1
Introdução

A equação diferencial parcial de Poisson é de fundamental importância em várias áreas de pesquisa, dentre elas: matemática, física e engenharia. De uma maneira geral, a equação de Poisson para uma função real de n variáveis $\phi : \Omega \subset \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$, chamada de potencial, é escrita como

$$\Delta\phi(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}) \ ,$$

onde a função $f : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$ é conhecida em todo o domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^n$.

Em eletrostática, por exemplo, pode-se escrever o campo elétrico E em termos de um potencial elétrico φ

$$E = -\nabla\varphi,$$

sendo que o potencial elétrico é dado por uma equação de Poisson

$$\Delta\varphi(\mathbf{r}) = -\frac{\rho(\mathbf{r})}{\epsilon} \ ,$$

onde $\rho(\mathbf{r})$ é a densidade de carga em $\mathbf{r}$ e ϵ é uma constante elétrica.

Vários outros problemas são descritos por uma equação de Poisson, ou têm como parte essencial de sua solução uma equação de Poisson. Dentre eles, pode-se citar simulações de escoamentos de fluidos, onde a pressão $p(\mathbf{r})$ satisfaz

$$\Delta p(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r}) \ ,$$

onde a função $F(\mathbf{r})$ depende da velocidade do escoamento e de alguns parâmetros físicos do fluido.

Encontrar uma solução analítica para uma equação de Poisson é em geral uma tarefa díficil e, portanto, recorre-se a métodos numéricos para encontrar uma solução em um conjunto discreto de pontos no domínio do problema. Pode-se citar para tal propósito a utilização dos métodos das diferenças finitas (38, 50) e dos elementos finitos (13).

Os métodos numéricos convencionais, tais como os métodos das diferenças finitas (MDF) e dos elementos finitos (MEF), têm sido vastamente aplicados na discretização de equações diferenciais parciais. Mesmo sendo a classe de métodos dominantes, métodos que se baseiam em malhas para obter a discretização dos operadores diferenciais envolvidos nessas equações têm algumas dificuldades inerentes à sua formulação, o que impossibilita a sua aplicação para muitos problemas.

Por exemplo, em métodos eulerianos com malhas, como MDF, a geração de uma malha inicial para o domínio da simulação é um grande desafio quando o domínio tem uma geometria complexa. Enquanto em métodos lagrangeanos com malhas, como MEF, o tratamento de grandes deformações na malha tem sido uma tarefa difícil.

Essas dificuldades ficam bastantes evidentes quando esses métodos são utilizados para simular fenômenos dinâmicos, tais como explosão e impacto em alta velocidade. Nesses problemas, grandes distorções nos elementos da malha são inevitáveis, causando erros numéricos na solução do sistema. Além dessa dificuldade, em simulações hidrodinâmicas, a captura da superfície livre do fluido também não é uma tarefa simples em métodos que usam malhas.

Esta tese descreve um método para resolver a equação de Poisson, utilizando uma abordagem de sistema de partículas conhecido como SPH, do inglês Smoothed Particles Hydrodynamics. A solução da equação de Poisson, em conjunto com os operadores diferenciais discretos definidos pelo método SPH, e conhecidos por operadores SPH, são utilizados em duas aplicações: na decomposição de campos vetoriais; e na simulação numérica de escoamentos de fluidos utilizando a equação de Navier-Stokes.

O método SPH

Desde sua introdução para resolver problemas astrofísicos em 1977 nos trabalhos de Lucy (65) e de Gingold e Monaghan (39), o método SPH tem sido estudado e estendido para modelar uma maior variedade de problemas, incluindo, além de problemas astrofísicos (12), problemas em hidrodinâmica (102) e mecânica (53).

Assim como o famoso particle-in cell (PIC) desenvolvido na década de 1960 (43), no método SPH o fluido é representado por um conjunto de partículas, definidas como pontos no espaço aos quais também se associam propriedades físicas individuais. As semelhanças, porém, param por aí. Ao contrário do método PIC, que utiliza uma malha para discretizar as equações diferenciais parciais que descrevem o problema, as derivadas parciais envolvidas nessas equações são, em SPH, aproximadas por uma média das propriedades de partículas próximas e, portanto, nenhuma conectividade pré-definida entre as partículas da discretização é necessária.

No capítulo 2, os conceitos básicos e a formulação do método SPH são descritos.

Análise estatística dos operadores SPH

Devido aos numerosos estudos e aplicações do método SPH, várias aproximações para um mesmo operador diferencial são encontradas na literatura. No capítulo 3, é feito um estudo comparativo entre algumas aproximações, encontradas na literatura de SPH, para aproximar um mesmo operador diferencial. A partir dessa análise, os principais operadores diferenciais presentes em equações diferenciais parciais são definidos, tornando possível a solução numérica para algumas EDP's, dentre elas a equação de Poisson (capítulo 4).

Decomposição de Helmholtz-Hodge usando SPH

No capítulo 5, a primeira contribuição desta tese é apresentada: um novo método, usando SPH, para decompor um campo vetorial através da chamada decomposição de Helmholtz-Hodge. Chamamos o novo método desenvovido de SPH-HH.

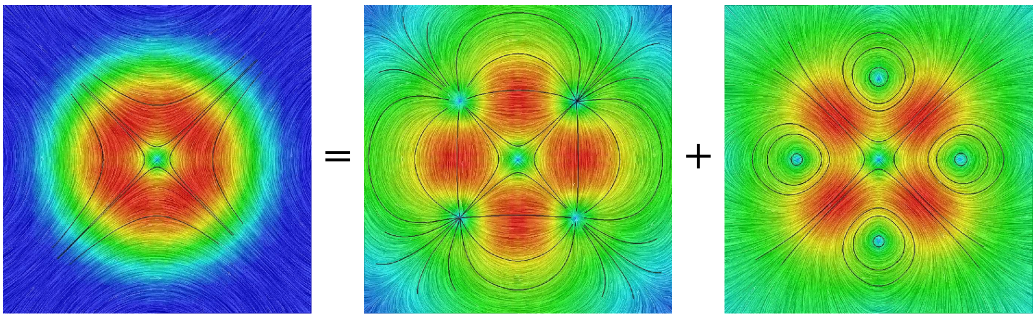


Figura 1.1: A decomposição de um campo sintético (esquerda) em suas componentes de rotacão nula (meio) e de divergência nula (direita). A componente de laplaciano nulo é dada por um campo vetorial nulo.

A decomposição de Helmholtz-Hodge diz que qualquer campo vetorial, definido em uma região simplesmente conexa, pode ser decomposto de forma única como soma de três componentes: uma componente de divergência nula (solenoidal), uma componente de rotação nula (irrotacional), e uma componente de laplaciano nulo (harmônica) (Figura 1.1). Essa decomposição faz da análise de campos vetoriais uma tarefa mais simples.

A decomposição de Helmholtz-Hodge é particularmente interessante para obter feições características de um campo vetorial. Por exemplo, em um campo bidimensional, a componente irrotacional contém somente fontes e sorvedouros presentes no campo original, enquanto a componente solenoidal contém apenas vórtices do campo.

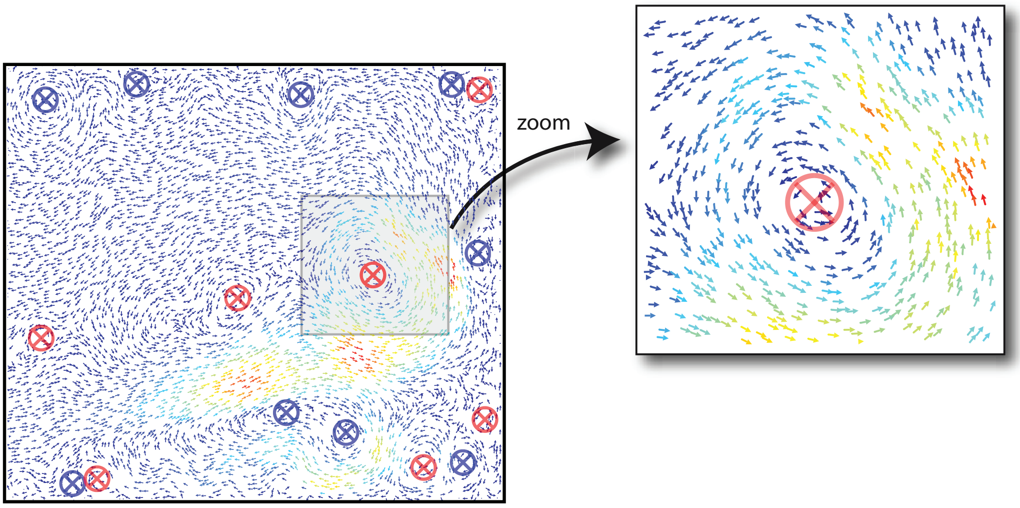


Figura 1.2: Detecção automática de feições características de um campo vetorial. O método SPH-HH detecta os vórtices em um campo vetorial.

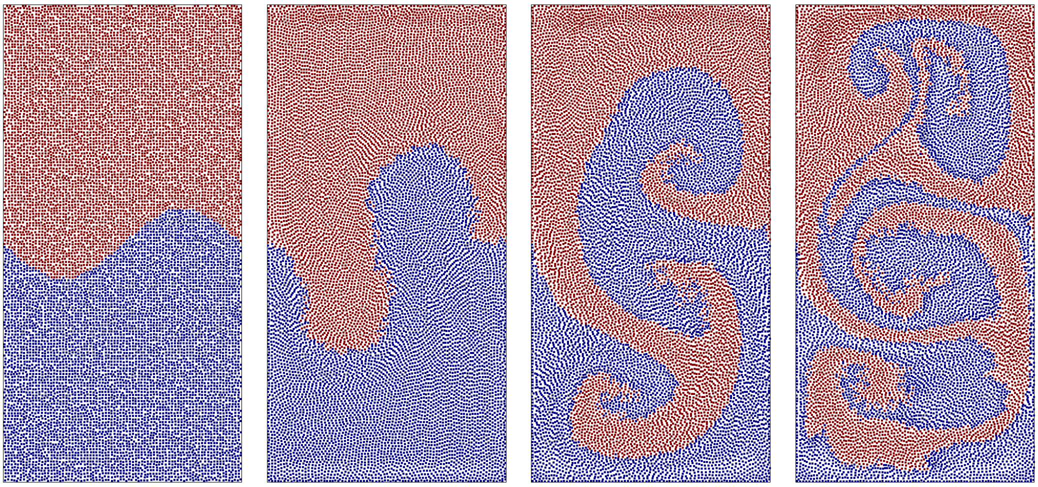
Numericamente, vários métodos foram desenvolvidos para decompor um campo, utilizando a decomposição de Helmholtz-Hodge (2, 41). Recentemente, Tong et al. (104) estenderam para campos vetoriais 3D o modelo bidimensional proposto por Polthier e Preuss (86), onde ambos utilizam método de elementos finitos para obter a decomposição.

O método proposto nesta tese utiliza as aproximações SPH para os operadores diferenciais, a fim de obter a decomposição de Helmholtz-Hodge em um campo vetorial discreto bidimensional, independente da amostragem na qual o campo foi obtido. Além disso, esse método de decomposição detecta automaticamente feições do campo (Figura 1.2). Vários exemplos de campos decompostos com o método proposto são ilustrados no capítulo 5.

Simulação de escoamentos

A descrição da segunda contribuição desta tese começa no capítulo 6, onde as equações que determinam o movimento ou escoamento de fluidos, chamadas de *equações de Navier-Stokes*, são derivadas. Essas equações descrevem o movimento das substâncias fluidas, como resultado das mudanças na pressão e nas forças viscosas dissipativas (similar a fricção), que atuam dentro de um fluido.

Nos trabalhos originais de Lucy (65) e Gingold e Monaghan (39), fluidos compressíveis são simulados pelo método SPH, onde a pressão é dada por uma equação do estado. Posteriormente, Monaghan (70) representou um fluido incompressível através de um fluido quase-incompressível com alta velocidade do som, onde a pressão também é calculada através de uma equação de estado (9). Os resultados utilizando essa abordagem são aceitáveis em algumas aplicações, como por exemplo para simulações de superfície livre com baixos números de Reynolds (77). Em escoamentos confinados e com altos números de Reynolds, porém, essa abordagem requer um passo de tempo de integração muito pequeno (21).



a) Repouso b) 2 segundos c) 4 segundos d) 6 segundos

Figura 1.3: Escoamentos Incompressíveis bifásicos.

O capítulo 7 descreve um método puramente Lagrangiano para escoamentos incompressíveis. O método consiste em projetar um campo intermediário de velocidade do escoamento no espaço de divergência nula em cada passo da simulação, garantindo a incompressibilidade do escoamento. A projeção é obtida através do cálculo da pressão por uma equação de Poisson. Essa técnica é conhecida como desacoplamento pressão-velocidade (16, 10).

Outros métodos também utilizam a técnica de descoplamento para a simulação de escoamentos de fluidos (25, 29, 83, 95). Ao contrário desses métodos, porém, onde a pressão é obtida em um malha, o método apresentado resolve a equação de Poisson utilizando as partículas da discretização como estrutura, isto é, a equação de Poisson é resolvida diretamente nas partículas, ao invés de a pressão ser obtida em um *grid*.

Exemplos numéricos demonstram a funcionalidade do método em problemas bidimensionais como, por exemplo, a instabilidade de Rayleigh-Taylor, criada quando um fluido de maior densidade é colocado sobre um fluido menos denso, e o equilíbrio do estado é pertubado (Figura 1.3).

Contribuições

As principais contribuições desta tese de doutorado são:

1. Uma análise estatística dos operadores SPH (Capítulo 3).

2. A utilização de algoritmos de matrizes esparsas, assim como métodos iterativos, na solução de sistema de equações provenientes da discretização da equação de Poisson pelo método SPH (Capítulo 4).

3. Um novo método de decomposição de campos vetoriais através da decomposição de Helmholtz-Hodge (Capítulo 5).

4. Um método puramente lagrangeano para a simulação de escoamentos incompressíveis de fluidos bifásicos (Capítulo 7).