

 $\mathrm{INPE}\text{-}15237\text{-}\mathrm{TDI}/1324$

O MÉTODO PARTICLE-IN-DIFFUSE-CELL: UMA ABORDAGEM MESHFREE PARA SIMULAÇÃO DE PLASMAS

Gleber Nelson Marques

Tese de Doutorado do Curso de Pós-Graduação em Computação Aplicada, orientada pelos Drs. Stephan Stephany, Airam Jônatas Preto e Ângelo Pássaro, aprovada em 29 de fevereiro de 2008.

> INPE São José dos Campos 2008

PUBLICADO POR:

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE Gabinete do Diretor (GB) Serviço de Informação e Documentação (SID) Caixa Postal 515 - CEP 12.245-970 São José dos Campos - SP - Brasil Tel.:(012) 3945-6911/6923 Fax: (012) 3945-6919 E-mail: pubtc@sid.inpe.br

CONSELHO DE EDITORAÇÃO:

Presidente:

Dr. Gerald Jean Francis Banon - Coordenação Observação da Terra (OBT) Membros:

Dr^a Maria do Carmo de Andrade Nono - Conselho de Pós-Graduação

Dr. Haroldo Fraga de Campos Velho - Centro de Tecnologias Especiais (CTE)

Dr^a Inez Staciarini Batista - Coordenação Ciências Espaciais e Atmosféricas (CEA)

Marciana Leite Ribeiro - Serviço de Informação e Documentação (SID)

Dr. Ralf Gielow - Centro de Previsão de Tempo e Estudos Climáticos (CPT)

Dr. Wilson Yamaguti - Coordenação Engenharia e Tecnologia Espacial (ETE)

BIBLIOTECA DIGITAL:

Dr. Gerald Jean Francis Banon - Coordenação de Observação da Terra (OBT) Marciana Leite Ribeiro - Serviço de Informação e Documentação (SID) Jefferson Andrade Ancelmo - Serviço de Informação e Documentação (SID) Simone A. Del-Ducca Barbedo - Serviço de Informação e Documentação (SID) **REVISÃO E NORMALIZAÇÃO DOCUMENTÁRIA:**

Marciana Leite Ribeiro - Serviço de Informação e Documentação (SID) Marilúcia Santos Melo Cid - Serviço de Informação e Documentação (SID) Yolanda Ribeiro da Silva e Souza - Serviço de Informação e Documentação (SID) EDITORAÇÃO ELETRÔNICA:

Viveca Sant'Ana Lemos - Serviço de Informação e Documentação (SID)



 $\mathrm{INPE}\text{-}15237\text{-}\mathrm{TDI}/1324$

O MÉTODO PARTICLE-IN-DIFFUSE-CELL: UMA ABORDAGEM MESHFREE PARA SIMULAÇÃO DE PLASMAS

Gleber Nelson Marques

Tese de Doutorado do Curso de Pós-Graduação em Computação Aplicada, orientada pelos Drs. Stephan Stephany, Airam Jônatas Preto e Ângelo Pássaro, aprovada em 29 de fevereiro de 2008.

> INPE São José dos Campos 2008

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

M348m Marques, Gleber Nelson.

O Método Particle-in-Diffuse Cell: uma abordagem Meshfree para simulação de plasmas/ Gleber Nelson Marques. – São José dos Campos: INPE, 2008. 175p. ; (INPE-15237-TDI/1324)

1. Particle in Cell Technique. 2. Element Free Galerkin Method. 3. Plasma Dynamics. 4. Meshfree Method. 5. Magnetohydrodynamic Simulation. I. Título.

CDU 533.95

Copyright © 2008 do MCT/INPE. Nenhuma parte desta publicação pode ser reproduzida, armazenada em um sistema de recuperação, ou transmitida sob qualquer forma ou por qualquer meio, eletrônico, mecánico, fotográfico, microfílmico, reprográfico ou outros, sem a permissão escrita da Editora, com exceção de qualquer material fornecido especificamente no propósito de ser entrado e executado num sistema computacional, para o uso exclusivo do leitor da obra.

Copyright © 2008 by MCT/INPE. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted in any form or by any means, eletronic, mechanical, photocopying, microfilming, recording or otherwise, without written permission from the Publisher, with the exception of any material supplied specifically for the purpose of being entered and executed on a computer system, for exclusive use of the reader of the work. Aprovado (a) pela Banca Examinadora em cumprimento ao requisito exigido para obtenção do Título de Doutor(a) em Computação Aplicada

Dr. Angelo Pássaro

- Dr. Stephan Stephany
- Dr. Fernando Manuel Ramos
- Dr. Haroldo Fraga de Campos Velho
- Dr. José Roberto Cardoso
- Dr. Vladimir Henrique Baggio Scheid

Orientador(a) / INPE / SJCampos - SP

Membro da Barica / INPE / SJCampos -ŚР

Membro da Banca / INPE / SJCampos - SP

Convidado(a) / USP/POLI / São Paulo - SP

Convidado(a) / IEAv/CTA / São José dos Campos - SP

mrl Aluno (a): Gleber Nelson Marques

São José dos Campos, 29 de Fevereiro de 2008



Albert Einstein

À minha esposa, minha família e meus amigos,

AGRADECIMENTOS

Aos professores Dr. Stephan Stephany, Dr. Airam Jonatas Preto e Dr. Angelo Passaro pela orientação, pelas conversas, pelo estímulo, amizade e confiança. Ao Dr. José Marcio Machado pelas discussões sempre muito proveitosas, também pela amizade e pelos anos de colaboração que temos.

Aos colegas do Laboratório de Engenharia Virtual (LEV) do Instituto de Estudos Avançados do CTA (IEAv/CTA), em especial à Dr^{a.} Nancy Mieko Abe, pelo exemplo de seriedade e competência em desenvolvimento de software. Não poderia deixar de agradecer ao Sgto. Ms. Onofre Felix de Lima Neto do LEV-IEAv pela grande amizade e companheirismo demonstrados em todos os momentos. Aos colegas Ms. Ademar Muraro Jr. e Roberto Tanaka do LEV-IEAv pelo auxílio e amizade.

À minha esposa, Lígia Rodrigues de Oliveira Marques, pelo carinho, compreensão e estímulo que foram imprescindíveis para conclusão de mais este percurso.

A meus pais, Nelson Pedro Marques e Rute Pereira Marques, por terem acreditado desde o início, e também a meu irmão, Gledes Nelson Marques, pelos valores que me transmitiram.

Aos colegas de trabalho da Universidade do Estado de Mato Grosso e da Secretaria de Ciência e Tecnologia do Estado de Mato Grosso, e também a Todos os amigos e colegas pós-graduandos e alunos, pelo apoio.

Ao CNPq pelo auxílio financeiro.

A Deus,

RESUMO

Esta tese descreve uma formulação meshfree inédita para simulação de plasmas via modelo de partículas fundamentada no modelo Particle-In-Cell (PIC) e no método Element-Free Galerkin (MEFG). A partir da revisão do conceito de elemento difuso, precursor do MEFG, chegou-se à concepção da célula difusa, dando origem à formulação denominada Particle-In-Diffuse-Cell (PIDC). Modelos PIC eletrostáticos e o MEFG são revisados para subsidiar a apresentação da formulação do método PIDC, bem como a paralelização de programas PIC e modelos colisionais. Além da característica de fácil adaptatividade dos métodos meshfree, a robustez no cálculo do campo elétrico também é um requisisto bastante desejável em modelos PIC. A abordagem interpolante do MEFG combinada com a técnica de truncamento de domínios, empregada no modelo computacional do PIDC, foi rigorosamente avaliada quanto a acurácia no cálculo de campos elétricos contínuos e descontínuos. O grande potencial de aplicação do PIDC inclui simulações de plasmas envolvendo geometrias complexas bi ou tridimensionais e / ou a necessidade de sucessivos refinamentos de malha, constituindo-se assim, nestes cenários, uma nova e promissora alternativa numérica aos métodos PIC baseados em malha.

THE PARTICLE-IN-DIFFUSE-CELL METHOD: A MESHFREE APPROACH FOR PLASMAS SIMULATION

ABSTRACT

This thesis describes an original meshfree formulation for plasmas simulation based on the Particle-In-Cell (PIC) particle model and the Element-Free Galerkin method (EFGM). Recalling the diffuse element concept introduced before the EFGM proposition, we realize the diffuse cell concept, which allowed the development of the Particle-In-Diffuse-Cell (PIDC) formulation. Electrostatic PIC models and the EFGM were revised, as well as the parallelization of PIC codes and collisional models. Despite the ability of easy adaptivity of the meshfree methods, also its robustness for computing the electric field is a very desired feature for PIC models. An interpolating EFGM with the domain truncation technique was rigorously evaluated for the computation of continuous and discontinuous electric fields. PIDC potential applications include complex bi or tri-dimensional geometries, and / or the requirement of frequent mesh refinement, in these scenarios, the PIDC formulation can be seen as a promising new numerical alternative instead of PIC mesh-based methods.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS LISTA DE TABELAS LISTA DE SIGLAS E ANREVIATURAS LISTA DE SÍMBOLOS 3 CÁLCULO DE CAMPOS ELETROMAGNÉTICOS: O MÉTODO EFG 61 5.1 Visão geral do desenvolvimento da tese...... 105 5.2 Procedimento geral de aplicação do método Particle-In-Diffuse-Cell 107 5.3 Algoritmos específicos e algumas otimizações...... 109 5.4 Modelo PIDC orientado a objetos 115 5.5 Modelo PIDC paralelo 119 6.1 Análise de desempenho da abordagem PIC-FEM...... 123 6.2 Análise do campo elétrico em meios heterogêneos...... 125

Pág.

LISTA DE FIGURAS

2.1	Células triangulares (elementos finitos) comuns ao vértice <i>i</i>
3.1	A conectividade nodal em um ponto de avaliação x, o elemento difuso 68
3.2	Padrões patológicos de distribuição nodal71
3.3	À esquerda o gráfico da função peso constante sem suporte compacto. À direita a aproximação resultante. (Adaptada de Belytschko e Dolbow (1998))74
3.4	À esquerda o gráfico da função peso constante com suporte compacto. À direita, a aproximação resultante. (Adaptada de Belytschko e Dolbow (1998)) 75
3.5	À esquerda o gráfico da função peso suave e compacta. À direita a aproximação resultante. (Adaptada de Belytschko e Dolbow (1998))
3.6	Domínio de influência circular77
3.7	Domínio de influência retangular
3.8	Descontinuidade física esperada para o campo (linha contínua) ao cruzar a interface entre dois materiais e oscilações espúrias típicas (linha pontilhada) 81
4.1	Esfera de Debye em torno da partícula <i>j</i> e o nós incluídos pela esfera
4.2	Célula difusa
4.3	Célula difusa: domínios de influência retangulares
4.4	Pontos nodais que receberão contribuição de carga da partícula j
4.5	Função de forma construída pela abordagem interpolante do MEFG 95
4.6	Ciclo de simulação PIC-MC
4.7	Espaço universo para determinação de um evento. Ilustração adaptada do trabalho de Nambu (2000)
5.1	Diagrama UML de Sequência
5.2	Algoritmo para cálculo das funções de forma do MEFG 112
5.3	Algoritmo para cálculo das derivadas das funções de forma do MEFG 113
5.4	Montagem das equações discretas
5.5	Diagrama UML de classes do PIC-FEM. (simplificado) 117
5.6	Diagrama UML de classes do PIDC
6.1	Speedups obtidos para o programa PIC-FEM (Passaro et al., 2004) 124
6.2	Modelo geométrico, condições de contorno e linha de avaliação 126
6.3	Percentual de erro relativo (eixo y) para o potencial elétrico em pontos uniformemente distribuídos no domínio para diferentes valores de d_{max}

<u>Pág.</u>

6.4	Percentual de erro relativo do potencial elétrico sobre a linha de avaliação (Figura 6.2).	. 128
6.5	Linhas equipotenciais calculadas com o MEFG interpolante com truncamento de domínios (721 nós, $d_{max}=1.8$).	. 128
6.6	Norma do campo elétrico (eixo y) sobre pontos ao longo da linha de avaliação cruzando a interface (figura 6.2).	. 129
6.7	Percentual de erro relativo para a norma do campo elétrico sobre a linha de avaliação cruzando a interface	. 129
6.8	Linhas de avaliação paralelas à interface material e regiões críticas	. 130
6.9	Percentual de erro relativo para a norma do campo elétrico. Linha de avaliação paralela (superior) a interface material	. 130
6.1(Percentual de erro relativo para a norma do campo elétrico. Linha de avaliação paralela (inferior) a interface material	. 131
6.1 1	Percentual de erro relativo para o potencial elétrico sobre a linha de avaliação cruzando a interface (Figura 6.2).	. 132
6.12	2 Percentual de erro relativo para a norma do campo elétrico sobre a linha de avaliação cruzando a interface (Figura 6.2)	.133
6.13	3 Percentual de erro relativo para a norma do campo elétrico sobre a linha de avaliação paralela (superior) à interface material (Figura 6.2)	.133
6.14	4 (a) Componente E _x e (b) componente E _y do vetor campo elétrico calculadas sobre a linha de avaliação que cruza a interface material.	. 136
6.15	5 Condição de descontinuidade: Percentual de erro relativo entre a estimativa teórica e os valores calculados.	. 137
6.10	6 Condição de continuidade: Percentual de erro relativo entre a estimativa teórica e os valores calculados.	. 137
6.17	7 Comparação entre os valores da norma do campo elétrico calculado pelo MEFG e pelo MEF	. 138
6.18	8 Percentual de erro relativo entre os valores da norma do campo elétrico calculados pelo MEFG e pelo MEF: pontos de avaliação sobre a linha paralela superior à interface material.	. 139
6.19	Percentual de erro relativo entre os valores da norma do campo elétrico calculados pelo MEFG e pelo MEF: pontos de avaliação sobre a linha paralela inferior à interface material	. 139
6.20) Percentual de erro relativo: potencial elétrico calculado pelo MEFG e pelo MEF. (Linha de avaliação indicada na Figura 6.2, caso $\sigma_{Cu} / \sigma_W = 3,2308$)	. 141
6.21	Percentual de erro relativo: potencial elétrico calculado pelo MEFG e pelo MEF. (Linha de avaliação indicada na Figura 6.2, caso $\sigma_{Cu} / \sigma_{Pb} = 11,644$)	. 142

6.22	Percentual de erro relativo: potencial elétrico calculado pelo MEFG e MEF. (Linha de avaliação: Figura 6.2, caso: $\sigma_{Cu} / \sigma_{Graf} = 2.055,944$)	143
6.23	Norma do campo elétrico calculado para o caso $\sigma_{Cu} / \sigma_W = 3,2308$ ao longo da linha de avaliação indicada na Figura 6.2	143
6.24	Norma do campo elétrico calculado para o caso $\sigma_{Cu} / \sigma_{Pb} = 11,644$ ao longo da linha de avaliação indicada na Figura 6.2	144
6.25	S Norma do campo elétrico calculado para o caso $\sigma_{Cu} / \sigma_{Graf} = 2.055,944$ ao longo da linha de avaliação indicada na Figura 6.2	144
6.26	Percentual de erro relativo: campo elétrico calculado pelo MEFG e pelo MEF. (Linha de avaliação indicada na Figura 6.2, caso $\sigma_{Cu} / \sigma_W = 3,2308$)	145
6.27	⁷ Percentual de erro relativo: campo elétrico calculado pelo MEFG e pelo MEF. (Linha de avaliação indicada na Figura 6.2, caso $\sigma_{Cu} / \sigma_{Pb} = 11,644$)	146
6.28	Percentual de erro relativo: campo elétrico calculado pelo MEFG e MEF. (Linha de avaliação indicada na Figura 6.2, caso $\sigma_{Cu} / \sigma_{Graf} = 2.055,944$)	146
6.29	Percentual de erro relativo: campo elétrico calculado pelo MEFG e pelo MEF. (Linha de avaliação superior da Figura 6.8, caso $\sigma_{Cu} / \sigma_W = 3,2308$)	147
6.30	Percentual de erro relativo: campo elétrico calculado pelo MEFG e pelo MEF. (Linha de avaliação superior Figura 6.8, caso $\sigma_{Cu} / \sigma_{Pb} = 11,644$)	148
6.31	Percentual de erro relativo: campo elétrico calculado pelo MEFG e pelo MEF. (Linha de avaliação superior Figura 6.8, caso $\sigma_{Cu} / \sigma_{Graf} = 2.055,944$)	148
6.32	Linhas equipotenciais da função potencial elétrico do plasma, relativas aos instantes $t_1 = 5 \cdot 10^{-12} s$ (esquerda) e $t_{30} = 1.5 \cdot 10^{-10} s$ (direita)	150
6.33	Representação vetorial do campo elétrico do plasma, correspondente aos instantes $t_1 = 5 \cdot 10^{-12} s$ (esquerda) e $t_{30} = 1,5 \cdot 10^{-10} s$ (direita)	151

LISTA DE TABELAS

<u>Pág.</u>

6.1	Medidas de desempenho e escalabilidade do programa PIC-FEM implementado	no
	sistema Levsoft do IEAv/CTA. (Passaro et al., 2004)	125

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

DF	Diferenças Finitas
DSMC	Direct Simulation Monte-Carlo
EFGM	Element-free Galerkin Method
EDP	Equação Diferencial Parcial
FEM	Finite Element Method
IEAv	Instituto de Estudos Avançados
INPE	Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais
LEV	Laboratório de Engenharia Virtual
MC	Monte-Carlo
ME	Métodos Espectrais
MED	Método dos Elementos Difusos
MEF	Método dos Elementos Finitos
MEFG	Método <i>Element-Free</i> Galerkin
MG	Método de Galerkin
MLS	Moving Least Squares
MRP	Método dos Resíduos Ponderados
PIC	Particle-In-Cell
PIDC	Particle-In-Diffuse-Cell

LISTA DE SÍMBOLOS

$a_j(\mathbf{x})$	escalares da espansão local MLS;
В	vetor indução magnética;
С	velocidade da luz;
<i>c</i> _{<i>I</i>_}	parâmetro do MEFG para ajuste dos raios de alcance nodais dos domínios de influência relativo à direção espacial denotada por _;
d_{\max}	parâmetro livre do MEFG;
d_{mI}	raio de alcance nodal ou raio de influência do nó I ;
d_{mI} _	raio de alcance nodal do nó <i>i</i> relativo à direção espacial denotada por _ ;
Ε	vetor campo elétrico;
е	carga elementar do elétron;
$f_j(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$	função distribuição de partículas de espécie <i>j</i> no espaço de fase;
$f_j(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$	função distribuição de partículas de espécie <i>j</i> no espaço de fase; vetor densidade de corrente;
$f_j(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ \mathbf{J} $J(\mathbf{x})$	função distribuição de partículas de espécie <i>j</i> no espaço de fase; vetor densidade de corrente; norma quadrática ponderada do erro;
$f_j(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ \mathbf{J} $J(\mathbf{x})$ K	função distribuição de partículas de espécie <i>j</i> no espaço de fase; vetor densidade de corrente; norma quadrática ponderada do erro; constante de Boltzmann;
$f_j(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ J J(\mathbf{x}) K K	 função distribuição de partículas de espécie <i>j</i> no espaço de fase; vetor densidade de corrente; norma quadrática ponderada do erro; constante de Boltzmann; matriz de rigidez obtida pela aplicação do procedimento de discretização de Galerkin;
$f_j(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ \mathbf{J} $J(\mathbf{x})$ K \mathbf{K} \mathbf{k} l_G	 função distribuição de partículas de espécie <i>j</i> no espaço de fase; vetor densidade de corrente; norma quadrática ponderada do erro; constante de Boltzmann; matriz de rigidez obtida pela aplicação do procedimento de discretização de Galerkin; lista de pontos nodais cujos domínios de influência incluem um dado ponto de Gauss;
$f_j(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ \mathbf{J} $J(\mathbf{x})$ K \mathbf{K} l_G m	<pre>função distribuição de partículas de espécie j no espaço de fase; vetor densidade de corrente; norma quadrática ponderada do erro; constante de Boltzmann; matriz de rigidez obtida pela aplicação do procedimento de discretização de Galerkin; lista de pontos nodais cujos domínios de influência incluem um dado ponto de Gauss; cardinalidade de p(x);</pre>
$f_j(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ \mathbf{J} $J(\mathbf{x})$ K \mathbf{K} l_G m m_e	<pre>função distribuição de partículas de espécie j no espaço de fase; vetor densidade de corrente; norma quadrática ponderada do erro; constante de Boltzmann; matriz de rigidez obtida pela aplicação do procedimento de discretização de Galerkin; lista de pontos nodais cujos domínios de influência incluem um dado ponto de Gauss; cardinalidade de p(x); massa do elétron;</pre>

Ν	número de pontos de discretização (ou nodais) usados no cálculo do campo elétrico;
n	número de pontos nodais conectados a um dado ponto de avaliação;
N _D	número de elétrons dentro de uma esfera de Debye;
n _e	densidade de elétrons;
$N_i(\mathbf{x})$	função de forma do MEF;
p (x)	base polinomial da formulação do MEFG;
q_j	carga elétrica da j-ésima partícula;
r	distância normalizada entre um nó de referência e um ponto de avaliação;
$R_1(\mathbf{x}), R_2(\mathbf{x}), R_3(\mathbf{x})$	funções resíduo do MRP;
Т	temperatura;
$u^h(\mathbf{x},\overline{\mathbf{x}})$	aproximação local MLS;
u _i	variáveis nodais, potencial elétrico;
$w_i(\mathbf{x}) \equiv w(\ \mathbf{x} - \mathbf{x}_i\)$	função de ponderação (ou peso) associada ao nó i ;
∇	operador diferencial nabla em coordenadas cartesianas;
δ_{ij}	delta de Kronecker;
\mathcal{E}_0	permissividade elétrica do vácuo;
$\phi_i(\mathbf{x})$	função de forma do MEFG;
$\phi(\mathbf{x})$	expansão para aproximação da solução da equação de Poisson;
$\Phi(\mathbf{x})$	função incógnita da equação de Poisson;
$\Gamma_{Dir}, \Gamma_{Neu}$	contornos do domínio com condição de contorno de Dirichlet e Neumann respectivamente;

λ_D	comprimento de Debye;
$\rho, \rho(\mathbf{x})$	função densidade de carga;
σ_i	condutividade elétrica do meio i;
ω_i	peso associado ao <i>i-</i> ésimo ponto de integração de Gauss;
ω_{pe}	freqüência plasma-elétron;
Ω_{Dif}	célula ou elemento difuso;

1 INTRODUÇÃO

Plasma é um assunto que tem despertado grande e crescente interesse devido, tanto às promissoras tecnologias e processos baseados em plasmas, quanto aos fenômenos globais que envolvem a ocorrência de plasmas na natureza. Dentre as diversas aplicações e interesses em plasmas podemos citar controle de fluxo, ignição de gases combustíveis, sistemas de propulsão, fontes compactas de laser, produção de filmes e processamento de materiais, nanotecnologia, dentre outras aplicações. (SCALES et al., 1997; ROTH et al., 1998; RANTAMÄKI et al., 1999; SARMA, 2000; LONGO, 2000; SHANG, 2001; MACHERET et al., 2002; PAES et al., 2002; MINUCCI, 2003; HRÄCH et al., 2003; COULAUD et al., 2003; KANDALA; CANDLER, 2004; SOUBACQ et al. 2004; CAPITELI et al., 2004; PHUOC, 2005; MATYASH et al., 2005; SPROUL et al., 2005; KAFAFY; WANG, 2006)

O estudo de plasmas por meio de simulação computacional permite colher informações importantes para projetos de dispositivos baseados em plasmas (SANDONATO e BARROSO, 1996; SINGH et al., 1997) e também, para entender melhor a interação entre plasmas naturais e nossos sistemas de comunicação e estruturas metálicas, de um modo geral. Estes modelos dividem-se basicamente em modelos de fluidos e de partículas. Diversos fenômenos físicos e químicos ocorrem em micro e macro escala em um plasma (KANDALA e CANDLER, 2004; SOUBACQ et al. 2004), de modo que a escolha pelo modelo de fluidos ou de partículas depende do tipo e detalhamento da informação que se deseja obter a partir da simulação computacional (SHANG, 2004). Por exemplo, efeitos eletrocinéticos e colisionais podem ser naturalmente incorporados e detalhadamente representados em modelos de partículas (LONGO, 2000; ERCOLANO et al., 2003; LARSON, 2003; MALKA et al., 2004; SCHWEIGERT e ALEXANDROV, 2005).

A motivação inicial desta tese foi contribuir no desenvolvimento de modelos e técnicas computacionais para simulação de plasmas relevantes no contexto de

controle de fluxo aerodinâmico usando plasma gerado por laser (CAPITELI et al., 2004; MINUCCI et al., 2003; SHNEIDER et al., 2003; MACHERET et al., 2002; KNIGHT, 2002; MACHERET et al., 2001; RIGGINS et al., 1999), muito embora as contribuições teórico-metodológicas aqui desenvolvidas sejam de interesse no contexto mais amplo de métodos computacionais para simulação de plasmas via modelos de partículas (VERBONCOEUR, 2005).

No experimento de controle de fluxo, devido à diferença de escala temporal, dois processos podem ser tratados separadamente (SOUBACQ et al., 2004): *i*) a deposição de energia e formação de plasma, e *ii*) a interação fluido-dinâmica entre a onda de detonação do plasma e as camadas de choque do escoamento hipersônico. Considerando que os processos de ruptura do ar e ionização ocorrem numa escala de tempo menor que nanossegundos ao passo que os processos fluido-dinâmicos são da ordem de alguns microssegundos o plasma formado pela incidência do laser e o escoamento reativo podem ser tratados separadamente (SOUBACQ et al., 2004; KANDALA e CANDLER, 2004).

Em outras palavras, podemos determinar as mudanças das propriedades físicas devido à atuação do laser até a formação da onda de detonação sem considerar efeitos hidrodinâmicos e então, só a partir deste ponto, usar os dados calculados no final desta etapa de formação do plasma (pressão, temperaturas, densidades, etc.) como dados de entrada em um modelo de fluidos computacional apropriado, para simular a interação hidrodinâmica (SHANG, 2004).

Algumas das dificuldades inerentes ao do processo geral de controle de fluxo aerodinâmico e de tantas outras aplicações de plasmas, envolvem por exemplo, a presença e a dinâmica de regiões de acúmulo de carga e grandes variações da densidade de partículas no domínio de simulação. Devido a estas características, é desejável o emprego de métodos numéricos que permitam a incorporação de algoritmos adaptativos (LAPENTA, 2005; VAY et al., 2004),

como os métodos *meshfree* (BELYTCHKO et al., 1996), já que processos de refinamento da discretização deverão ocorrer dinamicamente ao longo da simulação para se obter uma descrição confiável destas variações. (KANDALA e CANDLER, 2004)

A simulação global do processo de redução de arrasto aerodinâmico por plasma gerado por *laser* deverá envolver diversos métodos numéricos para uma descrição detalhada dos fenômenos envolvidos, particularmente modelos contínuos acoplados a modelos de partículas. Este tipo de simulação computacional, por décadas demandou tempo computacional probibitivo para grande parte dos cientistas interessados no assunto, os quais não dispunham de recursos computacionais compatíveis.

Por muito tempo, a simulação computacional de modelos de partículas de médio e grande porte foi privilégio de poucos pesquisadores lotados em centros que disponibilizavam alta capacidade de processamento. O alto custo dos supercomputadores era proibitivo para a grande maioria das Instituições de Pesquisa no mundo, assim, a investigação de modelos computacionais que dispendessem de alta capacidade de processamento, como os modelos de partículas, desenvolveu-se em ritmo relativamente lento neste período.

Devido ao cenário vivido em torno da década de 90 até os dias de hoje em que se destaca a crescente disponibilidade de alta capacidade de memória e processamento a baixo custo, a investigação de modelos de partículas, como os modelos Particle-In-Cell (PIC), vem sendo cada vez mais disseminada e adotada em diversas áreas, haja vista o grande número de publicações envolvendo métodos baseados em modelos PIC e modelos híbridos (VERBONCOEUR, 1996), que em parte serão oportunamente citados no decorrer do texto.

Modelos PIC tiveram origem nos trabalhos de Dawson e Buneman no final da década de 50, (DAWSON, 1962; BUNEMAN, 1959) e têm despertado interesse

em diversas áreas por ser um modelo bastante flexível, permitindo o acoplamento de técnicas adicionais para tratamento de diversos tipos de interações entre partículas, como colisões reativas, elásticas, dentre outras interações (NANBU, 2000b).

Modelos PIC não-colisionais resolvem a equação de Vlasov de forma indireta acoplada às equações de campo de Maxwell. As equações de movimento de Newton são resolvidas para cada partícula, alternativamente à equação de Vlasov. A força atuante é dada pelo campo elétrico autoconsistente, proveniente da carga das próprias partículas. As equações diferenciais ordinárias relativas ao movimento das partículas são usualmente resolvidas usando-se os métodos de Euler ou *leap-frog* e o campo é determinado resolvendo-se as equações de Maxwell. (DAWSON e LIN, 1984; BIRDSALL e LANGDON, 1985; KRUER, 1988)

Métodos espectrais (ME) e de diferenças finitas (DF) podem ser e foram bastante empregados em programas PIC, particularmente devido à simplicidade e baixo custo computacional associados a estas abordagens, apesar das limitações inerentes a cada método especialmente no que diz respeito à habilidade no tratamento de domínios envolvendo geometrias complexas e à eficiência da paralelização (ME), indispensável para a maior parte dos problemas de interesse nas engenharias. Em particular, o processo de interação da onda de detonação do plasma com o escoamento de fluidos requer a resolução correta da dinâmica das ondas de choque, de modo que algoritmos de refinamento auto-adaptativos devem ser empregados (SHANG, 2001; MINUCCI et al., 2003; SHANG, 2004; VAY et al., 2004).

O método dos elementos finitos (MEF) (TAYLOR e ZIENKIEWICZ, 1989), apesar de apresentar maior custo computacional comparado a estes dois últimos, é um método já consagrado na engenharia civil, mecânica, aeronáutica, elétrica e eletrônica, dentre outras, sendo uma boa alternativa para lidar com geometrias complexas. Um método PIC acoplado ao MEF foi

proposto por Paes *et al.* (2003) no qual as células do modelo PIC coincídem com os elementos finitos da malha usada pelo MEF.

Contudo, algoritmos para refinamento local de malha, bi ou tridimensionais apresentam, em geral, alto custo computacional, podendo comprometer a aproximação em casos extremos. Como alternativa aos métodos baseados em malha, por volta de 1990, são propostos novos métodos para resolução de edp's, cujas formulações independem de malha, consolidando uma nova classe de métodos, chamados *meshfree* ou *meshless* (NAYROLES et al., 1992; BELYTSCHKO et al., 1994).

Em 1992, Nayroles et al. propôs o método dos elementos difusos (MED) como uma generalização do MEF no qual o procedimento de Galerkin é aplicado sem a necessidade de uma malha do domínio, ou seja, um método de Galerkin sem elementos. Este método se popularizou como element-free Galerkin (MEFG), após a modificação de alguns parâmetros numéricos que conferiram maior robustez ao método, publicada dois anos depois, em 1994 por Belytschko *et al.*

O MEFG vem recebendo considerável atenção da comunidade científica de diversas áreas, como em engenharia mecânica (BELYTSCHKO et al., 1994; CORDES e MORAN, 1996; ROSSI e ALVES, 2005), eletromagnetismo computacional (MARECHAL, 1998; CINGOSKI et al., 1998; VIANA e MESQUITA, 1998; MACHADO et al., 2000; MARQUES, 2003; XUAN et al., 2004; ZHANG et al., 2005), magneto-hidrodinâmica (VERARDI et al., 2003) e física quântica (SUGAWARA, 1999), apresentando bons resultados numéricos e tendo como principais atrativos a fácil implementação de algoritmos autoadaptativos para refinamento da discretização, e aproximações com alto grau de continuidade, apesar de apresentar, em geral, maior custo computacional comparado ao MEF.

Ressalta-se o interesse por aproximações com alto grau de continuidade na resolução da equação de Poisson em modelos PIC, visto que, sendo o

potencial elétrico a variável de estado na equação de Poisson, o campo elétrico será a primeira derivada da aproximação, o qual influencia diretamente a direção e módulo das velocidades das partículas. O rastreamento correto das trajetórias das partículas é de interesse em diversas áreas, como por exemplo, no projeto de propulsores iônicos, onde uma descrição satisfatoriamente aproximada da trajetória das particulas possibilita obter informações relevantes sobre a colimação do feixe de partículas, permitindo melhorar o projeto do dispositivo (SANDONATO e BARROSO,1996; NAM et al., 2005).

Assim, se a aproximação para o potencial for linear em um dado subdomínio, então o campo será constante no interior do mesmo. Uma aproximação constante para as componentes do campo elétrico pode não descrever corretamente efeitos de bainha de plasma e regiões de acúmulo de carga, devido à forte variação do campo em regiões estreitas. Neste caso, um refinamento maior da discretização faz-se necessário nestas regiões para que as variações do campo sejam descritas satisfatoriamente.

Considerando-se estas duas características desejáveis para um método de aproximação do campo elétrico em modelos PIC, fácil adaptatividade e aproximação altamente contínua, e ainda a disponibilidade de métodos numéricos que atendem a estas características, conjecturou-se que o desenvolvimento de modelos PIC independentes de malha é relevante no contexto de simulação de plasma via modelos PIC.

De fato, em meados de 2004, Christlieb et al. propõem um método de simulação de partículas carregadas usando um algoritmo *grid-free treecode* para resolver a equação de Poisson, obtida a partir das equações de Maxwell. Este método calcula a resultante das forças oriundas das interações entre *clusters* de partículas ao redor de uma dada partícula de referência, para cada partícula. Isso evita a soma direta de todas as interações entre pares de partículas que tem custo $O(N^2)$, e a formulação resultante apresenta, segundo os autores, um custo computacional O(N Log N), como os modelos PIC.
É neste contexto que se inserem as contribuições desta tese. Um método PIC sem malha denominado Particle-In-Diffuse-Cell (PIDC) para simulação de plasmas, fundamentado no modelo PIC e no MEFG, é proposto e descrito detalhadamente. A idéia do elemento difuso introduzida por Nayroles (1992) é discutida no contexto de modelos PIC, culminando na concepção da *célula difusa*: uma estrutura que não possui regularidade geométrica, contudo, bem definida no espaço funcional gerado pelas funções de base associadas à cada *nó* da célula difusa. O conceito de célula como entidade geometricamente bem definida nos modelos PIC é, neste sentido, estendido pelo modelo PIDC.

Resultados relevantes em eletromagnetismo computacional são alcançados durante a investigação dos métodos envolvidos, bem como são descritos os principais algoritmos computacionais empregados e propostos. Em síntese, o PIDC é de potencial interesse em situações que: 1) envolvam o tratamento de geometrias complexas, 2) requeiram estratégias auto-adaptativas eficientes e 3) alta continuidade na aproximação do campo, que como discutimos, são habilidades numéricas desejáveis para descrever as fortes variações de campo que frequentemente ocorrem em aplicações tecnológicas baseadas em plasmas.

Devido à natureza multidisciplinar desta tese, buscou-se não ser exaustivo na descrição do estado da arte de cada área envolvida, mas dos principais desenvolvimentos dessas áreas e sempre que necessário referenciando a literatura específica. No capítulo 2, apresentamos conceitos básicos de plasmas, e então discutimos o modelo Particle-In-Cell eletrostático, especificamente a abordagem PIC-FEM de Paes et al. (2003), a partir da qual, devido às analogias entre o MEF e o MEFG, pode-se formular de modo mais claro o PIDC. Concluímos o capítulo com uma revisão das estratégias de paralelização de programas PIC.

Em seguida, no capítulo 3, o método Element-Free Galerkin é aplicado à equação de Poisson, derivada das equações de Maxwell para o campo elétrico, incluindo as formulações matemáticas e técnicas adicionais, como para o tratamento de condições de contorno e de interface, envolvidas no processo.

Tendo sido discutidas a fundamentação teórico-metodológica dos modelos PIC e do MEFG, a formulação PIDC é descrita detalhadamente no capítulo 4. Adicionalmente, a implementação de algoritmos colisionais é discutida preliminarmente no contexto do método PIDC.

No capítulo 5 são discutidas as metodologias computacionais empregadas no desenvolvimento do projeto e paralelização do programa PIDC, os algoritmos usados na implementação do método, além de algumas otimizações inéditas e peculiares aos métodos e algoritmos usados, são descritos detalhadamente.

Por fim, no capítulo 6, apresentamos resultados numéricos inéditos sobre a acurácia obtida com uma implementação do MEFG interpolante para o cálculo do campo elétrico na proximidade de interfaces materiais, além de resultados preliminares da simulação de um plasma não-colisional com o PIDC.

2 SIMULAÇÃO DE PLASMAS VIA MODELOS PARTICLE-IN-CELL

Métodos Particle-In-Cell são uma classe de métodos para simulação de plasma fundamentados a partir de uma perspectiva Lagrangeana do sistema de partículas eletricamente carregadas e acopladas pelos seus campos autoconsistentes.

Os modelos PIC são especialmente interessantes do ponto de vista da escalabilidade do modelo computacional por apresentarem um custo computacional $O(N \log N)$ para calcular a força que atua sobre as partículas, enquanto a soma direta das contribuições de força, par a par, tem complexidade $O(N^2)$.

Os detalhes do método PIC-FEM (Particle-In-Cell – Finite Element Method) proposto no trabalho de Paes *et al.* (2003) serão discutidos após apresentarmos alguns conceitos básicos de plasmas que fundamentam o modelo PIC.

2.1 Fundamentos de Plasmas

Nesta seção são discutidos aspectos básicos de plasmas. É difícil estabelecer uma definição para plasma em poucas palavras, dada a riqueza das interações físicas presentes em fina e larga escala. Por isso, objetivamos aqui apresentar uma descrição conceitual introdutória sobre plasmas e os principais fenômenos físicos envolvidos. Essas discussões não apenas fundamentam o modelo de simulação como também são as bases de muitas estratégias de paralelização para modelos PIC, e que consideravelmente podem aumentar o desempenho computacional.

É comum plasma ser definido como o quarto estado da matéria, muito embora a transição de estado gasoso para o de plasma não seja uma transição de fase no sentido termodinâmico por ocorrer com temperatura crescente. Isto significa que se fornecermos energia suficiente, um gás molecular pode gradualmente se dissociar em um gás atômico como resultado de colisões entre as partículas cuja energia termo-cinética excede a energia de ligação molecular. Apesar desta transição ocorrer com temperatura crescente, o estado de plasma é caracterizado basicamente pelo equilíbrio entre os potenciais de Coulomb e termo-cinético propiciado pelo comportamento coletivo oscilatório das partículas que compõem o plasma. Este comportamento coletivo está relacionado a um parâmetro importante para a caracterização de um plasma, o chamado comprimento de Debye. (KRUER, 1988)

O comprimento de Debye mede a distância sobre a qual o campo gerado por uma partícula individual age sobre as outras. Isto é, os campos eletrostáticos individuais gerados por partículas além desta distância são blindados devido a forma com que as partículas carregadas se organizam, de modo que a interação entre essas partículas ocorre de forma coletiva: uma dada partícula sofre a ação do campo elétrico resultante (coletivo) das partículas que se encontram além da distância de Debye.

Em basicamente termos mais gerais. um plasma é um meio macroscopicamente neutro que contém muitos elétrons livres e átomos ou moléculas ionizadas interagindo coletivamente devido aos campos eletromagnéticos auto-consistentes. Estes últimos são os campos elétrico e magnético provenientes das cargas e velocidades das próprias partículas carregadas (elétrons e íons) do plasma. Equivalentemente, um plasma é um sistema de partículas eletricamente carregadas que estão acopladas devido aos campos elétrico e magnético auto-consistentes.

Entretanto, nem todo sistema de partículas carregadas representa algum plasma. Para que certo sistema de partículas carregadas represente um plasma, alguns critérios relacionados com as características fundamentais de um plasma devem ser observados. Estes critérios fundamentam a metodologia de simulação de plasmas por modelos de partículas estudada nesta monografia e são discutidos nas seções seguintes.

2.1.1 Neutralidade Macroscópica

Na ausência de forças externas e para um volume que inclua um número suficientemente grande de partículas, (e isto é determinado pelos comprimentos característicos do plasma) a carga elétrica resultante em um plasma deve ser nula. Ou seja, um plasma é macroscopicamente neutro sob condições de equilíbrio na ausência de campos externamente aplicados. Se essa neutralidade macroscópica elétrica não fosse mantida, a energia potencial elétrica proveniente das forças de Coulomb seria muito grande comparada à energia termo-cinética da partícula, o que forçaria uma reorganização das partículas tedendo a equilibrar seus potenciais termo-cinéticos e eletrostáticos. O processo de reorganização das partículas em direção ao equilíbrio pode envolver vários fenômenos físicos diferentes, como por exemplo a emissão de radiação, colisiões, surgimento de campos de polarização elétrica e campos magnéticos devido ao movimento acelerado de partículas carregadas, etc.

Oscilações em torno do estado de neutralidade macroscópica elétrica podem ocorrer em um plasma em equilíbrio, mas somente para distâncias nas quais é obtido um balanço entre as energias termo-cinética e potencial elétrica. Isto ocorre porque ao passo que a energia termo-cinética tende a perturbar a neutralidade elétrica, os potenciais de Coulomb, resultantes da separação de quaisquer cargas, tendem a restaurá-la.

Essa distância, onde pode ser observado um afastamento do estado de neutralidade macroscópica em um plasma, é determinada por um comprimento característico de cada plasma, chamado de comprimento de Debye λ_D . Em um plasma em equilíbrio, perturbações do estado de neutralidade macroscópica não ocorrem para distâncias maiores que λ_D , uma vez que as partículas carregadas do plasma podem mover-se livremente para neutralizar qualquer região com excesso de carga em resposta ao aparecimento de fortes forças de Coulomb.

2.1.2 Blindagem de Debye

O comprimento de Debye representa a medida da distância sobre a qual desvios da quasi-neutralidade são possíveis. O comprimento de Debye de um plasma é dado por:

$$\lambda_{D} = \left(\frac{\varepsilon_0 \cdot K \cdot T}{n_e \cdot e^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$
(2.1)

onde ε_0 é a permissividade elétrica do meio, *K* é a constante de Boltzman, *T* é a temperatura, n_e é a densidade de elétrons e *e* é a carga elementar do elétron.

Em outras palavras, se definirmos uma esfera de Debye, isto é, uma esfera com raio igual a λ_D , em torno de uma partícula carregada, então a contribuição individual dos campos elétricos produzidos por partículas carregadas que estiverem fora da esfera de Debye é muito pouco expressiva (negligenciável) no campo elétrico resultante sobre a partícula no centro da esfera de Debye, conforme demonstrado teoricamente em Kruer (1988). O efeito da blindagem dos campos eletrostáticos a partir de uma distância da ordem de λ_D , também chamada blindagem de Debye, é uma característica de todos os plasmas e não ocorre em todos os meios com partículas carregadas. Este fenômeno se deve à forma com que as partículas carregadas do plasma se organizam em resposta aos efeitos coletivos.

Um requisito para ocorrência de plasma pode ser estabelecido aqui: as dimensões físicas do sistema devem ser grandes comparadas ao parâmetro de Debye, já que deve haver espaço físico suficiente para que os efeitos de blindagem coletiva de Debye possam ser observados. Caso contrário, simplesmente não haverá espaço físico suficiente para o efeito de blindagem e as partículas carregadas não apresentarão comportamento de plasma. A seguinte relação estabelece um primeiro critério para a ocorrência de plasma: $L >> \lambda_D$, onde *L* é um fator de escala das dimensões do sistema de partículas.

O comprimento de Debye também pode ser entendido como a distância sobre a qual perturbações da neutralidade macroscópica (causadas pela energia cinética das partículas) podem ocorrer, originando flutuações de potencial elétrico, também conhecidas na literatura especializada como flutuações de microcampo. Essas flutuações de potencial elétrico dão origem a fenômenos ondulatórios em plasma, que nada mais são que a transformação periódica de energia termo-cinética em energia potencial elétrica e vice-versa, como será discutido adiante.

Desde que o efeito de blindagem é resultado da interação coletiva das partículas dentro de uma esfera de Debye, o número de elétrons dentro de uma esfera de Debye deve ser suficientemente grande, ou equivalentemente, a distância média entre elétrons ($\approx n_e^{-\frac{1}{3}}$) dentro da esfera de Debye deve ser muito pequena comparada ao comprimento de Debye, isto é,

$$n_e \cdot \lambda_D^3 >> 1 \,, \tag{2.2}$$

que representa um segundo critério para a ocorrência de um plasma. Quando o número de elétrons dentro de uma esfera de Debye é muito grande, pode-se demonstrar que os efeitos colisionais podem ser desprezados (Kruer, 1988), e o plasma é dito não colisional. O número de elétrons dentro de uma esfera de Debye é dado por:

$$N_D = \frac{4}{3}\pi \cdot \lambda_D^3 \cdot n_e.$$
(2.3)

Um terceiro critério a ser levado em conta é a neutralidade macroscópica de carga elétrica, uma vez satisfeitas as condições anteriores dada pelas equações (2.2) e (2.3).

2.1.3 Freqüência Plasma-Eletron

Devido a estabilidade da neutralidade elétrica, quando um plasma é perturbado os campos resultantes da separação de partículas carregadas dão origem a movimentos coletivos de partículas que tendem a recuperar a neutralidade de carga original. Estes movimentos coletivos são caracterizados por uma freqüência chamada de freqüência do plasma. Os elétrons, partículas mais leves, oscilam coletivamente em torno de íons mais pesados e à medida que se afastam, a força restauradora é fornecida pela interação de Coulomb íonelétron, acelerando rapidamente os elétrons para recuperar a neutralidade de carga (no espaço de cargas considerado). Entretanto, devido à sua inércia, os elétrons avançam da posição de equilíbrio, e então é originado um campo elétrico restaurador na direção contrária. Estas oscilações coletivas rápidas (de alta freqüência) de elétrons em torno de íons mais pesados repetem-se periodicamente e são oriundos da transformação contínua de energia termocinética em energia potencial elétrica e vice-versa. A freqüência angular destas oscilações coletivas de nuvens de elétrons é dada por:

$$\omega_{pe} = \left(\frac{n_e \cdot e^2}{m_e \cdot \varepsilon_0}\right) \tag{2.5}$$

Normalmente, esta é a mais alta freqüência em um plasma. Isto deve ser levado em conta no dimensionamento do incremento de tempo que deverá ser usado na integração das equações de movimento.

Colisões entre elétrons e partículas neutras tendem a reduzir estas oscilações coletivas e gradualmente diminuir sua amplitude. Quando a freqüência de colisão elétron-partícula neutra v_{en} é relativamente alta, os elétrons deixam de se comportar de forma independente (devido às freqüentes colisões) e são forçados a entrarem em equilíbrio termodinâmico com as partículas neutras; neste caso, o meio pode ser tratado como um gás neutro. Assim, pode-se dizer que a ocorrência de um plasma é caracterizada por uma freqüência de colisão elétron-partícula neutra menor que a freqüência plasma-elétron.

2.1.4 Plasmas não-colisionais

Como já mencionamos na seção 2.1.2 os efeitos colisionais em plasma podem ser desprezados quando o número de elétrons dentro de uma esfera de Debye é muito maior que 1, e o plasma é dito não-colisional (KRUER, 1988).

Um ponto de partida usual para descrever a evolução de um plasma não colisional é a equação de Vlasov, que pode ser obtida diretamente a partir da equação de Boltzmann desconsiderando-se as contribuições do termo colisional, como em Nanbu (2000b), ou a partir da equação de continuidade para a função distribuição de partículas no espaço de fase. Tomaremos o segundo caminho.

Definimos $f_j(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ a função de distribuição de partículas de espécie j no espaço de fase. Desde que partículas não são criadas e nem destruídas de um ponto para outro no espaço de fase, a equação da continuidade deve ser satisfeita por $f_j(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$:

$$\frac{\partial f_j}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} (\dot{\mathbf{x}} \cdot f_j) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} (\dot{\mathbf{v}} \cdot f_j) = 0$$
(2.6)

Além disso, das leis de movimento e da equação da força de Lorentz podemos escrever:

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{v}$$

$$\dot{\mathbf{v}} = \frac{q_j}{m_j} \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v} \times \mathbf{B}}{c} \right),$$
(2.7)

onde q_j e m_j são a carga e a massa das partículas da j-ésima espécie e E e B são os campos elétrico e magnético. No caso de modelos eletrostáticos, B = 0.

Agora, substituindo as identidades dadas pelas equações (2.7) na equação (2.6), obtemos a equação de Vlasov:

$$\frac{\partial f_j}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_j}{\partial \mathbf{x}} + \frac{q_j}{m_j} (\mathbf{E}) \cdot \frac{\partial f_j}{\partial \mathbf{v}} = 0.$$
(2.8)

Esta equação nos diz que $f_j(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ é constante seguindo uma trajetória dinâmica no espaço de fase, e nada mais é do que a imposição:

$$\frac{df_j}{dt} = \frac{\partial f_j}{\partial t} + \frac{\partial f_j}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} + \frac{\partial f_j}{\partial \mathbf{v}} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = 0, \qquad (2.9)$$

Uma equação de Vlasov é aplicada a cada espécie de partículas. Por exemplo, em um plasma composto por elétrons e somente uma espécie de íons, os elétrons são tratados como sendo uma espécie de fluido e os íons como sendo outra; esta abordagem é chamada de modelo de plasma de dois fluidos. (KRUER, 1988)

No entanto, somente a equação de Vlasov não é suficiente para a descrição de um plasma. Em conjunto devem ser resolvidas as equações de campo de Maxwell (JACKSON, 1975; BASTOS, 1992),

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho,$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0,$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t},$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{J} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$$
(2.10)

sendo $\rho(\mathbf{x})$ a função densidade de carga, **J** o vetor densidade de corrente e *c* a velocidade da luz.

Simulações via modelo de partículas, como o PIC, permitem, por exemplo, investigar efeitos eletrocinéticos, tais como a distribuição de energia de íons e elétrons, importantes, por exemplo, no estudo de fenômenos de descargas (NAMBU et al. 2000a), de ionização, expansão e resfriamento de plasmas

(LONGO, 2000; SHONG et al., 2001; ERCOLANO et al., 2003, NAM et al., 2005; MATYASH et al., 2005).

2.2 O Modelo PIC Eletrostático

O que torna viável a aplicação desta técnica é o fato de estarmos interessados na investigação do comportamento coletivo das partículas que compõem o plasma, o que ocorre em uma escala espacial de ordem maior ou comparável ao comprimento de Debye λ_D . A interação partícula-partícula entre os elétrons e íons presentes é aproximada por uma interação partícula-campo nos modelos PIC. O ciclo de simulação pode ser resumido pelas 4 etapas seguintes:

- *i)* Distribuição das cargas;
- ii) Cálculo do campo elétrico;
- iii) Interpolação do campo elétrico;
- iv) Cálculo das novas posições e velocidades.

As partículas usadas no modelo de simulação não são cargas puntiformes, mas são macropartículas de tamanho finito $a \approx \lambda_D$ (KRUER, 1988). Se o comprimento *L* característico das dimensões do sistema físico for grande comparado ao tamanho das partículas *a*, *L* >> *a* (e isso deve ser verdade para que efeitos coletivos possam ser observados), então uma coleção de macropartículas se comporta aproximadamente da mesma forma que uma coleção de partículas pontuais, muito embora o modelo de macropartículas suprima flutuações em escala de comprimento menor que λ_D .

Devido a massa relativamente grande dos íons, estes estão inaptos a responderem a oscilações de alta freqüência e por isso podem ser tratados como íons fixos, como um *background* de íons neutralizante. O campo magnético auto-consistente, originado da corrente gerada pelas cargas em movimento, pode ser desprezado no limite eletrostático, e assim, na ausência de fontes externas de campos, a força que age sobre cada partícula do plasma

é resultado apenas da atuação do campo elétrico auto-consistente. Sob essas considerações, para o caso de um domínio bidimensional homogêneo e isotrópico, e utilizando-se a formulação do potencial escalar elétrico (SIMKIN e TROWBRIDGE, 1979), $\mathbf{E} = -\nabla \phi(x, y)$, as equações de Maxwell se reduzem à equação de Poisson:

$$\nabla \cdot \left(\varepsilon_0 \nabla \phi(\mathbf{x}) \right) = -\rho(\mathbf{x}). \tag{2.11}$$

Nesta equação ϕ é a função potencial elétrico, ρ é a função densidade de carga e ε_0 é a permissividade elétrica.

Para resolvermos a equação de Poisson é necessário conhecer a distribuição de cargas (ρ). Para isso, o domínio é dividido em elementos de área (caso bidimensional) topologicamente regulares, não intersectantes (como uma malha de elementos finitos) e suficientemente pequenos para resolverem o efeito coletivo. Esses elementos topologicamente regulares e não intersectantes são denominados células nos modelos PIC. A carga de cada partícula dentro de uma célula é distribuída pelos vértices desta célula seguindo-se algum critério previamente estabelecido. Após este procedimento, temos determinado o valor da distribuição de carga sobre os vértices das células (pontos de discretização do domínio) e então calculamos a densidade ρ .

Com isso, podemos resolver a equação de Poisson e determinar o campo eletrostático auto-consistente resultante dessa distribuição de cargas. Conhecidos os potenciais nodais, podemos interpolar o campo nas posições das partículas.

Em seguida, usando a equação da força de Lorentz e as equações de movimento podemos determinar o avanço das partículas no tempo e espaço para um intervalo de tempo suficientemente pequeno capaz de resolver a mais alta freqüência. Calculamos as novas posições e velocidades das partículas; a mudança nas posições destas modifica a distribuição das cargas e conseqüentemente o campo eletrostático auto-consistente. Voltamos ao início

do ciclo de simulação: recalculamos a função densidade ρ nos vértices das células, com essa distribuição resolvemos a equação de Poisson, usando, por exemplo, métodos de diferenças finitas, elementos finitos, ou outros, e assim por diante.

2.2.1 Distribuição das cargas

Para interpolarmos a densidade de carga necessitamos dos valores locais de acúmulo de carga. Usando-se as células, podemos efetuar um particionamento de carga das partículas dentro de cada célula entre os nós que compõem a célula seguindo algum critério (BIRDSALL e LANGDON, 1985; VERBONCOEUR, 2005), desde que seja consistente com a natureza do fenômeno, não introduza nem remova carga do sistema, e em particular, que preserve a neutralidade macroscópica de cargas.

Por exemplo, pode-se adotar o critério de menor distância acumulando-se toda a carga de uma partícula no vértice mais próximo a ela. Este critério é referido na literatura como *nearest grid point* (NGP). Também, pode-se dividir a carga da partícula pelos dois vértices mais próximos, ou ainda, pode-se distribuir a carga usando um esquema de ponderação baseado na distância entre a partícula e os pontos de acúmulo de carga usando splines lineares, quadráticas ou cúbicas.

Em outras palavras, necessitamos, nesta fase da simulação, *interpolar* a função densidade de carga $\rho(\mathbf{x})$ sobre os pontos nodais. Isto é feito em duas etapas, primeiramente distribuímos a carga das partículas pelos nós e depois dividimos pelo volume em torno do ponto nodal.

Ao se utilizar o método dos elementos finitos (MEF) (SCHWARZ, 1984; TAYLOR e ZIENKIEWICZ, 1989) para resolver a equação de Poisson, podemos utilizar a estrutura de malha do domínio (os elementos finitos), necessária a aplicação do método, como sendo a própria estrutura de células

do PIC, bastando que a malha seja adequadamente refinada para resolver os efeitos coletivos do plasma em estudo (PAES et al., 2003).

Outro benefício se tira da aplicação de elementos finitos em conjunto com a metodologia de simulação de partículas: as funções de forma do MEF, $N_i(\mathbf{x})$, satisfazem a condição de partição de unidade (MELENK e BABUSKA, 1996; PASSARO et al., 2004), também chamada de condição de consistência de ordem zero (BREITKOPF et al., 1998; 2000):

$$\sum_{i=1..NV} N_i(x) = 1,$$
 (2.12)

onde *NV* é o número de vértices do elemento finito (célula) em questão. Dessa forma, as funções de forma podem ser usadas para realizar o particionamento das cargas das partículas entre os nós. Cada parcela da soma

$$\sum_{i=1..NV} N_i(x) \cdot q_j = q_j \qquad , \tag{2.13}$$

representa a contribuição de carga da *j*-ésima partícula para o *i*-ésimo vértice do elemento finito que contém a partícula. De modo semelhante,

$$\sum_{j \in \bigcup \Omega_{e_i}} N_i(\mathbf{x}_j) = Q_{Tot_i}$$
(2.14)

representa a carga total acumulada no nó *i*, Q_{Tot_i} , ou seja, a soma das contribuições de carga, $N_i(\mathbf{x}_j) \cdot q_j$, de todas as partículas contidas nos elementos finitos (células) que têm o nó *i* como vértice, Ω_{e_i} .



Figura 2.1 Células triangulares (elementos finitos) comuns ao vértice i

É interessante observar que o processo de particionamento da carga de cada partícula é incorporado naturalmente devido ao caráter local da aproximação construída pelo MEF e à propriedade de partição de unidade das funções de forma do MEF. Uma vez que o suporte das funções de forma está associado às dimensões dos elementos finitos, segue que as dimensões lineares dos elementos finitos (células) devem ser da ordem do comprimento de Debye λ_D a fim de resolver adequadamente os efeitos coletivos do plasma.

2.2.2 Cálculo do campo elétrico auto-consistente

O campo eletrostático gerado pela distribuição de carga calculada de acordo com o procedimento anterior pode ser calculado resolvendo-se o seguinte problema de valor de contorno para a equação de Poisson:

$$\nabla^{2} \Phi(\mathbf{x}) = \rho(\mathbf{x}),$$

$$\Phi(\mathbf{x}) = \phi_{Dir}, \quad em \quad \Gamma_{Dir} \subset \Gamma,$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{n}} = f_{Neu}, \quad em \quad \Gamma_{Neu} \subset \Gamma,$$

(2.15)

onde $\Gamma_{Neu} \cap \Gamma_{Dir} = \{ \}, \Gamma_{Neu} \cup \Gamma_{Dir} = \Gamma$, sendo Γ o contorno que delimita o domínio de estudo, e os valores de $\rho(\mathbf{x})$ são conhecidos sobre os nós da malha de elementos finitos.

Aplicando o método dos Resíduos Ponderados (SCHWARZ, 1984) ao problema de valor de contorno (2.15) e seguindo a abordagem de Galerkin, podemos construir uma aproximação $\phi(\mathbf{x})$ usando o método dos elementos finitos (TAYLOR e ZIENKIEWICZ, 1989):

$$\Phi(\mathbf{x}) \approx \phi(\mathbf{x}) = \sum_{i} N_{i}(\mathbf{x}) \cdot u_{i} , \qquad (2.16)$$

onde N_i é um conjunto de funções linearmente independentes (construídas pelo método dos elementos finitos) e u_i são os escalares da expansão, a serem determinados. Após um pouco de cálculo, tendo usado a identidade de Green, pode-se chegar à seguinte forma discretizada:

$$\mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{b} \tag{2.17}$$

na qual,

$$[K]_{ij} = \int_{\Omega} \nabla N_j \cdot \nabla N_i d\omega,$$

$$[b]_j = \int_{\Omega} N_j \rho d\omega$$
(2.18)

e *u_j* são as incógnitas do sistema de equações. No capítulo 3 apresentamos detalhadamente este processo de discretização da equação de Poisson. Uma boa descrição do método PIC-FEM pode ser encontrada em Paes et al. (2003).

A ordem deste sistema de equações lineares é $NP \times NP$, em que NP é o número de pontos nodais. Assim, dependendo da densidade de pontos necessária para resolver os efeitos coletivos do plasma, ou necessária para garantir uma descrição confiável na investigação dos fenômenos de interesse, ou ainda em problemas tridimensionais, o custo computacional para resolução do campo pode ser relativamente alto, o que pode influenciar a escolha por uma estratégia de paralelização. Estes aspectos são discutidos na próxima seção.

2.2.3 Interpolação do campo e resolução das equações de movimento

O campo elétrico é interpolado na posição das partículas usando a relação do potencial escalar para o campo elétrico e subsequentemente substituindo a expressão (2.16) para a aproximação local do potencial, obtem-se:

$$E(x_p) \approx -\nabla \phi(x_p) = -\sum_i \phi_i \cdot \nabla N_i(x_p)$$
(2.19)

Note-se que o campo elétrico é calculado usando-se as derivadas das funções de forma N_i , de modo que a aproximação do campo elétrico herdará a mesma continuidade destas derivadas.

Na ausência de campos eletromagnéticos aplicados externamente, a força de Lorentz que age sobre cada partícula no sistema pode ser calculada interpolando-se o campo elétrico autoconsistente. Pela equação de Lorentz, segue que a aceleração que atua sobre uma partícula j, em um problema eletrostático, é dada por:

$$\mathbf{a}_j = \frac{q_j}{m_j} \mathbf{E}$$
(2.20)

Para efetuar o avanço das partículas, usualmente é empregado um algoritmo de segunda ordem do tipo *"leap frog"* (KRUER, 1988), (GARRIGUES et al., 2000), mas outros métodos também podem ser utilizados, como o de Euler (LONGO, 2000). As equações de diferenças, para este algoritmo, são dadas por:

$$\mathbf{v}^{(n+\frac{1}{2})} = \mathbf{v}^{(n-\frac{1}{2})} + \mathbf{a}^{(n)} \cdot \Delta t$$

$$\mathbf{x}^{(n+1)} = \mathbf{x}^{(n)} + \mathbf{v}^{(n+\frac{1}{2})} \cdot \Delta t \quad .$$
(2.21)

Em síntese, dadas as condições iniciais do sistema $\mathbf{v}_{j(0)} = \mathbf{v}_{j_0}$, $\mathbf{x}_{j(0)} = \mathbf{x}_{j_0}$ em $t_0 = 0$, podemos: calcular a densidade de carga ρ em t_0 , em seguida o campo e determinar a força que atua na partícula, o que nos possibilita calcular a velocidade no instante de tempo anterior, $\mathbf{v}^{(t_0 - \frac{1}{2}\Delta t)}$.

Neste ponto temos todos os ingredientes necessários para a aplicação do algoritmo *leap frog* apresentado. A nova velocidade $\mathbf{v}^{(t+\frac{1}{2}\Delta t)}$ é calculada usando-se a velocidade no instante de tempo imediatamente anterior e a aceleração $\mathbf{a}^{(t)}$ relativa à força no instante atual, dada pela primeira equação em (2.21). Calculamos a nova posição, $\mathbf{x}^{t+\Delta t}$, usando a posição atual $\mathbf{x}^{(n)}$ e a última velocidade calculada $\mathbf{v}^{(t+\frac{1}{2}\Delta t)}$, de acordo com a segunda equação em (2.21).

A evolução do plasma é simulada repetindo-se esse ciclo de cálculos. Como já foi dito, é necessário utilizar um incremento de tempo suficientemente pequeno, que permita resolver as mais altas freqüências características do plasma que está sendo simulado (subseção **2.1.3**), que é usualmente a freqüência plasma-

elétron. O valor para incremento de tempo comumente utilizado é $\Delta t = 0.2\omega_{pe}$ (KRUER, 1988).

O estudo de aplicações de plasmas, como dispositivos e processos baseados em plasma, em geral, requer que números muito elevados de partículas sejam usados, inclusive frequentemente envolvendo geometrias complexas bi e tridimensionais. Devido ao tradicional requisito de alto desempenho para simulações PIC, modelos computacionais paralelos PIC são bastante investigados, encontrando-se na Literatura um histórico expressivo de artigos reportando várias estratégias de paralelização, que serão revisadas na próxima seção.

2.3 Paralelização de modelos PIC

Lubeck e Faber em 1988 propõem uma estratégia para paralelização de programas PIC, referida na literatura como *decomposição estática para partículas e campos*. Nesta abordagem, cada processador é responsável por todas as operações que dizem respeito a um conjunto de partículas e outro de pontos nodais (nós) atribuídos a ele no início da simulação. Este particionamento de partículas e de pontos nodais é fixo, isto significa que não há troca, ou migração, de partículas ou nós entre processadores, sendo que cada processador mantém cópias das informações de campo e das células.

A principal vantagem desta estratégia é que o balanceamento de carga é sempre mantido, ao preço de cada processador replicar as informações concernentes ao campo e às células. Deste modo, a aplicação desta estratégia é condicionada à disponibilidade de memória em cada nó do *cluster*, ou seja, esta estratégia é adequada quando a quantidade de memória requerida pela replicação dos dados não é um fator proibitivo para a arquitetura computacional a ser utilizada.

Nos dias de hoje, arquiteturas paralelas tipo Beowulf, *clusters* de *PCs,* tem a capacidade de memória necessária para aplicação desta abordagem de paralelização. Além da simplicidade da estratégia, a preservação de balanceamento de carga durante a simulação é obtida sem esforço adicional de comunicação entre os nós do *cluster*, o que diminui o tempo total de simulação comparado a uma estratégia com balanceamento dinâmico de carga, discutidas a seguir.

Com o intuito de diminuir a quantidade de informação replicada e diminuir o uso de memória, Walker (1989) propõe que somente a informação nodal de campo, necessárias às partículas atribuídas a cada processador, seja armazenada nos mesmos. Isto diminui a replicação de dados; entretanto, a comunicação entre os nós do cluster aumenta, uma vez que, quando as partículas migram de uma

célula para outra, a interpolação dos valores de campo (efetuada pelo processador encarregado destas partículas) passa a envolver valores nodais que podem estar distribuídos na memória de outros processadores. Segundo Campbell, Carmona e Walker (1990), a eficiência desta técnica é dependente dos padrões de comunicação, os quais são fortemente influenciados pelos critérios usados na distribuição de partículas pelos processadores e pelas características do fenômeno em estudo. Em outras palavras, estes critérios devem levar em conta características físicas do fenômeno e modelo geométrico a fim de que a decomposição de partículas seja feita de forma a otimizar a comunicação entre processadores.

Liewer e Decyk (1989) propõem um dos mais citados algoritmos PIC paralelos, o algoritmo GCPIC (General Concurrent PIC). As partículas e as células são distribuídas independentemente por meio de decomposição de domínio. Uma primeira decomposição espacial que decompõem o domínio de simulação em subdomínios perfeitamente conexos e que contém aproximadamente o mesmo número de partículas. A distribuição de partículas é feita atribuindo a cada processador um destes subdomínios. Analogamente, por meio de uma segunda decomposição espacial distribuímos quase uniformemente os pontos nodais aos processadores. Dado que o tempo de resolução dos campos é proporcional ao número de pontos nodais, este esquema garante o balanceamento de carga durante o cálculo dos campos em cada processador (se a discretização não mudar durante a simulação), o que pode melhorar o desempenho computacional quando o tempo de cálculo dos campos for comparável ao tempo gasto com as interpolações e avanço das partículas. Os processadores são encarregados de proceder com as tarefas necessárias à evolução das partículas que residem (e das que eventualmente saem ou entram) no subdomínio a ele atribuído.

Neste cenário, a migração de partículas de um processador para outro pode levar a expressivo desbalanceamento de carga, e então, algum algoritmo de balanceamento dinâmico de carga pode ser necessário. A necessidade de

empregar-se um algoritmo para balanceamento dinâmico depende de vários fatores, principalmente das características fenomenológicas, como a existência de padrões de concentração de partículas e de direção preferencial de movimento, e computacionais, como a arquitetura computacional.

Considerando que a densidade do número de partículas varia em função do espaço e do tempo, então não haverá necessidade de balanceamento dinâmico em situações nas quais esse valor se mantém aproximadamente constante dentro dos subdomínios ao longo do tempo (isto é, quando as partículas se distribuem uniformemente no domínio durante a simulação); por outro lado, se hover variação temporal forte da densidade de partículas nos subdomínios atribuídos aos processadores, então o uso de algoritmos para balanceamento dinâmico de carga deve ser considerado ponderando-se o custo operacional deste procedimento. Dependendo das dimensões do sistema em simulação e de características dos recursos computacionais a serem utilizados, algoritmos de balanceamento dinâmico podem dar bons resultados, mas pode ser que a escolha por outra estratégia de decomposição seja mais vantajosa, tanto em termos de desempenho quanto de simplicidade implementacional.

Campbel, Carmona e Walker (1990), propõem um esquema de *decomposição hierárquica de domínios com balanceamento dinâmico unitário*, no qual, a decomposição espacial usada para distribuição das partículas é a mesma usada para os pontos nodais, seguindo um critério de decomposição espacial baseado em informações *a priori* da provável evolução do sistema. Ou seja, esta abordagem trata de forma dependente a distribuição de partículas e pontos nodais, e explora peculiaridades do fenômeno físico em estudo.

Os autores propõem o uso desta estratégia em situações físicas nas quais o movimento das partículas tem uma direção preferencial. Além disso, a estabilidade do balanço de carga em cada processador pode ser melhorada com uma decomposição de domínio que seja consistente com os padrões de

concentração de partículas esperados para o fenômeno físico. Por exemplo, se a direção axial, em uma região cilíndrica, for a direção preferencial de movimento das partículas, então, esta é a direção menos preferível para uma decomposição espacial de partículas. O domínio é hierarquicamente decomposto a partir das direções menos favoráveis (ortogonais à direção preferencial) ao movimento das partículas até a direção preferencial de *movimento*, isto é, se houver necessidade de decomposição nesta direção.

Esta é a idéia central da decomposição hierárquica de domínio que reduz a troca de partículas entre processadores usando um esquema de decomposição baseado em informações prévias sobre a evolução da simulação. Estas informações permitem uma implementação paralela em que as partículas ficam mais tempo dentro dos subdomínios de cada processador, uma vez que neste esquema de decomposição as partículas tendem a percorrer a direção longitudinal dos subdomínios.

Combinado a este esquema de decomposição de dados, foi utilizada uma estratégia para balanceamento dinâmico de carga, chamado balanceamento unitário. O balanceamento unitário dinâmico avalia os subdomínios ponderando simultaneamente os custos computacionais associados ao movimento das partículas e ao cálculo do campo, de modo que a razão entre os custos associados ao cálculo do campo e ao das partículas tenda a 1. Situações físicas que envolvem variáveis padrões de concentração de partículas e discretizações não uniformes do domínio de simulação (ou mesmo repetida geração de malha) podem ser situações bastante apropriadas para aplicação deste algoritmo, já que o balanceamento unitário conduz a um balanço médio de tempo de computação para cada processador, muito embora, não necessariamente conduza a um balanço dos números de partículas e de pontos nodais quando considerados isoladamente. Segundo os autores, esta técnica proporciona melhor balanceamento de carga quando comparada a outras técnicas que se baseiam na concentração de partículas do instante de tempo anterior, pelo mesmo custo computacional. Em 2004, Nieter e Cary

empregam esta estratégia para uma implementação orientada a objetos de um modelo PIC.

Em 1993, Ferraro, Liewer e Decyk propõem um algoritmo para balanceamento dinâmico de carga usado com o GCPIC. Neste trabalho, o balanceamento de partículas é realizado dinamicamente reajustando as partições primárias (que distribuem as partículas) sempre que a contagem de partículas de um processador excede um valor limite (*threshold*). Os resultados mostram que o balanceamento dinâmico de carga é necessário somente quando a densidade do número de partículas muda sensivelmente ao logo da simulação, ocasionando desbalanço considerável da carga computacional associada à evolução das partículas nos processadores.

Para uma grande classe de simulações de plasma, uma decomposição espacial estática de partículas, adequadamente escolhida, pode ser tão eficiente quanto a abordagem com balanceamento dinâmico, com a vantagem de ter menor complexidade implementacional.

Em 1995, Decyk publica resultados de experimentações computacionais com *sistemas de escala muito grande* (cerca de 162 milhões de partículas) comparando o desempenho de um Intel Touchstone Delta MIMD com 512 nós (totalizando 6 Gbytes de memória) com o de um Cray mono-processado C90, usando o esquema de balanceamento proposto no trabalho anterior. Neste trabalho também comparam o uso de dois métodos, de Diferenças Finitas e o outro baseado em Transformação de Fourier (usa FFT), para resolução das equações de campo em simulações GCPIC. Segundo os autores, a resolução dos campos pela abordagem de diferenças finitas é significantemente mais eficiente do que a resolução usando FFT em computadores paralelos.

Nos casos em que o número de partículas é muito elevado, concluiu-se que o tempo de cálculo dos campos representa uma parcela muito pequena do tempo de cálculo total em cada *time step*. Nestas condições, o desbalanceamento de

carga durante a resolução dos campos não tem impacto expressivo no tempo total de simulação. Assim, uma mesma decomposição espacial usada para distribuir pontos nodais e partículas aos processadores e um esquema de balanceamento dinâmico, mais simples do que o balanceamento unitário, puderam ser empregados com sucesso (CAMPBELL, 1990). Uma revisão destas estratégias de paralelização de programas PIC pode ser encontrada em Carmona e Chandler (1997) e.

Foram também propostas estratégias para acelerar simulações PIC que envolvem a redução do número de partículas ao longo da simulação, como descrito por Shon et al. (2001). Ao longo da simulação, partículas de mesma espécie e que estão próximas no espaço de fase, em um dado instante de tempo, são convertidas em "superpartículas"¹ de forma consistente com as leis de conservação de massa e energia.

Segundo os autores, esta abordagem é apropriada para simulações de escala muito grande, para as quais o custo de aplicação deste procedimento (que envolve ordenação de partículas) seja suficientemente pequeno comparado com o custo computacional total da simulação. Esta técnica pode ser aplicada em problemas uni, bi e tridimensionais, embora a complexidade de sua aplicação aumente quanto maior a dimensão do sistema. Para os casos avaliados por Shon (2001), o método melhora a acurácia e tem estabilidade crescente à medida que o número de partículas diminui, além de proporcionar menor tempo de processamento.

¹ aqui o termo super-partícula se refere a uma nova espécie de *macropartícula* (partículas do modelo de simulação) originada da junção de *macropartículas* pré-existentes.

Vêm sendo investigadas estratégias para otimização de acesso a memória (TSKHAKAYA e SCHNEIDER, 2007), uma vez que, segundo Boewers (2001), a alta taxa de *cache miss* é freqüentemente um fator limitante ao desempenho computacional de simulações PIC, em particular em computadores de memória compartilhada. O trabalho de Boewers propõe um algoritmo híbrido de contagem e ordenação para este fim. Um algoritmo para contagem e ordenação para este fim. Um algoritmo para contagem e ordenação é acoplado aos principais laços iterativos da simulação PIC a fim de tornar mais eficiente o acesso à memória cache explorando a localidade espacial e temporal dos dados.

Em 2003, Plimpton et al. propõem uma estratégia para balanceamento dinâmico de carga para o GCPIC (LIEWER, 1989) definindo janelas (grupo de células) em subdomínios (provenientes da primeira decomposição espacial para partículas no GCPIC) com excesso de partículas; as tarefas relacionadas às partículas contidas nestas janelas são atribuídas uma a uma aos demais processadores com o intuito de restabelecer o balanço de carga, mas o cálculo dos campos não muda, pois as decomposições espaciais são diferentes para partícula e campo.

A complexidade de gerenciamento dessas janelas pode crescer bastante à medida que o número de janelas aumenta, uma vez que a necessidade de abertura de novas janelas está relacionada com a dinâmica dos padrões de concentração de partículas, se o fenômeno apresentar variações expressivas de padrões de concentração ao longo do tempo, o gerenciamento destas janelas pode consumir tempo computacional significativo. Além disso, quando uma partícula sai do subdomínio de um processador, a determinação do processador encarregado do subdomínio para o qual a partícula migrou pode ficar mais complicada dependendo das estruturas de dados que estiverem sendo utilizadas. Outras estratégias de paralelização usando balanceamento dinâmico vêm sendo investigadas, como em Wolfheimer et al. (2006) e Wu et al. (2007).

O número de possíveis combinações entre estratégias e otimizações de paralelização de simulações PIC é muito considerável. Além disso, não existe uma regra geral; cada simulação particular que executará em uma dada arquitetura e com especificado recurso computacional tem características e limitações que devem ser exploradas convenientemente na busca de melhor eficiência. (DECYK e NORTONB, 2004; DECYK, 2007)

3 CÁLCULO DE CAMPOS ELETROMAGNÉTICOS: O MÉTODO EFG

As orígens dos métodos *meshfree* deram-se há cerca de 30 anos, mas esforços e resultados expressivos para as engenharias e computação ocorreram somente a partir da década de 90. O ponto de partida foi o método "Smooth Particle Hydrodynamics" (SPH) (LUCY, 1977), o qual foi usado na modelagem de problemas da Astrofísica sem contornos, como a explosão de estrelas e nuvens de poeira. Se compararmos com outros métodos, veremos que na década de oitenta foram publicados poucos trabalhos sobre o método SPH, dos quais se destacam dois artigos de Monagham (MONAGHAM, 1988; 1982). Somente na década passada, anos 90, foram publicados importantes estudos propondo técnicas para estabilização, dentre outros aprimoramentos, encontrados em (SWEGLE et al., 1995; JOHNSON e BEISSEL, 1996; LIU et al., 1995)

Ao mesmo tempo, nos anos noventa, uma outra abordagem para construção de métodos meshfree também estava sendo investigada: o uso de aproximações "Moving Least Squares" (MLS). Inicialmente, as aproximantes MLS foram empregadas em trabalhos de ajustes de curvas e superfícies como na publicação de Lancaster e Salkauskas (1981). Nayroles et al. (1992) publicaram em 1992 um método meshfree empregando originalmente o uso de aproximantes MLS em um procedimento de Galerkin, o qual foi chamado de "Método dos Elementos Difusos" (MED). Dois anos depois, Belytschko et al. (1994) propuseram modificações e refinamentos no MED, como o uso de derivadas completas em vez das difusas e o uso de quadratura de ordens mais elevadas para integração das equações discretas, e assim obtiveram maior acurácia. Este método foi chamado de "Element-Free Galerkin" (EFG). Os métodos construídos pela abordagem das aproximantes MLS são consistentes (BELYTSCHKO et al., 1996) e estáveis (KRYSL e BELYTSCHKO, 1997), de consideravelmente mais os SPH apesar caros que (BELYTSCHKO et al., 1994) em termos de desempenho computacional. Uma

boa revisão sobre as principais formulações *meshfree* pode ser encontrada nos trabalhos de Li e Liu (2002) e Liu (2002).

No contexto de simulação de plasmas, diversas situações envolvem, por exemplo, o fenômeno de formação de bainha (*plasma sheats*) (TACCOGNA et al., 2005), regiões de acúmulo de carga e requerem o estudo da dinâmica das mesmas. O estudo destes fenômenos requer repetido processo de refinamento das células do PIC (LAPENTA, 2005; VAY, 2004). Seguindo o modelo PIC-MEF (PAES et al., 2003) descrito no capítulo anterior, o refinamento das células do PIC implica no refinamento da malha de elementos finitos, uma tarefa que pode envolver alto custo computacional.

É neste cenário que métodos *meshfree* vêm se consagrando como uma alternativa numérica bastante promissora em diversas áreas, como mecânica (BELYTSCHKO, 1994), eletromagnetismo (CINGOSKI, 1998; LIU, 2002), magnetohidrodinâmica (VERARDI et al., 2003), quântica (SUGAWARA, 1999, MACHADO et al., 2000). Em particular, desde meados desta década, abordagens *meshfree* para simulação de plasmas vêm destacando-se como metodologias numéricas de grande interesse e notável potencial de aplicação para simulação de plasmas (CHRISTLIEB et al., 2004; CHRISTLIEB et al., 2006; MARQUES et al., 2007b.), alternativas aos métodos baseados em malha.

3.1 Das Equações de Maxwell às Equações Discretas

3.1.1 Formulação Potencial Escalar

Na aproximação eletrostática as equações de Maxwell relativas ao campo elétrico podem ser escritas como:

$$\nabla \times \mathbf{E} = \mathbf{0}$$

$$\nabla \cdot (\varepsilon \cdot \mathbf{E}) = \rho$$
(3.1)

sendo $\mathbf{D} = \varepsilon \cdot \mathbf{E}$ a relação constitutiva. Estas equações vetoriais diferenciais parciais podem ser reduzidas à equação de Poisson, utilizando-se a formulação do potencial escalar (elétrico).

A formulação do potencial escalar (SIMKIN e TROWBRIDGE, 1979), nos permite trocar o cálculo das aproximações para todas as componentes espaciais da variável vetor campo elétrico \mathbf{E} para as equações de Maxwell, pelo cálculo dos valores de uma única variável escalar, o potencial elétrico Φ para a equação de Poisson.

De acordo com a primeira equação em (3.1), o campo elétrico é um campo irrotacional e, como tal, pode ser escrito em função do gradiente de uma função escalar, a saber:

$$\mathbf{E} = -\nabla \Phi(\mathbf{x}) \,. \tag{3.2}$$

Em outras palavras, isto significa que, se o campo elétrico satisfaz à equação anterior, então satisfaz à primeira equação em (3.1). Substituindo a identidade anterior na segunda equação em (3.1), obtemos a equação de Poisson:

$$\nabla \cdot \varepsilon \nabla \Phi(\mathbf{x}) = \rho(\mathbf{x}) \tag{3.3}$$

de modo que, esta equação satisfaz o conjunto de equações em (3.1), com condições de contorno adequadas.

Resolvendo-se a equação de Poisson, i.é. determinando-se o potencial elétrico $\Phi(\mathbf{x})$, podemos calcular o campo usando a relação (3.2).

3.1.2 O método dos resíduos ponderados e a abordagem de Galerkin

O método de Galerkin (MG) é um desdobramento do método dos Resíduos Ponderados (MRP). A idéia central é obter uma aproximação em um espaço funcional gerado por uma base de funções, por meio da minimização do erro da aproximação construída neste espaço funcional. Em outras palavras, a aproximação a ser construída será a projeção ortogonal da solução da equação diferencial parcial no espaço funcional gerado pelas funções de base.

Seja $\{\phi_i(x)\}_{i=1..n}$ uma base de funções para um espaço funcional no qual uma aproximação da função incognita será construída. Seja $\phi(\mathbf{x})$,

$$\Phi(\mathbf{x}) \approx \phi(\mathbf{x}) = \sum_{i=1..n} u_i \cdot \phi_i(\mathbf{x}), \qquad (3.4)$$

uma aproximação para a função incógnita, no nosso caso, o potencial elétrico. Na equação anterior u_i são os coeficientes escalares da representação de $\Phi(\mathbf{x})$ na base $\{\phi_i(x)\}_{i=1..n}$. Neste momento, assumimos que sabemos construir as funções $\phi_i(x)$ da base, as quais serão construídas por outros métodos; nosso interesse aqui é chegar a um sistema de equações discretas, um conjunto de equações lineares cuja solução é uma aproximação para o problema de valor de contorno de Poisson nos pontos de discretização.

Substituimos (3.4) em (3.3) e nas condições de Dirichlet e Neumann associadas ao problema, e como essas equações são apenas aproximadamente satisfeitas, obtemos, respectivamente, as seguintes equações, chamadas de resíduos:

$$R_{1}(\mathbf{x}) = \nabla^{2} \phi(\mathbf{x}) - \rho(\mathbf{x})$$

$$R_{2}(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x}_{\Gamma_{Dir}}) - \phi_{Dir}$$

$$R_{3}(\mathbf{x}) = \frac{\partial \phi(\mathbf{x}_{\Gamma_{Neu}})}{\partial n} - f_{Neu},$$
(3.5)

onde Γ_{Dir} e Γ_{Neu} são os contornos com condição de Dirichlet e Neumann respectivamente.

No MRP escolhemos uma base de funções de ponderação arbitrárias com as quais impomos a ortogonalidade com as funções resíduos. Na abordagem de Galerkin, as mesmas funções $\phi_i(\mathbf{x})$ usadas na base de expansão (3.4) são usadas como funções de ponderação, e dessa forma é imposta a ortogonalidade entre o espaço resíduo e o espaço solução. Em um espaço funcional, a ortogonalidade pode ser imposta fazendo com que o produto interno entre as funções envolvidas seja igual a zero, resultando no seguinte funcional:

$$\int_{\Omega} R_1(\mathbf{x}) \cdot \phi_j(\mathbf{x}) d\omega + \int_{\Gamma_{Dir}} R_2(\mathbf{x}) \cdot \phi_j(\mathbf{x}) d\gamma + \int_{\Gamma_{Neu}} R_3(\mathbf{x}) \cdot \phi_j(\mathbf{x}) d\gamma = 0, \qquad j = 1..n$$
(3.6)

Aplicamos a identidade de Green à primeira integral para reduzir a ordem das derivadas envolvidas, e fazendo considerações adequadas sobre as funções de forma para que as integrais de contorno se anulem, chegamos à seguinte equação íntegro-diferencial:

$$\int_{\Omega} \nabla \phi_j(\mathbf{x}) \cdot \nabla \phi_i(\mathbf{x}) d\omega = \int_{\Omega} \phi_j(\mathbf{x}) \rho(\mathbf{x}) d\omega, \qquad j = 1..n$$
(3.7)

Substituindo a aproximação , $\phi(\mathbf{x})$ dada na equação (3.4), na equação anterior, e minimizando a expressão resultante com respeito aos coeficientes escalares u_i , pode-se chegar à seguinte representação matricial do sistema de equações lineares:

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{b} \,, \tag{3.8}$$

em que $[\mathbf{u}]_i = u_i$ são as incógnitas a serem determinadas, **K**, chamada matriz de rigidez, e **b**, dito vetor de fontes, são dados por:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} \end{bmatrix}_{ij} = \int_{\Omega} \nabla \phi_i(\mathbf{x}) \cdot \nabla \phi_j(\mathbf{x}) d\omega$$
$$\begin{bmatrix} \mathbf{b} \end{bmatrix}_j = \int_{\Omega} \phi_j(\mathbf{x}) \rho(\mathbf{x}) d\omega$$
(3.9)

Uma descrição mais detalhada destes desenvolvimentos pode ser encontrada em Schwarz (1984), Elsgoltz (1969) ou em Marques (2003). Os coeficientes K_{ij} e b_j são calculados resolvendo-se as integrais, comumente empregando-se o método de quadratura de Gauss.

Agora, necessitamos calcular as funções de base para que os coeficientes K_{ij} e b_j do sistema (3.8) possam tambem ser calculados e então, possamos resolver o sistema de equações discretas. O vetor solução do sistema (3.8) corresponde aos escalares u_i da expansão (3.4) que minimizam o erro da aproximação da função potencial escalar $\Phi(\mathbf{x})$ na base $\{\phi_i(x)\}_{i=1..n}$.

3.2 O método Element-Free Galerkin

Apresentaremos aqui a formulação padrão do método element-free Galerkin (MEFG), o qual nos fornecerá as funções que formam a base de expansão $\{\phi_i(\mathbf{x})\}_{i=1..n}$.

Como um método *meshfree* (LIU, 2002), a aproximação pelo método EFG é construída apenas em termos de uma nuvem de pontos, chamados nós, e uma descrição dos contornos do modelo. A conectividade entre os nós, que no método dos elementos finitos é obtida pela malha, é introduzida na formulação deste e de outros métodos *meshfree* por funções peso associadas aos nós.

O método EFG emprega a técnica de aproximação *Moving Least Squares* (MLS) para construir a aproximação da solução da equação diferencial. Essa técnica será utilizada e suscintamente apresentada no desenvolvimento da formulação, mas uma ampla descrição da mesma pode ser encontrada em Lancaster e Salkauskas (1981).

Para construir essa aproximação, três componentes são necessários: uma função peso w_i associada a cada nó, uma base de expansão local (usualmente polinomial) e um conjunto de coeficientes que dependem da posição, sendo que estes últimos são determinados pela técnica MLS.

A função peso deve ter suporte compacto, ou seja, ela deve ser diferente de zero somente em uma pequena vizinhança (ou subdomínio) do nó a que ela está associada. Este subdomínio é chamado de suporte da função peso e está associado diretamente ao caráter local da aproximação e à esparsidade do sistema de equações discretas obtido pelo método de Galerkin. O suporte da função peso define o domínio de influência do nó, que é o subdomínio sobre o qual um ponto particular contribui para a aproximação no nó em questão. Dessa forma, a conectividade nodal é estabelecida pela superposição dos

domínios de influência dos nós. A figura 3.1 ilustra um ponto particular de avaliação **x** "conectado" a três pontos nodais: **x**₁, **x**₂, e **x**₄.



Figura 3.1 A conectividade nodal em um ponto de avaliação x, o elemento difuso.

Uma característica atrativa desta técnica de aproximação é que a continuidade da aproximação está fortemente relacionada à continuidade da função peso escolhida, de modo que, mesmo sendo a continuidade da base local MLS menor que a da função peso, a aproximação resultante terá a continuidade da função peso. Sendo assim, uma base polinomial de ordem baixa (como por exemplo uma base linear) pode ser usada resultando em aproximações altamente contínuas dependendo da função peso escolhida.

3.2.1 Formulação padrão do MEFG

A técnica de aproximação utilizada pelo método EFG, proposto por Belytschko *et al.* (1994), é a das aproximantes MLS. Esta técnica de aproximação foi inicialmente usada por Lancaster e Salkauskas (1981) em problemas de ajuste de curvas e superfícies. Nayroles *et al.* (Nayroles, 1992) empregaram essa mesma técnica na formulação conhecida como elementos difusos e dois anos depois, em 1994, Belytschko *et al.* (1994) propõem o método EFG.

Suponha que estamos interessados em construir uma função $u^{h}(\mathbf{x})$ em um domínio Ω , que aproxime a solução exata, $u(\mathbf{x})$, de uma dada equação diferencial parcial. Esta aproximação é construída com base em um conjunto de *N* pontos nodais, $\mathbf{x}_{i} \in \Omega$, provenientes da discretização do domínio Ω . A

cada ponto nodal \mathbf{x}_i é associda uma função de ponderação $w(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}\|) \equiv w_i(\mathbf{x})$, e um parâmetro de aproximação u_i , que controla a influência dos pontos nodais na aproximação, chamados de parâmetros nodais. Estes últimos são as incógnitas do sistema de equações discretas (equação (3.8)) obtidas após a aplicação do método de Galerkin. As funções de ponderação devem atender às seguintes características: não-negativas, decrescer à medida que $\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}\|$ cresce, ter norma unitária e suporte compacto Belytschko (1994). Uma aproximação local *moving least-squares* (MLS) para $u^h(\mathbf{x})$ pode ser escrita da seguinte forma:

$$u^{h}(\mathbf{x},\overline{\mathbf{x}}) = \sum_{j=1}^{m} p_{j}(\mathbf{x}) \cdot a_{j}(\overline{\mathbf{x}}) \equiv \mathbf{p}^{T}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{a}(\overline{\mathbf{x}}), \qquad (3.10)).$$

onde $\mathbf{p}^T(\mathbf{x})$ forma uma base polinomial completa no espaço das coordenadas com cardinalidade igual a *m*, e os coeficientes $\mathbf{a}(\mathbf{x})$ da expansão local são as incógnitas a serem determinadas. Geralmente, $\mathbf{p}^T(\mathbf{x})$ é uma base polinomial linear, isto é, $\mathbf{p}^T(\mathbf{x}) = [1, x, y]$ com m = 3, no caso bidimensional.

Precisamos determinar os coeficientes $\mathbf{a}(\mathbf{x})$ que minimizam o erro entre a aproximação local MLS e os parâmetros nodais u_i , supondo que estes últimos são conhecidos. Define-se uma norma quadrática ponderada do erro entre a aproximação local e os parâmetros nodais, dada por:

$$J(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} w \left(\left\| \mathbf{x} - \mathbf{x}_i \right\| \right) \cdot \left[\mathbf{p}^T \left(\mathbf{x}_i \right) \cdot \mathbf{a}(\mathbf{x}) - u_i \right]^2.$$
(3.11)

Seja *n* o número de pontos nodais na vizinhança do ponto de avalaliação **x** cujas funções de ponderação associadas diferem de zero em **x**. Como normalmente $n \ll N$, a grande parte dos termos do somatório em (3.11) são anulados pelas funções peso.

Minimizando a norma em (3.11), com respeito aos coeficientes a(x) da expansão MLS, obtemos:

$$\frac{\partial J}{\partial a_j} = 0, \quad j = 1..m \tag{3.12}$$

Após razoável manipulação algébrica, cujo detalhamento pode ser encontrado em Marques (2003), pode chegar-se à seguinte equação matricial:

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{a}(\mathbf{x}) = \mathbf{B}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u} \tag{3.13}$$

em que foram definidas as matrizes A e B, dadas por:

$$\mathbf{A} = \mathbf{P}\mathbf{W}\mathbf{P}^T$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{P}\mathbf{W},$$
 (3.14)

sendo as matrizes **P** e **W**, respectivamente, construídas a partir dos monômios da base polinomial linear e das funções peso,

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} p_{1}(\mathbf{x}_{1}) & p_{1}(\mathbf{x}_{2}) & \cdots & p_{1}(\mathbf{x}_{N}) \\ p_{2}(\mathbf{x}_{1}) & p_{2}(\mathbf{x}_{2}) & \cdots & p_{2}(\mathbf{x}_{N}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{m}(\mathbf{x}_{1}) & p_{m}(\mathbf{x}_{2}) & \cdots & p_{m}(\mathbf{x}_{N}) \end{pmatrix}, \\ \mathbf{W} = \begin{pmatrix} w_{1}(\mathbf{x}) & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & w_{2}(\mathbf{x}) & \vdots & 0 \\ 0 & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & w_{N}(\mathbf{x}) \end{pmatrix}.$$
(3.15)

Partindo de (3.13), e admitindo a existência de $A^{-1}(x)$, podemos escrever os coeficientes a(x),

$$\mathbf{a}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u} \,. \tag{3.16}$$

Existem situações em que a inversibilidade de A pode não ser possível. Essas situações ocorrem quando não é atendida a condição $n \ge m$ (BELYTSCHKO, 1996) em um dado ponto de avaliação **x**, ou quando a distribuição local dos pontos nodais que participam da aproximação no ponto de avaliação é patológica com respeito à base polinomial usada.
Para atender $n \ge m$, o número mínimo de nós a serem incluídos é, neste caso particular, n=3. Por exemplo, para uma base polinomial quadrática, m=6, devemos ter $n \ge 6$, isto é, pelo menos 6 nós devem ter seus domínios de influência sobrepondo o ponto de avaliação **x** para evitar o mal condicionamento de **A.** Por outro lado, não existe um limite superior quanto ao número *n* de nós, contudo este limite deve ser ponderado pelo custo computacional associado à inversão da matriz **A**.

Infelizmente, garantir um número mínimo de nós participantes da aproximação em um ponto de avaliação arbitrário não é suficiente para garantir o bom condicionamento da inversa de **A** neste ponto. É preciso também assegurar que os *n* nós não estão distribuídos próximos de um padrão patológico com respeito à base polinomial. Por exemplo, no caso de usarmos uma base polinomial linear e ocorrer dos nós participantes da aproximação no ponto **x** estarem distribuídos colinearmente (o que tornaria **A** singular), ou próximo de colineares, então **A** ficará mal condicionada. Analogamente, se empregarmos uma base polinomial quadrática, o padrão patológico será o caso de uma distribuição nodal local próxima de uma circunferência, no caso bidimensional. A figura a seguir ilustra estes dois casos.



Figura 3.2 Padrões patológicos de distribuição nodal.

Vale enfatizar que estas situações patológicas são casos limite onde a aproximação não pode ser efetuada, e que quando o padrão de distribuição local dos nós tende ao padrão patológico, então **A** fica mal condicionada

podendo introduzir erros numéricos. Marechal (2001) sugere que os pontos nodais estejam distribuídos em todas as direções para se evitar o mal condicionamento de **A**.

Substituindo (3.16) em (3.10), obtemos:

$$u(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{\substack{j=1\\ j=1}}^{m} p_j(\mathbf{x}) (\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x}))_{ji} \cdot u_i$$
$$= \sum_{i=1}^{n} \phi_i(x) \cdot u_i$$
(3.17)

onde foram definidas as funções de forma $\phi_i(\mathbf{x})$ por:

$$\phi_i(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^m p_j(\mathbf{x}) (\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x}))_{ji} .$$
(3.18)

Como vimos na seção anterior, além das funções de forma necessitaremos de suas derivadas para calcular os coeficientes \mathbf{K}_{ij} em (3.9) do sistema de equações discretas. A derivada espacial das funções de forma com respeito a *x* podem ser escritas como:

$$\frac{d\phi_i(\mathbf{x})}{dx} = \frac{d\mathbf{p}^T}{dx} \mathbf{A}(\mathbf{x})^{-1} \mathbf{B}(\mathbf{x}) + \mathbf{p}^T \frac{d\mathbf{A}(\mathbf{x})^{-1}}{dx} \mathbf{B}(\mathbf{x}) + \mathbf{p}^T \mathbf{A}(\mathbf{x})^{-1} \frac{d\mathbf{B}(\mathbf{x})}{dx}, \quad (3.19)$$

e analogamente para a derivada parcial com respeito à coordenada y.

Resta dizer que as funções de forma $\phi_i(\mathbf{x})$ satisfazem o critério de partição de unidade (Babuska e Melenk, 1996; BREITKOPF et al, 1998), ou seja,

$$\sum_{i=1}^{n} \phi_i(\mathbf{x}) = 1.$$
 (3.20)

As funções do MEFG obtidas pela abordagem padrão (BELYTSCHKO et al., 1994) não satisfazem o critério do delta de Kronecker, isto é, $\phi_i(\mathbf{x}_j) \neq \delta_{ij} = \begin{cases} 1, i = j \\ 0, i \neq j \end{cases}$, e por isso, $\phi(\mathbf{x}_i) \neq u_i$, ou seja, os parâmetros nodais não correspondem aos valores nodais. Isso dificulta a imposição de condições de contorno de Dirichlet. No entanto, a escolha por funções peso singulares (BREITKOPF et al., 2000; MARQUES, 2003; VERARDI et al., 2003;) faz com que as funções de forma passem a satisfazer o referido critério.

Na próxima subseção falaremos mais detalhadamente sobre a escolha de funções peso e o ajuste dos domínios de influência, dada a grande influência destes elementos na qualidade da aproximação.

3.2.2 A função peso e os domínios de influência

A função peso, $w(||\mathbf{x} - \mathbf{x}_i||)$, é um ingrediente importante na formulação do método EFG, e está presente na definição das funções de forma e suas derivadas (equações (3.18) e (3.19)) implicitamente pelas matrizes \mathbf{A}^{-1} e **B**. Observando-se a equação (3.11) podemos interpretar o papel das funções peso na aproximação. Elas ponderam ou controlam a influência dos nós vizinhos a um ponto de avaliação **x** na aproximação, ou em outras palavras, elas controlam as contribuições locais a um ponto.

A condição de compacidade² das funções peso tem um papel crucial com relação ao custo computacional do método, pois é o que controla a esparsidade do sistema de equações discretas. Assim, se a definirmos de modo que a aproximação inclua apenas um número suficiente e adequado de nós, estaremos também preservando a esparsidade (HÄUSSLER-COMBE. e KORN, 1998) do sistema.

² Dizemos que uma função *f*(*x*) tem suporte compacto em um domínio Ω quando *f* é diferente de zero apenas em um pequeno subdomínio $\Omega_s \subset \Omega$.

Dentro da classe de funções que atendem às propriedades requeridas para as funções peso, podemos ainda selecionar subclasses de funções que tenham outras características que forem desejáveis. Para melhor ilustrar como as funções peso afetam a aproximação, serão discutidos suscintamente três casos ilustrados por Ted Belytschko e John Dolbow (1998).

Consideremos um domínio Ω unidimensional [0,1], por simplicidade e com os nós igualmente espaçados por 0.1. Se tomarmos $w_i(\mathbf{x}) = 1$ em todo o domínio Ω , então o processo de minimização em um ponto de avaliação $\mathbf{x} \in \Omega$, incluirá todos os nós do domínio. Desta forma, a aproximação MLS com uma base polinomial linear resultará numa aproximação linear em todo o domínio (mesma continuidade da base), já que os coeficientes $\mathbf{a}_j(\mathbf{x})$ serão constantes em todo o domínio. A figura a seguir ilustrada essa situação.



Figura 3.3 À esquerda o gráfico da função peso constante sem suporte compacto. À direita a aproximação resultante. Adaptada do trabalho de Belytschko e Dolbow (1998).

No segundo caso, tomemos $w_i(\mathbf{x}) = 1$ somente em uma região pequena centrada em cada nó, o que equivale dizer, que $w_i(\mathbf{x})$ tem *suporte compacto*, digamos

$$w_i(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\| \le 0.1 \\ 0, & \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\| > 0.1 \end{cases}$$
(3.21)

Com esta escolha, o tamanho dos domínios de influência é tal que, em cada ponto de avaliação **x**, apenas dois nós são incluídos para a aproximação (n = m = 2). Assim como no caso anterior, a aproximação obtida é linear, semelhante a uma aproximação de primeira ordem do MEF. O que mudou com a imposição da condição de compacidade da função peso, foi que demos um caracter local à aproximação, o que pode ser observado na figura 3.4.



Figura 3.4 À esquerda, a função peso constante com suporte compacto. À direita, a aproximação resultante. Adaptada do trabalho de Belytschko e Dolbow (1998).

Por último, tomemos funções peso com suporte compacto, mas em vez de constantes, sejam estas funções suaves com domínios de influência um pouco maiores, tais que n > m, e de classe de continuidade superior a C^1 . Note-se que a mesma base polinomial linear foi usada em todos os casos, evidenciando a decisiva influência das funções peso. A aproximação obtida é bastante suave e contínua, como mostrada pela figura 3.5.



Figura 3.5 À esquerda o gráfico da função peso suave e compacta, e à direita a aproximação resultante. Adaptada do trabalho de Belytschko e Dolbow (1998).

Assim, se, por exemplo, usarmos como função peso a função de Schwarz que é de classe de continuidade C^{∞} , a aproximação fornecida pelo MEFG será de classe C^{∞} . Isto significa que a variável de estado (potencial elétrico) e suas derivadas (campo elétrico) serão funções suaves de classe C^{∞} , apesar de termos empregado uma base local MLS polinomial de primeira ordem. Diferentemente, quando empregamos MEF de primeira ordem, utilizamos também uma base polinomial linear para construir a aproximação local, mas que resulta, no interior dos elementos finitos, em uma aproximação local, mas a variável de estado (potencial elétrico) e em um campo médio constante para sua primeira derivada (campo elétrico), ou seja, no interior de cada elemento finito o potencial elétrico é aproximado por uma função linear (classe C^1) e o campo elétrico por uma função constante (classe C^0).

3.2.3 Topologias dos domínios de influência

Dependendo da maneira que as funções peso são definidas, obtemos diferentes topologias para os domínios de influência. Será apresentada agora uma discussão sobre como são definidas as funções peso, as topologias dos

domínios de influência resultantes da definição, dentre outros aspectos relevantes na sua implementação.

Domínios de Influência Esféricos

Os domínios de influência esféricos, num caso geral bi ou tridimensional, são obtidos quando definimos as funções peso em função da distância normalizada r entre o ponto de avaliação \mathbf{x} e o ponto nodal (nó) \mathbf{x}_I ao qual a função peso está associada, isto é,

$$w_I(\mathbf{x}) = w(r) \tag{3.22}$$

onde $w: \Re^+ \to [0, 1], r = \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_I\|}{d_{mI}}$ é o raio normalizado e d_{mI} é o raio de alcance do domínio de influência do nó *I*, conforme ilustrado pela figura abaixo.



Figura 3.6 Domínio de influência circular.

Com esta definição, o domínio de influência do nó *I* fica definido como uma circunferência no caso bidimensional ou uma esfera no caso tridimensional.

O valor do parâmetro d_{mI} , chamado de raio de influência médio, deve ser calculado de modo que um número suficiente de nós vizinhos sejam incluídos para que seja possível a inversão da matriz **A**. A determinação dos d_{mI} depende de como os pontos estão distribuídos ou espaçados no domínio Ω .

Para domínios cuja distribuição de pontos foi gerada aleatoriamente, o ajuste destes coeficientes pode ser uma tarefa difícil. Vários algoritmos podem ser empregados para geração de pontos para aplicação de métodos *meshfree*, contudo, deve ser considerado o custo de se realizar uma operação de busca pelos nós em uma dada vizinhança. Alguns algoritmos mantêm informações oriundas da geração dos pontos que podem ser utilizadas para tornar mais eficiente a freqüente tarefa de busca, bem como para o ajuste do raio de influência médio (LÖHNER e OÑATE, 1998). Utilizamos uma abordagem semelhante na implementação do MEFG no sistema Levsoft (ABE et al., 2002), empregamos as informações da malha de Delaunay (usada para gerar os pontos de discretização) para ajustar os raios dos domínios de influência nodais.

Domínios de Influência Paralelepipedais

Os domínios paralelepipedais se distinguem dos domínios esféricos pela forma com que as funções peso são definidas. As funções peso com topologias paralelepipedais são chamadas de funções peso de produto-tensorial, o que se deve à forma algébrica com que são definidas. Os domínios esféricos são obtidos definindo as funções peso diretamente em função dos raios de influência dos suportes dos nós (domínios de influência), enquanto que nos paralelepipedais definimos as funções peso na forma de um produto tensorial. O que fazemos é definir as funções peso como o produto de funções peso aplicadas em cada direção,

$$w_I(x) = w(S_x) \cdot w(S_y) \cdot w(S_z)$$
(3.23)

onde $S_x = \frac{|x - x_i|}{d_{mI_x}}$, $S_y = \frac{|y - y_i|}{d_{mI_y}}$ e $S_z = \frac{|z - z_i|}{d_{mI_z}}$ no caso tridimensional. Os raios

médios em cada direção espacial, $d_{mI_{-}}$, correspondem à metade do comprimento de cada respectivo lado do paralelepípedo que define o domínio de influência do nó. O ajuste deste parâmetro será discutido no contexto da implementação computacional. Para obter a expressão correspondente ao

caso bidimensional basta desconsiderar o termo dependente de *z*. A figura seguinte ilustra o caso de um domínio de influência retangular (bidimensional).



Figura 3.7 Domínio de influência retangular.

As funções peso paralelepipedais são de particular interesse por apresentarem um melhor desempenho computacional (BELYTSCHKO e KRYSL, 2001), dado que o problema de inclusão, isto é, verificar se um ponto de avaliação **x** está ou não dentro de um domínio de influência Ω_I é mais fácil para um domínio retangular do que para um circular.

3.3 Tratamento de meios heterogêneos

Apesar da variável de estado, o potencial escalar elétrico, ser uma função contínua em todo o domínio inclusive nas proximidades de interfaces materiais, suas derivadas espaciais, componentes do vetor campo elétrico, podem não ser funções contínuas ao cruzar uma interface material. De fato, materiais com propriedades físicas diferentes provocam um salto, ou descontinuidade, em uma componente específica do campo ao cruzar a interface entre os materias, de acordo com a natureza do fenômeno e a propriedade física dos materiais envolvidos. Em termos matemáticos, a função propriedade material denotada por $\varepsilon(x, y)$ na equação de Poisson (3.3) é uma função descontínua ao longo das interfaces materiais.

No entanto, a aproximação construída pelo MEFG utilizando como função peso a função de Schwarz truncada é de classe C^{∞} , e suas derivadas serão, naturalmente, contínuas e diferenciáveis em todo o domínio. Uma dentre as várias técnicas para tratamento de descontinuidades (KRONGAUZ e BELYTSCHKO, 1996; CORDES e MORAN, 1996; KRYSL e BELYTSCHKO, 1997; KRONGAUZ e BELYTSCHKO, 1998; HERAULT e MARECHAL, 1999; LIU, 2002; MARQUES et al., 2005a) deve ser empregada a fim de que o MEFG forneça aproximações que descrevam corretamente as descontinuidades esperadas pela física do problema.

Para efeito de ilustração, considere o gráfico (Figura 3.8) dos valores da componente do campo elétrico normal à interface material sobre uma linha de avaliação que cruza a interface material, e que obedece a seguinte relação física de descontinuidade ao passar do meio 1 para o meio 2:

$$\sigma_1 E_{1n} = \sigma_2 E_{2n}, \qquad (3.24)$$

em que E_{1n} e E_{2n} representam a componente normal do campo elétrico nos pontos *x1*, pertencente ao meio 1, e *x2*, pertencente ao meio 2, ambos bastante próximos da interface material, e σ_1 e σ_2 são os valores das propriedades físicas dos meios 1 e 2, respectivamente. O não tratamento destas descontinuidades pelo modelo numérico leva a oscilações espúrias, que podem ser observadas pelo gráfico pontilhado na Figura 3.8.

Com pequenas modificações a técnica de truncamento de domínios de Cordes e Moran (1996) foi utilizada com sucesso em uma abordagem interpolante do MEFG (MARQUES, 2003), tendo fornecido excelentes resultados globais e locais, mesmo para domínios envolvendo materiais com propriedades físicas consideravelmente distintas (MARQUES et al., 2007a; MARQUES et al., 2005a).



Figura 3.8 Descontinuidade física esperada para o campo (linha contínua) ao cruzar a interface entre dois materiais e oscilações espúrias típicas (linha pontilhada).

Os domínios de influência dos nós pertencentes a um dado meio material são levados em conta apenas no cálculo da aproximação em pontos que pertencem ao mesmo meio material, e são desconsiderados (truncados) no caso do ponto de avaliação pertencer a um material com propriedade física diferente.

As aproximações assim construídas em cada *subdomínio material* são conectadas pelos nós sobre a interface material, os quais devem ter suas contribuições de aproximação consideras independentemente do material em que se encontra o ponto de avaliação. Uma descrição detalhada sobre a implementação dessa abordagem interpolante do MEFG com a técnica de truncamento pode ser encontrada em Marques et al. (2007a).

Não é imposta nenhuma restrição adicional ao sistema de equações (3.8) relativa à condição de interface. Os multiplicadores de Lagrange usados por Cordes e Moram (1996) não são mais requeridos devido o carater interpolante da abordagem empregada (MARQUES, 2003). O livro *Meshfree Methods, moving beyond the finite element method* de Liu (2002) apresenta uma descrição detalhada sobre as várias técnicas numéricas que podem ser empregadas para o tratamento de meios heterogêneos no contexto do MEFG.

É importante observar que o truncamento de domínio implica na redução do número de nós participantes da aproximação em pontos de avaliação próximos à interface material, o que pode alterar indesejavelmente o condicionamento da matriz **A** em (3.18). Dessa forma, a conectividade nodal, isto é, o número de nós participantes da aproximação em um ponto nas proximidades das interfaces materiais deve ser, eventualmente, inspecionada, já que valores um pouco maiores para seus raios de influência podem ser necessários.

3.4 Montagem do sistema de equações discretas

Agora que sabemos como construir a base de funções de forma do MEFG, necessária para cálculo dos coeficientes das equações discretas por este método, discutiremos o procedimento de montagem da matriz de rigidez **K** e do vetor de fontes **b** dados em (3.8). Primeiramente, precisamos calcular as integrais que definem estes coeficientes, e para isto usaremos o método de quadratura de Gauss.

A aplicação do método de quadratura de Gauss requer uma estrutura de células de integração como uma cobertura sobre o domínio, em outras palavras, uma malha. Os pontos vértices dessas células podem, ou não, coincidir com os pontos nodais do MEFG, e ainda respeitarem ou não as interfaces materiais se houverem. A decisão quanto aos vértices das células coincidirem ou não com os pontos nodais é arbitrária, no entanto, a presença de células de quadratura "divididas" por interfaces materiais, isto é, uma parte da célula está em um material e outra parte em outro material, pode comprometer a precisão da aproximação (CORDES e MORAN, 1996).

Temos empregado com sucesso (MARQUES et al., 2005a; MARQUES et al., 2007a) vértices de células de integração coincidentes com os pontos nodais do MEFG e respeitando as interfaces materiais. A partir de uma malha fornecida pelo gerador de malha de Delaunay do sistema Levsoft, usamos os vértices da malha como sendo os pontos de discretização para o MEFG e os elementos da malha são empregados como células de integração.

Seja $f(x, y) \in \Omega_C$ uma função conhecida em uma dada subregião, uma célula de integração, então a integral de f(x, y) em Ω_C pode ser aproximada pela soma:

$$\int_{\Omega_C} f(x, y) dx dy = \sum_{i=1}^{NG} \omega_i \cdot f(x_i, y_i) \cdot \|\mathbf{J}\|,$$
(3.24)

onde x_i e y_i são os pontos de Gauss, ω_i são os pesos de Gauss associados aos pontos de Gauss e **J** é a matriz de transformação (mudança de coordenadas) da célula real de integração Ω_C para a célula de referência.

Existe uma parcela de soma (3.24) associada a cada ponto de Gauss para cada par de nós cujos domínios de influência incluam o ponto de Gauss. Seja um ponto de Gauss \mathbf{x}_G , pertencente à intersecção de três domínios de influência, $\mathbf{x}_G \in \Omega_{\phi 1} \cap \Omega_{\phi 2} \cap \Omega_{\phi 3}$ em um mesmo meio material. As integrais envolvendo as funções de forma ϕ_1, ϕ_2 e ϕ_3 serão aproximadas por uma soma de termos na qual um desses termos será, certamente, relativo ao ponto de Gauss \mathbf{x}_G em questão. Por exemplo, calculamos a parcela de soma relativa a este ponto de Gauss da aproximação da integral cujo integrando envolve as funções de forma ϕ_1 e ϕ_2 , e adicionamos esta contribuição (parcela de soma) na posição (1,2) da matriz de rigidez do sistema de equações discretas. Fazemos o mesmo para as outras integrais que envolvem as funções de forma ϕ_1, ϕ_2 e ϕ_3 , e ao final, todas as contribuições integrais relativas ao ponto de Gauss \mathbf{x}_G terão sido acumuladas na matriz de rigidez **K** (3.8).

Dessa forma, para cada ponto de Gauss construímos uma lista de nós $l_G = \{I : \mathbf{x}_G \in \Omega_{\phi_I}\}$,cujos domínios de influência incluem o ponto de Gauss e que pertencem ao mesmo meio material do ponto de Gauss em questão. Se o domínio de influência de um nó localizado em um meio material diferente do meio material do ponto de Gauss, a contribuição deste ponto nodal à aproximação naquele ponto de integração é truncada, de acordo com a técnica de truncamento de domínios de influência. Calculamos as parcelas de soma do ponto de Gauss em questão para cada integral cujo integrando envolva somente funções de forma ϕ_K e ϕ_L , em que $K, L \in l_G$, e adicionamos esta parcela de soma à entrada (K,L) da matriz do sistema de equações discretas (3.8).

Após este procedimento sobre cada ponto de Gauss, teremos determinado numericamente os coeficientes da matriz do sistema de equações discretas. O lado direito do sistema de equações é calculado de modo análogo.

3.5 Imposição de condições de contorno de Dirichlet

Muitas técnicas tem sido usadas para impor condições de contorno de Dirichlet no MEFG, também chamadas de condições essenciais, como Multiplicadores de Lagrange originalmente usada neste contexto por Belytschko et al. (1994), e relacionadas (MUKHERJEE, outras abordagens 1997), (HO, 2001), (XUAN, 2004), Princípios Variacionais Modificados (HERAULT et al., 1999), Penalidades Liu (2003), Liu et al. (2004) e Zhang et al. (2005), ou mesmo o acoplamento com o MEF (KRONGAUZ, 1996). As principais desvantagens no uso dessas técnicas estão relacionadas ao ajuste de parâmetros numéricos livres adicionais, aumento do número de incógnitas do sistema de equações e o fato da matriz de rigidez deixar de ser positiva definida. Liu (2003) apresenta uma descrição detalhada sobre o tratamento de condições de contorno com o método Element Free Galerkin.

Como já dissemos, se empregarmos funções peso singulares as funções de forma resultantes irão satisfazer ao critério de Kronecker e fornecerão uma aproximação interpolante, o que equivale dizer que os valores das variáveis nodais (parâmetros nodais no MEFG) correspondem aos valores da variável de estado, $\phi(\mathbf{x}_i) = u_i$. O caráter interpolante da aproximação é desejável particularmente porque simplifica a imposição de condições de Dirichlet, permitindo-nos usar o método de substituição direta, da mesma forma que no MEF. Caso contrário, em que a aproximação não é interpolante, outras técnicas devem ser usadas para imposição das condições de Dirichlet, como Multiplicadores de Lagrange (BELYTSCHKO, 1994) ou o método de Penalidades, conforme discutido em (LIU, 2002; MARQUES *et al.*, 2007; XUAN *et al.*, 2004; HERAULT e MARECHAL, 1999).

Para um sistema de equações genérico,

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{b} \tag{3.25}$$

onde $\mathbf{A} \in \mathfrak{R}^{n \times n}$ e $\mathbf{u}, \mathbf{b} \in \mathfrak{R}^n$, análogo às equações discretas em (3.8), suponha que os parâmetros nodais $u_{k0}, u_{k1}, \dots, u_{km}$ estão associados a pontos sobre uma fronteira com condição de Dirichlet igual a ϕ_0 , isto é, $u_{k0} = u_{k1} = \dots = u_{km} = \phi_0$. Para cada u_{kJ} fazemos:

$$\mathbf{A}_{kJ,kJ} = 1,$$

$$\mathbf{A}_{kJ,i} = 0, \quad \forall i \neq kJ,$$

$$\mathbf{b}_{kJ} = \phi_0,$$

$$\mathbf{b}_i = \mathbf{b}_i - \mathbf{A}_{i,kJ} \cdot \phi_0, \quad \forall i \neq kJ,$$
(3.26)

onde $A_{i,j}$ denota o elemento da *i*-ésima linha e *j*-ésima coluna de A, e b_i representa a *i*-ésima componente de **b**.

De fato, nenhuma equação ou ajuste de parâmetro adicional ocorre, e a matriz de rigidez tem sua característica positiva definida preservada. O número de dimensões livres (número de incógnitas) do sistema de equações discretas é reduzido pela substituição dos valores das condições de contorno especificadas nas variáveis nodais correspondentes.

A condição de Dirichlet é satisfeita apenas pontualmente nos nós sobre o contorno, de modo que uma boa discretização nos contornos sob condição essencial pode prevenir pequenas oscilações numéricas ao longo dos contornos de Dirichlet (MARQUES et al., 2007; MARQUES et al., 2005; VERARDI et al., 2003).

4 O MODELO PARTICLE-IN-DIFFUSE-CELL

Tradicionalmente os códigos de simulação de plasmas PIC empregam métodos de diferenças finitas (MDF) ou espectrais (Transformada Rápida de Fourier - FFT) para resolução da equação de Poisson, e mais recentemente, vem sendo usado o acoplamento PIC-FEM que incorpora o método dos elementos finitos no modelo PIC (PAES et al., 2003; NAM et al., 2005; KAFAFY e WANG, 2006; WU et al., 2007) dadas as conhecidas vantagens do MEF no que diz respeito ao tratamento de geometrias mais complexas, e acurácia no tratamento de equações diferenciais parciais elípticas e parabólicas quando comparado ao MDF (TAJIMA, 1989; PAES, 2003). Por outro lado, existem muitas situações que podem demandar esforço computacional considerável gasto com sucessivos refinamentos locais da malha necessária a aplicação MEF, e nestes casos, formulações *meshfree*, como o MEFG e o PIDC, representam uma boa alternativa numérica, especialmente para problemas envolvendo geometrias complexas tridimensionais.

Tanto os métodos de diferenças finitas e dos elementos finitos quanto o método Element-Free Galerkin são métodos classificados como métodos de partição de unidade (MELENK e BABUSKA, 1996). Em linhas gerais, estes métodos diferem na forma com que a aproximação para a variável de estado é construída, resultando em diferentes acoplamentos com o modelo PIC. O ponto central destes acoplamentos é a estrutura de células.

4.1 A Célula Difusa

Nos modelos de simulação PIC não-colisionais, a estrutura de células desempenha dois papéis no ciclo de simulação: fornece uma rede de pontos de discretização (pontos nodais) para resolução da equação de Poisson e as próprias células usadas para a interpolação da função densidade de carga. Em outras palavras, independentemente de sua forma geométrica, as células

servem como estrutura auxiliar para interpolação da densidade de carga das partículas, e seu espaçamento é definido em função de parâmetros do plasma.

Concernente à resolução da equação de Poisson, no caso de empregar-se MDF, os vértices das células são usados como pontos de discretização do domínio, e a informação de conectividade da estrutura de células é reutilizada para compor as chamadas moléculas computacionais na montagem do sistema de equações de diferenças finitas. Em se tratando do acoplamento PIC-FEM, as células do modelo PIC coincídem com os próprios elementos finitos, conseqüentemente, os vértices das células são os pontos nodais, e desse modo, a informação de conectividade da estrutura de células é totalmente aproveitada pelo método de resolução do campo.

Por outro lado, no método Element-Free Galerkin não são usadas estruturas geometricamente tão bem definidas na construção da aproximação, como as que são usadas no MEF e no MDF, ou seja, no método EFG não existem elementos finitos (elementos de malha geometricamente regulares, conexos e não intersectantes) nem moléculas computacionais que permitam uma reutilização ou mesmo uma associação direta entre a nuvem de pontos que discretiza o domínio com a estrutura de células do modelo PIC. Isto ocorre porque o conjunto de nós envolvidos na aproximação é muito variável e depende da localização do ponto de avaliação; diferentemente, a aproximação do MEF em um dado ponto de avaliação, é calculada localizando-se o elemento finito que contém o ponto de avaliação, uma vez que o conjunto de nós que participarão da aproximação serão os nós vértices do elemento finito³.

³ No caso de elementos finitos de ordem superior a 1, nem todos os nós associados ao elemento finito serão vértices, mas todos participarão da aproximação em qualquer ponto no interior do elemento finito.

Em outras palavras, o elemento finito que contém o ponto de avaliação **x** determina o conjunto de funções de forma que participarão do cálculo da aproximação em qualquer ponto no interior do elemento. Reciprocamente, as funções de forma que participam da aproximação em um dado ponto estão associadas aos nós do elemento finito que contém o ponto de avaliação.

Usando este racioncínio, no contexto do MEFG, as funções de forma que participam da aproximação em um dado ponto de avaliação **x**, definem os nós do, então chamado, *elemento difuso* (NAYROLES et al., 1992).

O conceito de elemento difuso surgiu no trabalho de Nayroles et al (1992) na proposição do Método dos Elementos Difusos como uma generalização do Método dos Elementos Finitos. Contudo, este método se popularizou dois anos depois, com o nome de Element Free Galerkin, a partir do artigo de Belytschko et al. em 1994, como discutido no capítulo anterior. O conceito de elemento difuso não se popularizou com o MEFG, de modo que esta terminologia não é empregada na grande maioria de artigos que utilizam o MEFG até os dias de hoje. Mas, quais são as condições necessárias para que um elemento difuso desempenhe corretamente o papel da célula na modelagem física do modelo de simulação de plasmas PIC?

Como discutido anteriormente sobre a modelagem física do plasma no modelo PIC, uma célula define uma região do espaço dentro da qual as contribuições locais de carga serão acumuladas nos "vértices" dessa célula, os quais necessariamente distarão da ordem do comprimento de Debye de qualquer ponto dentro da célula, $\Omega_c = \{\mathbf{x} \in \Omega : ||\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|| \approx \lambda_D, \}$. O efeito da blindagem Debye é incorporado à medida que as partículas terão suas cargas acumuladas somente em nós que distam até um certo comprimento próximo de λ_D , usando as informações da estrutura de células.

Voltemos ao fenômeno físico de blindagem de Debye. Dada uma partícula eletricamente carregada no plasma, a partir de uma distância chamada de *comprimento de Debye,* os efeitos individuais das cargas das partículas são desprezíveis (KRUER, 1988), e somente o efeito coletivo é percebido pela partícula em questão. Essa distância no caso tridimensional delimita uma região esférica de alcance em torno da partícula carregada, a esfera de Debye. A figura 4.1 ilustra este cenário no caso bidimensional para uma distribuição irregular de pontos (típica para o MEFG e MEF), em que os nós indicados por **A, B, C, D** e **E** estão dentro da esfera de Debye da partícula *j*.



Figura 4.1 Esfera de Debye em torno da partícula *j* e o nós incluídos pela esfera.

No caso ilustrado pela figura 4.1, os nós **A**, **B**, **C**, **D** e **E** devem receber contribuição de carga da partícula *j* na construção da função densidade de carga. Reconsiderando o caráter local da aproximação do MEFG, podemos relacionar este mesmo conjunto de nós com a aproximação na posição da partícula *j*. Se ajustarmos os raios de influência nodais para um valor próximo ao comprimento de Debye, então os domínios de influência dos nós **A**, **B**, **C**, **D**

e E irão incluir a partícula *j*, conforme ilustrado na figura 4.2. Nesta figura, os nós indicados pelas letras A, B, C, D e E formam o elemento difuso, que no contexto de modelos PIC, faz sentido chamarmos de *célula difusa* ..



× pontos nodais

Figura 4.2 Célula difusa com domínios de influência circulares. .

Naturalmente, supomos um conjunto de funções de particionamento de carga univocamente associadas a cada nó, as quais levem em conta a distância do nó à carga e formem uma base de partição de unidade (MARQUES et al., 2007b), para garantir a integridade final da carga distribuída. As funções de forma do método Element Free Galerkin podem facilmente atender a estes requisitos.

Foram considerados na ilustração da figura 4.2 domínios de influência circulares, mas domínios de influência retangulares, desejáveis por uma questão de eficiência computacional (seção 3.2.3) (BELYTSCHKO e DOLBOW, 1998), também podem ser utilizados (Figura 4.3).

Em outras palavras, os domínios de influência nodais do método Element Free Galerkin podem ser ajustados de modo que os elementos difusos desempenhem o papel de células no modelo PIC.



Figura 4.3 Célula difusa com domínios de influência retangulares.

Dessa forma, semelhantemente ao desenvolvimento de Nayroles *et al.* (1992) com respeito à generalização do MEF, propomos o método Particle-In-Diffuse-Cell, no qual a célula deixa de ser uma estrutura geometricamente regular e bem definida, e passa a ser uma estrutura definida pelas funções de forma.

Resta discutir como realizar o ajuste das células difusas, em outras palavras, como ajustar os domínios de influência de modo que seus raios médios: 1) sejam da ordem do comprimento de Debye, conforme discutido no capítulo anterior, e 2) incluam pontos nodais suficientes para calcular a aproximação (seção 3.3). O raio de influência nodal $d_{m_{-}}$, onde o *underline* indica uma coordenada espacial *x* ou *y*, pode ser definido por

$$d_{m_I} = c_{I_} \cdot d_{\max} , \qquad (4.1)$$

onde d_{max} é um parâmetro livre que deve ser ajustado de modo a garantir o grau de conectividade: 1) mínimo requerido pela inversão da matriz **A**, e ao mesmo tempo, 2) suficiente para que uma boa aproximação seja obtida. O coeficiente $c_{I_{\perp}} \in \{c_{Ix}, c_{Iy}\}$ define, aproximadamente, a distância do próximo nó naquela direção espacial. Assim, o coeficiente d_{max} funciona como um fator de escala para os raios de influência médios em cada direção.

4.2 O particionamento de carga

Como dissemos anteriormente, o particionamento das cargas é o primeiro estágio da simulação PIC, e consiste em distribuir localmente a carga das partículas entre pontos cuja distância máxima, com respeito à carga de referência, seja um valor da ordem do comprimento de Debye λ_D . Seja a partícula *j* uma partícula de referência, cuja carga deve ser particionada entre os nós que distam da ordem do comprimento de Debye, como ilustrado na Figura 4.4.



Figura 4.4 Pontos nodais que receberão contribuição de carga da partícula j.

No caso da ilustração anterior, a carga da partícula *j* deverá ser particionada pelos nós identificados pelas letras **A**, **B**, **C**, **D** e **E**. Evidentemente se fôssemos

calcular a distância de cada nó à partícula de referência e depois de compararmos ao comprimento de Debye para então calcularmos a parcela de carga, isto seria muito caro computacionalmente. Fazemos a associação inversa (Figura 4.4), isto é, utilizamos a informação dos domínios nodais que compõem a célula difusa para identificar as partículas que pertencem a estes domínios, (definindo os raios de influência da ordem do comprimento de Debye) e tendo admitido que os pontos nodais estão organizados em uma estrutura de dados que otimiza esta busca, obteremos o resultado desejado com um custo computacional satisfatório.

Não é necessário calcular a distância entre a partícula *j* e os nós **A**, **B**, **C**, **D** e **E** para determinarmos a parcela de carga que será acumulada em cada nó. Uma vez que as funções de forma ϕ_i satisfazem o critério de partição de unidade (3.20), e além disso, são decrescentes à medida que nos distanciamos do nó ao qual estão associadas, estas funções podem ser usadas como critério de particionamento de carga. Assim, tendo como referência o caso particular ilustrado na figura 4.4, ao multiplicarmos a equação (3.20) pela carga q_j de uma partícula arbitrária *j*, obtemos:

$$\sum_{i \in \{A,B,C,D,E\}} \phi_i(\mathbf{x}_j) \cdot q_j = q_j , \qquad (4.2)$$

onde cada termo do somatório $\phi_i(\mathbf{x}_j) \cdot q_j$ representa uma parcela da carga q_j a ser acumulada em cada nó $i \in \{A, B, C, D, E\}$, e \mathbf{x}_i é a posição da partícula *j*.

Podemos reescrever (4.2) de forma mais geral para uma distribuição arbitrária de nós, e para uma *j*-ésima partícula com carga q_j localizada na posição **x**_j.

$$\sum_{\mathbf{x}_{i} \in \Omega_{Dif}} \phi_{i}(\mathbf{x}_{j}) \cdot q_{j} = q_{j}, \qquad (4.3)$$

onde os domínios de influência dos nós \mathbf{x}_i incluem a partícula *j*, ou seja, os nós do elemento difuso Ω_{Dif} em torno de \mathbf{x}_j . Note que o valor de $\phi_i(x_j)$ já corresponde à parte da unidade de carga da partícula a ser acumulada no nó *i*,

e ainda que, esta parcela será maior quanto mais perto a partícula estiver do ponto nodal.

A figura 4.5 apresenta o gráfico de uma função de forma interpolante do MEFG para um nó cujas coordenadas são (2., 2.), no centro do plano (x, y) do gráfico.



Figura 4.5 Função de forma construída pela abordagem interpolante do MEFG.

Como pode ser observado, a função de forma construída pelo MEFG é bastante suave. A carga total Q_i acumulada no *i*-ésimo nó é dada por:

$$Q_i = \sum_{j=1}^{p_n} \phi_i(\mathbf{x}_j) \cdot q_j , \qquad (4.4)$$

onde cada termo da soma representa a contribuição de carga de cada partícula $j = 1..p_n$ contida no domínio de influência do nó *i*.

4.3 A interpolação do campo elétrico

Após resolvermos o sistema de equações discretas (3.8) usando a função densidade de carga interpolada, teremos determinado o valor do potencial elétrico nos pontos nodais, e necessitamos determinar o campo elétrico que atua nas posições das partículas.

Considerando a formulação do potencial escalar elétrico (3.2) e a aproximação na base de funções de forma do MEFG (3.4), obtemos a seguinte expressão para o campo elétrico na posição de uma partícula *p* arbitrária:

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}_p) \approx -\sum_{\mathbf{x}_i \in \Omega_{Dif}} u_i \cdot \nabla \phi_i(\mathbf{x}_p) , \qquad (4.5)$$

onde u_i são os parâmetros nodais, e $\nabla \phi_i(\mathbf{x}_p)$ é o gradiente, com respeito às coordenadas espaciais, das funções de forma associadas aos nós internos à circunferência de Debye associada à partícula *p*.

Note que as derivadas das funções de forma, dadas em (3.19), são calculadas na mesma posição em que são calculadas as funções de forma no estágio de distribuição de carga. Esta consideração é importante para otimizações computacionais a serem consideradas no próximo capítulo. Com isso, a aceleração que atua em uma partícula *p* pode ser escrita da seguinte forma:

$$\mathbf{a}(\mathbf{x}_p) \approx -\frac{q_p}{m_p} \sum_{\mathbf{x}_i \in \Omega_{Dif}} u_i \cdot \nabla \phi_i(\mathbf{x}_p) \,. \tag{4.6}$$

Por substituição direta nas equações de diferenças finitas obtemos:

$$\mathbf{v}^{\left(n+\frac{1}{2}\right)} = \mathbf{v}^{\left(n-\frac{1}{2}\right)} + \left(-\frac{q_p}{m_p} \sum_{x_i \in \Omega_{Dif}} u_i \cdot \nabla \phi_i(\mathbf{x}_p)\right)^{(n)} \cdot \Delta t,$$

$$\mathbf{x}^{(n+1)} = \mathbf{x}^{(n)} + \mathbf{v}^{\left(n+\frac{1}{2}\right)} \cdot \Delta t.$$
(4.7)

 $\langle \rangle$

O custo computacional das funções de forma do MEFG é superior ao das provenientes do MEF, contudo, a aproximação fornecida pelo método Element Free Galerkin pode, facilmente e sem aumento significativo de complexidade

computacional, fornecer aproximações de classe C^{∞} como a ilustrada pela figura 4.5. Este tipo de função pode fornecer uma descrição mais precisa do campo em regiões estreitas com forte variação de campo, digamos um decaimento racional ou exponencial, ao passo que, mesmo uma aproximação com elementos finitos de *segunda ordem*, além de aumentar a ordem das matrizes locais envolvidas na formulação, fornecerão, ainda assim, uma aproximação linear para o campo elétrico dentro de cada elemento finito.

Considerando que o campo elétrico governa a direção do movimento das partículas, a acurácia no cálculo das componentes do campo é essencial para descrever corretamente os movimentos das partículas do plasma, em particular, de grande interesse no contexto de projeto de dispositivos baseados em plasmas (SANDONATO e BARROSO, 1996; NAM et al., 2005). Além disso, devido ao recente estágio de desenvolvimento dos métodos *meshfree*, em particular do MEFG, faltam na literatura resultados sobre o desempenho de implementações específicas do método EFGM que combinam técnicas adicionais também específicas. Por exemplo, a técnica de truncamento de domínios para tratamento de meios materiais diferentes parece não ter fornecido bons resultados com o método *meshfree* usado por Herault e Marechal (2000). Por isso, foram conduzidas investigações minuciosas das aproximações fornecidas pela implementação do MEFG da variável de estado e principalmente das suas derivadas nas proximidades de interfaces materiais. Estes resultados serão apresentados no capítulo 6.

4.4 Acoplamento com modelos colisionais

Voltemos à motivação inicial desta tese, a simulação computacional do processo de controle de fluxo via plasma gerado por laser, em particular, o tratamento de processos colisionais reativos e não-reativos associados à ionização e ao resfriamento do plasma.

Nesta seção é apresentada uma discussão preliminar a respeito do tratamento de processos colisionais com a abordagem proposta, o PIDC, com base nos principais modelos PIC colisionais publicados na literatura especializada. A relevância desta discussão se justifica não apenas pela natureza colisional do experimento de modificação de fluxo via plasma gerado por laser, mas também pelo papel atribuído às células do PIC em certos algoritmos colisionais, considerando que a célula difusa do PIDC pode não ser a estrutura mais adequada e eficiente para desempenhar a mesma função.

Uma estratégia possível para utilização de um algoritmo colisional que necessite da regularidade geométrica das células dos programas PIC em um programa PIDC, poderia ser a re-utilização das células de integração de Gauss usadas para aproximar as integrais em (3.9). Estas células de integração têm, ou podem ter, características muito semelhantes às tradicionais células geometricamente regulares e conexas do PIC, e nestas condições podem ser re-utilizadas para este fim.

Quando as espécies químicas envolvidas na simulação não estão em equilíbrio químico, suas interações podem ser levadas em conta na simulação por modelos colisionais. Nestes modelos, as diversas interações físico-químicas entre partículas são incluídas no modelo computacional por meio de eventos colisionais.

As reações químicas mais relevantes entre as espécies consideradas no modelo de simulação podem ser estabelecidas com base em resultados

experimentais reportados pela literatura especializada (PARK, 1989; BIRD, 1987; ITIKAWA et al., 1989; ITIKAWA et al.1986). A estas reações pode ser associada uma função probabilidade de ocorrência da reação, seguindo-se algum modelo proposto na Literatura (SÉROR et al., 1998; BIRDSALL, 1991; NANBU, 1996; NANBU e DENPOU, 1998; NANBU, 2000; VERBONCOEUR, 2005), que seja adequado para as condições termodinâmicas do sistema.

Esses modelos, em geral, dependem de dados experimentais como seções de choque parciais e totais para diversas reações (ITIKAWA et al., 1989; ITIKAWA et al., 1986), coeficientes de taxa de reações químicas (PARK, 1989; BIRD, 1987; NANBU e DENPOU, 1998) ou outros parâmetros (SÉROR et al., 1998) que podem ser encontrados nas bases de dados especializadas. Diferentes implementações para os modelos estocásticos podem ser adotadas para uma mesma reação (NANBU, 2000), e esta decisão pode ser tomada em função da disponibilidade ou não de dados experimentais necessários à implementação do modelo.

Neste contexto, a idéia central dos métodos de Monte-Carlo (MC), dentre os quais se destacam o DSMC (BIRD, 1976; SHARMA e LONG, 2004) e as as abordagens híbridas PIC-MC (BIRDSALL, 1991; LONGO, 2000; CHENG et al., 2004; NANBU et al., 2000a; NANBU, 2000b), consiste, de um modo geral, na determinação de intervalos de tempos livres de colisão, isto é, o tempo livre entre duas colisões sucessivas para uma partícula teste. Estes tempos são estimados usando-se uma seqüência de números aleatórios que obedece a uma distribuição de probabilidade apropriada, a qual tem o papel de reproduzir, ou simular, a física que rege o fenômeno.

Estes acoplamentos PIC-MC ou PIC-MCC (PIC-MC Collision) são usualmente implementados introduzindo-se um estágio colisional no ciclo de simulação, conforme ilustrado na figura 4.6. A ilustração desta figura não representa interações colisionais reativas que convertem parte dos reagentes em

produtos, mas tão somente as interações não reativas, convertendo v'(p) em v(p).



Figura 4.6 Ciclo de simulação PIC-MC.

No método de colisão nula (Null Collision), o tempo para o próximo evento colisional deve ser calculado a cada instante de tempo conhecendo a freqüência de colisão total em função das velocidades das partículas envolvidas, suas densidades e seções de choque (NANBU, 2000b). O tempo médio livre de colisão varia de elétron para elétron, o que vem a ser, de certa forma, inadequado para o acoplamento com uma simulação PIC padrão, ou PIDC, na qual os campos eletromagnéticos autoconsistentes são calculados em intervalos de tempo igualmente espaçados. Assim, no contexto do PIDC, este método é mais adequado para uma abordagem acoplada, como descrita em PIC-DSMC (CHENG et al., 2004), ou ainda em abordagens puramente de Monte Carlo, tipo DSMC (BIRD, 1976).

A inconveniência do método anterior é superada pelo método de incremento de tempo constante, por sua vez, mais caro computacionalmente. A idéia básica

por trás deste método é bem discutida nos trabalho de Nanbu (2000b), e consiste basicamente no desacoplamento dos termos colisionais dos nãocolisionais da equação de Vlasov-Boltzmann (NANBU, 2000b).

Este método é bastante versátil e adequado para modelos PIC e também para o PIDC, além de possibilitar o tratamento de uma grande variedade de eventos colisionais. Neste método, simultaneamente determinamos a ocorrência ou não de algum evento colisional para cada partícula no intervalo de tempo Δt transcorrido e, sem custo adicional, temos determinado qual o tipo de colisão ocorreu. Em outras palavras, em vez de determinarmos o tempo livre até a próxima colisão, primeiramente movemos as partículas e depois avaliamos quais colisões provavelmente aconteceram no intervalo de tempo transcorrido.

Sejam $P_k^{(i)}$, k = 1, ..., m, as probabilidades de ocorrência de cada evento colisional envolvendo a partícula i. A probabilidade que a partícula i colida com uma partícula qualquer em sua vizinhança pode ser escrita como:

$$P_T^{(i)} = \sum_{k=1}^m P_k^{(i)},\tag{4.8}$$

onde $P_k^{(i)}$ é uma probabilidade conhecida. Dessa forma, a probabilidade $P_T^{(i)}$ representa a possibilidade de que algum evento colisional ocorra em $t + \Delta t$. A natureza do evento colisional é determinada pela forma com que as probabilidades parciais $P_k^{(i)}$ são distribuídas no intervalo de probabilidades [0, 1]. Seguindo o desenvolvimento de Nambu, considere as identidades abaixo:

$$1 = P_T + (1 - P_T) = \sum_{k=1}^{m} \left(P_k + \left(\frac{1}{m} - P_k \right) \right).$$
(4.9)

que sugerem a divisão do intervalo unitário [0, 1] em *m* intervalos iguais de comprimento *l*. Cada intervalo representando a possibilidade de ocorrência ou não de certo evento colisional. Cada intervalo é dividido em duas partes, a primeira associada à ocorrência do evento colisional, com tamanho $l \cdot P_k^{(i)}$, e a segunda associada à sua não ocorrência (colisão nula) cujo comprimento é

 $l \cdot (1 - P_k^{(i)})$. A figura 4.6 ilustra o processo. As setas em negrito, localizadas no lado direito de cada intervalo, representam os intervalos de ocorrência de eventos colisionais.



Figura 4.7 Espaço universo para determinação de um evento. Ilustração adaptada do trabalho de Nambu (2000).

Tomando um número aleatório $U \in [0,1]$, gerado segundo uma distribuição de probabilidade uniforme, se U pertence ao lado direito do k-ésimo intervalo então o k-ésimo evento colisional ocorre; o mesmo vale para qualquer dos m intervalos. É importante notar que somente um número aleatório é usado para determinar tanto a ocorrência ou não quanto o tipo de evento colisional que ocorrerá. Modelos de colisão específicos para cada tipo de reação devem ser considerados dependendo da situação e interesses. Estes modelos devem levar em conta os parâmetros físicos que mais influenciam a ocorrência da reação química entre os parceiros colisionais, e devem ser baseados em observações experimentais e/ou modelos teóricos.

O nível de detalhamento na descrição dos estados das partículas pode ser grandemente enriquecido, como por exemplo, considerando-se modelos que levam em conta os diferentes modos de transferência de energias vibracionais, translacionais e rotacionais (CAPITELLI et al., 1997), além de efeitos quânticos (SÉROR, 1998; GIMELSHEIN et al., 1998; BOSE e CANDLER, 1998; GIMELSHEIN et al., 1996; BOYD, 1996). Uma boa revisão sobre o acoplamento PIC/MCC para o tratamento de colisões envolvendo elétron-molécula, íon-molécula, molécula-molécula e espalhamento de Rutherford é apresentada no trabalho de Nanbu (2000). O trabalho de Birdsall (1991) é também uma boa referência para este assunto.

Lembrando que as partículas de simulação em modelos PIC representam centenas ou milhares de partículas reais, a cada partícula é atribuído um fator multiplicativo W, chamado de peso, que corresponde ao número de partículas reais que a partícula de simulação representa. Este ponderamento das partículas não interfere no PIC, ou no PIDC, uma vez que a relação carga/massa é a mesma para uma única partícula real ou para uma partícula de simulação.

No entanto, o *peso* das partículas de simulação pode interferir na realização dos eventos colisionais. Consideremos duas partículas de simulação sorteadas para realização de um processo colisional. Suponha, por exemplo, que a primeira partícula de simulação represente 7 elétrons e a segunda represente 2 átomos de nitrogênio, então a proporção real de elétrons e átomos colidindo é de 7:2 e não de 1:1. O tratamento destas situações é apresentado detalhadamente nos trabalhos de Nanbu (2000) e em Nanbu & Yonemura (1998).

5 METODOLOGIAS COMPUTACIONAIS E DESENVOLVIMENTOS

5.1 Visão geral do desenvolvimento da tese

Em 2003 um grupo de pesquisadores do LEV (Laboratório de Engenharia Virtual) do Instituto de Estudos Avançados do Centro Técnico Aeroespacial (IEAv – CTA), cadastrado no Diretório de Grupos de Pesquisa no Brasil do CNPq propôs um acoplamento entre modelos PIC e o MEF, chamado PIC-MEF (PAES et al., 2003). Após reuniões relativas ao projeto de software PIC-MEF no sistema Levsoft, e desenvolvimento de documentação de software como diagramas UML, foram implementadas as classes do PIC-MEF no sistema Levsoft (PASSARO et al., 2004) e realizados testes de desempenho (MARQUES et al., 2004a) em um *cluster* de PCs do IEAv/CTA.

Uma vez realizada a formulação do PIDC, possível a partir da concepção da *célula difusa*, julgou-se necessário investigar a robustez da abordagem interpolante do MEFG para cálculo de campo elétrico, em particular das componentes de campo, por governarem o movimento das partículas carregadas do plasma. Esta formulação, descrita no capítulo 4, foi publicada recentemente (MARQUES et al., 2007b).

Devido ao recente estágio de desenvolvimento dos métodos *meshfree*, e as várias possíveis implementações do MEFG que podem ser mais ou menos robustas, foram realizados diversas investigações numéricas com a abordagem interpolante do MEFG com truncamento de domínio a ser usada no PIDC.

Primeiramente, foram conduzidos testes com foco na variável de estado, erros globais e aspectos qualitativos da aproximação para problemas de natureza elétrica e magnética com geometrias típicas, envolvendo diferentes magnitudes de descontinuidades materiais (MARQUES et al., 2004c; 2005a). Os erros no cálculo do campo elétrico para uma geometria teste de um resistor foram

calculados por comparação com aproximações fornecidas pelo MEF no sistema Levsoft, e por comparação com a condição física de continuidade ou descontinuidade esperada para cada componente ao cruzar a interface material (MARQUES et al., 2007a).

Ao mesmo tempo, foi desenvolvido o projeto de software e implementada uma versão do PIDC (MARQUES et al., 2007b) no Levsoft. As reflexões conduzidas até momento sugerem que a criação da célula difusa como estrutura de dados parece não apresentar nenhum ganho do ponto de vista computacional, de modo que na implementação atual, a mesma é determinada dinamicamente por meio de uma busca auxiliada pela malha de Delaunay.

As informações necessárias para conhecimento das células difusas, por serem entidades dinâmicas, necessitam ser calculadas de forma eficiente, o que equivale dizer que ferramentas que aperfeiçoem este processo são muito desejáveis. Por outro lado, necessitamos de uma estrutura de células de integração, e desta forma, foi conveniente utilizar o gerador de malhas de Delaunay bidimensional do Levsoft. As malhas triangulares do domínio são usadas tanto para prover os pontos de discretização quanto para a integração numérica. Além disso, a estrutura de dados da malha fornece funcionalidades de interesse que possibilitam uma busca mais eficiente das partículas no domínio ao percorrer as ligações entre os elementos da malha.

Adicionalmente, otimizações de código foram identificadas, basicamente decorrentes do critério de partição de unidade das funções de forma e do algoritmo da abordagem de consistência de Breitkopf (2000) que serão discutidas nas seções que seguem.

A implementação de uma estratégia paralela do PIDC para sistemas de escala não muito larga está em fase de testes, seguindo a mesma estratégia de paralelização que foi empregada para o PIC-MEF (PASSARO et al., 2004). São muitas as semelhanças entre o MEF e o MEFG, em particular, pode-se dizer
que o custo computacional de ambos os métodos é de mesma ordem de magnitude. Assim, pode-se esperar que os resultados obtidos com a implementação paralela do PIC-MEF (MARQUES et al., 2004a) são uma boa referência para os que serão obtidos para a implementação paralela do PIDC usando a mesma estratégia de paralelização, a qual será discutida na seção 5.5.

5.2 Procedimento geral de aplicação do método Particle-In-Diffuse-Cell

No início da simulação as informações relativas às partículas e à resolução do campo são inicializadas, ou seja, para cada partícula são geradas aleatoriamente posição e velocidade (usando funções de distribuição específicas), incluindo a inicialização das estruturas e dados necessários para aplicação do MEFG (classe CLev_EFGM_Poisson), dentre eles, os raios de influência nodais, células de integração, pontos de integração, a matriz de rigidez e o vetor de fontes. A evolução do sistema pode ser descrita da seguinte forma:

<u>Para *t=0..N:*</u>

Para cada partícula:

- 1. Calcula-se os valores das funções de forma dos nós do elemento difuso associado à partícula, seguindo o algoritmo descrito na seção 5.3.2;
- Usa-se estes valores para interpolar a densidade de carga nos pontos nodais, e adiciona-se as contribuições parciais no vetor de fontes, o qual está associado a ρ.
- Monta-se a matriz de rigidez (eq. 3.8) percorrendo-se uma lista de todos os pontos de integração de Gauss, seguindo o algoritmo descrito na seção 5.3.3
- 4. Impõe-se as condições de Dirichlet relativas ao campo (eq. (3.36), seção
 3.5) e resolve-se o sistema de equações lineares resultante;

- Calcula-se os valores das derivadas das funções de forma para interpolação do campo na posição da partícula (usando os valores nodais já calculados);
- A partir das informações disponíveis é possível calcular a nova velocidade e posição da partícula usando a equação (4.7), seção 4.3;
- Aplicam-se as condições de contorno relativas ao modelo de simulação do plasma, por exemplo, condições periódicas e/ou reflexivas;
- Repete-se o processo a partir do passo 1 pelo número de incrementos de tempo estipulados para a simulação da evolução do plasma.

Um diagrama de sequência UML simplificado é apresentado na figura 5.1, e nos permite ter uma visão geral do ciclo de simulação descrito anteriormente. As mensagens **1.1** a **1.3** no diagrama de sequência estão relacionadas à inicialização da simulação: as posições e velocidades das partículas são inicializadas usando-se os geradores de números aleatórios fornecidos pelas classes UniformDeviate e GaussianDeviate implementadas no Levsoft.

A montagem do vetor de fontes é indicada pela mensagem **1.4.1.** Distribute **Charge**, no diagrama de sequência. A montagem do sistema de equações discretas, imposição de condições de contorno e resolução do sistema linear são realizadas pela chamada a Solve (), indicada pela mensagem **1.4.2.** Solve.

Os últimos passos, 5, 6 e 7, relativos ao avanço das partículas no espaço de fase, são realizados a partir da chamada a Advance Particle, indicada pela mensagem **1.4.3.** Advance Particle no diagrama de seqüencia (Figura 5.1).

Como o ciclo de simulação do PIDC é o mesmo que o do PIC, a complexidade (SZWARCFITER e MARKENZON, 1994) do PIDC é da mesma ordem do PIC, isto é, *O*(*n Log n*) (CHRISTLIEB, 2004).



Figura 5.1 Diagrama UML de Sequência.

5.3 Algoritmos específicos e algumas otimizações

5.3.1 Ajuste dos Raios de Influência

O parâmetro d_{max} é um parâmetro livre do método e é fortemente dependente do padrão de distribuição de pontos, de modo que não é possível definir-se um valor ideal para o mesmo *a priori*. Em virtude disso, é comum os artigos que reportam resultados da aplicação do MEFG apresentarem gráficos comparativos entre as aproximações obtidas a partir de diferentes valores de d_{max} . À medida que mais trabalhos reportam estas análises para aplicações específicas do MEFG, como por exemplo aplicado ao cálculo de campos eletromagnéticos envolvendo meios heterogêneos (MARQUES et al., 2007a; BOTTAUSCIO et al., 2006), é possível que sejam identificados valores, ou intervalos de valores, freqüentemente mais adequados para o parâmetro d_{max} em tais situações, os quais poderão ser usados como referência para implementações futuras.

Vários fatores podem influenciar a determinação dos valores mais adequados para d_{max} . Em primeiro lugar, é natural que o padrão de distribuição dos pontos de discretização do domínio influencie o ajuste desse parâmetro devido sua relação com o parâmetro $c_{I_{-}}$ (eq. 4.1), e isto pode envolver a topologia da função peso empregada. Também, as técnicas adicionais como a de truncamento de domínios, podem influenciar o valor adequado para d_{max} . Ressalta-se que, na formulação do PIDC, o tamanho dos domínios de influência estão relacionados à modelagem do fenômeno de blindagem de Debye, e isto significa que o comprimento de Debye do plasma a ser simulado deverá ser levado em conta no processo de discretização e mais uma vez, considera-se relevante mencionar que a topologia das funções peso pode influenciar esse ajuste.

Em nossa implementação, para ajustarmos os raios de influência médios, d_{ml_x} e d_{ml_y} (eq. 4.1), de cada nó l = 1..N, usamos as informações da malha para determinar as arestas ligadas ao nó l, e assim, determinamos a distância do nó mais distante conectado ao nó l. Este valor é definido como sendo o valor da distância média, $c_{Ix} = c_{Iy}$ (eq. 4.1), de um vizinho na direção x ou y. Vale dizer que os parâmetros c_{Ix} e c_{Iy} estão diretamente relacionados com o refinamento da discretização, ou seja, o distanciamento dos pontos nodais determina os valores desses parâmetros, de acordo com as definições dadas na seção 4.1, e por isso, não há muito a ser discutido sobre o ajuste dos mesmos.

Assumindo que os elementos da malha têm dimensões lineares da ordem do comprimento de Debye (especificado na pré-discretização do domínio) pode-se esperar que os valores mais adequados de d_{max} variem de 1.2 a 2. em

110

aplicações de plasmas, se considerarmos as diferentes possibilidades de combinações entre base local e função de ponderação, que podem resultar em funções de forma com topologias muito variadas.

É interessante notar que a malha facilita bastante este processo ao fornecer de antemão as informações locais relativa à conectividade nodal, o que permite um processo automático de ajuste dos parâmetros c_{Ix} e c_{Iy} . Contudo, devem ser estudados outras abordagens e algoritmos específicos (Löhner e Oñate, 1998) para as tarefas relacionadas à aplicação do MEFG, até o momento inéditas no contexto de plasmas.

5.3.2 Otimização no cálculo das funções de forma do MEFG no PIDC

O algoritmo de referência para a implementação computacional do método EFG é apresentado nesta seção, e originalmente são apresentadas algumas otimizações para o modelo PIDC, propiciadas pela utilização da abordagem de consistência do MEFG. Proposta por Breitkopf *et al.* (1998), o principal atrativo desta abordagem é que ela evita a inversão direta da matriz **A** na equação (3.18), apresentando um ganho computacional em torno de 30% (BREITKOPF et al., 2000) com relação à formulação padrão (inversão direta de **A**) no cálculo dos valores das funções de forma em um dado ponto de avaliação.

A figura 5.2 apresenta o algoritmo da abordagem de consistência (BREITKOPF et al., 2000), o qual calcula os valores das funções de forma em um dado ponto de avaliação. Cabe dizer que os pontos de avaliação inerentes ao ciclo de simulação PIDC são, naturalmente, os pontos de integração de Gauss e a posição das partículas.

1. Inicializar
$$\mathbf{W}^{1} = \mathbf{W}$$
;
2. Para $k = 2$ até m :
____2.1 Calcular $\mathbf{C} = \mathbf{W}^{k-1}\mathbf{P}_{k.}^{T}$ e $d = \mathbf{P}_{k.}\mathbf{C}$;
____2.2 Calcular $\mathbf{W}^{k} = \mathbf{W}^{k-1} - \frac{1}{d}\mathbf{C}\mathbf{C}^{T}$;
3. Modificar o vetor \mathbf{C} e o escalar d :
 $\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \vdots \\ \sum_{j} \mathbf{W}_{ij}^{m} \\ \vdots \end{bmatrix}, \quad d = \sum_{i} \sum_{j} \mathbf{W}_{ij}^{m}$;
4. Calcular $[\phi] = \frac{1}{d}\mathbf{C}$.

Figura 5.2 Algoritmo para cálculo das funções de forma do MEFG.

O subscrito *k*. denota a *k*-ésima linha da matriz, por exemplo, \mathbf{P}_k é a *k*-ésima linha da matriz **P**. **W** é uma matriz diagonal cujos elementos são os valores das funções peso na posição do ponto de avaliação **x**, como escrita na equação (3.15). A matriz **P** usada neste algoritmo difere da anteriormente usada na apresentação da formulação padrão do MEFG (capítulo 3), e na abordagem de consistência é dada por:

$$\mathbf{P}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_1 - x & x_2 - x & \cdots & x_n - x \\ y_1 - y & y_2 - y & \cdots & y_n - y \end{bmatrix}.$$
 (5.1)

Denotamos o vetor com os valores das funções de forma por $[\phi]$, onde cada componente do vetor corresponde ao valor de uma certa função de forma $[\phi]^T = [\phi_1(\mathbf{x}), \phi_2(\mathbf{x}), \cdots, \phi_n(\mathbf{x})]$ no ponto de avaliação **x**.

O algoritmo a seguir (BREITKOPF et al., 2000) é usado para o cálculo dos valores das derivadas das funções de forma, e valem as mesmas observações feitas anteriomente com respeito à notação e às matrizes **W** e **P**. Como antes, o vetor que denota os valores das derivadas das funções de forma, no algoritmo

a seguir, é dado por,
$$\left[\frac{\partial\phi}{\partial x}\right]^{T} = \left[\frac{\partial\phi_{1}(\mathbf{x})}{\partial x}, \frac{\partial\phi_{2}(\mathbf{x})}{\partial x}, \cdots, \frac{\partial\phi_{n}(\mathbf{x})}{\partial x}\right].$$

1. Inicializar
$$\mathbf{W}_{x}^{1} = \mathbf{W}_{x}$$
;
2. Para $k = 2$ até m :
_____2.1 Calcular $\mathbf{C}^{'x} = \mathbf{W}_{x}^{k-1}\mathbf{P}_{k}^{T} + \mathbf{W}^{k-1}(\mathbf{P}_{k}^{'x})^{T}$ e $d^{'x} = \mathbf{P}_{k}^{'x}\mathbf{C} + \mathbf{P}_{k}\mathbf{C}^{'x}$;
_____2.2 Calcular $\mathbf{W}_{x}^{k} = \mathbf{W}_{x}^{k-1} - \frac{1}{d} \left[\mathbf{C}^{'x}\mathbf{C}^{T} + \mathbf{C} \left(\mathbf{C}^{'x} \right)^{T} + \frac{d^{'x}}{d}\mathbf{C} \mathbf{C}^{T} \right]$;
3. Modificar o vetor $\mathbf{C}^{'x}$ e o escalar $d^{'x}$:
 $\mathbf{C}^{'x} = \left[\sum_{j} \mathbf{W}_{xij}^{m} \right], \quad d^{'x} = \sum_{i} \sum_{j} \mathbf{W}_{xij}^{m}$;
4. Calcular $[\phi]^{'x} = \left[\frac{\partial \phi}{\partial x} \right] = \frac{1}{d} \left(\mathbf{C}^{'x} - [\phi] d^{'x} \right)$.

Figura 5.3 Algoritmo para cálculo das derivadas das funções de forma do MEFG.

Adicionalmente, a notação 'x denota a derivada com respeito à variável espacial x, independentemente de onde estiver localizado (super ou subescrito). As derivadas com respeito a y são calculadas da mesma forma, substituindo-se 'x por 'y. Em Marques et al. (2007a) é apresentada uma descrição detalhada do ajuste da função peso de Schwarz singular truncada que foi utilizada, bem como sua relação com a propriedade do delta de Kronecker das funções de forma.

O uso deste algoritmo possibilita uma otimização significativa no ciclo de simulação. Note que no cálculo dos valores das derivadas (Figura 5.3) em um dado ponto de avaliação calculamos intermediariamente os valores das funções de forma. Como na fase de avanço das partículas, equação (4.7), necessitamos calcular os valores das derivadas das funções de forma na posição das partículas, $\nabla \phi_i(\mathbf{x}_p^{(n)})$, digamos na *n*-ésima iteração no tempo, e ainda recordando que na fase de distribuição de carga imediatamente anterior (também na n-ésima iteração no tempo) necessitamos dos valores das funções de forma na posição das partículas, $\phi_i(\mathbf{x}_p^{(n)})$ (eq. 4.3), podemos antecipar o cálculo das derivadas, efetuando-o antes do estágio de distribuição das cargas, assim, teremos calculado os valores das funções de forma a serem utilizados na distribuição das cargas e também os valores das funções de forma que serão utilizados no estágio de avanço das partículas. O desempenho desta abordagem deve ser investigado com especial atenção para sistemas de escala muito grande, avaliando-se a quantidade de memória necessária para o armazenamento das novas estruturas de dados.

5.3.3 Montagem das equações discretas no MEFG

A montagem do sistema de equações discretas (equação (3.8)) pode ser realizada percorrendo-se a lista dos pontos de Gauss, conforme discutido na seção **3.4.** Como apresentado anteriormente, usamos células de quadratura triangulares fornecidas pelo gerador de malha do Levsoft, e empregamos ordem de quadratura igual a três. O algoritmo é apresentado na figura 5.4.

Como na seção 3.4, equação (3.24), ω_{X_G} corresponde ao peso de Gauss associado ao ponto de integração x_G da célula de integração Ω_c^{Int} , $\|\mathbf{J}\|$ representa o jacobiano da transformação entre a célula de integração Ω_c^{Int} e a célula de referência.

114



Figura 5.4 Montagem das equações discretas.

Note que nesta fase as funções de forma e suas derivadas também são calculadas, mas seus valores são calculados nos pontos de Gauss, ao passo que nos estágios de distribuição de carga e de avanço das partículas os valores das funções de forma são calculados na posição das partículas.

5.4 Modelo PIDC orientado a objetos

Dois programas foram implementados em linguagem de programação C++ utilizando o paradigma de orientação a objetos: o primeiro para simulação usando a formulação PIC-FEM e o segundo para o uso da PIDC. As implementações fizeram uso da biblioteca de classes do sistema Levsoft (sdklevsoft). As figuras 5.5 e 5.6 apresentam os diagramas UML de classe simplificados dos programas PIC-FEM e PIDC.

As principais classes que implementam as duas formulações são a CLevPIC e CLevCellParticleAssociation. A classe CLevPIC é responsável pelo controle da

simulação, e é derivada da classe CLevPhenomenon, assim como a classe CLev_FEM_Poisson. As principais funções desta classe são a *Initialize*, responsável pela geração das partículas e montagem das estruturas de dados relevantes, a *Build*, que prepara as estruturas para a resolução do campo, e a *Solve* implementa efetivamente o ciclo de simulação. A segunda classe, CLevCellParticleAssociation, realiza as operações que envolvem informações de partículas e células: a distribuição de cargas (método *DistributeCharge*) e o avanço das partículas (método *AdvanceParticle*) na simulação.

A CLevPIC agrega uma classe para resolução da equação de Poisson, no caso do PIC-FEM a classe agregada é a CLev_FEM_Poisson e no PIDC a CLev_EFGM_Poisson. A classe CLev_EFGM_Poisson foi implementada como uma especialização da CLev_FEM_Poisson, na qual as funções *Initialize* e *Build* foram especializadas para a inicialização das estruturas de dados específicas do MEFG e para a montagem do sistema de equações discretas.

Apesar de a classe CLev_EFGM_Poisson ser, na implementação atual, derivada da classe CLev_FEM_Poisson, outra hierarquia (generalização) deve ser considerada, promovendo métodos comuns para uma superclasse. As demais classes que fazem parte da biblioteca sdk-levsoft não serão discutidas neste trabalho.



Figura 5.5 Diagrama UML de classes do PIC-FEM. (simplificado)



Figura 5.6 Diagrama UML de classes do PIDC.

5.5 Modelo PIDC paralelo

Conforme discutido anteriormente, várias estratégias e otimizações para paralelização de simulações PIC já foram propostas e podem ser adequadamente aplicáveis ao PIDC. Vale lembrar que, não necessariamente, a célula difusa deverá ser utilizada para desempenhar certas funcionalidades exercidas pelas células no PIC, mas provavelmente as células de integração serivirão a este papel nos programas PIDC.

Foram realizados testes de desempenho em um cluster de PCs do IEAv/CTA com o programa PIC-FEM (PASSARO et al., 2004), usado como referência para o programa PIDC. Apesar do MEF apresentar, para a maioria das implementações, menor custo computacional do que as implementações do MEFG, o tempo total gasto para resolver o campo por qualquer um dos métodos é pouco expressivo se comparado ao tempo total gasto no cálculo da dinâmica das partículas.

Está em fase de testes uma implementação paralela do programa PIDC implementado no Levsoft. A quantidade de memória disponível em cada nó do cluster, e o porte dos testes iniciais que se pretende, possibilita que seja usada a mesma estratégia de paralelização usada na implementação PIC-FEM (PASSARO et al., 2004), descrita a seguir. Em particular, as células de integração do PIDC são, em efeito, os elementos finitos gerados pelo mesmo gerador de malha de Delaunay do Levsoft.

Nossa estratégia de paralelização é semelhante à de Lubeck e Faber (1988). Entretanto, tendo em vista que 1) o tempo de resolução do campo representa uma parcela pequena do ciclo de simulação, e que 2) a matriz de rigidez **K** do sistema de equações discretas (3.9) necessitará ser recalculada apenas se a nuvem de pontos de discretização mudar durante a simulação (PASSARO et al., 2004), apenas a dinâmica das partículas foi paralelizada, sendo o sistema

119

de equações discretas (3.8) relativo ao campo elétrico resolvido seqüencialmente pelo nó mestre do *cluster*.

No início da simulação, as partículas são distribuídas entre os processadores; cada processador mantém cópia da estrutura de células de integração, além de uma cópia do vetor de fontes e da matriz de rigidez relativa ao campo (eq. 3.8). A matriz de rigidez K é montada pelo nó mestre do *cluster* neste momento, a fim de otimizar a realização da distribuição de carga e interpolação do campo, conforme discutido na subseção 5.3.2. Em cada iteração no tempo, cada processador é encarregado de proceder com as seguintes atividades do ciclo PIDC às partículas atribuídas a ele:

- Interpolação da densidade de carga: cada processador distribui a carga de cada partícula pelos nós da malha de elementos finitos (seção 4.2, eq. (4.3)). Por meio da classe ClevCellParticleAssociation (seção 5.4), cada processador conhece as células que contém cada uma de suas partículas, sendo capaz de determinar os nós (pontos de discretização) que receberão alguma contribuição de carga do seu conjunto de partículas. A partir dessas contribuições de carga pode-se calcular o vetor local de fontes de campo (cópia), e usando troca de mensagens com a biblioteca MPI, os vetores locais de cada processador são reduzidos por adição formando o vetor de fontes global.
- Resolução da equação de Poisson: Após o nó mestre ter obtido o vetor de fontes f e calculado a matriz de rigidez K (3.9), o sistema (3.8) é resolvido pelo nó mestre e uma cópia do vetor solução (potencial elétrico) é enviada a cada nó do *cluster*.
- Interpolação do campo elétrico: cada processador deve determinar o campo que atua em cada partícula sob seu controle. Novamente, as informações da classe ClevCellParticleAssociation são utilizadas para melhorar a eficiência na localização dos nós que compõem a célula difusa. O campo elétrico na posição de cada partícula do processador é calculado por (4.5).

 Avanço da partícula no tempo e espaço: cada processador calcula a nova posição no espaço de fase para cada uma das partículas a ele atribuída, usando as equações de diferenças (4.7).

Como foi discutido na seção 2.3, existem muitas estratégias de paralelização possíveis, cuja escolha depende basicamente de 2 fatores: das características fenomenológicas conhecidas *a priori* e da arquitetura computacional paralela a ser utilizada. Portanto, a estratégia de paralelização descrita para o PIDC nesta seção é adequada para problemas de porte não muito grande, devido à replicação das informações concernentes à discretização espacial, e dependendo das características da arquitetura computacional paralela a ser usada.

6 **RESULTADOS**

6.1 Análise de desempenho da abordagem PIC-FEM

O plasma simulado é composto por duas espécies de partículas carregadas: elétrons a uma temperatura inicial de 10000 K e prótons a uma temperatura inicial de 1000 K. As partículas são distribuídas uniformemente no domínio de simulação, um retângulo com razão de aspecto 1:2, tendo, respectivamente, o lado menor e o maior 64 e 128 vezes o comprimento de Debye associado ao plasma. As velocidades seguem uma distribuição de Maxwell-Boltzmann. Consideramos a inexistência de campos externos aplicados e a aproximação eletrostática. Deste modo, apenas o campo elétrico autoconsistente é calculado. Condições de contorno periódicas são impostas, ou seja, quando uma partícula abandona o domínio retangular de simulação, outra partícula com exatamente as mesmas propriedades é introduzida a partir do lado oposto. (PAES et. al. 2003)

Foram considerados três casos testes para avaliar o desempenho e escalabilidade da implementação, o primeiro com 100 mil partículas, o segundo com 250 mil e o terceiro com 500 mil partículas. Foi usada a mesma malha de elementos finitos nos três casos, tendo o número de partículas por célula variando de 11,5 para 28,8 e 57,6, respectivamente para cada caso.

Os testes foram realizados em um cluster do IEAv/CTA (LIMA et al., 2003), com 12 computadores com processadores Athlon Barton 2500, com 1 GB de memória principal por nó conectado por uma rede Fast Ethernet.



Figura 6.1 Speedups obtidos para o programa PIC-FEM (PASSARO et al., 2004)

A tabela 6.1 apresenta os tempos de processamento medidos para os três casos e diferentes números de processadores (de 1 a 10). Pode-se notar que o *speedup*⁴ aumenta à medida que o número de partículas aumenta, confirmando que o custo envolvido no cálculo do campo, para este caso, é pouco expressivo comparado ao custo total da simulação, dado que os

⁴ O *speedup* é definido como o quociente entre as medidas dos tempos de execução dos programas seqüencial e paralelizado.

speedups são próximos de linear. Isto ocorre porque a matriz de rigidez é calculada apenas na primeira iteração, já que a discretização não se altera durante a simulação.

		implementado (PASSARO et al	no sistema Le	evsoft do LEV-IEAv/CT
tempo (s) / nº de partículas				
	# proc.	10 ⁵ partículas	2.5 x 10 ⁵ partículas	5.0 x 10 ⁵ partículas
	1	12376.6	30610.9	61114.9
	2	6246.18	15376.2	30639.7
	3	4194.62	10277.6	20549.5
	4	3166.7	7721.53	15463.3
	5	2555.37	6209.2	12405.0
	6	2146.87	5190.57	10354.4
	7	1850.58	4461.79	8888.42
	8	1639.47	3923.16	7802,04
	9	1470.91	3492.87	6957.59
	10	1330.06	3154.6	6255.86

Tabela 6.1 Medidas de desempenho e escalabilidade do programa PIC-FEM Ά.

6.2 Análise do campo elétrico em meios heterogêneos

Nesta seção apresentamos uma análise detalhada da precisão das aproximações das derivadas da variável de estado da equação de Poisson para meios heterogêneos fornecidas pela abordagem interpolante do MEFG com a técnica de truncamento de domínios. A figura 6.2 ilustra o modelo geométrico, condições de contorno e uma das linhas de avaliação usadas.



Figura 6.2 Modelo geométrico, condições de contorno e linha de avaliação.

Duas discretizações para a geometria do resistor foram utilizadas: uma com 721 nós e a outra com 2.721 nós, uniformemente distribuídos ($h_x=h_y=h$) no domínio de simulação. Correspondentemente, duas aproximações com o MEF foram usadas, para as quais foram geradas malhas de Delaunay com 733 nós e 2726 nós. Foram utilizados os mesmos números de pontos na discretização dos contornos do modelo geométrico para o MEFG e para o MEF, dessa forma, o número de variáveis livres associadas às condições de Dirichlet é o mesmo para ambos os métodos (em cada caso), bem como a mesma discretização na interface material.

Uma aproximação com 12.207 nós usando o MEF (Levsoft) foi usada como aproximação de referência. A influência do parâmetro d_{max} na precisão da aproximação é investigada na próxima subseção. Em seguida, a reprodução das condições físicas de continuidade e descontinuidade das derivadas da variável de estado são verificadas. Em ambas as investigações, os materiais 1 e 2 atribuídos ao domínio foram respectivamente, AI ($\sigma_1 = \sigma_{Al} = 3.57 \times 10^7$ $(\Omega m)^{-1}$) e Cu ($\sigma_2 = \sigma_{Cu} = 5.88 \times 10^7$ $(\Omega m)^{-1}$). Por fim, na subseção 6.2.3, diferentes combinações materiais são testadas para o mesmo modelo geométrico.

6.2.1 Análise do parâmetro d_{max}

O parâmetro d_{max} foi avaliado no intervalo de valores de 1.3 a 3.0. Considerando que o custo computacional do MEFG é crescente com respeito ao número de conectividade (equação 3.18), é natural buscarmos um d_{max} o menor possível. Definimos o percentual de erro relativo entre uma dada aproximação de referência, u_{ref} , e uma aproximação que se deseja avaliar, u_{approx} , por

$$\% Err = 100 \cdot \frac{|u_{ref} - u_{approx}|}{u_{ref}}.$$
(6.1)

As figuras 6.3 e 6.4 mostram que a variação do parâmetro d_{max} não afeta significantemente a precisão da aproximação da variável de estado, dado que o percentual de erro relativo é menor que 0.2%, para uma aproximação com 721 nós de discretização. A figura 6.5 apresenta as linhas equipotenciais elétricas calculadas pelo MEFG.



Figura 6.3 Percentual de erro relativo (eixo y) para o potencial elétrico em pontos uniformemente distribuídos no domínio para diferentes valores de d_{max} .



Pontos de avaliação arbitrários sobre a linha de avaliação





Figura 6.5 Linhas equipotenciais calculadas com o MEFG interpolante usando a técnica de truncamento de domínios (721 nós, $d_{max}=1.8$).

Os gráficos das figuras 6.6 e 6.7 mostram que as aproximações obtidas para a norma Euclideana do campo elétrico estão em acordo com as obtidas pelo MEF, sendo que o percentual de erro relativo é menor ou igual a 7% para todos os valores testados de d_{max} .



Figura 6.6 Norma do campo elétrico (eixo y) sobre pontos ao longo da linha de avaliação cruzando a interface (figura 6.2).



Figura 6.7 Percentual de erro relativo para a norma do campo elétrico sobre a linha de avaliação cruzando a interface.

Pode-se esperar maiores erros nas proximidades das duas regiões críticas indicadas na figura 6.8 devido aos cantos (*corners*) da geometria. De fato, pelas figuras 6.9 e 6.10, pode-se observar que os erros cometidos nas aproximações da norma do campo elétrico, calculada sobre as linhas de

avaliação paralelas à interface material indicadas na figura 6.8, são maiores em pontos localizados nas regiões críticas.



Figura 6.8 Linhas de avaliação paralelas à interface material e regiões críticas.



Figura 6.9 Percentual de erro relativo para a norma do campo elétrico. Linha de avaliação paralela (superior) a interface material.



Figura 6.10 Percentual de erro relativo para a norma do campo elétrico. Linha de avaliação paralela (inferior) a interface material.

Os valores de d_{max} entre 1.6 e 2.0 parecem prover melhor concordância entre as aproximações do MEFG interpolante (721 nós) resultantes e a de referência do MEF (12.207 nós).

Mantendo-se d_{max} fixo e igual a 1.6, e comparando-se as aproximações obtidas com as outras duas discretizações (733 e 2726 nós) usando o MEF com a de referência com 12207 nós (MEF), nota-se que o percentual de erro atingido pela aproximação do MEFG com 721 nós corresponde ao percentual de erro relativo da aproximação do MEF com 2726 nós, aproximadamente 4 vezes mais nós, o que pode ser observado pelos gráficos de erros das figuras 6.11, 6.12 e 6.13. Adicionalmente, em média, o erro relativo cometido na aproximação da variável de estado é aproximadamente duas ordens de magnitude menor que o erro relativo cometido na aproximação do campo para ambos os métodos.



Figura 6.11 Percentual de erro relativo para o potencial elétrico sobre a linha de avaliação cruzando a interface (Figura 6.2).

O gráfico da figura 6.13 mostra que tanto as aproximações obtidas com o MEFG e com o MEF apresentam erros maiores em pontos localizados nas vizinhanças das regiões críticas.



Figura 6.12 Percentual de erro relativo para a norma do campo elétrico sobre a linha de avaliação cruzando a interface (Figura 6.2)



Figura 6.13 Percentual de erro relativo para a norma do campo elétrico sobre a linha de avaliação paralela (superior) à interface material (Figura 6.2).

6.2.2 As condições de interface material

Na figura 6.14 são comparados os resultados obtidos com o uso da abordagem interpolante do MEFG com truncamento de domínios e sem truncamento para as componentes (a) tangencial e (b) normal à interface material. Quando a técnica de truncamento de domínio é usada tanto a componente contínua quanto a descontínua são reproduzidas corretamente pela aproximação. Contudo, sem o tratamento da descontinuidade material pela técnica de truncamento, oscilações espúrias comprometem a aproximação de ambas componentes nas proximidades da interface material.



Figura 6.14 (a) Componente E_x e **(b)** componente E_y do vetor campo elétrico calculadas sobre a linha de avaliação que cruza a interface material.

A fim de verificar as relações físicas de continuidade e descontinuidade das componentes do campo ao cruzar a interface material, discutido na seção 3.3, conduzimos uma investigação da precisão com que estas condições físicas são satisfeitas na vizinhança da interface material. Foram criados dois conjuntos de pontos, em que o primeiro conjunto consiste dos pontos ao longo de uma reta paralela à interface material do lado de cima, e o outro conjunto é formado por pontos verticalmente alinhados, suficientemente próximos aos primeiros, e também distribuídos ao longo de uma reta paralela à interface, analogamente à ilustração da figura 6.8.

Ambas componentes do campo foram avaliadas. Primeiramente calculamos os valores de campo para cada componente nos pontos pertencentes ao primeiro conjunto (lado de cima da interface), então, usando as condições de continuidade e descontinuidade esperada para cada componente, $\sigma_1 E_{1n} = \sigma_2 E_{2n}$ e $E_{1t} = E_{2t}$, podemos estimar o valor teórico esperado para cada componente imediatamente após a interface (do lado debaixo da interface, meio material 2). Os valores de campo teoricamente estimados para cada componente, logo após a interface material, são comparados com os valores numericamente calculados nos pontos do segundo conjunto.

O erro relativo entre a estimativa teórica das componentes de campo e os valores numericamente calculados para as mesmas componentes de campo são apresentados nas figuras 6.15 e 6.16. Exceto em pontos localizados nas regiões críticas, pode-se dizer que as condições de interface são satisfatoriamente reproduzidas pela aproximação fornecida pelo MEFG interpolante com truncamento de domínio, considerando a pequena magnitude dos erros relativos obtidos, que são freqüentemente menores do que 0.1 e em média da ordem de 0.04.

135



Figura 6.15 Condição de descontinuidade: Percentual de erro relativo entre a estimativa teórica e os valores calculados.



Figura 6.16 Condição de continuidade: Percentual de erro relativo entre a estimativa teórica e os valores calculados.

A figura 6.17 permite uma comparação qualitativa entre os valores calculados para a norma do campo elétrico pelo MEFG e pelo MEF ao longo da linha

paralela e do lado de cima da interface material. As aproximações menos refinadas de ambos os métodos subestimam o pico do campo nas extremidades, contudo, a aproximação fornecida com menos nós do MEFG é corretamente contínua e suave, diferentemente da aproximação fornecida pela discretização menos refinada do MEF.



Pontos de avaliação paralelos (superior) à interface material

Figura 6.17 Comparação entre os valores da norma do campo elétrico calculado pelo MEFG e pelo MEF.

Pelos gráficos das figuras 6.18 e 6.19 podemos observar a excelente concordância entre as aproximações fornecidas pelo MEFG e a aproximação de referência do MEF com 12.207 nós para os valores de campo calculados sobre as linhas de avaliação paralelas (superior e inferior) à interface material. Pode ser observado que para as aproximações em ambos os lados da interface, os erros cometidos pela aproximação menos refinada do MEFG com 721 nós são da mesma magnitude dos erros cometidos pela aproximação com 2726 nós do MEF.



Figura 6.18 Percentual de erro relativo entre os valores da norma do campo elétrico calculados pelo MEFG e pelo MEF: pontos de avaliação sobre a linha paralela superior à interface material.



Figura 6.19 Percentual de erro relativo entre os valores da norma do campo elétrico calculados pelo MEFG e pelo MEF: pontos de avaliação sobre a linha paralela inferior à interface material.

6.2.3 Variação de magnitude da descontinuidade material

Nesta subseção investigamos a robustez da abordagem interpolante do MEFG com truncamento de domínios usando o mesmo modelo geométrico mas aumentando a descontinuidade material caso a caso. Para este fim, foram realizadas as mesmas análises numéricas que antes, para os seguintes casos de arranjo material: (1) tungstênio e cobre ($\sigma_{Cu}/\sigma_W = 3,2308$), (2) chumbo e cobre ($\sigma_{Cu}/\sigma_{Pb} = 11,644$), e (3) grafite e cobre ($\sigma_{Cu}/\sigma_{Graf} = 2.055,944$).



Pontos sobre a linha de avaliação cruzando a interface

Figura 6.20 Percentual de erro relativo: potencial elétrico calculado pelo MEFG e pelo MEF. (Linha de avaliação indicada na Figura 6.2, caso $\sigma_{Cu} / \sigma_W = 3,2308$)

Considerando os gráficos de erros nas figuras 6.20 a 6.22, pode-se notar que o erro aumenta à medida que a magnitude da descontinuidade material aumenta, tanto para o MEFG quanto para o MEF. Como antes, os erros cometidos pela aproximação fornecida pelo MEFG com 721 nós são da mesma magnitude dos erros cometidos pela aproximação com o MEF usando 2726 nós, em outras

palavras, as aproximações fornecidas pelo MEFG convergem para a aproximação de referência do MEF (12.207 nós) mais rapidamente do que as aproximações fornecidas pelo MEF. Além disso, a descontinuidade esperada para a norma do campo ao longo da linha de avaliação que cruza a interface material (figura 6.2) é corretamente reproduzida do ponto de vista qualitativo para cada um dos três casos, como pode ser observado nos gráficos das figuras 6.23, 6.24 e 6.25.



Pontos sobre a linha de avaliação cruzando a interface

Figura 6.21 Percentual de erro relativo: potencial elétrico calculado pelo MEFG e pelo MEF.(Linha de avaliação indicada na Figura 6.2, caso $\sigma_{Cu} / \sigma_{Pb} = 11,644$)



Figura 6.22 Percentual de erro relativo: potencial elétrico calculado pelo MEFG e MEF. (Linha de avaliação: Figura 6.2, caso: $\sigma_{Cu} / \sigma_{Graf} = 2.055,944$)



Figura 6.23 Norma do campo elétrico calculado para o caso $\sigma_{Cu} / \sigma_W = 3,2308$ ao longo da linha de avaliação indicada na Figura 6.2.


Figura 6.24 Norma do campo elétrico calculado para o caso $\sigma_{Cu} / \sigma_{Pb} = 11,644$ ao longo da linha de avaliação indicada na Figura 6.2.



Figura 6.25 Norma do campo elétrico calculado para o caso $\sigma_{Cu} / \sigma_{Graf} = 2.055,944$ ao longo da linha de avaliação indicada na Figura 6.2.

As figuras 6.26 a 6.28 mostram novamente que, para os dois métodos, os erros relativos no cálculo do campo elétrico aumentam à medida que a descontinuidade aumenta, contudo, os erros aumentam mais lentamente para as aproximações MEFG. Note que o erro relativo máximo cometido pela aproximação MEF com 2726 nós fica próximo de 8.5% (Figura 6.26) e chegou a 11% (Figura 6.28) no caso de maior descontinuidade, ao passo que o erro relativo cometido pelas aproximações menos refinadas do MEFG (721 nós) variam entre 7% (Figura 6.26) a 8.5% (Figura 6.28).



Figura 6.26 Percentual de erro relativo: campo elétrico calculado pelo MEFG e MEF. (Linha de avaliação indicada na Figura 6.2, caso $\sigma_{Cu} / \sigma_W = 3,2308$)



Figura 6.27 Percentual de erro relativo: campo elétrico calculado pelo MEFG e MEF. (Linha de avaliação indicada na Figura 6.2, caso $\sigma_{Cu} / \sigma_{Pb} = 11,644$)



Figura 6.28 Percentual de erro relativo: campo elétrico calculado pelo MEFG e MEF. (Linha de avaliação indicada na Figura 6.2, caso $\sigma_{Cu} / \sigma_{Graf} = 2.055,944$)



Figura 6.29 Percentual de erro relativo: campo elétrico calculado pelo MEFG e MEF. (Linha de avaliação superior da Figura 6.8, caso $\sigma_{Cu} / \sigma_W = 3,2308$)

Analisaremos agora os erros cometidos no cálculo da norma do campo elétrico sobre a linha de avaliação superior paralela à interface material, indicada na Figura 6.8, para as três combinações de materiais.

As figuras 6.29 a 6.31, respectivamente associadas aos casos de materiais (1), (2) e (3), também mostram que os erros relativos cometidos pela discretização mais refinada do MEF (2726 nós) são da mesma ordem de magnitude ou maiores que os cometidos pela aproximação menos refinada (721 nós) do MEFG. Além disso, a magnitude do erro relativo máximo cresce à medida que a magnitude da descontinuidade cresce, como observado antes.

Pelos resultados apresentados nas figuras 6.29, 6.30 e 6.31, pode-se observar que os erros relativos médios cometidos pelo MEFG são frequentemente menores que 10% e em média, aproximadamente, 4.5%.







Figura 6.31 Percentual de erro relativo: campo elétrico calculado pelo MEFG e MEF. (Linha de avaliação superior Figura 6.8, caso $\sigma_{Cu} / \sigma_{Graf} = 2.055,944$)

6.3 Análise qualitativa do campo elétrico autoconsistente

Nesta seção apresentamos resultados preliminares da aplicação do modelo PIDC para simulação de um plasma composto por duas espécies de partículas: elétrons (180000) e protons (180000) a uma temperatura inicial de, respectivamente, 10000 K e 1000 K, totalizando 360000 partículas de simulação. Em nosso código, ambas espécies de partículas são deslocadas ao longo da simulação, apesar de que em muitos códigos para simulação de plasmas apenas os elétrons sejam deslocados e as partículas mais pesadas (íons) serem mantidas fixas. As partículas foram distribuídas uniformemente no espaço e suas velocidades foram amostradas obedecendo-se a distribuição de Maxwell-Boltzmann (WOODS, 1993).

O domínio de simulação é um retângulo com dimensões da ordem de cem vezes o comprimento de Debye. O volume das células difusas é aproximadamente o volume de uma esfera de Debye, se os raios dos domínios de influência dos pontos nodais forem definidos aproximadamente iguais ao comprimento de Debye.

Não foram consideradas fontes externas de campo na simulação, desta forma, a única força atuante no movimento das partículas é proveniente do campo elétrico autoconsistente do plasma. Além disso, a fim de preservar o número total de partículas ao longo da simulação, foram impostas condições de contorno periódicas em todo o contorno do domínio, ou seja, se uma partícula abandona o domínio de simulação, outra partícula com exatamente as mesmas características é inserida no domínio pelo lado oposto ao lado de saída.

As linhas equipotenciais elétricas e uma visualização vetorial do campo elétrico ao final da primeira ($t_1 = 0.2 \cdot \omega_{pe}^{-1} = 5 \cdot 10^{-12} s$) e trigésima ($t_{30} = 1.5 \cdot 10^{-10} s$) iterações são apresentados nas figuras 6.32 e 6.33. Apesar de estes resultados estarem corretos do ponto de vista qualitativo, esforços adicionais devem concentrar-se na implementação de cálculos para realizar a análise quantitativa das características do plasma simulado. Contudo, os bons resultados apresentados na seção anterior indicam que podem ser esperados resultados numéricos para o PIDC tão bons quanto os obtidos pelo PIC-MEF (PAES et al., 2003).



Figura 6.32 Linhas equipotenciais da função potencial elétrico do plasma, relativas aos instantes $t_1 = 5 \cdot 10^{-12} s$ (esquerda) e $t_{30} = 1.5 \cdot 10^{-10} s$ (direita).



Figura 6.33 Representação vetorial do campo elétrico do plasma, correspondente aos instantes $t_1 = 5 \cdot 10^{-12} s$ (esquerda) e $t_{30} = 1.5 \cdot 10^{-10} s$ (direita).

7 CONSIDERAÇÕES E PERSPECTIVAS

Métodos *meshfree*, mais que uma nova classe de métodos, se revelaram técnicas numéricas com grande potencial de aplicação em diversas áreas. Em particular o MEFG, originalmente proposto no contexto de engenharia mecânica, vem se popularizando em outras áreas e se consagrando como uma robusta alternativa numérica aos métodos baseados em malha, capaz de fornecer boas aproximações. Por outro lado, ainda existem áreas nas quais estas formulações independentes de malha permanecem inexploradas ou em um estágio inicial de investigação. Este é o caso da área de simulação de plasmas via modelos de partículas, em particular dos modelos PIC.

As vantagens no tratamento de geometrias complexas e fácil adaptatividade dos métodos *meshfree*, características que se popularizaram rapidamente em outras áreas, vêm chamando recentemente a atenção daqueles que trabalham com simulação de plasmas. De fato, Christlieb et al. (2004) e Christlieb et al. (2006) propuseram o método *Boundary integral / treecode*, no qual um método *gridless treecode* é usado para resolver as equações de campo e um modelo de interações clusters-partículas / partículas-partículas é usado para calcular as contribuições das partículas. Até onde se sabe, essa abordagem pode ser considerada a primeira abordagem *meshfree* no contexto geral de simulação de plasmas via modelos de partículas.

O método Particle-In-Diffuse-Cell, proposto nesta tese, é uma contribuição original neste campo, pois, de acordo com os levantamentos bibliográficos realizados, é a primeira formulação PIC *meshfree* para simulação de plasmas proposta na Literatura. O formalismo *meshfree* é introduzido no modelo PIC a partir do conceito do elemento difuso, originário do MED (NAYROLES et al., 1992), precursor do MEFG (BELYTSCHKO et al., 1994), culminando na concepção da célula difusa e o desenvolvimento da formulação PIDC.

Foi realizada a engenharia dos softwares PIC-FEM e PIDC no sistema Levsoft, nesta ordem, discutida no capítulo anterior, e pelos diagramas UML apresentados pode-se observar muitas semelhanças entre os programas. Considera-se um aspecto positivo as semelhanças entre os modelos computacionais implementados para o PIC-FEM e para o PIDC, pois permitem estender com mais facilidade as funcionalidades de um programa PIC *meshbased* para um PIC *meshfree*.

Os principais algoritmos concernentes à implementação do PIDC foram apresentados, incluindo os relativos ao cálculo das funções de forma. Adicionalmente, foram apresentadas algumas otimizações de código possibilitadas pelas particularidades dos algoritmos utilizados na implementação do PIDC. O modelo computacional apresentado pode servir como referência para outras implementações com, eventualmente, diferentes métodos *meshfree* para resolução do campo.

Devido ao atual estágio de desenvolvimento e aplicação do MEFG em eletromagnetismo computacional, e especialmente devido às diferentes implementações possíveis para o MEFG, realizou-se uma ampla investigação da implementação desenvolvida para ser usada no PIDC, e foram obtidos resultados relevantes e inéditos em eletromagnetismo computacional (MARQUES et al., 2007a).

Este trabalho limitou-se ao desenvolvimento de um modelo matemático e computacional para simulação de plasmas via um modelo de partículas PIC *meshfree* e à busca de indicações quanto ao real potencial de aplicação do MEFG em simulação de plasmas, cenário em que uma boa aproximação para as derivadas da variável de estado, incluindo na vizinhança de interfaces materiais, é imprescindível para garantir uma descrição correta das trajetórias das partículas, especialmente em dispositivos baseados em plasmas.

Adicionalmente, investigou-se a escalabilidade e desempenho do programa PIC-FEM orientado a objetos, paralelizado segundo o modelo descrito em Marques et al. (2004a), e a implementação computacional do modelo PIDC está em fase de testes. Pode-se esperar que a implementação do PIDC paralelizado, segundo descrito nesta tese, apresente desempenho semelhante àquele obtido com o PIC-FEM (PASSARO et al., 2004; MARQUES et al., 2004a), considerando a rápida convergência demonstrada pela implementação do MEFG interpolante proposta (MARQUES et al., 2007a). Investigações mais detalhadas a respeito do tempo computacional para convergência entre a abordagem interpolante do MEFG (incluindo as técnicas adicionais) e o MEF devem ser realizadas cuidadosamente, bem como os limites de aplicação da presente abordagem do MEFG (MEFG interpolante mais técnicas adicionais), conforme discutido no capítulo de resultados e também abordado em Marques et al. (2007a).

Alguns conceitos físicos e matemáticos que fundamentam o modelo de simulação de plasmas via modelos PIC foram discutidos e relacionados na descrição da formulação PIDC. Os métodos PIC-FEM e element-free Galerkin foram revisados e, devido às conhecidas analogias entre o MEFG e o MEF, espera-se que tenha sido possível discutir com suficiente clareza a formulação do PIDC.

Há muito a ser investigado no contexto da formulação PIDC devido à originalidade e potencial de aplicação da mesma. Todavia, tentar-se-á ser breve na descrição de alguns tópicos que merecem atenção neste novo contexto.

Trabalhos futuros devem incluir o ajuste dos parâmetros livres do MEFG, tais como d_{max} , buscando identificar valores adequados para a simulação de plasmas, em diferentes condições, e o estudo do efeito que a escolha de outras funções de ponderação (do MEFG) tem no caso de simulação de plasmas. Quanto a este último ítem, ressalta-se que funções de ponderação com

decaimentos diferentes produzirão perfis de distribuição de carga diferentes (MARQUES, 2003), tendo em mente que as funções de forma do MEFG são usadas para realizar a distribuição das cargas no PIDC. Em outras palavras, deve ser investigada quão adequada é a função de forma utilizada para realizar a tarefa de particionamento de carga, mesmo que, eventualmente, seja necessário abrir mão das otimizações possibilitadas pelos algoritmos envolvidos no PIDC. Reforça-se, considera-se importante avaliar outras funções de ponderação, como por exemplo, funções normalizadas de Sheppard (MARECHAL, 1998) ou outras, para entermos melhor *como* e *o quanto* estes parâmetros livres interferem na acurácia da aproximação no contexto de simulação de plasmas.

As investigações listadas a seguir representam contribuições originais à literatura específica e estão em andamento: 1) análises de desempenho e escalabilidade do PIDC, 2) avaliação da eficiência das otimizações propostas para o PIDC, e 3) comparação com outros métodos para casos reportados na Literatura.

O tratamento de meios homogêneos no MEFG deve continuar a ser investigado na busca do desenvolvimento de uma estratégia que evite o truncamento e também os inconvenientes das outras técnicas, o que será investigado pelo autor no contexto de um projeto de pesquisa, já aprovado pela Fundação de Apoio à Pesquisa do Estado de Mato Grosso, a ser executado na Universidade do Estado de Mato Grosso UNEMAT. Neste contexto específico, também será realizada a investigação da imposição das condições de contorno pelo método de substituição direta com a abordagem interpolante do MEFG para a equação de Poisson: os limites de aplicação desta abordagem é um tópico que ainda falta ser discutido com o devido rigor na Literatura.

O algoritmo geral e otimizações que compõem o modelo computacional do PIDC, descritos no capítulo 5, são inéditos e podem servir como referência para futuros modelos computacionais para simulação de plasmas PIC

meshfree, ou mesmo para diferentes ajustes dos parâmetros livres do PIDC. O modelo orientado a objetos apresentado consiste em uma primeira implementação PIDC no sistema Levsoft, e deverá sofrer modificações em breve. Em outras palavras, do ponto de vista computacional, apesar da implementação de uma formulação inédita ser naturalmente inédita, não tivemos neste momento, a pretenção de desenvolver um modelo PIC *Meshfree* orientado a objetos para referência em programas para simulação de plasmas como no trabalho de NIETER e CARY (2004). Diferentemente, optou-se pela reutilização do código do PIC-FEM, deixando o desenvolvimento de um modelo orientado a objetos mais elaborado para o PIDC e a inclusão de algoritmos mais especializados para trabalhos futuros.

Algoritmos específicos para o PIDC devem ser estudados, por exemplo, para tornar mais eficiente a determinação dos nós que compõem a célula difusa, e há de se notar que este procedimento é proporcional ao número de partículas, segundo a abordagem proposta, de modo que informações de conectividade nodal ou estruturas de dados mais especializadas, associando pontos nodais e partículas, podem permitir redução expressiva do tempo total de simulação ao desempenharem a tarefa de identificação da célula difusa em um dado ponto de avaliação (neste caso, pode ser a posição de uma partícula ou mesmo um ponto de integração).

A despeito da robustez e eficiência apresentada pela abordagem do MEFG que vem sendo investigada, a maior parte das implementações deste método apresenta maior custo computacional que outros métodos, *meshfree* ou de elementos finitos, e conforme discutido em Marques et al. (2007a), Krysl e Belytschko (2001), e Xuan et al. (2004), uma comparação rigorosa deve levar em conta o grau de convergência das aproximações além do tempo de processamento. Sugere-se que seja avaliado o uso de outros métodos *meshfree* e, vale lembrar que, sendo estes, métodos de partição de unidade, provavelmente poderão ser utilizados para simulação de plasmas de forma bastante semelhante ao PIDC.

Para encerrar, ressalta-se o recente estágio de desenvolvimento dos métodos *meshfree*, tanto em simulação de plasmas quanto em eletromagnetismo computacional dentre outras áreas, e que o principal interesse no desenvolvimento dessas formulações está relacionado ao estudo de situações envolvendo sucessivo refinamento de malha, geometrias complexas bi ou tridimensionais e continuidade da aproximação. Neste contexto, o método PIDC, proposto e descrito nesta tese, formaliza uma classe de métodos PIC *meshfree*, inédita no contexto específico de modelos Particle-In-Cell.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABE, N. M.; PASSARO, A.; FRANCO, M.A. R. *et al.* Um sistema de software para análise de dispositivos e componentes de óptica integrada, fibras ópticas e microondas. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ELETROMAGNETISMO, 5., 2002, Gramado. **Anais...** Gramado: [s.n], 2002.

BASTOS, J. A. P. **Eletromagnetismo e cálculo de campos**. Florianópolis: UFSC, 1989.

BELYTSCHKO, T.; KRYSL, P. ESFLIB: a library to compute the element-free Galerkin shape functions, **Computational Methods in Applied Mechanic Engineering**, v.190, p. 2181-205, 2001.

BELYTSCHKO, T.; DOLBOW, J. An introduction to programming the meshless element-free Galerkin method, **Comput. Mechanics**, v.5, n.3, p. 207-241, 1998.

BELYTSCHKO, T.; KRONGAUZ, Y.; ORGAN, D., FLEMING, M.; KRYSL, P. Meshless Methods: An overview and recent developments, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v.139, p.3-47, 1996.

BELYTSCHKO, T.; LU, Y. Y.; GU, L. Element-free Galerkin methods. International Journal for Numerical Methods in Engineering, v. 37, p.229-256, 1994.

BIRD, G. A. Molecular gas dynamics.Oxford, U.K.: Clarendon Press, 1976.

BIRD, G. A. Nonequilibrium radiation during re-entry at 10 km/s. **AIAA Paper 87-1543**, 1987.

BIRDSALL, C.K. Particle-in-cell charged-particle simulations plus Monte Carlo collisions with neutral atoms, **IEEE Transactions on Plasma Science**, v.19, n. 2, p.65-85, 1991.

BIRDSALL, C. K.; LANGDON, A. B. **Plasma physics via computer simulation.** New York: McGraw-Hill, 1985.

BOEWERS, K. J. Accelerating a particle-in-cell simulation using a hybrid counting sort. **Journal of Comput. Physics**, v. 173, p.393-411, 2001.

BOSE, D.; CANDLER, G.V. Advanced model of nitric oxide formation in hypersonic flows, **Journal of Thermophysics and Heat Transfer**, v. 12, n. 2, p.214-222, 1998.

BOTTAUSCIO, O.; CHIAMPI, M.; MANZIN, A. Element-free Galerkin method in eddy-current problems with ferromagnetic media, **IEEE Transactions on Magnetics**, v. 42, n. 5, p.1577-1584, 2006.

BOYD, I. D.; BOSE, D.; CANDLER, G. V. Monte Carlo modeling of nitric oxide formation based on a quasi-classical trajectory calculations, **Phys. Fluids**, v.9, n. 4, p.1162-1170, 1996.

BOYD, I. D. A threshold line dissociation model for the direct simulation Monte Carlo method, **Phys. Fluids**, v.8, n. 5, p.1293-1300, 1996.

BREITKOPF, P.; TOUZOT, G.; VILLON, P. Consistency approach and di_use derivation in element-free methods based on moving least squares approximation, **Computer Assisted Mechanics and Engineering Sciences**, v. 5, p. 479-501, 1998.

BREITKOPF, P.; RASSINEUX, A.; TOUZOT, G. ; VILLON, P. Explicit form and efficient computation of MLS shape functions and their derivatives, **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 48, p. 451-466, 2000.

BUNEMAN, O. Dissipation of currents in ionized media, **Physical Review**, v. 115, p. 503–517, 1959.

CAMPBELL, P. M.; CARMONA, E. A.; WALKER, D. H. Hierarchical domain decomposition with unitary load balancing for electromagnetic particle-in-cell codes. **IEEE Concurrency**, p.943-950, 1990.

CAPITELLI, M.; ARMENISE, I.; GORSE, C. State to state approach in the kinetics of air components under re-entry conditions, **Journal of Thermophysics and Heat Transfer**, v. 11, n. 4, p.570-578, 1997.

CAPITELI, M., CASSAVOLA, A.; COLONNA, G.; De GIACOMO, A. Laserinduced plasma expansion: Theoretical and experimental aspects, **Spectrochimica Acta Part B**, v. 59, p.271-289, 2004.

CARMONA, E. A.; CHANDLER, L. J. On parallel PIC versatility and the structures of parallel PIC approach, **Concurrency: Practice and Experience**, v. 9, p.1377-1405, 1997.

CHENG, S.; SANTI, M.; CELIK, M.; MARTINEZ-SANCHES M.E.; PERAIRE, J. Hybrid PIC-DSMC simulation of a Hall thruster plume on unstructured grids. **Computer Physics Communications**, v. 164, p.73-79, 2004.

CHRISTLIEB, A. J.; KRASNY, R.; VERBONCOEUR, J. P.; EMHOFF, J. W.; BOYD, I. D. Grid-free plasma simulation techniques. **IEEE Transactions on Plasma Science**, v. 34, n. 2, p.149-165, 2006. CHRISTLIEB, A. J.; KRASNY, R.; VERBONCOEUR, J. P. Efficient Particle Simulation of Virtual Cathod using a grid-free treecode poisson solver. **IEEE Transactions on Plasma Science**, v. 22, n. 2, p.384-389, 2004.

CINGOSKI, V.; MIYAMOTO, N.; YAMASHITA H. Element-Free Galerkin Method for Electromagnetic Field Computation. **IEEE Transactions on Magnetics**, v. 34, n. 5, p.3236-3239, 1998.

CORDES, L. W.; MORAN, B. Treatment of material discontinuity in the Element-Free Galerkin method. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 139, p.75-89, 1996.

COULAUD, O.; DUSSERE, M.; HÉNON, P.; LEFEBVRE, E.; ROMAN, J. Optimization of a kinetic laser-plasma interaction code for large parallel systems, **Parallel Computing**, v. 29, p.1175-1189, 2003.

DAWSON, J.M.; LIN, A.T. **Particle simulation:** handbook of plasma physics, Elsevier Science Publishers, v. 2, 1984.

DAWSON, J.M. One-dimensional plasma model, **Physics of Fluids**, v. 5, p.445–459, 1962.

DECYK, V. K. UPIC: A framework for massively parallel particle-in-cell codes. **Computer Physics Communications**, v. 177, n. 1-2, p.95-97, 2007

DECYK, V. K.; NORTONB, C. D. UCLA Parallel PIC Framework, **Computer Physics Communications**, v. 164, n. 1-3, p.80-85 2004.

DECYK, V.K. Skeleton PIC codes for parallel computers, **Computer Physics Communications**, v. 87, p.87-94, 1995.

ELSGOLTZ, L. Ecuaciones diferenciales y el calculo variacional. Moscou, MIR, 432p., 1969.

ERCOLANO, B.; BARLOW, M.J.; STOREY, P.J.; LIU, X.-W. Mocassin: a fully three dimensional Monte-Carlo photoionization code, **Mon. Not. R. Astron. Soc.**, v. 340, p.1136-1152, 2003.

FERRARO, R. D.; LIEWER, P. C.; DECYK, V. K. Dynamic load-balancing for a 2D concurrent plasma PIC code. **Journal of Computational Physics**, v. 109, n. 2, p.329-341, 1993.

GARRIGUES, L.; HERON, A.; ADAM, J. C.; BOEUF, J. P. Hybrid and particle in cell model of a stationary plasma thruster. **Plasma Sources Science. Technology**, v. 9, p.219-226, 2000.

GIMELSHEIN, S.F.; IVANOV, M.S.; MARKELOV, G.N. Statistical simulation of Nonequilibrium rarefied flows with quasiclassical vibrational energy transfer model, **Journal of Thermophysics and Heat Transfer**, v. 12, n. 4, p.489-495, 1998.

HÄUSSLER-COMBE, U.; KORN, C. An adaptive approach with the elementfree Galerkin method, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**., v.162, p.203-222, 1998.

HERAULT, C.; MARECHAL, Y. Boundary and interface conditions in meshless methods. **IEEE Transactions on Magnetics**, v. 35 n. 3, p.1450-1453, 1999.

HO, S. L.; YANG, S.; MACHADO, J. M.; WONG, H. C. Application of a Meshless Method in Electromagnetics. **IEEE Transactions on Magnetics**, v. 37, n. 5, p. 3198-3202, 2001.

HO, S. L.; YANG, S.; NI, P.; WONG, H. C. Developments of an efficient global optimal design technique – a combined approach of MLS and SA algorithm. **Compel – The International Journal for Computation and Mathematics in Electrical and Electronic Engineering**, v. 21, n. 4, p.604-614, 2002.

HRÄCH, R.;SEDLÁK, D.;VICHERA, M.;SIMEK, J. Self-consistent modelling of plasma–solid interaction in electronegative plasmas. **Thin Solid Films**, v. 459, p. 137-140. 2003.

ITIKAWA, Y.; ICHIMURA, A.; ONDA, K.; SAKIMOTO, K.; TAKAYANAGI, K. Cross sections for collisions of electrons and protons with oxygen molecules, **Jounal of Physical Chemical Reference Data**, v.18, n.1, p. 23-42, 1989.

ITIKAWA, Y.; HAYASHI, N.; ICHIMURA, A.; ONDA, K.; SAKIMOTO, K.; TAKAYANAGI. Cross sections for collisions of electrons and protons with nitrogen molecules. **Jounal of Physical Chemical Reference Data**, vol. 15, n. 3, 985-1010p., 1986.

JACKSON, J. D. **Classical electrodynamics**. 2. ed. New York: John Wiley & Songs, 1975.

JOHNSON, G. R.; BEISSEL, S. R. Normalized smoothing functions for SPH impact computations. International Journal for Numerical Methods in Engineering, v. 39, n. 16, p.2725-2741,1996.

KAFAFY, R.E.; WANG, J. A Hybrid Grid Immersed Finite Element Particle-in-Cell Algorithm for Modeling Spacecraft–Plasma Interactions. **IEEE Transactions on Plasma Science**, v. 34, n. 5, p. 2114-2124, 2006. KANDALA, R.; CANDLER, G.V. Numerical studies of laser induced energy deposition for supersonic flow control. **AIAA Journal**, v.42, n. 11, p. 2266 -2275, 2004.

KNIGHT, D. Aerodynamic flow control at high speed using energy deposition. In: WORKSHOPON MAGNETOPLASMA AERODYNAMICS FOR AEROSPACE APPLICATIONS, 4., 2002, Moscow. **Proceedings...** Moscow: Institute for High Temperatures/Russian Academy of Sciences, 2002.

KRONGAUZ, Y.; BELYTSCHKO, T. Enforcement of essential boundary conditions in meshless approximations using finite elements. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 131, p.133-45 1996.

KRONGAUZ, Y.; BELYTSCHKO, T. EFG approximation with discontinuous derivatives. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v.41, p.1215-1233, 1998.

KRYSL, P.; BELYTSCHKO, T. Element-Free Galerkin method: convergence of the continuous and discontinuous shape functions. **Computational Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 148, p.257-277, 1997.

KRUER, W.L. **The physics of laser plasma interactions**. New York: Addison-Wesley Publishing Company Inc., 1988.

LANCASTER, P.; SALKAUSKAS, K. Surfaces generated by moving least squares methods. **Math. Comput.**, v. 37, p.141-158, 1981.

LAPENTA, G. Automatic adaptation in mono- and multi-dimensional PIC codes, In: INTERNATIONAL SYMPOSIUM FOR SPACE SIMULATIONS (ISSS-7), 7., 2005, Los Alamos. **Proceedings...** Disponível em: <u>http://www.rish.kyoto-</u> <u>u.ac.jp/isss7/CDROM/CONTENTS/DATA_PDF/T-GLAP.PDF</u>. Acesso em: 25 Apr. 2008.

LARSON, D.J. A Coulomb collision model for PIC plasma simulation. **Journal** of Computational Physics, v. 188, p.123-138, 2003.

LI, S.; LIU, W.K. Meshfree and particle methods and their applications. **Applied Mechanics Review,** v. 55, n. 1, p.1-34, 2002.

LIEBERMAN, M.A.; LICHTENBERG, A.J. **Principles of plasma discharges and materials processing**. New York: John Wiley and Sons, Inc., 1994.

LIEWER, P.; DECYK, V. K. A general concurrent algorithm for plasma particlein-cell simulation codes. **Journal of Comput. Physics,** v. 85, p.302, 1989.

LISZKA, T. An interpolation method for an irregular set of nodes. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 20, p.599-612, 1984.

LIU, W. K.; JUN, S.; ZHANG, Y. F. Reproducing kernel particle methods, International Journal for Numerical Methods in Engineering, v.20, p.1081-1106, 1995.

LIU, G. R. **Meshfree Methods, moving beyond the finite element method.** Florida: CRC Press LCC, 2002.

LIU, S.; YANG, Q.; CHEN, H.; XU, G.; LIU, F. Improvement of the Element-Free Galerkin Method for Electromagnetic Field Calculation. **IEEE Transactions on Magnetics**, v. 40, n. 1, p.1866-1869, 2004.

LONGO, S. Monte Carlo models of electron and ion transport in non-equilibrium pasmas. **Plasma Sources Science Technology**, v. 9, p.468-476, 2000.

LÖHNER, R.; OÑATE, E. An advancing front point generation technique. **Comunications in Numerical Methods in Engineering**, v.14, p.1097-108, 1998.

LUBECK, O.; FABER, V. Modeling the performance of hypercubes: a case study using the particle-in-cell application. **Parallel Computing,** v. 37, n. 9, s/p. 1988.

LUCY, L. B. A numerical approach to testing of the fission hypothesis. **The Astron. Journal**, v. 8, n. 12, p.1013-1024, 1977.

MACHADO, J.M.; SHYOU, Y.; PASSARO, A.; ABE, N.M. An application of the element-free Galerkin method to the analysis of quantum well structures, In: INTERNATIONAL CONFERENCE OON ELECTROMAGNETIC FIELD PROBLEMS AND APPLICATIONS, 4., 2000, Tianjin. **Proceedings...** Tianjin: ICEF, 2000. p,207-210.

MACHERET, S. O.; SHNEIDER, M. N.; MILES, R. B. Modeling of air plasma generation by repetitive high-voltage nanosecond pulses, **IEEE Transactions on Plasma Science**, v.30, N. 3, p.1301-1314, 2002.

MACHERET, S. O.; SHNEIDER, M. N.; MILES, R. B. Modeling of plasma generation in repetitive ultra short DC, Microwave, and laser pulses, In: AIAA PLASMADYNAMICS & LASERS CONFERENCE, 32., and WEAKLY IONIZED GASES WORKSHOP AIAA-2001-1940, 4., 2001, Anaheim-CA, **Proceedings...** Anaheim-CA: AIAA, 2001.

MALKA, V. FRITZLER, S.; LEFEBVRE, E.; d'HUMIÈRES, E.; FERRAND, R.; GRILON, G.; ALBARET, C.; MEYRONEINC, S.; CHAMBARET, J. P.; ANTONETTI A.; HULIN, D. Practicability of protontherapy using compact laser systems. **Medical Physics**, v. 31, p.1587-1592, 2004. MARECHAL, Y. Some Meshless Methods for Electromagnetic Field Computations. **IEEE Transactions on Magnetics**, v. 34, n. 5, p. 3351-3354, 1998.

MARQUES, G.N.; MACHADO, J.M.; VERARDI, S.L.L.; STEPHANY, S. ; PRETO, A.J. Interpolating EFGM for computing continuous and discontinuous electromagnetic fields. **COMPEL – The International Journal for Computation and Mathematics in Electrical and Electronic Engineering**, v. 26, n. 5, p. 1411-1438, 2007a.

MARQUES, G.N.; PRETO, A.J.; STEPHANY, S.; PASSARO, A.; PAES, A.C. J. ; ABE, N. M. Uma abordagem meshfree para simulação de plasmas não colisionais. In: IBERIAN LATIN AMERICAN CONGRESS ON COMPUTATIONAL METHODS IN ENGINEERING (XXVIII CILAMCE)., 28., 2007, 13-15 June Porto. **Proceedings...** Porto: APMTAC/SEMNI/ABMEC, 2007b

MARQUES, G.N.; MACHADO, J.M.; VERARDI, S.L.L.; SHYOU, Y. An application of the element-free Galerkin method with interpolating shape functions to the analysis of electromagnetic fields in inhomogeneous media. In: IEEE CONF. COMP. ELECTROMAG. FIELDS, COMPUMAG'05, 15., 2005, Shenyang, China. **Proceedings...** Shenyang, China: IEEE, v. II, p. 68-69, 2005a.

MARQUES, G.N.; PRETO, A.J.; STEPHANY, S., PASSARO, A., ABE, N.M. e PAES, A.C.J. Particle-In-Cell/Monte-Carlo Modeling of Collisional/Non-Collisional Plasmas, In: WORKSHOP DOS CURSOS DE COMPUTAÇÃO APLICADA DO INPE (V WORCAP), 5., 2005, São José dos Campos. **Anais...** São José dos Campos – SP: INPE, 2005b.

MARQUES, G.N., PRETO, A.J., STEPHANY, S., PASSARO, A., ABE, N.M., PAES, A.C.J. Plasmas simulations using the particle-in-cell model and the finite element method in parallel architecture, In: WORKSHOP DE COMPUTAÇÃO APLICADA DO INPE, (IV WORCAP), 4., 2004. São José dos Campos – SP, **Anais...** São José dos Campos: INPE, 2004a.

MARQUES, G.N., PRETO, A.J., STEPHANY, S., PASSARO, A., MINUCCI, M.A.S. Plasmas Simulations Applied to the Study of Magneto-Aerodynamics Effects. In: WORKSHOP DE COMPUTAÇÃO APLICADA DO INPE, (IV WORCAP), 4., 2004, São José dos Campos. **Anais...** São José dos Campos – SP, INPE, 2004b.

MARQUES, G.N., MACHADO, J.M., VERARDI, S.L.L. Interpolating Element-Free Galerkin Method Results for Electromagnetic Field Computations. In: IBERIAN LATIN AMERICAN CONGRESS ON COMPUTATIONAL METHODS IN ENGINEERING (XXV CILAMCE), 25., 2004, Recife – PE. **Proceedings ...** Recife: UFPE, 2004c. MARQUES, G. N. **O método element-free Galerkin: uma abordagem interpolante aplicada ao estudo de campos eletromagnéticos.** 2003. 118f. Dissertação de Mestrado em Matemática Aplicada e Computacional – Instituto de Biociências Letras e Ciências Exatas (IBILCE) - Universidade Estadual Paulista (UNESP), São José do Rio Preto – SP, Brasil (2003).

MATYASH, K., SCHNEIDER, R., BONNIN, X., COSTER, D., ROHDE, V. e KERSTEN, H. Modeling of parasitic plasma under the divertor roof baffle, **Journal of Nuclear Materials**, 337-339, 237-240p., 2005.

MELENK, J.M. e BABUSKA, I. The partition of unit finite element method: Basic theory and applications. **Computational Methods for Applied Engineering**, v. 139, 289-314p., 1996.

MINUCCI, M.A.S. TORO, P.G.P, OLIVEIRA, A.C E CHANES JR., J.B. Multi laser pulse investigation of the DEAS concept in hypersonic flow, In: INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON BEAMED ENERGY PROPULSION, 2., 2003, Sendai. **Proceedings...**Sendai: AIBEP, 2003.

MUKHERJEE, Y.X. e MUKHERJEE, S. On boundary conditions in the element-free Galerkin method, **Computational Mechanics**, v. 19, 264-270p., 1997.

NAM, S.K. DONNELLY V.M. e ECONOMOU, D.J. Particle-In-Cell simulation of ion flow through a hole in contact with plasma. **IEEE Transactions on Plasma Science**, v. 33, n.2, 232-233p., 2005.

NANBU, K. Simple method to determine collisions event in Monte Carlo simulation of electron-molecule collision, **Jpn. Journal of Applied Physics**, v. 33, 4752-4753p., 1995.

NANBU, K., MITSUI, K. & KONDO, S. Self-consistent particle modelling of dc magnetron discharges of na O_2/Ar mixture. Journal of Physics D.: Appl. Physics, v. 33, 2274-2283p., 2000a.

NANBU, K. Pobability theory of electron-molecule, ion-molecule, moleculemolecule, and Coulomb collisions for particle modeling of materials processing plasmas and gases, **IEEE Transactions on Plasma Science**, v. 28, n. 3, 971-90p., 2000b.

NANBU, K. e YONEMURA, S. Weighted particles in Coulomb Collision simulations based on the theory of cumulative scattering angle, **Journal of Computational Physics**, v.145, 639-654p., 1998.

NANBU, K. Stochastic solution method of the Boltzmann equation II. Simple gas, gas mixture, diatomic gas, reactive gas and plasma, **Reports of the Institute of Fluid Science**, v. 8, 77-125p., 1996. NAYROLES, B. TOUZOT G. E VILLON, P. Generalizing the finite element method: diffuse approximation and diffuse elements. **Computational Mechanics**, v. 10, 307-318p., 1992.

NIETER, C. e CARY, J.R. VORPAL: a versatile plasma simulation code, **Journal of Computational Physics**, v.196, 448-473p., 2004.

PAES, A.C.J., ABE, N.M., SERRÃO, V.A. e PASSARO, A., Análise de um Mecanismo de Aceleração de Feixe Utilizando um Modelo de Partículas Autoconsistente e o Método dos Elementos Finitos. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ELETROMAGNETISMO, 5., 2002, Gramado. **Anais...** Gramado: [s.n], 2002.

PAES, A.C. J., ABE, N.M., SERRÃO, V.A. e PASSARO, A., A Simulation of plasmas with electrostatic PIC models using the finite element method. **Brazilian Journal of Physics**, vol. 33, 411 – 417p., 2003.

PARK, C.A review of reaction rates in high temperature air, **AIAA Paper 89-1740**, Buffalo, NY, 1989.

PASSARO, A., FRANCO, M.A.R., MACHADO, J.M. e CARDOSO, J.R. Modal Analysis of Quasi-Guided Waveguides by the Finite Element Method with Spatial Transformations. In: SBMO/IEEE MTT-S, AP-S and LAOS International Microwave and Optoelectronics Conference. IMOC, 1999, Rio de Janeiro. **Proceedings...** Rio de Janeiro: SBMO/IEEE, 1999.

PASSARO, A., ABE, N.M., PAES, A.C.J., MARQUES, G.N., PRETO, A.J., STEPHANY, S. A Parallel and Object-Oriented Plasma Simulation Code Based on Electrostatic PIC Model and the Finite Element Method. P.R.M. Lyra, S.M.B.A. Silva, F.S. Magnani, L.J.N. Guimarães, L.M. Costa e E.P. Junior eds. In: The XXV Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering, Brasil XXV CILAMCE, 2004, Recife. **Proceedings...** Recife: UFPE, 2004.

PHUOC, T. X. An experimental and numerical study of laser-induced spark in air, **Optics and Lasers Engineering**, v.43, 113-129p., 2005.

PLIMPTON, S.J., SEIDEL, D.B., PASIK, M.F. *et al.* A load-balancing algorithm for a parallel electromagnetic particle-in-cell code. **Computer Physics Communication**, v. 152, 227-241p., 2003.

RANTAMÄKI, K. M., PÄTTIKANGAS, T.J.H., KARTTUNEN, S.J. *et al.* Particlein-cell simulations of parasitic absorption of lower hybrid power in edge plasmas of tokamaks. **Plasma Phys. Control. Fusion**, v. 41, 1125-1133p., 1999. RIGGINS, D. e NELSON, H. F. Hypersonic flow control using upstream focused energy deposition, **AIAA-99-0898**, 11p., 1999.

ROTH, J. R., SHERMAN, D. M. e WILKINSON, S.P., Boundary layer flow control with a one atmosphere iniform glow discharge surface plasma, **AIAA 98-0328**, 28p., 1998.

ROSSI, R. e ALVES, M. K. An *h*-adaptive modified element-free Galerkin method, **European Journal of Mechanics A/Solids**, v. 24, 782-199p., 2005.

SANDONATO, G.M. e BARROSO, J.J. Conceptual design of a beam extraction electrode system for a 1mN ion thruster. **Rev. Sci. Instrum.,** v. 67 n.4, 1486-1493 p., 1996.

SARMA, G. S. R. Physico-chemical modeling in hypersonic flow simulation, **Progress in Aerospace Sciences**, v.36, p.281-349, 2000.

SCALES, W.A., CHENG, K.T. & SRIVASTAVA, S. Simulation studies of process associated with stimulated electromagnetic emissions (SEE) in the ionosphere. **Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics**, v. 59 n.18, 2373-2381p., 1997.

SCHWARZ, H.R., **Finite Element Mehtods**, Academic Press INC., San Diego, 386p., 1984.

SCHWEIGERT, I.V. e ALEXANDROV, A.L. Transition between different modes of a capacitively coupled radio frequency discharge in CH₄ in one- and twodimensional PIC-MCC simulations, **IEEE Transactions on Plasma Science**, v. 33, n. 2, 615-623p., 2005

SÉROR, S., SCHALL, E., DRUGUET, M.-C. e ZEITOUN, D.E. An extension of CVDV model to Zeldovich exchange reactions for hypersonic non-equilibrium air flows, **Shock Waves**, v.8, p.285-98, 1998.

SHANG, J. S. Three decades of accomplishments in computational fluid dynamics, **Progress in Aerospace Sciences**, v.40, 173-197p., 2004.

SHANG, J. S. Shared knowledge in computational fluid dynamics, electromagnetics, and magneto-aerodynamics, **Progress in Aerospace Sciences**, v.38, 449-467p., 2002.

SHANG, J.S. Recent research in magneto-aerodynamics. **Progress in Aerospace Sciences**, v. 37, 1-20 pp., 2001.

SHARMA, A. e LONG, L.N. Numerical simulation of the blast impact problem using the direct simulation Monte-Carlo (DSMC) method, **Journal of Computational Physics**, v. 200, 211-237p., 2004.

SHON, C.H., LEE, H.J. e LEE, J.K. Method to increase the simulation speed of particle-in-cell (PIC) code. **Computer Physics Commun**., v. 141, 322-329p., 2001.

SHNEIDER, M.N., MACHERET, S.O., ZAIDI, S.H., GIRGIS, I.G., RAIZER, YU.P. e MILES, R.B. Steady and unsteady supersonic flow control with energy addition, **AIAA 2003-3862**, 2003.

SIMKIN, J. e TROWBRIDGE, C.W. On the use of the total scalar potential in numerical solution of field problems in electromagnetics, **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v.14, 423-440 p., 1979.

SINGH, A., WEILE, D.S., RAJAPATIRANA, S. e GRANATSTEIN, V.L. Integrated design of depressed collector for gyrotrons, **IEEE Transactions on plasma science**, v. 25, n. 3, 480-491p., 1997.

SOUBACQ, S., PIGNOLET, P., SCHALL, E. e BATINA, J. Investigation of a gas breakdown process in a laser-plasma experiment, **Journal of Physics D: Applied Physics**, v.37, 2686-2702 p., 2004.

SPROUL, W.D., CHRISTIE, D.J. e CARTER, D.C. Control of reactive sputtering processes. **Thin Solid Films**, v. 491, 1-17p., 2005.

SUGAWARA, M. Adaptive basis set for quantum-mechanical calculation based on element-free Galerkin method. **Chemical Physics Letters**, v. 314, 522-528 p., 1999.

SWEGLE, J. M., HICKS, D. L. e ATTAWAY, S. W. Smoothed particle hydrodynamics stability analysis, **Computational Physics**, v.116, 123-134p., 1995.

SZWARCFITER, J. L. e MARKENZON, L. Estrutura de Dados e seus algoritmos, Ed. LTC-Livros Técnicos e Científicos – Editora S.A., 1994

TACCOGNA, F., LONGO, S. e CAPITELLI, M. Plasma sheats in hall discharge, **Physics of plasmas**, v. 12, paper 093506, 2005

TAJIMA, T. Computational plasma physics with applications to fusion and astrophysics. New York: Addison-Wesley Publishing Company, 1989.

TAYLOR, R.L. e ZIENKIEWICZ, O.C. **The finite element method.** New York: McGraw-Hill Internation Editions, 1989.

TSKHAKAYA, D., SCHNEIDER, R. Optimization of PIC codes by improved memory management. **Journal of Computational Physics**, n.225, 829–839p., 2007.

VAY, J.-L., COLELLA, P., KWAN, J. W., MCCORQUODALE, P., SERAFINI, D. B. A., FRIEDMAN, GROTE, D. P., WESTENSKOW, ADAM, J.-C. G. e HÉRON, A. Application of adaptive mesh refinement to particle-in-cell simulations of plasmas and beams. **Physics of Plasmas**, v. 11, n.5, 2928-2934 p., 2004.

VERARDI, S.L.L., MACHADO, J.M. e SHIYOU, Y. The application of interpolating MLS approximations to the analysis of MHD flows. **Finite Elements in Analysis and Design**, v. 39, 1173-1187p., 2003.

VERBONCOEUR, J.P., LANGDON, A.B. e GLADD, N.T. An object-oriented electromagnetic PIC code, **Computer Physics Communications**, v. 87, 199-211p., 1996.

VERBONCOEUR, J.P., Particle simulation of plasmas: review and advances, **Plasma Physics and Controled Fusion,** v. 47, A231-A260p., 2005.

VIANA, S. A. e MESQUITA, R. C. Método de Galerkin sem malha aplicado ao cálculo de campos eletromagnéticos, In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ELETROMAGNETISMO, 3., 1998. São Paulo. **Anais...** São Paulo: [s.n], 1998. p.214-217.

WALKER, D. W. The implementation of a three-dimensional particle-in-cell code on a hypercube concurrent processor. In: CONFERENCE ON HYPERCUBE CONCURRENT COMPUTERS AND APPLICATIONS, 4., 1989, Monterey, CA. **Proceedings...** Monterey: ACM/IEEE,1989.

WOLFHEIMER, F., GJONAJ, E., WEILAND, T. A parallel 3D particle-in-cell code with dynamic load balancing. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research**, n.558 202–204p., 2006.

WU, J.-S. ,HSU, K.-H., LI, F.-L., HUNG, C.-T., JOU.S.-Y. Development of a parallelized 3D electrostatic PIC-FEM code and its applications. **Computer Physics Communications**, v.177, 98–101p., 2007.

WOODS, L.C. An Introduction to the kinetic theory of gases and magnetoplasmas. New York: Oxford University Press Inc. cap. 2,1993.

XUAN, L., ZENG, Z., SHANKER, B., e UDPA, L. Element-Free Galerkin Method for Static and Quasi-Static Electromagnetic Field Computation. **IEEE Transactions on Magnetics**, v.40, n. 1, 12-20p., 2004.

ZHANG, Y., SHAO, K. R., XIE, D. X. e LAVERS, J. D. Meshless Method Based on Orthogonal Basis for Computational Electromagnetics. **IEEE Transactions on Magnetics**, v.41, n. 5, 1432-1435p., 2005.

ÍNDICE POR ASSUNTO

ABSTRACT, 13 ALGORITMOS Cálculo das derivadas das funções de forma do MEFG, 114 Cálculo das funções de forma do MEFG, 113 Estratégia de paralelização PIDC, 121 Montagem do sistema de equações discretas no MEFG, 83, 116 **PIDC**, 108 CÉLULA DIFUSA Célula difusa. 91 Domínios de influência circulares, 91 Domínios de influência retangulares, 92 Nós interiores à esfera de Debye, 90 Raios de de influência nodal, 92 CONSIDERAÇÕES FINAIS Contribuições, 154 Algoritmos, 155, 158 **MEFG**, 155 Paralelização PIC-FEM, 156 Projeto e desenvolvimento de software, 155 Perspectivas e trabalhos futuros, 156 **MEFG. 157** Paralelização PIDC, 156 PIDC, 156, 157, 158 CONSIDERAÇÕES FINAIS, 154 ÍNDICE POR ASSUNTO, 172 INTRODUÇÃO, 29 LISTA DE FIGURAS, 17 LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS, 23 LISTA DE SÍMBOLOS, 25 LISTA DE TABELAS, 21 MÉTODO. 83 MÉTODO ELEMENT FREE GALERKIN, 61 Domínios de Influência Esféricos, 77 Domínios de Influência Paralelepipedais, 78 Equações de Maxwell às Equações Discretas A abordagem de Galerkin, 64 Equações de Maxwell às Equações Discretas, 63 Formulação padrão do método EFG, 68 Função peso e os domínios de influência, 73 Topologias dos domínios de influência, 76 Imposição de condições de Dirichlet, 85 Tratamento de meios heterogêneos, 79 METODOLOGIAS COMPUTACIONAIS E DESENVOLVIMENTOS, 106 Algoritmos Específicos e Algumas Otimizações, 110 Ajuste dos Raios de Influência, 110

Montagem das equações discretas pelo MEFG, 115 Otimização no cálculo das funções de forma do MEFG no ciclo do PIDC, 112 Modelo PIDC orientado a objetos, 116 Procedimento geral de aplicação do método Particle-In-Diffuse-Cell, 108 Visão geral do desenvolvimento da tese, 106 METODOLOGIAS COMPUTACIONAIS E DESENVOLVIMENTOS Modelo PIDC paralelo, 120 MODELO PARTICLE-IN-DIFFUSE-CELL, 87 Célula Difusa, 87 interpolação do campo elétrico, 98 modelos colisionais, 100 Particionamento de carga ilustração, 93 Particionamento de carga, 93 Moving Least Squares, 61, 69 **REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS, 160 RESULTADOS**, 124 Análise de desempenho e escalabilidade PIC-FEM, 124 Análise do campo elétrico, 126 Análise do parâmetro d_{max}, 127 Análise qualitativa do campo elétrico autoconsistente, 150 As condições de interface, 136 Variação de magnitude da descontinuidade material, 142 **RESUMO**, 11 SIMULAÇÃO DE PLASMAS VIA MODELOS PARTICLE-IN-CELL, 37 Fundamentos de Plasmas, 37 Blindagem de Debye, 40 Freqüência Plasma-Eletron, 41 Neutralidade Macroscópica, 39 Plasmas não colisionais, 43 O Modelo PIC eletrostático, 45 Cálculo do campo elétrico auto-consistente com o MEF, 49 Interpolação da densidade de carga, 47 Interpolação do campo e resolução das equações de movimento, 50 Paralelização de modelos PIC, 53

PUBLICAÇÕES TÉCNICO-CIENTÍFICAS EDITADAS PELO INPE

Teses e Dissertações (TDI)	Manuais Técnicos (MAN)
Teses e Dissertações apresentadas nos Cursos de Pós-Graduação do INPE.	São publicações de caráter técnico que incluem normas, procedimentos, instruções e orientações.
Notas Técnico-Científicas (NTC)	Relatórios de Pesquisa (RPQ)
Incluem resultados preliminares de pesquisa, descrição de equipamentos, descrição e ou documentação de programa de computador, descrição de sistemas e experimentos, apresenta- ção de testes, dados, atlas, e docu- mentação de projetos de engenharia.	Reportam resultados ou progressos de pesquisas tanto de natureza técnica quanto científica, cujo nível seja compatível com o de uma publicação em periódico nacional ou internacional.
Propostas e Relatórios de Projetos (PRP)	Publicações Didáticas (PUD)
São propostas de projetos técnico- científicos e relatórios de acompanha- mento de projetos, atividades e convê- nios.	Incluem apostilas, notas de aula e manuais didáticos.
Publicações Seriadas	Programas de Computador (PDC)
São os seriados técnico-científicos: boletins, periódicos, anuários e anais de eventos (simpósios e congressos). Constam destas publicações o Internacional Standard Serial Number (ISSN), que é um código único e definitivo para identificação de títulos de seriados.	São a seqüência de instruções ou códigos, expressos em uma linguagem de programação compilada ou interpretada, a ser executada por um computador para alcançar um determinado objetivo. São aceitos tanto programas fonte quanto executáveis.
Pré-publicações (PRE)	
Todos os artigos publicados em periódicos, anais e como capítulos de livros.	