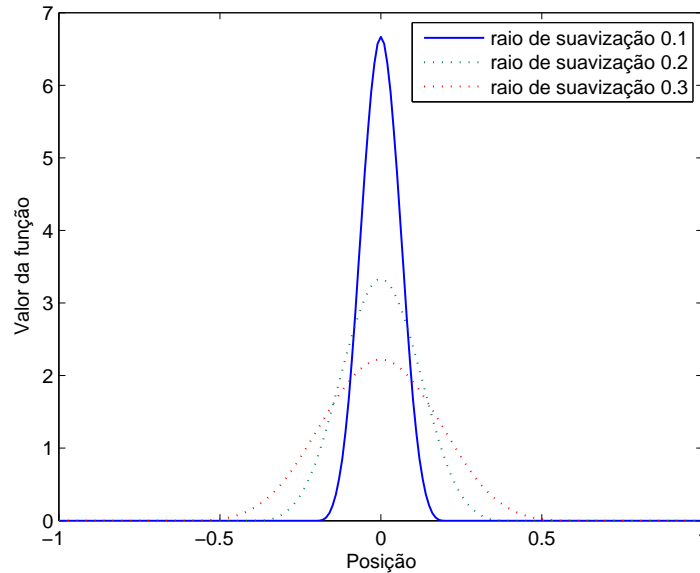


Figura 2.3: Spline cúbica 1D para diferentes raios de suavização com $\alpha = 2$.

Uma das maneiras de contornar o problema é redefinindo a função núcleo de forma que o truncamento não implique em uma função não par. Uma das maneiras de fazê-lo é através do Reproducing Kernel Particle Method (RKPM) (Liu & Zhang 1995). No entanto, optou-se aqui pela utilização de outro método, que além de garantir a consistência C^1 para a representação integral, irá também garantir a consistência de primeira ordem na aproximação por partículas, como será mostrado na próxima seção.

2.3.2 Consistência na aproximação por partículas

Pelo que foi visto até aqui, viu-se que a forma integral do SPH com uma função núcleo convencional tem consistência C^1 no interior da região. Esta consistência é chamada de consistência núcleo ou de aproximação e está rela-

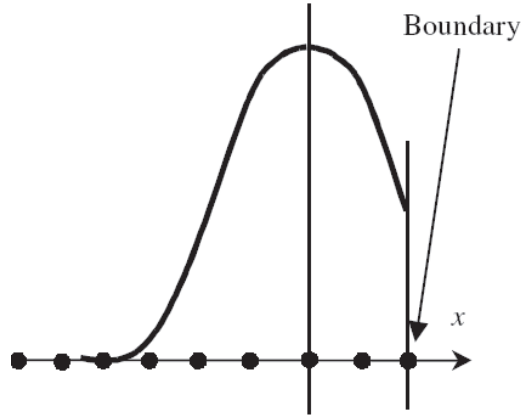


Figura 2.4: Função núcleo próxima ao contorno do problema. (Liu 2003)

cionada com a aproximação integral contínua do SPH. Satisfazer uma determinada consistência núcleo não implica necessariamente que a aproximação por partículas correspondente também satisfará a condição de consistência discretizada. Esta discrepância entre a aproximação por partículas e a aproximação contínua é denominada inconsistência de partícula.

Quando utiliza-se a aproximação por partículas com uma distribuição não uniforme de partículas, a consistência de primeira ordem é quebrada para regiões no interior do domínio Ω , longe do contorno. As condições de consistência em (2.17) e (2.20) em sua forma discretizada são:

$$\sum_{j=1}^N W(x_j - x, h) \omega_j = 1 \quad (2.21)$$

$$\sum_{j=1}^N (x_j - x) W(x_j - x, h) \omega_j = 0 \quad (2.22)$$

A inconsistência das partículas é uma manifestação da discrepância entre estas equações espaciais discretizadas e as aproximações na forma contínua correspondentes.

Embora a função núcleo (na forma contínua) seja par, a avaliação desta função em pontos diferentemente espaçados leva a uma aproximação discretizada que não é par, devido à contribuição desbalanceada das partículas nas somas, como mostra a figura 2.5. Com isto, a condição na equação (2.22) não é satisfeita. Nas regiões próximas ao contorno, mesmo para distribuições uniformes de partículas, o lado esquerdo da equação (2.21) é menor do que 1 e o lado esquerdo da equação (2.22) não será nulo, graças ao truncamento da função núcleo nas bordas (veja figura 2.4). Assim o método SPH não terá consistência C^0 ou C^1 na aproximação por partículas. Este problema é a causa direta para baixa precisão associada ao SPH original.

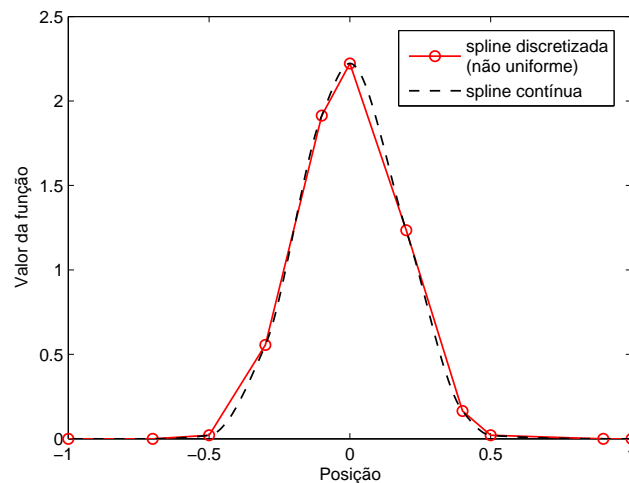


Figura 2.5: Inconsistência na aproximação por partículas não uniforme.

Além dos problemas apontados nos parágrafos anteriores, é preciso também escolher de forma coerente o raio de suavização h em função da distribuição de partículas no domínio. Em um domínio unidimensional e usando uma spline cúbica, com distribuição uniforme das partículas, o SPH terá consistência C^0 uma vez que a equação (2.21) será satisfeita. Mas não será qualquer escolha de h que irá satisfazer tal condição. Se o raio h for

muito pequeno em relação ao espaçamento, por exemplo, corre-se o risco de que uma partícula não tenha nenhuma partícula em sua vizinhança, fazendo assim com que a função núcleo discretizada seja representada em apenas um ponto, resultando em uma função núcleo discretizada descontínua.

De forma geral, a inconsistência de partículas é originada a partir da discrepância entre a aproximação núcleo do SPH e sua aproximação discreta. Partículas próximas à fronteira, irregularmente distribuídas e a variação do raio de suavização são fatores que podem levar à inconsistência da aproximação por partículas do SPH original.

2.3.3 Imposição de Consistência

Para restaurar a consistência na aproximação por partículas, diferentes métodos foram propostos. As abordagens mais recentes usualmente envolvem algum tipo de normalização ou a reconstrução da função de aproximação. A reconstrução da função núcleo pelo RKPM leva a uma função Kernel negativa em alguns pontos da vizinhança, fazendo com que a propriedade positividade (veja 2.1.2) não seja obtida.

Baseados na expansão em série de Taylor da aproximação de uma função no SPH, (Chen et al. 1999) desenvolveram o método *Corrective Smoothed Particle Method* (CSPM). A aproximação kernel (ou representação integral) corrigida é obtida a partir da expansão em série de Taylor em torno da posição de uma partícula i . Ao invés de fazer a expansão em torno de uma posição de uma partícula, será feita aqui a expansão em torno de uma posição x qualquer do domínio Ω . Em uma dimensão esta expansão é dada por:

$$u(\xi) = u(x) + (\xi - x)u'(x) + \frac{(\xi - x)^2}{2!}u''(x) + \dots \quad (2.23)$$

Multiplicando os dois lados da equação (2.23) pela função núcleo W e integrando sobre todo o domínio:

$$\begin{aligned} \int u(\xi)W(\xi - x, h)d\xi = & u(x) \int W(\xi - x, h)d\xi + \\ & u'(x) \int (\xi - x)W(\xi - x, h)d\xi + \dots \end{aligned} \quad (2.24)$$

Agora, se todos os termos envolvendo qualquer derivada de u na equação (2.24) forem omitidos, obtemos uma aproximação para a função $u(\xi)$ na posição x :

$$u^h(x) = \frac{\int u(\xi)W(\xi - x, h)d\xi}{\int W(\xi - x, h)d\xi} \quad (2.25)$$

A aproximação expressa na equação (2.25) tem consistência C^1 no interior da região Ω e também em regiões próximas à fronteira. De fato, comparando as equações (2.4) e (2.25) observa-se que para regiões no interior do domínio as aproximações kernel do SPH original e do CSPM são idênticas, devido à condição de unicidade imposta na função núcleo.

A aproximação por partícula correspondente para uma função $u(x)$ em uma partícula i pode ser obtida usando uma soma sobre as partículas vizinhas para cada termo da equação (2.25), resultando em

$$u^h(\mathbf{x}_i) = \frac{\sum_{j=1}^N u(\mathbf{x}_j)W(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i, h_i)\omega_j}{\sum_{j=1}^N W(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i, h_i)\omega_j} \quad (2.26)$$

onde N é o número de partículas no conjunto NNP da partícula i e h_i é raio de suavização definido para esta mesma partícula. Usando a equação (2.25) pode-se também obter uma aproximação para a derivada de uma função, seguindo procedimento análogo ao mostrado em 2.1, obtendo-se:

$$\nabla u(x_i)^h = \frac{\int [u(\xi) - u(x_i)] \nabla W(\xi - x_i, h_i) d\xi}{\int [\xi - x_i] \nabla W(\xi - x_i, h_i) d\xi} \quad (2.27)$$

A aproximação por partículas correspondente à equação (2.27) é dada por:

$$\nabla u(x_i)^h = \frac{\sum_j^N [u(x_j) - u(x_i)] \nabla W(x_j - x_i, h_i) \omega_j}{\sum_j^N [x_j - x_i] W(x_j - x_i, h_i) \omega_j} \quad (2.28)$$

As equações de aproximação do CSPM para derivadas também têm consistência de ordem C^1 para regiões interiores e consistência C^0 para regiões próximas ao contorno.

Uma outra abordagem mostrada em (Liu & Liu 2006) tem a vantagem de ter consistência C^1 também nas bordas. Ela também é baseada na expansão em séries de Taylor de uma função em torno de um ponto \mathbf{x}_i . Esta expansão para uma função multidimensional é dada por:

$$u(x) = u(\mathbf{x}_i) + (\mathbf{x}^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha) u_\alpha(\mathbf{x}_i) + \frac{(\mathbf{x}^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha)(\mathbf{x}^\gamma - \mathbf{x}_i^\gamma)}{2!} u_{\alpha,\gamma}(\mathbf{x}_i) + \dots \quad (2.29)$$

onde u_α é a derivada da função u em relação a uma coordenada α e onde α e γ são coordenadas dimensionais variando entre 1 e d , sendo d o número de dimensões.

Seguindo os mesmos passos do CSPM, ou seja, multiplicando ambos os lados por uma função núcleo e omitindo suas derivadas de duas ou mais ordens, obtém-se:

$$\begin{aligned} \int u(\xi) W(\xi - \mathbf{x}_i, h_i) d\xi &= u(\mathbf{x}_i) \int W(\xi - \mathbf{x}_i, h_i) d\xi + \\ &u_\alpha(\mathbf{x}_i) \int (\xi^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha) W(\xi - \mathbf{x}_i, h_i) d\xi \end{aligned} \quad (2.30)$$

$$\int u(\xi)W_\beta(\xi - \mathbf{x}_i, h_i)d\xi = u(\mathbf{x}_i) \int W_\beta(\xi - \mathbf{x}_i, h_i)d\xi + u_\alpha(\mathbf{x}_i) \int (\xi^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha)W_\beta(\xi - \mathbf{x}_i, h_i)d\xi \quad (2.31)$$

Aqui, β é um índice de dimensão repetido de 1 até d . As equações (2.30) e (2.31) são na verdade $d + 1$ equações de um sistema com $d + 1$ variáveis ($f(x_i)$ e $f(x_i)_\alpha$). Resolvendo o sistema, obtém-se:

$$u_i = \frac{\begin{vmatrix} \int u(\xi)W_i(\xi)d\xi & \int (\xi^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha)W_i(\xi)d\xi \\ \int u(\xi)W_{i,\beta}(\xi)d\xi & \int (\xi^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha)W_{i,\beta}(\xi)d\xi \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \int W_i(\xi)d\xi & \int (\xi^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha)W_i(\xi)d\xi \\ \int W_{i,\beta}(\xi)d\xi & \int (\xi^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha)W_{i,\beta}(\xi)d\xi \end{vmatrix}} \quad (2.32)$$

$$u_{i,\alpha} = \frac{\begin{vmatrix} \int W_i(\xi)d\xi & \int u(\xi)W_i(\xi)d\xi \\ \int W_{i,\beta}(\xi)d\xi & \int (\xi^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha)W_{i,\beta}(\xi)d\xi \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \int W_i(\xi)d\xi & \int (\xi^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha)W_i(\xi)d\xi \\ \int W_{i,\beta}(\xi)d\xi & \int (\xi^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha)W_{i,\beta}(\xi)d\xi \end{vmatrix}} \quad (2.33)$$

As aproximações por partículas correspondentes são dadas por:

$$u_i = \frac{\begin{vmatrix} \sum_j^N u(x_j)W_i(x_j)\omega_j & \sum_j^N (x_j^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha)W_i(x_j)\omega_j \\ \sum_j^N u(x_j)W_{i,\beta}(x_j)\omega_j & \sum_j^N (x_j^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha)W_{i,\beta}(x_j)\omega_j \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \sum_j^N W_i(x_j)\omega_j & \sum_j^N (x_j^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha)W_i(x_j)\omega_j \\ \sum_j^N W_{i,\beta}(x_j)\omega_j & \sum_j^N (x_j^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha)W_{i,\beta}(x_j)\omega_j \end{vmatrix}} \quad (2.34)$$

$$u_{i,\alpha} = \frac{\begin{vmatrix} \sum_j^N W_i(x_j)\omega_j & \sum_j^N u(x_j)W_i(x_j)\omega_j \\ \sum_j^N W_{i,\beta}(x_j)\omega_j & \sum_j^N (x_j^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha)W_{i,\beta}(x_j)\omega_j \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \sum_j^N W_i(x_j)\omega_j & \sum_j^N (x_j^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha)W_i(x_j)\omega_j \\ \sum_j^N W_{i,\beta}(x_j)\omega_j & \sum_j^N (x_j^\alpha - \mathbf{x}_i^\alpha)W_{i,\beta}(x_j)\omega_j \end{vmatrix}} \quad (2.35)$$

Nas equações (2.32) a (2.35), $u_i = u(\mathbf{x}_i)$, $W_i(\xi) = W(\xi - \mathbf{x}_i, h_i)$ (função

núcleo centralizada em \mathbf{x}_i) e $W_{ij} = W(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i, h_i)$.

Nas equações (2.30) e (2.31) apenas as derivadas de ordem maior ou igual a dois são omitidas, enquanto no CSPM as derivadas de qualquer ordem eram omitidas. Este é o motivo pelo qual estas aproximações tem consistência C^2 (Liu & Liu 2006).

Capítulo 3

SPH para Problemas de Eletromagnetismo

O SPH pode ser aplicado na resolução de problemas do eletromagnetismo. Neste capítulo, as equações corrigidas mostradas na seção 2.3.3 são aplicadas às equações de Maxwell para solução de problemas dependentes do tempo, conforme sugerido por (Ala, Francomano, Tortorici, Toscano & Viola 2006b). Estas equações são modificadas para que seja aplicado o método de camadas perfeitamente casadas (PML - perfectly matching layers), tornando possível a imposição de condições de contorno absorventes. Em seguida, uma breve discussão sobre a imposição de condições de contorno de Dirichlet também é feita, onde apresenta-se um sistema de equações que deve ser resolvido para imposição destas condições.

3.1 SPH aplicado a Problemas de Propagação

Por ser um método pensado inicialmente para resolução de problemas de hidrodinâmica, espera-se que o SPH também tenha bons resultados na resolução de problemas dinâmicos no eletromagnetismo. Nesta seção a aproximação do SPH será usada para obter uma forma de aproximar as derivadas espaciais nas equações de Maxwell dependentes do tempo.

Será mostrada aqui a aplicação do SPH com as alterações do CSPM, mostradas na seção 2.3.3, para resolução das equações de Maxwell dependentes do tempo para ondas TMz. Estas equações tem derivadas espaciais e temporais. O SPH será usado para aproximar as derivadas espaciais enquanto um esquema *leap-frog* será usado para solução das derivadas temporais.

3.1.1 Equações de Maxwell Dependentes do Tempo

Considere as equações de Maxwell dependentes do tempo, em um meio isotrópico, não dispersivo, e sem correntes, definidas por:

$$\frac{\partial \bar{E}}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_r} \nabla \times H \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \bar{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0 \mu_r} \nabla \times E \quad (3.2)$$

onde \bar{E} e \bar{H} são os campos vetoriais elétrico e magnético, ϵ_0 e μ_0 são a permissividade e a permeabilidade do vácuo, e ϵ_r e μ_r são a permissividade e a permeabilidade relativas do meio de propagação respectivamente.

Por simplicidade, neste trabalho serão consideradas as equações de Maxwell dependentes do tempo em três dimensões no modo TMz, ou seja, o

campo magnético tem componente $z = 0$ e o campo elétrico tem componentes $x = 0$ e $y = 0$. Assim, as equações se tornam:

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_r} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0 \mu_r} \frac{\partial E_z}{\partial y} \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu_0 \mu_r} \frac{\partial E_z}{\partial x} \quad (3.5)$$

3.1.2 Aplicando o SPH nas Equações de Maxwell

Inicialmente, considere um domínio de interesse Ω qualquer. Para aplicar o CSPM é preciso espalhar sobre este domínio um conjunto de partículas onde serão feitas as aproximações do método. As derivadas das componentes dos campos elétrico e magnético nas equações (3.3) a (3.5) serão substituídas então por suas aproximações no CSPM feitas a partir das partículas distribuídas. Estas aproximações são:

$$\left(\frac{\partial H_y(\mathbf{x}_i)}{\partial x} \right)^h = \frac{\sum_{j=1}^N (H_y(\mathbf{x}_j) - H_y(\mathbf{x}_i)) W_{i,x}(\mathbf{x}_j) \omega_j}{\sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) W_{i,x}(\mathbf{x}_j) \omega_j} \quad (3.6)$$

$$\left(\frac{\partial H_x(\mathbf{x}_i)}{\partial y} \right)^h = \frac{\sum_{j=1}^N (H_x(\mathbf{x}_j) - H_x(\mathbf{x}_i)) W_{i,y}(\mathbf{x}_j) \omega_j}{\sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) W_{i,y}(\mathbf{x}_j) \omega_j} \quad (3.7)$$

$$\left(\frac{\partial E_z(\mathbf{x}_i)}{\partial x} \right)^h = \frac{\sum_{j=1}^N (E_z(\mathbf{x}_j) - E_z(\mathbf{x}_i)) W_{i,x}(\mathbf{x}_j) \omega_j}{\sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) W_{i,x}(\mathbf{x}_j) \omega_j} \quad (3.8)$$

$$\left(\frac{\partial E_z(\mathbf{x}_i)}{\partial y} \right)^h = \frac{\sum_{j=1}^N (E_z(\mathbf{x}_j) - E_z(\mathbf{x}_i)) W_{i,y}(\mathbf{x}_j) \omega_j}{\sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) W_{i,y}(\mathbf{x}_j) \omega_j} \quad (3.9)$$

onde \mathbf{x}_i é a posição da partícula i e $W_{i,x}$ é a função núcleo centralizada na posição da partícula i derivada em relação a x (respectivamente para j e y) e N é o conjunto de índices das partículas vizinhas de i . Agora, reescrevendo as equações de Maxwell utilizando as novas aproximações, obtém-se uma maneira de aproximar estes campos nas posições das partículas:

$$\frac{\partial E_z(\mathbf{x}_i)}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_r} \left(\frac{\sum_{j=1}^N (H_y(\mathbf{x}_j) - H_y(\mathbf{x}_i)) W_{i,x}(\mathbf{x}_j) \omega_j}{\sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) W_{i,x}(\mathbf{x}_j) \omega_j} - \frac{\sum_{j=1}^N (H_x(\mathbf{x}_j) - H_x(\mathbf{x}_i)) W_{i,y}(\mathbf{x}_j) \omega_j}{\sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) W_{i,y}(\mathbf{x}_j) \omega_j} \right) \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0 \mu_r} \frac{\sum_{j=1}^N (E_z(\mathbf{x}_j) - E_z(\mathbf{x}_i)) W_{i,y}(\mathbf{x}_j) \omega_j}{\sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) W_{i,y}(\mathbf{x}_j) \omega_j} \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu_0 \mu_r} \frac{\sum_{j=1}^N (E_z(\mathbf{x}_j) - E_z(\mathbf{x}_i)) W_{i,x}(\mathbf{x}_j) \omega_j}{\sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) W_{i,x}(\mathbf{x}_j) \omega_j} \quad (3.12)$$

Pelas equações (3.10) a (3.12) percebe-se que existem duas funções sendo aproximadas: o campo elétrico, com componente única E_z e o campo magnético com componentes H_x e H_y . Nas equações também fica claro a interdependência entre estes campos, uma vez que a variação temporal do campo elétrico está relacionada à derivada espacial do campo magnético, e vice-versa.

3.1.3 Resolvendo as Derivadas Temporais

Para obter o esquema final utiliza-se uma aproximação por diferenças centralizadas para as derivadas temporais. Desta maneira, quando computam-se as equações intervalares é necessário introduzir relações na posição espacial mútua entre as componentes do campo elétrico e magnético: as componentes de H devem estar localizadas entre as componentes do campo E no espaço e

no tempo. Para satisfazer esta condição, as partículas serão então divididas em dois grupos distintos: o grupo das partículas elétricas e o das partículas magnéticas. As partículas do primeiro grupo devem guardar apenas os valores nodais referentes às componentes do campo magnético e as do segundo, do campo elétrico. O esquema final fica assim:

$$E_z^{n+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}_i) = E_z^{n-\frac{1}{2}}(\mathbf{x}_i) + \frac{\Delta t}{\epsilon_0 \epsilon_r} \left(\frac{\sum_{j=1}^N (H_y^n(\mathbf{x}_j) - H_y^n(\mathbf{x}_i)) W_{i,x}(\mathbf{x}_j) \omega_j}{\sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) W_{i,x}(\mathbf{x}_j) \omega_j} - \frac{\sum_{j=1}^N (H_x^n(\mathbf{x}_j) - H_x^n(\mathbf{x}_i)) W_{i,y}(\mathbf{x}_j) \omega_j}{\sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) W_{i,y}(\mathbf{x}_j) \omega_j} \right) \quad (3.13)$$

$$H_x^{n+1}(\mathbf{x}_i) = H_x^n(\mathbf{x}_i) - \frac{\Delta t}{\mu_0 \mu_r} \frac{\sum_{j=1}^N (E_z^{n+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}_j) - E_z^{n+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}_i)) W_{i,y}(\mathbf{x}_j) \omega_j}{\sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) W_{i,y}(\mathbf{x}_j) \omega_j} \quad (3.14)$$

$$H_y^{n+1}(\mathbf{x}_i) = H_y^n(\mathbf{x}_i) + \frac{\Delta t}{\mu_0 \mu_r} \frac{\sum_{j=1}^N (E_z^{n+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}_j) - E_z^{n+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}_i)) W_{i,x}(\mathbf{x}_j) \omega_j}{\sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) W_{i,x}(\mathbf{x}_j) \omega_j} \quad (3.15)$$

Repare que nas equações (3.13) a (3.15) o grupo de partículas vizinhas a ser considerado nos somatórios não é mais o NNP, mas sim um NNP de partículas que não sejam do mesmo grupo da partícula i onde a aproximação está sendo calculada. Em outras palavras, apenas partículas elétricas podem ser consideradas vizinhas de uma partícula magnética e vice-versa. A figura 3.1 ilustra este esquema.

O passo de tempo na integração temporal das equações (3.13) a (3.15) está sujeito às condições de estabilidade de Courant-Friedrichs-Levy (CFL) (Taflove & Hagness 2000). Esta condição exige que o passo de tempo seja proporcional à menor resolução espacial, que na formulação SPH é representado

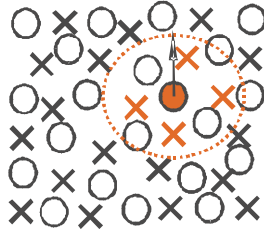


Figura 3.1: Distribuição não uniforme de partículas no SPH

pelo menor raio de suavização (Liu & Liu 2003). Assim, a condição de estabilidade CFL no SPH pode ser escrita como:

$$S = \frac{\sqrt{2}c\Delta t}{h_{min}} \leq 1 \quad (3.16)$$

onde c é a velocidade da luz e h_{min} é o menor raio de suavização e Δt é o passo de tempo.

O procedimento mostrado aqui para aplicação do CSPM pode ser facilmente estendido a outras equações do eletromagnetismo. De fato, vamos fazer pequenas alterações nas equações para acoplar o método PML nas próximas seções.

3.1.4 Condições de Contorno no SPH

A resolução das equações diferenciais mostradas na seção 3.1 fornecem um esquema para calcular a variação do campo no interior de um domínio Ω . Porém é necessário ainda investigar a correta forma de se impor as condições de contorno. Uma dificuldade encontrada neste aspecto é que as funções de forma do SPH não satisfazem a propriedade do delta de Kronecker e, portanto, a imposição de condições de contorno de Dirichlet exige a utilização de métodos específicos.

Se nenhuma condição de contorno em especial for determinada sobre as

partículas e não houver nenhuma partícula em uma determinada direção a partir do contorno, as ondas incidentes serão refletidas como se um condutor perfeito envolvesse este (Ala et al. 2006a).

Nesta seção são apresentados os tratamentos para imposição de condições de contorno de Dirichlet e condições de contorno absorventes, estas últimas utilizando o método PML.

Condições de Contorno de Dirichlet

A imposição de condições de contorno de Dirichlet passa pela fixação do valor do campo no contorno do problema. Infelizmente o SPH não satisfaz a propriedade do delta de Kronecker, ou seja, o valor do campo não pode ser definido sobre uma partícula a partir apenas do parâmetro nodal da mesma. Assim, impor um valor de campo sobre um conjunto de partículas envolve a resolução de um sistema linear. Na seção 3.1.5 é mostrado o sistema linear que deve-se resolver para impor os campos sobre as partículas.

Condições de Contorno Absorventes

A imposição de condições de contorno absorventes pode ser feita através do bem conhecido método das camadas perfeitamente casadas (PML-perfectly matching layers). Este método foi introduzido em (Berenger 1994) como um método para simular problemas de espaço livre. Ele é baseado na definição de um meio onde ondas incidentes são gradativamente absorvidas pelo meio, evitando assim reflexões espúrias.

O método PML será aplicado aqui para tratar as equações (3.3) a (3.5). Quando trata-se de ondas no modo TM_z, como é o caso, a componente E_z do campo elétrico é quebrada em duas novas componentes E_{zx} e E_{zy} no meio PML. Neste meio, as equações (3.3) a (3.5) se tornam:

$$\epsilon_0 \frac{\partial E_{zx}}{\partial t} + \sigma_x E_{zx} = \frac{\partial H_y}{\partial x} \quad (3.17)$$

$$\epsilon_0 \frac{\partial E_{zy}}{\partial t} + \sigma_y E_{zy} = -\frac{\partial H_x}{\partial y} \quad (3.18)$$

$$\mu_0 \frac{\partial H_x}{\partial t} + \sigma_x^* H_x = -\frac{\partial(E_{zx} + E_{zy})}{\partial y} \quad (3.19)$$

$$\mu_0 \frac{\partial H_y}{\partial t} + \sigma_y^* H_y = \frac{\partial(E_{zx} + E_{zy})}{\partial x} \quad (3.20)$$

onde os vários σ e σ^* são condutividades elétrica e magnética respectivamente.

Neste sistema de equações, se $\sigma_x = \sigma_y$ então as duas primeira equações podem ser unificadas em uma única e o meio PML se reduz a um meio usual. Além disso, se $\sigma_x = \sigma_y = \sigma_x^* = \sigma_y^* = 0$ este sistema se reduz às equações (3.3) a (3.5).

É importante ressaltar que se $\sigma_y = \sigma_y^* = 0$ o meio PML será capaz de absorver apenas onda plana propagando no eixo x mas não uma que se propaga no eixo y , e analogamente para $\sigma_x = \sigma_x^* = 0$. Estas propriedades dos meios PML $(\sigma_x, \sigma_x^*, 0, 0)$ e $(0, 0, \sigma_y, \sigma_y^*)$ tem uma relação próxima com outra:

$$\frac{\sigma}{\epsilon_0} = \frac{\sigma^*}{\mu_0}. \quad (3.21)$$

Se esta propriedade é satisfeita para os meios citados, então nas interfaces entre o vácuo e o meio, normais respectivamente a x e y , estes dois meios não ativam nenhuma reflexão de ondas eletromagnéticas (Berenger 1994). Estes meios são a base do PML.

O domínio computacional pode agora ser cercado por meios absorventes de acordo com a direção das ondas incidentes. A figura 3.2 (Berenger 1994) ilustra todos os possíveis meios PML e em que situações cada tipo de meio

deve ser usado.

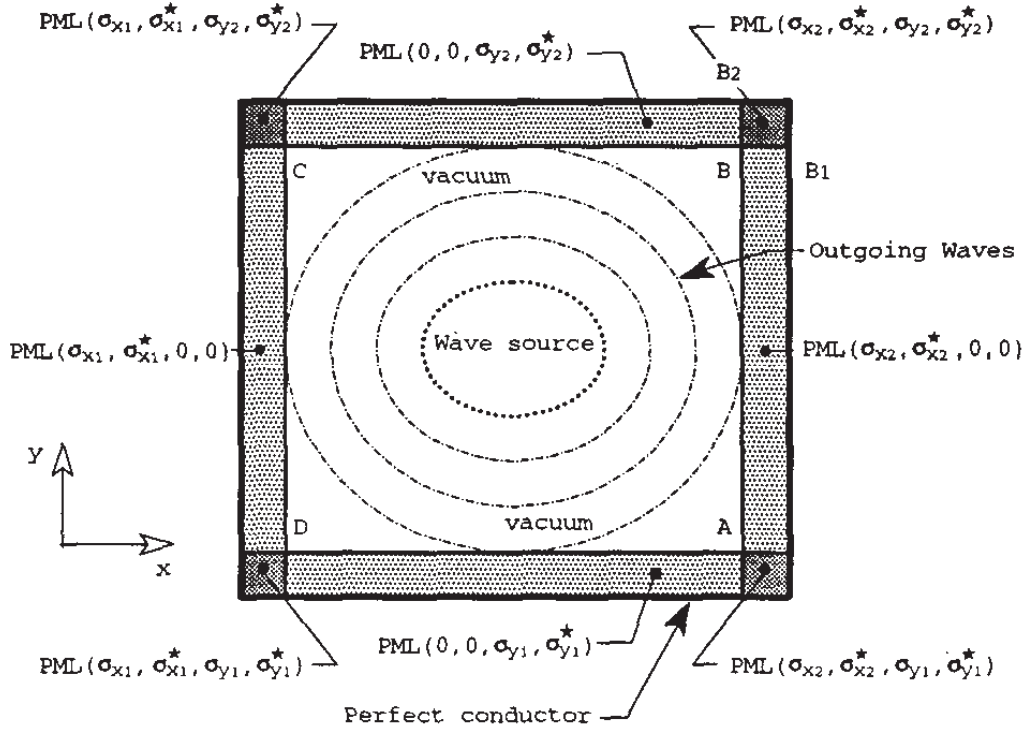


Figura 3.2: Meios PML para absorção de ondas incidentes para todas as possíveis direções de propagação. (Berenger 1994)

A uma distância ρ de qualquer interface entre o vácuo e o meio PML a magnitude da componente de campo é dada por:

$$\psi(\rho) = \psi(0)e^{-(\sigma \cos(\theta)/\epsilon_0 c)\rho} \quad (3.22)$$

onde θ é o ângulo de incidência em relação à interface, e σ pode ser σ_x ou σ_y . Após cruzar a camada PML, a onda é refletida pela condição de condutor perfeito no fim do domínio e então, depois de um segundo cruzamento, ela pode voltar ao domínio computacional. Assim, para uma borda de espessura δ , um fator de reflexão aparente pode ser definido por:

$$R(\theta) = e^{-2(\sigma \cos(\theta)/\epsilon_0 c)\delta} \quad (3.23)$$

A equação (3.23) nos mostra que a reflexão é uma função do produto $\sigma\delta$. Em implementações do PML para o FDTD, utilizam-se algumas poucas células na borda PML. No SPEM serão usadas também algumas partículas de profundidade nestas bordas. Repare que na borda PML pode-se usar uma distribuição uniforme de partículas sem que o mesmo aconteça no interior do domínio de interesse Ω . Para partículas mais distantes da fronteira entre o vácuo e o meio PML, utilizam-se valores gradativamente maiores de σ . Assim, a condutividade cresce, partindo de zero na interface entre a camada PML e o interior do domínio, e chegando até um valor máximo σ_m no limite da borda PML com a região exterior.

Escolheu-se aqui utilizar a função proposta em (Berenger 1994) para determinar os valores de σ . Eles são definidos pela seguinte equação:

$$\sigma(\rho) = \sigma_m \left(\frac{\rho}{\delta}\right)^n \quad (3.24)$$

onde ρ é a distância até a fronteira entre os meios, δ é a grossura do meio absorvente e n é um inteiro (usualmente usa-se 3 ou 4).

O valor de σ_m (condutividade máxima) deve ser escolhido de acordo com o valor máximo de reflexão desejado. Para a condutividade definida pela equação (3.24), o fator de reflexão é definido por:

$$R(\Theta) = e^{-(2/(n+1))(\sigma_m \delta/\epsilon_0 c)} \quad (3.25)$$

Considerando um ângulo de incidência nulo, e definindo como reflexão dese-

jada a precisão numérica ψ , obtém-se o valor de σ_m :

$$\sigma_m = -\frac{\ln(\psi)(n+1)\epsilon_0 c}{2\delta} \quad (3.26)$$

A partir das equações (3.17) a (3.20) pode-se seguir os mesmos passos mostrados na seção 3.1.2 para se obter um meio PML no SPEM. O esquema final obtido é:

$$E_{zx}^{n+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}_i) = E_{zx}^{n-\frac{1}{2}}(\mathbf{x}_i) + \frac{\Delta t}{\epsilon_0 \epsilon_r} \left(\frac{\sum_{j=1}^N H_y^n(\mathbf{x}_j) W_{i,x}(\mathbf{x}_j) \omega_j}{\sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) W_{i,x}(\mathbf{x}_j) \omega_j} - \frac{\sum_{j=1}^N H_y^n(\mathbf{x}_i) W_{i,x}(\mathbf{x}_j) \omega_j}{\sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) W_{i,x}(\mathbf{x}_j) \omega_j} - \sigma_x E_{zx}(\mathbf{x}_i) \right) \quad (3.27)$$

$$E_{zy}^{n+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}_i) = E_{zy}^{n-\frac{1}{2}}(\mathbf{x}_i) - \frac{\Delta t}{\epsilon_0 \epsilon_r} \left(\frac{\sum_{j=1}^N H_x^n(\mathbf{x}_j) W_{i,y}(\mathbf{x}_j) \omega_j}{\sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) W_{i,y}(\mathbf{x}_j) \omega_j} - \frac{\sum_{j=1}^N H_x^n(\mathbf{x}_i) W_{i,y}(\mathbf{x}_j) \omega_j}{\sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) W_{i,y}(\mathbf{x}_j) \omega_j} - \sigma_y E_{zy}(\mathbf{x}_i) \right) \quad (3.28)$$

$$H_x^{n+1}(\mathbf{x}_i) = H_x^n(\mathbf{x}_i) - \frac{\Delta t}{\mu_0 \mu_r} \left(\frac{\sum_{j=1}^N E_z^{n+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}_j) W_{i,y}(\mathbf{x}_j) \omega_j}{\sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) W_{i,y}(\mathbf{x}_j) \omega_j} - \frac{\sum_{j=1}^N E_z^{n+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}_i) W_{i,y}(\mathbf{x}_j) \omega_j}{\sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) W_{i,y}(\mathbf{x}_j) \omega_j} - \sigma_x^* H_x^n(\mathbf{x}_i) \right) \quad (3.29)$$

$$H_y^{n+1}(\mathbf{x}_i) = H_y^n(\mathbf{x}_i) + \frac{\Delta t}{\mu_0 \mu_r} \left(\frac{\sum_{j=1}^N E_z^{n+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}_j) W_{i,x}(\mathbf{x}_j) \omega_j}{\sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) W_{i,x}(\mathbf{x}_j) \omega_j} - \frac{\sum_{j=1}^N E_z^{n+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}_i) W_{i,x}(\mathbf{x}_j) \omega_j}{\sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) W_{i,x}(\mathbf{x}_j) \omega_j} - \sigma_y^* H_y^n(\mathbf{x}_i) \right) \quad (3.30)$$

onde $E_z^{n+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}) = E_{zx}^{n+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}) + E_{zy}^{n+\frac{1}{2}}(\mathbf{x})$.

3.1.5 A falta da Propriedade do Delta de Kronecker no SPH

No SPH os parâmetros nodais são diferentes dos valores aproximados das funções na posição dos nós, ou seja, vale a desigualdade $u(x_i) \neq u^h(x_i)$. Isso acontece porque, em geral, as funções de forma não possuem a propriedade do delta de Kronecker, ou seja, em geral existem nós i e j ($i \neq j$) tais que $W(x_j - x_i, h)\omega_j \neq 0$. A falta da propriedade do delta de Kronecker traz como consequência a dificuldade da imposição de valores para funções sobre as partículas.

Considere a aproximação por partículas usada no SPEM, definida pela equação (3.29). Repare que do lado esquerdo desta equação temos o valor da função H_x^{n+1} na posição da partícula i . Assim, quando utiliza-se esta equação, deseja-se impor sobre a partícula i o valor do campo, mas na memória do computador é guardado apenas o valor do parâmetro nodal. É necessário calcular de alguma forma o valor que se deve guardar para o parâmetro nodal da partícula i e também para os parâmetros nodais de suas vizinhas, de forma que o somatório mostrado na equação (2.14) resulte no campo que deseja-se impor sobre a partícula i . Generalizando o raciocínio, deseja-se impor sobre uma partícula i um valor de campo f_i . Logo, a igualdade mostrada na equação (2.14) precisa ser válida para este valor:

$$f_i = \sum_j^N W(x_j - x_i, h)u(x_j)\omega_j \quad (3.31)$$

O conjunto N de partículas vizinhas à partícula i inclui a própria partícula

i. Explicitando o termo envolvendo $u(x_i)$ na equação (3.31) obtém-se:

$$\begin{aligned}
 f_i &= \sum_j^N W(x_j - x_i, h)u(x_j)\omega_j \iff \\
 f_i &= u(x_i)W(x_i - x_i, h)\omega_i + \sum_{j \neq i}^N W(x_j - x_i, h)u(x_j)\omega_j \iff \\
 u(x_i) &= \frac{\sum_{j \neq i}^N -W(x_j - x_i, h)u(x_j)\omega_j}{W(x_i - x_i, h)\omega_i} + \frac{f_i}{W(x_i - x_i, h)\omega_i} \quad (3.32)
 \end{aligned}$$

A equação (3.32) permite calcular qual o valor do parâmetro nodal para a partícula i quando o valor f_i que desejamos impor para o campo na posição desta partícula é conhecido. É possível seguir o mesmo raciocínio utilizado acima para impor o campo desejado sobre cada partícula do domínio:

$$\begin{aligned}
 u(x_1) &= \frac{\sum_{j \neq 1}^N -W(x_j - x_1, h)u(x_j)\omega_j}{W(0, h)\omega_1} + \frac{f_1}{W(0, h)\omega_1} \\
 &\vdots \\
 u(x_n) &= \frac{\sum_{j \neq n}^N -W(x_j - x_n, h)u(x_j)\omega_j}{W(0, h)\omega_n} + \frac{f_n}{W(0, h)\omega_n} \quad (3.33)
 \end{aligned}$$

O sistema de equações mostrado em (3.33) pode ser escrito na seguinte

forma matricial:

$$\begin{aligned}
 & \begin{bmatrix} 0 & -W_{12}\omega_2 & -W_{13}\omega_3 & \cdots & -W_{1n}\omega_n \\ -W_{21}\omega_1 & 0 & -W_{23}\omega_3 & \cdots & -W_{2n}\omega_n \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ -W_{n1}\omega_1 & -W_{n2}\omega_2 & -W_{n3}\omega_3 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} + \\
 & + \begin{bmatrix} f_1(W_{11}\omega_1)^{-1} \\ f_2(W_{22}\omega_2)^{-1} \\ \vdots \\ f_n(W_{nn}\omega_n)^{-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} \quad (3.34)
 \end{aligned}$$

onde $u_i = u(x_i)$ e $W_{ij} = W(x_j - x_i, h)$.

Denominando a matriz principal em (3.34) como \bar{A} , o vetor de parâmetros nodais como \bar{u} e o vetor de constantes como \bar{b} , temos:

$$\begin{aligned}
 \bar{A}\bar{u} + \bar{b} &= \bar{u} \quad \iff \\
 \bar{A}\bar{u} - \bar{u} + \bar{b} &= \bar{0} \quad \iff \\
 (\bar{A} - \bar{I})\bar{u} + \bar{b} &= \bar{0} \quad (3.35)
 \end{aligned}$$

onde \bar{I} é a matriz identidade. Assim, para resolver o sistema linear é preciso calcular a inversa da matriz $\bar{A} - \bar{I}$. Observando esta matriz vê-se que seus elementos são constantes ao longo das iterações, uma vez que as partículas não se movem. Não existe garantia, porém, de que a matriz seja simétrica. Para que isto se verificasse, seria necessário que a igualdade $\omega_i = \omega_{n-i}$ valesse para qualquer i entre 1 e n . Finalmente, observa-se que a matriz $\bar{A} - \bar{I}$ é uma matriz esparsa, pois apenas quando i e j são partículas vizinhas temos $W_{ij} \neq 0$. Tipicamente, para problemas pouco complexos, é possível chegar

facilmente a uma quantidade de nós da ordem de 10^4 com uma quantidade de nós vizinhos variando entre 10 e 50. Portanto, temos linhas com $O(10^4)$ colunas com 10 a 50 colunas não nulas.

Sem resolver o sistema matricial em (3.35) não é possível impor condições de Dirichlet não homogêneas sobre partículas ou impor ondas incidentes sobre as partículas de forma coerente. Até mesmo para atualizar os valores dos parâmetros nodais das partículas utilizando as equações (3.27) a (3.30) é necessário resolvê-lo. A boa notícia é que a matriz $\bar{A} - \bar{I}$ só precisa ser invertida uma única vez para todas as iterações, já que seus elementos não variam ao longo das mesmas. Esta necessidade, porém, não foi abordada na maioria dos artigos envolvendo o SPH para solução de problemas de eletromagnetismo, como em (Ala et al. 2006a), (Ala, Francomano, Tortorici, Toscano & Viola 2007), dentre outros.

3.2 Detalhes Computacionais

O esquema mostrado na seção anterior serve como base para um algoritmo de cálculo do campo em uma região do espaço. Nesta seção serão apresentados detalhes computacionais da implementação do método, incluindo uma breve discussão sobre a estrutura de dados a serem utilizadas na implementação e como tornar o algoritmo paralelo, aproveitando assim os vários núcleos presentes em um único processador.

3.2.1 Algoritmo para o SPEM

No SPEM, a atualização das partículas magnéticas só pode ser feita quando a atualização em todas as partículas elétricas estiverem concluídas. De fato, pelas equações (3.27) a (3.30) a interdependência entre estas atual-

algoritmo 3.1 Atualiza os campos elétricos e magnéticos do SPEM

Entradas: Conjunto das partículas elétricas S^E , e o das magnéticas S^H , distribuídos com condições iniciais impostas e com condutividades σ e σ^* definidas.

Saídas: O campo E nas posições das partículas de S^E e o H nas posições das partículas de S^H após k iterações.

$t \leftarrow 0$

$\Delta t \leftarrow \mathbf{CFL}(S^E, S^H)$

para $it = 1 : k$ **faça**

$nE \leftarrow \text{length}(S^E)$

$nH \leftarrow \text{length}(S^H)$

para $i = 1 : nE$ **faça**

 Atualiza o campo E da partícula i de S^E usando (3.27) e (3.28)

fim para

para $i = 1 : nH$ **faça**

 Atualiza o campo H da partícula i de S^H usando (3.29) e (3.30)

fim para

$t \leftarrow t + \Delta t$

fim para

izações é explicitadas nos índices das iterações.

O algoritmo 3.1 mostra os passos do algoritmo do SPEM. Nele, a função **CFL** calcula o passo de tempo do algoritmo como sendo proporcional ao menor raio de suavização h dentre todas as partículas elétricas ou magnéticas.

Um dos principais gargalos computacionais do SPEM é a busca por partículas vizinhas. No SPH, como as partículas se movimentam em um domínio, esta busca é efetuada em cada iteração, enquanto no SPEM a busca por partículas vizinhas só precisa ser feita uma única vez, numa etapa de pré-processamento, uma vez que as partículas são apenas distribuídas no domínio e sua posição não varia nas iterações. De qualquer maneira é necessário utilizar um artifício eficiente para fazer a busca por partículas vizinhas.

Em (Roy 1995) a proposta é utilizar uma grade de células quadradas de raio αh . Cada célula tem oito células vizinhas, numeradas sequencialmente,

de forma que se uma partícula estiver em uma determinada célula, uma de suas partículas vizinhas deverá estar em uma das oito vizinhas ou na célula desta mesma partícula.

Outra opção interessante para se fazer a busca por vizinhos é a utilização de árvores de busca multi-dimensionais (kd-trees). Este tipo de estrutura de dados já possui implementações em diversas bibliotecas, como a CGAL (CGAL 2010).

3.2.2 Algoritmo SPEM paralelo

Uma das grandes vantagens dos métodos sem malha como o SPEM é o fato de que não é preciso impor regras na distribuição das partículas. A única restrição, no caso do SPEM, é que cada partícula tenha ao menos um número mínimo de vizinhos.

Como a atualização de partículas de um mesmo tipo não depende das demais partículas deste mesmo tipo, sua atualização pode ser feita de forma totalmente independente. A restrição imposta pelo SPEM, como visto no algoritmo 3.1, é que todas as atualizações em partículas elétricas tenham sido feitas antes do início da atualização das partículas magnéticas. Assim, uma boa estratégia de divisão de processamento no SPEM seria distribuir partículas de um mesmo tipo igualmente para os processadores (ou núcleos de processamento) de forma a atualizá-las em paralelo. O diagrama na figura 3.3 ilustra o fluxo de execução do SPEM paralelo.

A forma como as partículas são distribuídas entre os núcleos de processamento afeta o desempenho do algoritmo paralelo. Uma distribuição sequencial de partículas entre processadores não resulta em uma boa distribuição de carga entre os mesmos. A título de exemplo, considere um domínio quadrado com partículas distribuídas uniformemente. Se dividimos o processamento

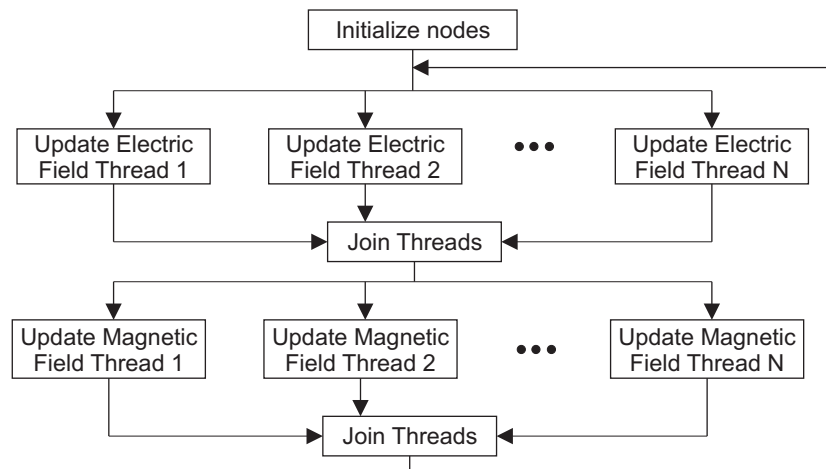


Figura 3.3: Fluxo de execução do SPEM paralelo. (Fonseca et al. 2008)

destas partículas entre dois processadores de forma sequencial, como ilustrado na figura 3.4, o balanceamento seria ideal, mas isso não aconteceria se houvessem três processadores. Isso se explica pelo fato de que no SPEM existem menos partículas vizinhas para aquelas partículas próximas às bordas, levando assim a um menor custo computacional no cálculo da aproximação por partículas.

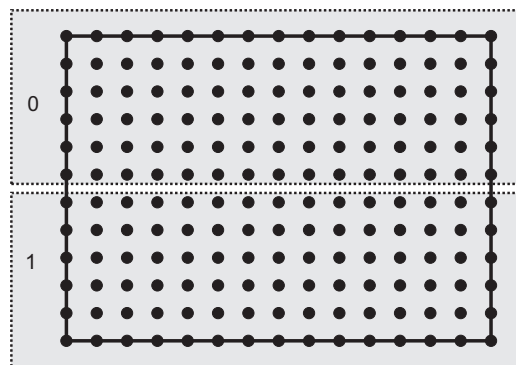


Figura 3.4: Exemplo de distribuição de partículas sequencial para 2 núcleos de processamento

Uma forma de evitar este problema é fazer uma distribuição alternada de partículas, como mostrado na figura 3.5. Uma distribuição aleatória, como

ilustrado na figura 3.6, também é uma alternativa interessante. No entanto, para equilibrar a carga entre os processadores da forma totalmente uniforme é preciso pré-calcular o número de vizinhos de cada partícula e então distribuir as partículas de mesmo “peso” igualmente entre os processadores, alocando as *threads* de execução para processamento de partículas de mesmo peso de forma aleatória entre os processadores, como ilustrado na figura 3.7.

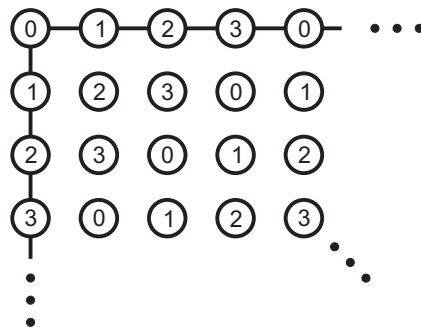


Figura 3.5: Exemplo de distribuição de partículas para 4 núcleos de processamento de forma alternada. Os índices indicam o número identificador do processador.

0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	a
15	5	13	11	0	12	4	8	14	10	9	2	6	1	7	3	b
3	1	1	3	0	0	0	0	2	2	1	2	2	1	3	3	c

a - ID da partícula b - Índice aleatório c - ID Thread ($c = \text{mod}(b,4)$)

Figura 3.6: Exemplo de distribuição de partículas para 4 núcleos de forma aleatória.

0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	a
4	16	16	4	8	8	16	16	16	16	4	16	16	8	8	4	b
0	3	10	15	4	5	13	14	1	2	6	7	8	9	11	12	c
4	4	4	4	8	8	8	8	16	16	16	16	16	16	16	16	d
1	2	3	0	2	0	1	3	3	4	1	6	2	5	0	7	e
1	2	3	0	2	0	1	3	3	0	1	2	2	1	0	3	f

a,c - ID Partícula b,d - Número de vizinhos e - Índice aleatório
 f - ID Thread ($f = \text{mod}(e,4)$)

Figura 3.7: Exemplo de distribuição de partículas para 4 núcleos, separando as partículas por números de vizinhos.

Capítulo 4

Testes e Resultados

4.1 Implementação

O SPEM foi implementado utilizando a linguagem C++. Cada partícula é um objeto da classe de partículas e possui parâmetros de raio de suavização h , posição da partícula, tipo da partícula e valores do campo na posição da partícula, que podem ser do campo elétrico ou magnético dependendo do tipo.

A forma como as partículas são distribuídas pode variar dependendo do problema sendo resolvido. Na maioria dos problemas optou-se pela distribuição uniforme das partículas, onde a consistência C^1 é garantida no interior e nas bordas do problema. Uma comparação entre os resultados obtidos para distribuições uniformes e não uniformes também é mostrada.

Os valores iniciais dos campos nas posições das partículas também deve ser definido de acordo com o problema que se pretende resolver. Nos problemas propostos neste trabalho, os campos inicialmente são nulos. O algoritmo 3.1 foi implementado para atualizar os campos nas partículas e a função núcleo utilizada foi a spline cúbica mostrada na equação (2.9). Como

apenas derivadas de primeira ordem são usadas na formulação do SPEM, o fato da função não ter derivadas suaves de ordem superior a 3 não impactará na solução obtida.

A implementação é paralela e a atualização dos campos é feita separadamente em cada processador. Uma das opções para se fazer uma implementação paralela é a API OpenMP (Open n.d.), amplamente utilizada por ser fácil de se utilizar e exigir poucas modificações no código sequencial. Uma alternativa é a biblioteca C++ BOOST Thread Library (BOO 2009), desenvolvida para encapsulamento orientado a objetos de threads de execução. Para aqueles acostumados ao paradigma de orientação a objetos, esta última opção será mais familiar e fácil de usar. Embora a OpenMP também seja fácil de se utilizar, ela exige suporte nativo do compilador a sua API, o que nem sempre está disponível. Nas implementações paralelas deste trabalho optou-se pela utilização da BOOST.

Neste capítulo serão mostrados os problemas usados para validação dos modelos computacionais do SPEM e os resultados obtidos serão discutidos.

4.2 Problema de Propagação 1D

Embora a formulação apresentada nos capítulos anteriores seja aplicada às equações de Maxwell para ondas TMz, é sempre uma boa idéia avaliar o desempenho de um método aplicado inicialmente a um problema 1D. Sendo assim, a primeira implementação considerada foi para solução de um problema unidimensional, onde o campo elétrico possui componente única E_x e o magnético componente única H_y , com direção de propagação ao longo do eixo z . Aplicando estas considerações às equações de Maxwell, obtém-se:

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = -\frac{1}{\epsilon_0} \frac{\partial H_y}{\partial z} \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial E_x}{\partial z} \quad (4.2)$$

Aplicando-se passos similares aos mostrados no capítulo 3.1 para ondas TMz, obtém-se um esquema para atualização dos campos parecido com aquele mostrado nas equações (3.13) a (3.15).

O domínio Ω considerado é o intervalo $[0, \pi]$. Nas bordas é imposta uma condição de Dirichlet nula, ou seja, $E_x = 0$. Como foi visto na seção 3.1.4, para impor esta condição no SPEM basta não colocar nenhuma partícula além do domínio Ω . No centro do domínio, é imposta uma fonte de campo E senoidal. O problema posto resume-se à propagação da onda em uma dimensão no vácuo. Assim, a solução analítica para o campo E_x é dada por:

$$E_x = E_{x0} \cos(\omega(t - z\sqrt{\mu_0\epsilon_0})) \quad (4.3)$$

onde ω é a frequência da fonte, t é o tempo de propagação (ou de simulação), z é a posição e E_{x0} é a amplitude da onda. Para avaliação, é usada uma frequência $f = 1.8 \times 10^9 Hz$.

Para esta simulação em 1D, as partículas são dispostas uniformemente ao longo do eixo z dentro do domínio Ω , formando uma linha, e o campo nas partículas é inicialmente nulo. As partículas do tipo E e as do tipo H são intercaladas, de forma a garantir que cada partícula de cada um destes tipos possua partículas vizinhas do tipo “oposto”. O pulso senoidal é definido como fonte na partícula (do tipo E) central para simular a fonte de campo elétrico. A figura abaixo ilustra a disposição das partículas.

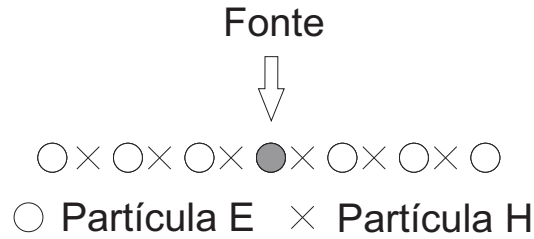


Figura 4.1: Definição do problema 1D com fonte na partícula central.

Inicialmente impõe-se campo nulo sobre todas as partículas. O campo E sobre a partícula central é definido em função do tempo de simulação t como $E(t) = \sin(2\pi ft)$.

Para efetuar-se a simulação é preciso escolher o raio de suavização a ser usado. Esta escolha deve levar em conta o comprimento da onda a ser simulada. Conforme citado na seção 2.2, o erro de aproximação no SPH é da mesma ordem do erro de aproximação do FD. Escolheu-se utilizar nesta simulação um raio de suavização $h = 3 \times 10^{-3}m$, o que representa cerca de 40 partículas elétricas por comprimento de onda. A distância entre as partículas é definida em função do raio de suavização de forma a se garantir que cada partícula tenha 8 vizinhas, conforme sugerido em (Laguna 1995), sendo assim definida por $dr = 1.66 \times 10^{-3}m$. O passo de tempo escolhido foi $dt = 5h \times 10^{-10}$ e está de acordo com a condição CFL mostrada na equação (3.16). A comparação entre a solução analítica e a aproximação pelo SPEM para o problema 1D no instante $t = 4.75 \times 10^{-9}$ é mostrada na figura 4.2. Os valores do campo E em cada partícula são mostrados como quadrados preenchidos nesta figura.

No intervalo $z = (0.5, 1.5)$ o erro médio obtido para o valor do campo elétrico é menor que 10^{-2} . Olhando para o gráfico da figura 4.2 com uma aproximação suficientemente grande é possível perceber um pequeno deslocamento da onda simulada. A figura 4.3 mostra uma aproximação deste gráfico

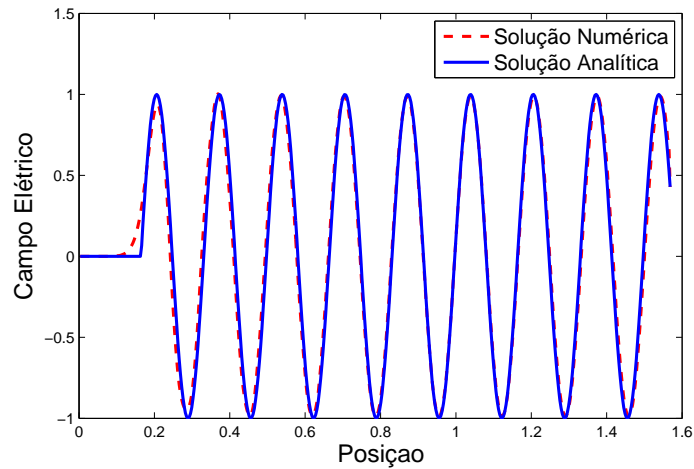


Figura 4.2: Comparação entre aproximação do SPH e solução analítica no instante $t=4.75\text{ns}$.

onde este pequeno deslocamento fica visível. A diferença observada é causada por um erro de dispersão na simulação, similar a aquele que observa-se nas simulações do FDTD quando um número insuficiente de partículas é usado na simulação, onde a velocidade numérica de fase das ondas é diferente da velocidade da luz. O erro relativo médio no comprimento da onda para esta simulação é inferior a 0.1%.

Pôde-se observar que as aproximações do SPH funcionam suficientemente bem para simulações em 1D com os parâmetros h e dr utilizados. No entanto, pequenas variações nos valores destes parâmetros são suficientes para alterar sensivelmente os resultados. Utilizando-se o parâmetro $dr = 1.9746 \times 10^{-3}$, por exemplo, ainda obtém-se 8 vizinhos para cada partícula, porém a variação no valor da relação h/dr é grande o suficiente para se obter o erro observado na figura 4.4.

Determinar os parâmetros ideais para a simulação, neste caso, foi um trabalho de teste e erro, assim como em (Ala et al. 2007). O valor ideal para a relação h/dr obtido aqui para um problema em 1D foi aproximadamente

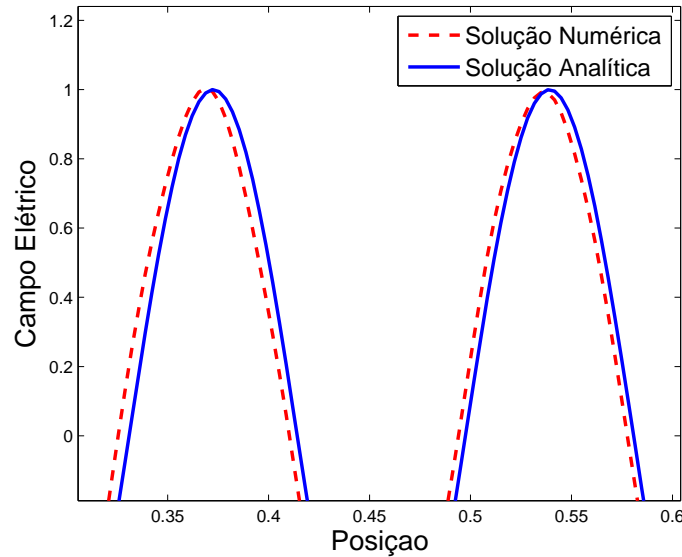


Figura 4.3: Comparação entre aproximação do SPH e solução analítica vista com ampliação.

1.82. Este valor não está de acordo com a relação sugerida naquele artigo para problemas em 2D, onde sugere-se $0.53 \leq h/dr \leq 0.63$.

Mesmo mantendo-se a relação ideal entre h e dr , é importante observar que dr deve sempre ser proporcional ao comprimento da onda sendo simulada. Sabendo que no FD utiliza-se tipicamente de 10 a 20 nós por comprimento de onda (Taflove & Hagness 2000), uma primeira tentativa seria utilizar uma distribuição com 20 partículas por comprimento de onda. A figura 4.5 mostra o resultado obtido com esta distribuição.

Pelo resultado obtido observa-se que esta densidade de partículas é insuficiente para garantir uma boa aproximação, mesmo quando a relação dr/h é a ideal. De fato, os vários testes executados para este problema mostram que são necessárias cerca de 40 partículas para se obter resultados tão bons quanto os mostrados na figura 4.2, o que representa uma densidade pelo menos 2 vezes maior que a exigida no FDTD.

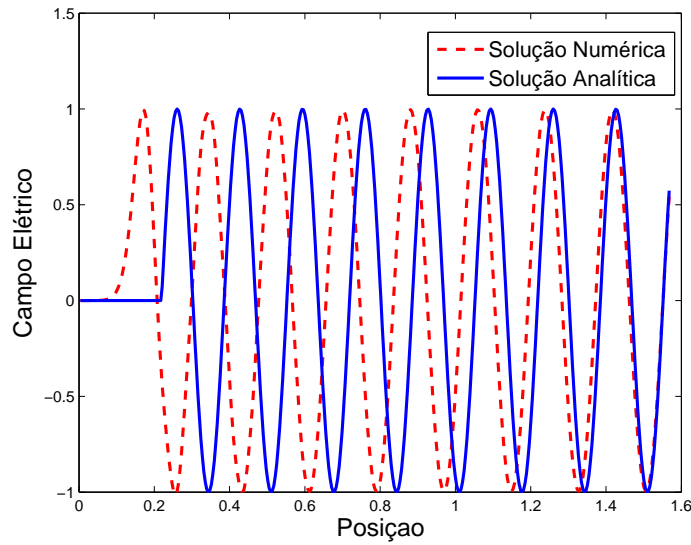


Figura 4.4: Aproximação do SPH com relação h/dr alterada comparada à solução analítica.

4.3 Pulso 2D

O próximo passo para validação do método é a solução de um problema em 2D. Inicialmente, será considerado um problema que não envolva a imposição de condições de contorno absorventes, a fim de evitar que possíveis erros gerados pela imposição destas condições de contorno reflitam em erros numéricos não relacionados ao SPEM.

Considere um domínio cilíndrico com as seguintes condições iniciais:

$$\begin{aligned}
 E_{z0}(x, y) &= I - \frac{r^2}{r_0^2} \\
 \left. \frac{\partial E_{zt}(x, y)}{\partial t} \right|_{t=0} &= 0 \\
 E_{zt}(x_r, y_r) &= 0
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

onde $r_0 = 0.1m$ é o raio da região de interesse e r é a distância do ponto (x, y) até o ponto central $(x_0, y_0) = (0.1, 0.1)$, (x_r, y_r) representa as coordenadas de qualquer ponto a uma distância r_0 do ponto central e I é uma constante.

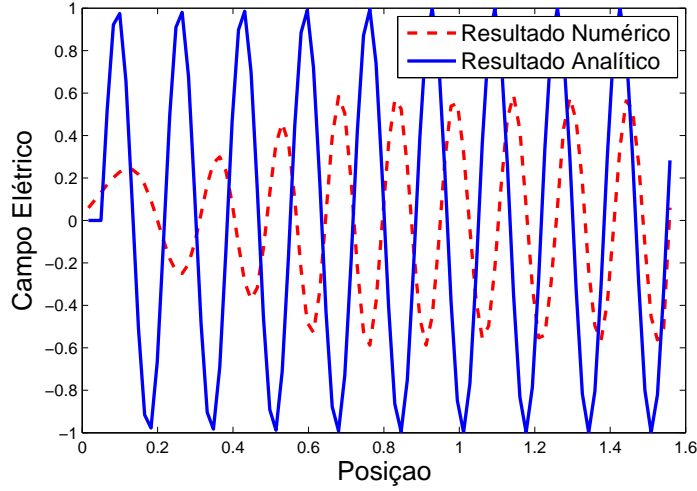


Figura 4.5: Aproximação do SPH com 20 partículas por comprimento de onda e $h/dr \approx 1.82$

O problema definido pelas equações (4.4) tem solução analítica definida por:

$$E_{z,t}(r) = 8 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0(\beta_n r/r_0)}{\beta_n^3 J_1(\beta_n)} \cos\left(\frac{\beta_n t}{r_0 \sqrt{\epsilon_r \epsilon_0 \mu_0}}\right) \quad (4.5)$$

onde J_0 e J_1 são as funções de Bessel do primeiro tipo e de primeira e segunda ordem, respectivamente, β_n são os zeros positivos de $J_0(\beta)$, enquanto ϵ_0 , ϵ_r e μ_0 são os parâmetros constitutivos do meio ($\epsilon_r = 10$).

A partir dos testes realizados para o problemas em 1D, viu-se que uma boa relação entre os parâmetros h e dr é $h/dr \approx 1.82$. Para simulações em 2D, no entanto, esta relação deve ser alterada. Agora é testada a função núcleo spline cúbica para a qual, conforme verificado em (Ala et al. 2007), o fator de escala $\alpha = 4$ é uma boa escolha e a relação h/dr deve estar no intervalo $[0.0, 0.8]$. Utilizou-se $h = 0.04$ (1/8 do comprimento de onda) e $dr = h/4 = 0.01$, o que vai de acordo com o sugerido naquele artigo.

O resultado mostrado na figura 4.6 indica que o comportamento obtido

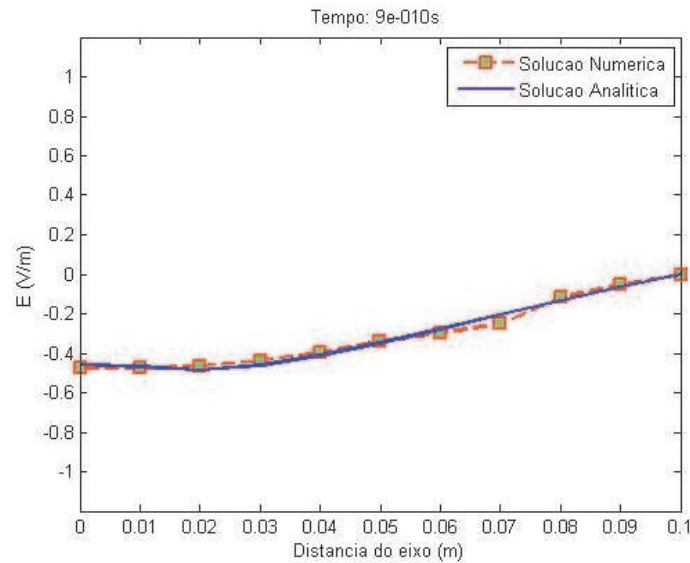


Figura 4.6: Comparação entre aproximação do SPH e solução analítica.

para a onda é o mesmo da solução analítica. A figura 4.7 mostra o erro percentual ao longo de uma linha radial partindo do centro do domínio. O erro percentual médio obtido é da ordem de 5%. Uma das principais razões para este índice de erro é que, com os valores escolhidos para h e para distância entre as partículas para este exemplo, não se impôs a consistência da primeira ordem, o que leva às pequenas perturbações observadas na solução. Além disso, excepcionalmente nesta simulação, a atualização dos campos é feita utilizando a formulação original do SPH, onde não impõe-se consistência nas bordas.

4.4 Guia de Onda em 2D

Outro problema considerado em 2D foi o problema que envolve um guia de onda formado por placas condutivas paralelas infinitas. Neste problema são consideradas duas placas paralelas ao eixo y , com uma placa sobre a linha

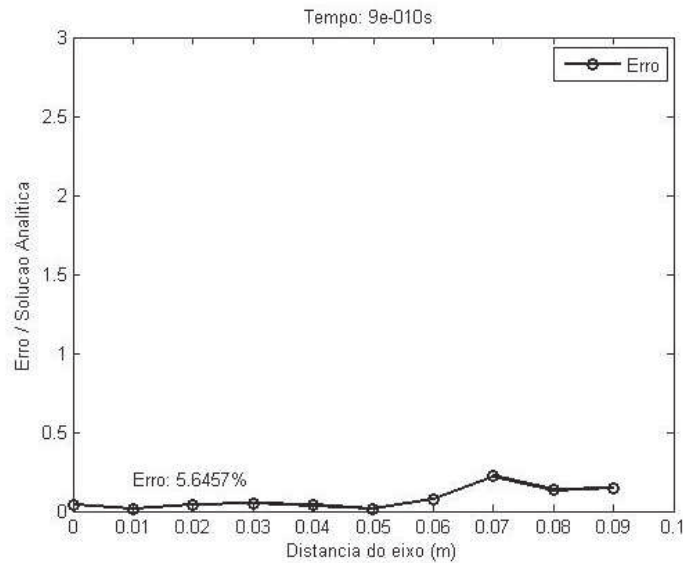


Figura 4.7: Erro percentual na aproximação ao longo da linha radial paralela ao eixo y .

$x = 0$ e a outra sobre a linha $x = l = 0.5m$. Ambas são limitadas à esquerda pela linha em $y = 0m$ e são ilimitadas à direita. Uma onda plana incidente sem inclinação é forçada à esquerda da região, na posição da linha $x = 0m$.

Para impor a onda plana incidente, utilizou-se o fato de que o algoritmo do SPEM atualiza primeiro o campo E e depois o campo H em cada iteração. Assim, ao longo da linha situada em $x = 0$ define-se o valor do campo E de acordo com a função $f(t)$ que define o valor deste campo e o tempo de simulação. Uma vez que o campo E é definido sobre todas estas partículas ao longo desta linha, o próprio algoritmo atualiza o campo H na meia-iteração subsequente de acordo com a variação do campo E . A fonte de onda é forçada, nesta simulação, com amplitude $E_0 = 0.2V/m$ e frequência $1.2fc$, onde fc é a frequência de corte do modo TM_{10} .

Para truncar o domínio, a condição de absorção é imposta na linha $x = l = 0.4m$ com uma camada PML de grossura $0.1m$, como mostrado na

figura 4.8. Adicionalmente, foram impostas condições naturais nos limites definidos pelas placas condutivas. De fato, no SPEM, este tipo de imposição nem precisa ser feita, uma vez que quando nenhuma condição é imposta sobre as partículas nas bordas, o comportamento obtido é equivalente a se impor um condutor perfeito além daquela borda, conforme discutido no capítulo 3.

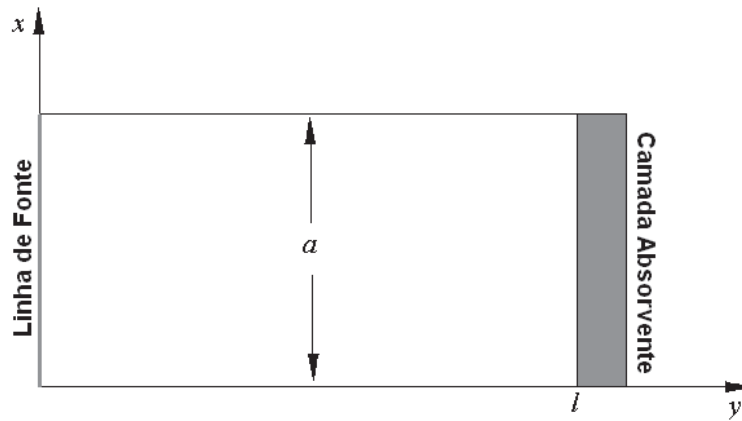


Figura 4.8: Guia de onda formado por placas paralelas infinitas.

Nesta simulação os parâmetros h e dr foram escolhidos de forma a se obter uma densidade de 80 partículas por comprimento de onda, enquanto o passo de tempo foi escolhido de forma a respeitar a condição CFL. A figura 4.9 mostra a comparação entre as soluções analítica e a solução numérica obtida após 4320 iterações, correspondente ao tempo de simulação $t = 4.1ns$, ao longo da linha $x = 0.244m$. O erro médio calculado, desconsiderando os resultados na borda absorvente, foi de 0.39%. A figura 4.10 mostra uma foto da simulação computacional neste mesmo instante.

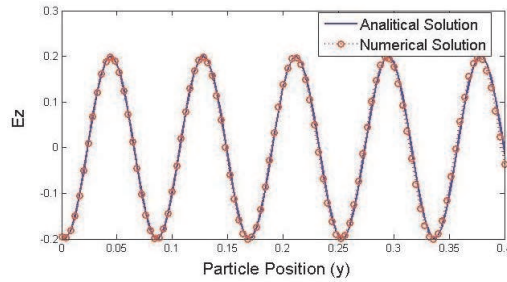


Figura 4.9: Comparação entre as soluções numérica e analítica para o problema do guia de ondas em $t=4.10ns$

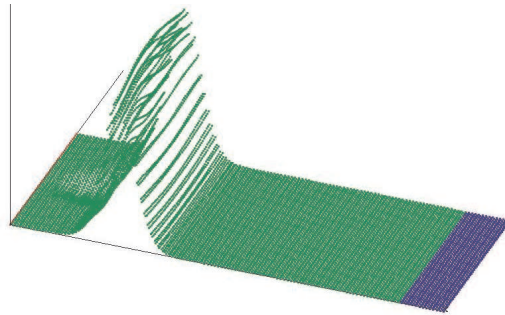


Figura 4.10: Foto da simulação do guia de ondas no instante $t = 4.1ns$.

4.5 Problemas onde não foram obtidos bons resultados

Um outro problema que tentou-se resolver com a utilização do método foi a propagação de uma onda plana no espaço livre. A onda considerada tem incidência com ângulo 0 em relação ao eixo $y+$ e tem frequência 3.6×10^9 . Para simular este problema, utilizou-se um domínio quadrado com lado $0.5m$ e com imposição de condições de contorno absorventes em todas as direções. A onda plana incidente foi inserida no domínio de simulação através de uma linha de partículas do tipo E dispostas paralelamente ao eixo x , dentro da região de simulação, junto à borda PML. Na figura 4.11 é mostrada a distribuição de partículas para este problema. Nesta figura, as partículas

em azul são da borda absorvente, as partículas vermelhas são as partículas onde impõe-se a onda incidente e as partículas verdes são as partículas onde serão feitas as aproximações normais do SPEM.

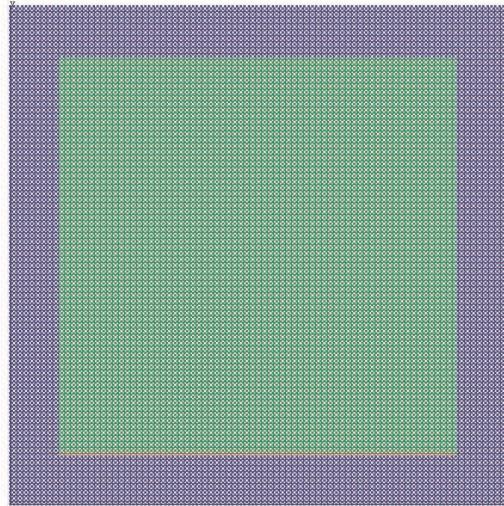


Figura 4.11: Distribuição de partículas no problema de propagação de onda plana no espaço livre.

Na solução deste problema foi observado um problema grave em todas as simulações. Olhando para a figura 4.12, que mostra uma foto de um corte da região de simulação na iteração 600, vê-se que um conjunto de partículas parece ter valores inconsistentes para o campo E , enquanto outras possuem valores consistentes com a onda incidente. De fato, o que ocorre é que observam-se linhas onde a amplitude da componente E tem valor igual ao da onda incidente, interpostas por outras onde esta amplitude está completamente errada. Os valores obtidos para o campo E em duas linhas paralelas ao eixo y ($y = 0.2$ e $y = 0.202$) são comparados na figura 4.13.

Muitos testes foram realizados na tentativa de se obter melhores resultados. A relação h/dr foi testada para diversos valores no intervalo $[0.362, 2.81]$, obtendo-se sempre resultados iguais ou piores aos relatados aqui. Variou-se também a quantidade de partículas por comprimento de onda, sem que se

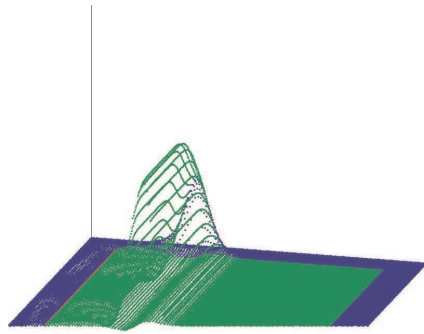


Figura 4.12: Foto da simulação de propagação da onda plana na iteração 600, $t = 4,578 \times 10^{-10} s$.

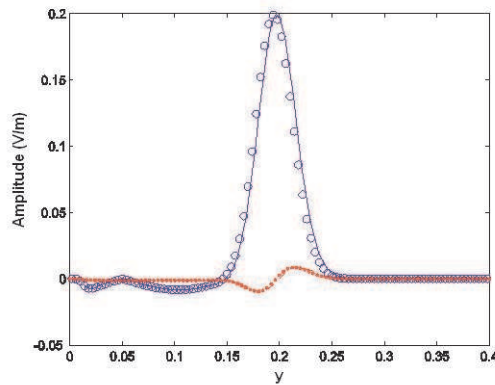


Figura 4.13: Comparação entre duas linhas paralelas para o problema da onda plana.

observasse qualquer melhora no problema relatado.

Uma das possíveis causas para este problema é a forma como a onda incidente foi imposta nesta simulação. Nos artigos relacionados ao SPEM não é discutida qual a maneira correta de se impor ondas incidentes planas como a que foi imposta neste problema. Outra possível causa é que a faixa onde a relação entre h e dr é ideal é tão estreita que não pôde ser identificada nestes testes. Ao contrário do sugerido em (Ala et al. 2007), o intervalo $[0.382, 0.386]$ pode não ser o ideal para a relação h/dr para este tipo de simulação.

4.6 Eficiência da Implementação Paralela

Para atestar o ganho de velocidade na implementação paralela foi utilizado o problema da guia de onda proposto na seção 4.4. Computadores pessoais comuns com processadores dual-core e quad-core foram usados para testar a implementação paralela. A tabela 4.1 mostra os *speedups* obtidos nesta implementação, quando comparada a uma implementação puramente seqüencial.

Esta implementação usa partículas uniformemente distribuídas com indexação seqüencial das mesmas, ou seja, cada partícula ao longo de uma linha está associada a um índice que é uma unidade maior (ou menor) do que o índice da partícula imediatamente ao seu lado. Graças a estas simplificações, a abordagem de distribuição alternada das partículas (AD), onde o processamento local delas é distribuído entre os processadores de forma alternada a partir dos índices das mesmas (veja seção 3.2.2), pôde ser usada e esta abordagem é ótima do ponto de vista de distribuição de carga entre os processadores. Os *speedups* obtidos são mostrados na tabela 4.1.

Tabela 4.1: Speedup para implementação paralela

Número de Núcleos	speedup
1	1
2	1.95
4	3.73

Em várias simulações feitas usando a distribuição de carga aleatória (RD), onde o processamento de cada partícula é atribuído aleatoriamente a um dos processadores e um número igual de partículas é atribuído a cada processador (veja também na seção 3.2.2), o tempo extra gasto por esta abordagem em relação à AD (que é ótima para este problema) foi sempre inferior

a 3%. Isso mostra que a distribuição aleatória de partículas entre as threads é uma boa solução quando o caso ótimo não for conhecido ou quando o pré-processamento de partículas não for vantajoso ou viável.

Os valores obtidos para o *speedup* com o SPEM mostram que este método possui um alto grau de paralelismo. Se o crescimento do *speedup* continuar linear, conforme indicam os resultados para 2 e 4 processadores, em uma máquina com 8 núcleos este seria de aproximadamente 7.5, e em um super-computador com 300 núcleos seria de aproximadamente 279.

Capítulo 5

Conclusões e Trabalhos Futuros

Um estudo detalhado sobre o método de Hidrodinâmica de Partículas suavizadas foi apresentado. O método foi aplicado às equações de Maxwell dependentes do tempo e um algoritmo para simulações de eletromagnetismo foi apresentado. O método PML é acoplado ao SPH e usado para impor condições de contorno absorventes. O algoritmo foi implementado e testado para alguns problemas simples em 1D em 2D.

Nos testes feitos com problemas em 1D, ficou claro que o bom funcionamento do SPEM depende sensivelmente da relação entre os parâmetros h e dr . Lá, o valor ideal obtido para esta relação foi $dr/h = 0.55$. Além disso, foi visto também que a quantidade de nós necessários depende do comprimento de onda da onda incidente, assim como acontece no método FDTD. Porém, para que se obtivesse resultados tão bons quanto os do FDTD, foi necessária uma densidade duas vezes maior de partículas, com 40 partículas de um mesmo tipo por comprimento de onda. Um ponto de dificuldade resultante destas relações é que com distribuições não uniformes de partículas, onde o espaçamento dr entre estas é variável, a estreita faixa onde a relação dr/h

é capaz de retornar bons resultados força uma partícula a ter vizinhos com espaçamento compatível ao seu parâmetro de suavização. A título de exemplo, se existir uma partícula com raio de suavização $h = 0.1$, suas partículas vizinhas devem ter um espaçamento que não varie muito de $dr = 55 \times 10^{-3}m$ pois, em caso contrário, o resultado obtido tende a se degradar. Esta consequência é totalmente indesejável, uma vez que uma das grandes vantagens atribuídas ao método seria a liberdade na distribuição das partículas no domínio computacional, sem a necessidade de qualquer pré-processamento.

Nos testes em 2D, novos problemas foram observados. A relação entre dr e h se torna ainda mais limitada e resultados inesperados são tipicamente encontrados. Mesmo com os valores sugeridos em (Ala et al. 2007), onde vários testes foram executados a fim de encontrar a relação ideal, erros de aproximação puderam ser encontrados em linhas intercaladas da região de simulação, como mostrado no teste da seção 4.5.

Duas hipóteses são levantadas para os problemas encontrados. A primeira é a de que a abordagem utilizada na imposição da onda incidente seja ruim para problemas com bordas PML absorventes próximas à linha de imposição do campo. Uma outra abordagem, conhecida como Campo total / Campo propagado (Taflove & Hagness 2000) (*Total field/Scattered field* ou TF/SF) pode ser usada para impor a onda incidente de forma mais completa, onde o campo H (e não somente o E) também é imposto sobre as partículas. Tal abordagem baseia-se na utilização de um grid FDTD em 1D auxiliar, que é disposto no sentido de propagação da onda, de onde os valores dos campos H e E incidentes podem ser lidos. A onda incidente é imposta de forma fácil neste grid auxiliar. Uma desvantagem da abordagem é que a precisão dos cálculos fica limitada pela precisão da simulação de propagação de onda em 1D no grid FDTD auxiliar. A segunda possibilidade levantada é a de que

faixa onde a relação entre h e dr é a ideal seja tão estreita que os testes realizados não foram suficientes para identificá-la. Neste caso, uma possível solução é obter uma relaxação da relação entre h e dr . Uma maneira de se relaxar esta relação é aumentar a ordem de consistência das simulações, omitindo-se apenas as derivadas de ordens maiores ou iguais a 3 nas equações (2.30) e (2.31), e então reformular as aproximações do SPH, de forma semelhante ao desenvolvimento feito na seção 2.3.3.

Aspectos computacionais foram abordados e quatro estratégias de paralelização e distribuição de carga entre processadores foram propostas. Os resultados obtidos mostram que o método tem grande capacidade de se aproveitar de múltiplos núcleos de processamento, obtendo um speedup de 1.96 para computadores com processadores de 2 núcleos.

Embora alguns artigos tenham sido publicados com a aplicação do SPH às equações de Maxwell, nenhum deles chama atenção ao fato de que o método não possui a propriedade do delta de Kronecker e, portanto, a atualização dos campos nas partículas passa pela resolução de um sistema linear, conforme mostrado na seção 3.1.5. Porém, tal sistema linear é esparso e sua matriz característica só precisa ser invertida uma única vez para todas as iterações durante uma simulação.

De forma geral, o método demonstrou não ter um bom potencial para aplicação em problemas do eletromagnetismo, e sua formulação ainda parece precisar de um amadurecimento, de forma a se obter maior liberdade na distribuição de partículas e na escolha de parâmetros de simulação. Além disso, a grande densidade de partículas necessária para se obter bons resultados, deixa as simulações do SPEM “pesadas” quando comparadas às de métodos tradicionais com malhas. Os bons *speedups* obtidos para processamento paralelo podem ser uma boa maneira de contornar o problema do ponto de vista

do tempo de processamento da simulação, mas não contornam o problema de consumo de memória, que tende a ser alto em função do grande número de partículas.

5.1 Trabalhos futuros

A redução dos erros de aproximação para o método pode ser obtida através da utilização de ordens de consistência superiores a C^1 . A utilização prática do método para problemas tridimensionais e com o uso de computadores com múltiplos processadores ou mesmo com o uso de processadores gráficos, que possuem usualmente centenas de núcleos de processamento, podem resultar numa aplicabilidade do método a problemas bem mais complexos do que os apresentados aqui.

Em (Pimenta, Mendes, Mesquita & Pereira 2007) o método SPH é usado para resolver um problema de hidrodinâmica onde cada partícula era afetada por um campo elétrico. O fato das partículas do SPH representarem uma entidade física pode ser usado para solução de outros problemas que envolvam eletromagnetismo, dinâmica de fluidos ou outros sistemas de engenharia em uma única simulação e representação do problema de interesse, como por exemplo o estudo do comportamento de partículas em suspensão em filtros eletrostáticos de partículas.

Outro trabalho de interesse é o de comparar o método SPH a demais métodos sem malha, ou mesmo compará-lo com métodos baseados em malhas. É possível também investigar quais as possibilidades de se integrar o método a outros métodos sem malha, de forma a se aproveitar as características positivas do SPH, como por exemplo a sua adaptabilidade a problemas com geometrias complexas e variantes no tempo.

A aproximação do SPH pode ser usada para fazer aproximações locais na resolução do sistema matricial do método de Galerkin sem elementos (EFG - element free Galerkin). O EFG, desenvolvido em (Belytschko et al. 1994), é baseado na construção de um sistema matricial, assim como no método de elementos finitos, porém com algumas variações: utiliza o métodos dos mínimos quadrados móveis (MLS - moving least square) para construção das funções de forma; usa a forma fraca e o método de Galerkin para desenvolver o sistema de equações discretizado que aproxima o problema original; utiliza uma malha de fundo para efetuar a integração necessária para o cálculo das matrizes do sistema.

A maneira como o MEF define as funções de forma é baseada na malha de elementos e feita de forma simples. No EFG, ao invés de elementos, utiliza-se um conjunto de nós espalhados pelo domínio e suas fronteiras. O MLS é utilizado para aproximar a solução do problema sobre um ponto de interesse. Para isso utilizam-se os *parâmetros nodais* sobre os nós definidos no *domínio de suporte*.

A proposta aqui é a de utilizar o SPH no lugar do MLS para fazer esta aproximação. Com a definição das funções de forma do SPH em mãos, pode-se utilizá-las nas equações do EFG em substituição às funções de forma do MLS. Para calcular as integrais envolvidas deve-se utilizar algum método de integração, como por exemplo uma quadratura de Gauss. Neste caso, será necessária a criação de uma malha de células para efetuar o cálculo das integrais.

5.2 Produção bibliográfica durante o período do mestrado

A seguir estão listadas as publicações relativas à esse trabalho e a outros trabalhos realizados durante o período de mestrado do aluno:

- Miguel L. Mendes ; PIMENTA, Luciano C. A. ; MESQUITA, Renato C. ; SILVA, E. J. ; T. C. Sant'ana. Smoothed Particle Electromagnetics with Boundary Absorbing Condition Using Perfectly Matched Layers. In: The IET 7th International Conference on Computation in Electromagnetics - CEM2008, 2008, Brighton, UK. Anais do CEM2008, 2008. p. 164-165.
- FONSECA, A. R. ; Miguel L. Mendes ; MESQUITA, Renato C. ; SILVA, E. J. . Parallel Programming for Mesh Free Methods. In: The 13th International IGTE Symposium on Numerical Field Calculation in Electrical Engineering, 2008, Graz. The 13th International IGTE Symposium on Numerical Field Calculation in Electrical Engineering - Proceedings, 2008. p. 262-267.
- Miguel L. Mendes ; FONSECA, A. R. ; MESQUITA, Renato C. ; SILVA, E. J. . Programação Paralela em Métodos sem Malha Aplicados a Problemas Eletromagnéticos. In: MOMAG 2008 - 13 Simpósio Brasileiro de Microondas e Optoeletrônica - 8 Congresso Brasileiro de Eletromagnetismo, 2008, Florianópolis. Anais do MOMAG 2008 - 13 Simpósio Brasileiro de Microondas e Optoeletrônica - 8 Congresso Brasileiro de Eletromagnetismo.. p. 632-635.
- FONSECA, Alexandre Ramos ; MENDES, Miguel Lima ; Mesquita, Renato C. ; SILVA, Elson José da . Mesh Free Parallel Programming for Electromagnetic Problems. Journal of Microwaves and Optoelectronics, 2009.

Referências Bibliográficas

- Ala, G., Francomano, E., Tortorici, A., Toscano, E. & Viola, F. (2006a).
Smoothed particle electromagnetics: A mesh-free solver for transients,
J. Comp. App. Math. **191**(4): 194–205.
- Ala, G., Francomano, E., Tortorici, A., Toscano, E. & Viola, F. (2006b).
A smoothed particle interpolation scheme for transient electromagnetic
simulation, *IEEE Trans. on Magn.* **42**(4): 647–650.
- Ala, G., Francomano, E., Tortorici, A., Toscano, E. & Viola, F. (2007).
A mesh-free particle method for transient full-wave simulation, *IEEE
Trans. on Magn.* **43**(4): 1333–1336.
- Atluri, S. N. & Zhu, T. (1998). A new meshless local Petrov
Galerkin (MLPG) approach in computational mechanics, *Comput.
Mech.* **22**: 117–127.
- Belytschko, T., Guo, Y., W.K.Liu & Xiao, S. (2000). A unified stability
analysis of meshless particle methods, *Int. J. Numer. Methods Eng.*
48: 1359–1400.
- Belytschko, T., Krongauz, Y., Dolbow, J. & Gerlach, C. (1998). On the
completeness of the meshfree particle methods, *Int. J. Numer. Methods
Eng.* **43**(5): 785–819.

- Belytschko, T., Lu, Y. Y. & Gu, L. (1994). Element-free galerkin methods, *Int. J. Numer. Methods Eng.* **37**: 229–256.
- Berenger, J. P. (1994). A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves, *J. Comp. Phys.* **114**: 185–200.
- Bischof, C., Mey, D. A., Terboven, C. & Sarholz, S. (2007). Parallel computers everywhere, *16th International Conference on the Computation of Electromagnetic Fields*, pp. 693–700.
- BOO (2009). Boost c++ libraries, <http://www.boost.org>. Acessado em fevereiro, 2009.
- CGAL (2010). The CGAL home page, <http://www.cgal.org>. Acesso em junho, 2010.
- Chen, J. K., Beraun, J. E. & Carney, T. C. (1999). A corrective smoothed particle method for boundary value problems in heat conduction, *Internat. J. Numer. Methods Engrg.* **46**: 231–252.
- Fonseca, A. R., Mendes, M. L., Mesquita, R. C. & Silva, E. J. (2008). Parallel programming for mesh free methods, *The 13th International IGTE Symposium on Numerical Field Calculation in Electrical Engineering - Proceedings 2008*, Graz, pp. 262–267.
- GA, D. (1999). Moving-least-square-particle-hydrodynamics. i: Consistency and stability, *Int. J. Number. Methods Eng.* **44**: 1115–1155.
- GA, D. (2000). Moving-least-square-particle-hydrodynamics. ii: Conservation and boundaries, *Int. J. Number. Methods Eng.* **48**: 1503–1524.

- Gingold, R. A. & Monaghan, J. J. (1977). Smoothed particle hydrodynamics: theory and applications to nonspherical stars, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **181**: 375–389.
- Gingold, R. A. & Monaghan, J. J. (1982). Kernel estimates as a basis for general particle methods in hydrodynamics, *J. Comput. Phys* **46**: 429–453.
- Laguna, P. (1995). Smoothed particle interpolation, *Astrophys. J.* **439**: 814–821.
- Liu, G. R. (2003). *Mesh Free Methods: Moving Beyond the Finite Element Method*, CRC Press LLC, New York.
- Liu, G. R. & Liu, M. B. (2003). *Smoothed Particle Hydrodynamics - a Mesh-free Particle Method*, World Scientific, Singapore.
- Liu, G. R. & Liu, M. B. (2006). Restoring particle consistency in smoothed particle hydrodynamics, *Appl. Num. Math* **56**: 19–36.
- Liu, M. & Liu, G. (2010). Smoothed particle hydrodynamics (sph): An overview and recent developments, *Arch. Comput. Methods Eng.* **17**: 25–76.
- Liu, W. K. & Zhang, Y. (1995). Reproducing kernel particle methods, *Int. J. Numer. Methods Fluids* **20**: 1081–1106.
- Lucy, L. (1977). A numerical approach to testing the fission hypothesis, *Astron. J.* **82**: 1013–1024.
- Ope (n.d.). The openmp api specification for parallel programming, <http://openmp.org/wp/>. Acessado em junho, 2009.

-
- Pimenta, L., Mendes, M., Mesquita, R. & Pereira, G. (2007). Fluids in electrostatic fields: An analogy for multirobot control, *IEEE Trans. on Magn.* **43**: 1765–1768.
- Roy, T. M. (1995). *Physically based fluid modeling using smoothed particle hydrodynamics*, Master's thesis, University of Illinois.
- Taflove, A. & Hagness, S. (2000). *Computational Electrodynamics: The Finite-difference Time-domain Method*, Artech House, Artech House, Boston.
- V.P.Nguyen, Rabczuk, T., Bordas, S. & Duflot, M. (2008). Meshless methods: a review and computer implementation aspects, *Math. Comput. Simul.* **79**: 763–813.