

Enéas Mendes de Jesus

Operadores SPH sobre Variedades

**Vitória
2017**

Enéas Mendes de Jesus

Operadores SPH sobre Variedades

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Matemática da Universidade Federal do Espírito Santo PPGMAT/UFES, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Matemática.

Orientador: Prof. Dr. Fabiano Petronetto do Carmo.

Vitória
2017

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

J58o Jesus, Enéas Mendes de, 1990-
Operadores sph sobre variedades / Enéas Mendes de Jesus.
– 2017.
94 f. : il.

Orientador: Fabiano Petronetto do Carmo.
Dissertação (Mestrado em Matemática) – Universidade
Federal do Espírito Santo, Centro de Ciências Exatas.

1. Geometria diferencial. 2. Superfícies (Matemática). 3.
Nuvem de pontos. I. Carmo, Fabiano Petronetto do. II.
Universidade Federal do Espírito Santo. Centro de Ciências
Exatas. III. Título.

CDU: 51



UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
Centro de Ciências Exatas
Programa de Pós-Graduação em Matemática

“Operadores SPH sobre variedades”

Enéas Mendes de Jesus

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Matemática da Universidade Federal do Espírito Santo como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Matemática.

Aprovada em 20/02/2017 por:

A handwritten signature in blue ink, reading "Fabiano Petronetto do Carmo", is written above a horizontal line.

Fabiano Petronetto do Carmo – UFES

A handwritten signature in blue ink, reading "Matheus Brioschi H. Vieira", is written above a horizontal line.

Matheus Brioschi H. Vieira – UFES

A handwritten signature in blue ink, reading "Afonso Paiva Neto", is written above a horizontal line.

Afonso Paiva Neto – USP

Em memória de Bento Ramos de Jesus.

Agradecimentos

Agradeço ao Alto, Sublime, que habita na eternidade e cujo nome é Santo.

Agradeço à minha mãe Antônia e à minha esposa Sara, minha Gata Morena. Agradeço aos meus sete irmãos: Ezequiel, Natanael, Raquel, Adriana, Elda, Laila e Laiane. Agradeço a todos os amigos não acadêmicos que de alguma forma contribuíram durante todo este percurso, em especial ao Nonô, também conhecido como Fernando.

Quanto aos meus amigos acadêmicos, que não são muitos, diga se de passagem, merecem um agradecimento especial o Aaron, o Bruno, o José Eduardo e o Thiago. Listei os nomes em ordem alfabética para homenagear o duplo “a” do Aaron.

Agradeço ao meu orientador Fabiano Petronetto do Carmo pelos seis anos de orientação que nos renderam participações em congressos importantes da área, esta dissertação e a aceitação em alguns respeitadas programas de doutorado.

Agradeço à UFES e ao PPGMAT pela formação, bem como aos professores que fazem parte do programa com os quais tive a oportunidade de aprender.

Agradeço à CAPES pelo apoio financeiro.

*Ora, ao Rei dos Séculos, Imortal, Invisível, ao Único Deus,
seja Honra e Glória para todo o sempre.
Saulo de Tarso.*

Resumo

Esta dissertação propõe uma extensão do método de partículas SPH (*Smoothed Particle Hydrodynamics*) para variedades diferenciáveis. A abordagem utilizada baseia-se no uso do espaço tangente para aproximar localmente a variedade, desde que esta seja suficientemente suave. Uma vez que o espaço tangente se comporta como o espaço euclidiano, pode-se então utilizar a formulação clássica do SPH para obter aproximações de operadores diferenciais definidos sobre a variedade. É apresentada uma análise de consistência dos operadores diferenciais SPH estendidos e estes são utilizados em algumas aplicações, como por exemplo para resolver EDP's sobre superfícies.

Palavras-chave: Operadores Diferenciais Discretos. Nuvem de Pontos. Superfícies.

Abstract

Title: SPH Operators on Manifold. This work proposes an extension of the point-based method Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) to manifolds. The approach is based on a local approximation of the manifold by tangent space, provided that it is smooth enough. Since the tangent space behaves like the euclidean space, one can use the classical formulation of SPH to derive approximations of differential operators defined on manifold. A consistency analysis of discrete differential operators is provided and they are used in some applications like to solve PDEs on surfaces.

Keywords: Discrete Differential Operators. Point Cloud. Surfaces.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Núcleos de Dirac. Observe que as áreas abaixo das funções k_n se acumulam junto ao eixo y à medida que n cresce.	34
Figura 2 – A partir da propriedade de simetria radial o núcleo em dimensão dois é calculado efetivamente num domínio paramétrico de dimensão um.	37
Figura 3 – Núcleo Spline Quíntico (azul) e suas derivadas primeira (vermelho) e segunda (magenta).	38
Figura 4 – Aproximação por partículas. No método SPH todo o sistema é representado por um número finito de partículas distribuídas no domínio do problema.	39
Figura 5 – Na aproximação por partículas o valor de uma função em um ponto x_i é aproximado utilizando-se apenas as partículas vizinhas, ou seja, as partículas x_j que pertencem ao suporte compacto de W_h	40
Figura 6 – A distribuição das partículas podem ser dadas de maneira uniforme com densidade constante (à esquerda), uniforme com densidade variável (no centro) e não uniforme (à direita).	41
Figura 7 – Distribuição uniforme das partículas com o suporte do núcleo inteiramente contido (à esquerda) e com insreção (no centro) com o domínio do problema e distribuição não uniforme das partículas (à direita). As imagens no centro e à esquerda ilustram situações onde há inconsistência de partículas.	42
Figura 8 – Distribuição uniforme com uma decomposição do quadrado de lado 1 em 100 subquadrados. Os subquadrados verdes possuem apenas uma partícula, os vermelhos possuem dois ou mais partículas e os brancos não possuem partículas.	43
Figura 9 – Sobreposição da decomposição do quadrado de lado um em 100 subquadrados e sua discretização uniforme com densidade variável (à esquerda) e não uniforme (à direita). Os quadrados verdes possuem apenas uma partícula, os vermelhos possuem duas ou mais e os brancos não possuem partículas.	44
Figura 10 – Gráfico dos valores absolutos das diferenças da área do quadrado de lado um e das somas dos elementos de área obtidos pela resolução do sistema ?? para 1000, 2000, 4000, 8000 e 16000 mil partículas.	45
Figura 11 – Elementos de área numéricos no domínio $[0, 1] \times [0, 1]$ discretizado com 1000 partículas de maneira uniforme com densidade constante (à esquerda), uniforme com densidade variável (no centro) e não uniforme (à direita).	45

Figura 12 – Uma faixa de tamanho κh é espelhada, assim os pontos que estão κh próximos à fronteira utilizam partículas do próprio domínio.	46
Figura 13 – Elementos de área numéricos com espelhamento de partículas no quadrado de lado um discretizado com 1000 partículas. Enquanto os elementos obtidos diretamente da resolução do sistema possui trinta partículas com elementos de área negativos, para os elementos de área com espelhamento apenas seis partículas apresentam valores negativos. . . .	47
Figura 14 – Boxplot.	49
Figura 15 – À esquerda a função $f(x, y) = xy$ sobre o domínio $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$ discretizado com 1007 partículas e à direita o gradiente analítico de f sobre o mesmo domínio.	50
Figura 16 – Operador gradiente SPH diferença. À esquerda tem-se o gradiente analítico da função $f(x, y) = xy$, no centro a aproximação obtida pelo operador diferença e à direita o operador analítico e a aproximação são sobrepostas.	51
Figura 17 – Aproximação para o gradiente da função $f(x, y) = xy$ obtida pelo operador gradiente SPH diferença. Exibimos os boxplots com os erros e ao lado a posição no domínio onde ocorre os outliers destacadas.	51
Figura 18 – Campo de vetores $F(x, y) = (\text{sen}(\pi x), \text{sen}(\pi y))$ à esquerda e o seu divergente analítico à direita calculado no domínio $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$ discretizado com 1007 partículas.	52
Figura 19 – Aproximação obtida pelo operador divergente SPH diferença para o campo $F(x, y) = (\text{sen}(\pi x), \text{sen}(\pi y))$. Destacamos na amostra as partículas cujos valores da aproximação são considerados outliers no boxplot do vetor de erro absoluto (à esquerda) e do vetor de erro relativo (à direita).	52
Figura 20 – À esquerda a função $f(x, y) = \text{sen}(\pi x)\text{cos}(\pi y)$ em $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$ discretizado com 1007 partículas e à direita o laplaciano analítico de f	54
Figura 21 – Aproximação para o laplaciano da função $f(x, y) = \text{sen}(\pi x)\text{cos}(\pi y)$ obtida pelo operador laplaciano SPH Taylor. Destacamos na amostra as partículas cujos valores da aproximação são considerados outliers no boxplot do vetor de erro absoluto (à esquerda) e do vetor de erro relativo (à direita).	54
Figura 22 – Aproximação para o laplaciano da função $f(x, y) = \text{sen}(\pi x)\text{cos}(\pi y)$ obtida pelo operador laplaciano SPH Taylor utilizando o espelhamento de partículas.	55
Figura 23 – À esquerda o gradiente da função $f(x, y) = xy$, no centro a aproximação obtida pela correção CSPM e à direita os boxplots com os erros da norma absoluto e relativo e o erro de fase.	58

Figura 24 – À esquerda o divergente da função $F(x, y) = (\text{sen}(\pi x), \text{sen}(\pi y))$, no centro a aproximação obtida pela correção CSPM e à direita os boxplots com os erros absoluto e relativo. Em destaque na amostra as partículas cujos valores dos erros são considerados outliers nos respectivos boxplot.	59
Figura 25 – À esquerda o laplaciano analítico da função $f(x, y) = \text{sen}(\pi x)\cos(\pi y)$, no centro a aproximação obtida pela correção CSPM e à direita os boxplots com os erros absoluto e relativo. Em destaque na amostra as partículas cujos valores dos erros são considerados outliers nos respectivos boxplot.	59
Figura 26 – À esquerda o gradiente analítico da função $f(x, y) = xy$, no centro a aproximação obtida pela correção MSPH e à direita os boxplots com os erros da norma absoluto e relativo. O boxplot do erro de fase foi omitido pois não apresentava informações relevantes sobre o comportamento do erro, uma vez que a maioria dos valores eram nulos.	60
Figura 27 – À esquerda o divergente analítico da função $F(x, y) = (\text{sen}(\pi x), \text{sen}(\pi y))$, no centro a aproximação obtida pela correção MSPH e à direita os boxplots com os erros absoluto e relativo. Em destaque na amostra os pontos cujos valores dos erros são considerados outliers do boxplot do erro absoluto. Os onze valores outliers do boxplot do erro absoluto foram omitidos do boxplot para melhor visualização.	61
Figura 28 – À esquerda o laplaciano analítico da função $f(x, y) = \text{sen}(\pi x)\cos(\pi y)$, no centro a aproximação obtida pela correção MSPH e à direita os boxplots com os erros absoluto e relativo. Em destaque na amostra as partículas cujos valores dos erros são considerados outliers nos respectivos boxplot.	62
Figura 29 – À esquerda o laplaciano analítico da função $f(x, y) = \text{sen}(\pi x)\cos(\pi y)$, no centro a aproximação obtida pela correção NCSPH e à direita os boxplots com os erros absoluto e relativo. Em destaque na amostra as partículas cujos valores dos erros são considerados outliers nos respectivos boxplot.	64
Figura 30 – Análise da representação integral dos operadores de primeira ordem.	66
Figura 31 – Análise da aproximação por partículas para operadores de primeira ordem. Mantemos o comprimento suave $h = 0,1$ fixo e variamos a quantidade de partículas entre 1007, 2009, 4005 e 8052.	66
Figura 32 – Análise da consistência dos operadores de primeira ordem.	67
Figura 33 – Análise da consistência dos operadores SPH laplacianos.	68
Figura 34 – Análise da consistência dos operadores SPH laplacianos desconsiderando os valores considerados outliers nos boxplot dos erros.	69

Figura 35 – Parametrização local da superfície S a partir de uma base do plano tangente à S em um ponto p	73
Figura 36 – Se S é suficientemente suave, então existe uma vizinhança de p tal que as derivadas parciais da função “altura” são pequenas. Na figura, as derivadas parciais $\partial_u f$ e $\partial_v f$ são as inclinações das retas r_u e r_v respectivamente.	74
Figura 37 – Para uma vizinhança V_p de $p \in S$, S suficientemente suave, a distância entre p e um ponto $p_1 \in V_p$ é aproximadamente a distância entre p e a projeção ortogonal de p_1 em $T_p S$	75
Figura 38 – Visualização da base para os planos tangentes ao Toro obtida pelo algoritmo descrito no texto.	76
Figura 39 – Visualização dos vizinhos de um ponto sobre a superfície Sausage. Embora existam partículas sobre a Sausage que estão próximas em relação a distância em \mathbb{R}^3 eles não são considerados vizinhos pois quando medida sobre a superfície tais pontos não estão próximos o suficiente.	77
Figura 40 – Elementos de área numéricos para a esfera com distribuição uniforme com densidade constante (à esquerda) e com densidade variável (à direita).	78
Figura 41 – Análise de consistência do operador gradiente SPH sobre a esfera obtido pela correção CSPM. As curvas em azul representam as normas do máximo (\circ) e euclidiana ($*$) aplicadas ao erro relativo da norma enquanto que as curvas em vermelho representam as normas do máximo e euclidiana aplicadas ao erro de fase.	80
Figura 42 – Boxplot com os erros absolutos e relativos das aproximações do gradiente obtidos pelos operadores Diferença, CSPM, MSPH e NCSPH. À direita descartamos os outliers para facilitar a análise.	81
Figura 43 – Gradiente da função $f(x, y, z) = \cos(xz - \text{sen}(y))$ sobre a esfera discretizada com 4032 partículas. À esquerda visualizamos a função, no centro o gradiente analítico e à direita o gradiente CSPM.	81
Figura 44 – As curvas em azul representam as normas do máximo (\circ) e euclidiana ($*$) aplicadas ao erro relativo enquanto que as curvas em preto representam as normas do máximo e euclidiana aplicadas ao erro absoluto.	82
Figura 45 – Divergente do campo $F(x, y, z) = \text{sen}(x + yz)\mathbf{x}_u + \cos(z - \text{sen}(xy))\mathbf{x}_v$ sobre a esfera discretizada com 4032 pontos. À esquerda o divergente analítico de F , no centro uma aproximação obtida pelo operador CSPM e à direita o boxplot com os erros absoluto e relativo dos operadores Diferença, CSPM, MSPH e NCSPH.	83
Figura 46 – Análise de consistência do operador Laplace-Beltrami SPH sobre a esfera obtido pela correção CSPM.	83

Figura 47 – Laplaciano da função $f(x, y, z) = \cos(xz - \sin(y))$ sobre a esfera discretizada com 4032 pontos. À esquerda o laplaciano analítico de f , no centro uma aproximação obtida pelo operador CSPM e à direita o boxplot com os erros absoluto e relativo dos operadores Taylor, CSPM, MSPH e NCSPH.	84
Figura 48 – Análise de consistência do operador Laplace-Beltrami SPH sobre o Toro obtido pela correção CSPM.	85
Figura 49 – Aproximação do Laplace-Beltrami para a função $f(x, y, z) = xyz$ obtida pelo operador CSPM. À esquerda temos o laplaciano analítico, no centro a aproximação e à direita o boxplot com os erros absolutos e relativos.	85
Figura 50 – Aproximação do laplaciano da função $f(x, y, z) = z\cos(xy)$ sobre o Bitoro, discretizado com 3070 partículas, obtido pelo operador CPSM. À esquerda a função analítica e à direita aproximação para o laplaciano.	86
Figura 51 – Evolução da equação do calor sobre a esfera nos instantes de tempo real de simulação $t=0$, $t=3,5s$, $t=7s$ e $t=10s$. As figuras acima são do ponto de vista do equador e as figuras abaixo são do ponto de vista do polo norte.	87
Figura 52 – Evolução da equação da onda sobre a esfera com uma fonte de propagação no polo norte nos instantes $t = 0s$, $t = 0,75s$, $t = 1,5s$ e $t = 2s$. As figuras acima são do ponto de vista do equador e as figuras abaixo do ponto de vista do polo norte.	88
Figura 53 – Evolução da equação da onda sobre a esfera com duas fontes de propagação no hemisfério norte nos instantes $t = 0s$, $t = 0,75s$, $t = 1,5s$ e $t = 2s$. As figuras acima são do ponto de vista do equador e as figuras abaixo do ponto de vista do polo norte.	88
Figura 54 – À esquerda a função $f(x, y, z) = xyz$ sobre a Sausage, no centro o a aproximação para o laplaciano de f obtida pelo operador CSPM e à direita um zoom na região de alta curvatura.	89
Figura 55 – À esquerda a função $f(x, y, z) = xyz$ sobre a sausage à direita temos uma aproximação para o laplaciano de f obtida pelo operador CSPM.	89
Figura 56 – À esquerda a função $f(x, y, z) = \cos(xz - \sin(y))$ sobre a esfera com distribuição uniforme, porém com densidade variável. À direita temos a função f e à esquerda uma aproximação para o laplaciano de f obtida pelo operador CSPM.	90

Lista de Símbolos

∇f - gradiente de uma função f ;

$\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ - gradiente de f em relação à variável \mathbf{x} ;

$\nabla \cdot F$ - divergente de um campo de vetores F ;

Δf - laplaciano de uma função f ;

$\langle \cdot, \cdot \rangle$ - produto interno;

$\nabla^S f$ - gradiente de uma função f sobre uma superfície S ;

$\text{div}_S F$ - divergente de um campo F sobre a superfície S ;

$\Delta_S f$ - laplaciano de uma função f sobre uma superfície S ;

f_h - representação integral de f ;

W_h - núcleo SPH;

h - comprimento suave;

V_i - vizinhança da partícula i ;

$(\nabla f)_h$ - operador SPH gradiente;

$(\nabla \cdot F)_h$ - operador SPH divergente;

$(\Delta f)_h$ - operador SPH laplaciano;

Lista de Siglas

SPH - Smoothed Particle Hydrodynamics;

CSPM - Corrective Particle Method;

MSPH - Modified Smoothed Particle Hydrodynamics;

NCSPH - New Corrective Smoothed Particle Hydrodynamics;

Sumário

	Introdução	18
1	CONCEITOS PRELIMINARES	21
1.1	Funções em \mathbb{R}^n	21
1.2	Superfícies Regulares	26
1.3	Operadores sobre Superfícies	29
1.4	Aproximações da Identidade	31
2	O MÉTODO SPH	33
2.1	Formulação Básica	33
2.1.1	Representação Integral	33
2.1.2	Núcleos SPH	35
2.1.3	Aproximação por Partículas	39
2.1.4	Consistência do Método SPH	41
2.2	Elementos de Área	42
2.3	Operadores SPH Padrões	47
2.3.1	Operador Gradiente SPH Diferença	50
2.3.2	Operador Divergente SPH Diferença	51
2.3.3	Operador Laplaciano SPH Taylor	52
2.4	Operadores SPH Corrigidos	55
2.4.1	CSPM	56
2.4.2	MSPH	60
2.4.3	NCSPH	62
2.5	Consistência dos Operadores SPH Padrões e Corrigidos	64
2.5.1	Comparando os Operadores SPH	70
3	OPERADORES SPH SOBRE VARIEDADES	72
3.1	Aproximações no Espaço Tangente	72
3.2	O Método SPH sobre Superfícies	75
3.2.1	Definindo uma Base para $T_p S$	76
3.2.2	Definindo uma Vizinhança em $p \in S$	77
3.2.3	Definindo os Elementos de Área	77
3.2.4	Operadores Diferenciais Discretos	78
3.3	Operadores SPH sobre a Esfera	80
3.4	Operadores SPH sobre Outras Superfícies	84
3.5	Aplicações	86

3.5.1	Equação do Calor	86
3.5.2	Equação da Onda	87
3.6	Limitações e Comentários	89
	Conclusão	93
	Referências	94

Introdução

Operadores diferenciais tais como gradiente, divergente e laplaciano, aparecem com frequência em diversas aplicações na matemática, na física, na computação e em outras áreas da ciência. No entanto, o estudo destes operadores sobre o ponto de vista analítico pode tornar-se demasiadamente complexo e, por esta razão, uma análise sob o ponto de vista numérico através de suas versões discretizadas tornou-se muito estudada e útil para o entendimento do comportamento destes operadores.

Há disponíveis na literatura alguns métodos para se obter operadores diferenciais discretos e nesta dissertação estudaremos o método numérico conhecido como SPH, do acrônimo inglês *Smoothed Particle Hydrodynamics*. Introduzido em 1977 nos trabalhos de Lucy (LUCY, 1977) e Gingold e Monaghan (GINGOLD; MONAGHAN, 1977), o SPH é um método de partículas sem uso de malha e de formulação lagrangeana. Inicialmente o método SPH foi utilizado para resolver problemas de astrofísica, mas atualmente já se verifica aplicações nas mais diversas áreas como dinâmica dos fluidos (MONAGHAN, 1994), mecânica dos sólidos (KUM; HOOVER; POSCH, 1995) e computação gráfica (IHMSEN et al., 2014; PAIVA et al., 2009a).

No método SPH o domínio de um problema é representado por um conjunto de partículas definidas como pontos que discretizam tal domínio e são totalmente livres de malha. Cada partícula contém, além da geometria do espaço, outras informações do problema tais como propriedades físicas e dados numéricos/computacionais. Esta dissertação propõe a discretização de operadores diferenciais sem associá-los a um fenômeno físico num primeiro momento, sendo assim apenas propriedades geométricas das partículas são levadas em consideração. Após a discretização do domínio, a discretização numérica é obtida usando informações em todas as partículas através de médias locais, assim as partículas também são utilizadas como a estrutura computacional para calcular as aproximações necessárias para obter uma solução numérica para o problema.

Embora muito eficiente, o método SPH apresenta um comportamento indesejado próximo a fronteira do problema, quando esta existe, e é sensível a má distribuição das partículas. Há diferentes maneiras de tratar tal deficiência, por exemplo Libersky et al (LIBERSKY et al., 1993) introduziram as chamadas partículas fantasmas para simular a interação de partículas com a fronteira do domínio. Algumas propostas de correções são encontradas na literatura e esta dissertação discute as correções CSPM (Corrective Smoothed Particle Method) (CHEN; BERAUN; CARNEY, 1999), MSPH (Modified Smoothed Particle Hydrodynamics) (ZHANG; BATRA, 2004) e NCSPH (New Corrective Smoothed Particle Hydrodynamics) (STRANEX; WHEATON, 2011). Uma análise comparativa é feita tendo em vista os operadores SPH padrões e as correções de modo a identificar as vantagens e desvantagens em se usar cada método de acordo o resultado pretendido.

Os operadores diferenciais discretos obtidos pelo método SPH e suas correções são definidos no espaço euclidiano e devido a alguns aspectos de sua formulação estes são aplicáveis apenas aos operadores definidos neste espaço. No entanto, aplicações que envolvem operadores diferenciais surgem naturalmente em outros espaços, como por exemplo sobre as variedades diferenciáveis. Assim, a busca por extensões dos operadores diferenciais obtidos pelo método SPH para variedades tem sido alvo de pesquisa e algumas técnicas já foram desenvolvidas (PETRONETTO et al., 2013; LIANG; ZHAO, 2013).

A abordagem utilizada para estender os operadores SPH para variedades proposta é muito similar à encontrada em (PETRONETTO et al., 2013; LIANG; ZHAO, 2013) e se utiliza do espaço tangente para aproximar localmente a variedade. A princípio a definição formal dos operadores diferenciais sobre variedades em coordenadas locais dependem do tensor métrico associado a uma parametrização. A ideia central da abordagem atual é utilizar o plano tangente para obter uma parametrização de modo que os operadores definidos sobre a variedade assumam uma expressão que aproxima os operadores equivalentes definidos no espaço euclidiano. Sendo a variedade suficientemente suave, o cálculo do operador sobre a variedade pode ser obtido a partir do plano tangente que por sua vez se comporta como o espaço euclidiano permitindo assim o uso dos operadores SPH já conhecidos.

Tendo definido uma extensão dos operadores SPH para variedades, uma análise de consistência é apresentada para os casos particulares dos operadores definidos sobre a esfera além de uma análise pontual sobre outras superfícies. Em seguida tais operadores são utilizados para resolver a equações do calor e a equação da onda sobre superfícies.

As principais contribuições desta dissertação são:

1. apresentar operadores diferenciais discretos obtidos pelo método SPH a partir da formulação clássica e de três propostas de correções, a saber, a CSPM, MSPH e NCSPH;
2. analisar a consistência de tais operadores bem como comparar o desempenho de cada um deles apontando qual apresenta o melhor resultado de acordo com o problema em questão;
3. definir operadores diferenciais discretos sobre variedades utilizando o método SPH;
4. aplicar os operadores discretos sobre variedades a problemas clássicos de EDP sobre variedades.

No capítulo 1, definimos os operadores diferenciais no espaço euclidiano, superfícies diferenciáveis e operadores sobre superfícies, bem como os principais resultados a serem utilizados ao longo do trabalho. No capítulo 2, formulamos o método SPH e definimos os operadores diferenciais discretos gradiente, divergente e laplaciano. Em seguida, discutimos os métodos CSPM, MSPH e NCSPH. Finalizamos este capítulo apresentando uma

análise de consistência dos operadores, comparando os resultados obtidos por cada um deles e apontando os que retornam melhores resultados. No capítulo 3, apresentamos uma nova proposta para se obter operadores diferenciais discretos sobre variedades utilizando o método SPH. Os passos detalhados da metodologia são discutidos e a consistência dos novos operadores é analisada. Por fim, os novos operadores definidos sobre variedades são utilizados para resolver a equação do calor e a equação da onda sobre a esfera e são feitas algumas considerações apontando vantagens e limitações do método.

1 Conceitos Preliminares

Apresentaremos neste capítulo algumas noções da análise no espaço euclidiano n -dimensional, a definição de operadores diferenciais no neste espaço e sobre superfícies e resultados sobre aproximações da identidade. Não ambicionamos exaurir tais temas, a nossa principal intenção neste capítulo é uniformizar as notações, bem como indicar um caminho ao leitor para que este possa ler a presente dissertação com o mínimo de conhecimento.

1.1 Funções em \mathbb{R}^n

Esta é uma seção de apresentação dos conceitos da análise no \mathbb{R}^n que utilizaremos ao longo do trabalho. Sendo assim, discorreremos por esta através de parágrafos, onde cada parágrafo conterà uma definição. Omitiremos as demonstrações de alguns resultados para sintetizar o conteúdo e tornar o capítulo mais fluente. Um texto completo sobre o conteúdo apresentado nesta seção pode ser encontrado em (LIMA, 2014).

Derivada parcial e direcional

Seja $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ uma função real, definida num subconjunto aberto $U \subset \mathbb{R}^n$. Dado um ponto $a \in U$, a i -ésima derivada parcial de f em a (onde $1 \leq i \leq n$) é o limite

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(a) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(a + te_i) - f(a)}{t},$$

quando tal limite existe. Podemos definir a derivada da função f na direção de um vetor $v \in \mathbb{R}^n$ qualquer. A *derivada direcional* de f no ponto a , segundo o vetor v , é definida pelo limite

$$\frac{\partial f}{\partial v}(a) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(a + tv) - f(a)}{t},$$

quando tal limite existe.

Funções diferenciáveis

Seja $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ com $U \subset \mathbb{R}^n$ e $a \in U$. Diremos que a função f é *diferenciável* no ponto a quando existirem constantes A_1, \dots, A_n tais que, para todo vetor $v = (\alpha_1, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{R}^n$, com $a + v \in U$, se tenha

$$f(a + v) = f(a) + A_1 \cdot \alpha_1 + \dots + A_n \cdot \alpha_n + r(v),$$

onde $\lim_{v \rightarrow 0} \frac{r(v)}{|v|} = 0$. Quando f é diferenciável em todos os pontos de U , dizemos simplesmente que f é *diferenciável*. Se f é diferenciável no ponto a então, tomando $v = te_i$, temos $\alpha_j = 0$ se $j \neq i$ e $\alpha_i = t$. Logo

$$\frac{f(a + te_i) - f(a)}{t} = A_i + \frac{r(te_i)}{t} = A_i \pm \frac{r(te_i)}{|te_i|}.$$

Fazendo $t \rightarrow 0$, vemos que existe cada derivada parcial de f no ponto a , sendo $\frac{\partial f}{\partial x_i}(a) = A_i$. Portanto a definição a seguir é equivalente a anterior.

Diremos que a função $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ é diferenciável no ponto $a \in U$ quando existirem as derivadas parciais $\frac{\partial f}{\partial x_1}(a), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(a)$ e, além disso, para todo vetor $v = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ tal que $a + v \in U$, tivermos

$$f(a + v) = f(a) + \frac{\partial f}{\partial x_1}(a) \cdot \alpha_1 + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_n}(a) \cdot \alpha_n + r(v),$$

onde $\lim_{v \rightarrow 0} \frac{r(v)}{|v|} = 0$.

Uma função real $f : U \rightarrow \mathbb{R}$, diz-se de *classe* C^1 quando existem em cada ponto $x \in U$ as derivadas parciais $\frac{\partial f}{\partial x_1}(x), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(x)$ e as n funções $\frac{\partial f}{\partial x_i} : U \rightarrow \mathbb{R}$ são contínuas. Mais geralmente, diremos que uma função $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ é de *classe* C^k quando ela possuir derivadas parciais em todos os pontos de U e as funções $\frac{\partial f}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} : U \rightarrow \mathbb{R}$ forem de classe C^{k-1} , onde k é um inteiro positivo. Para completar a definição indutiva, diremos que uma função $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ é de *classe* C^0 quando ela for contínua. Usaremos a notação $f \in C^k$ e escreveremos $f \in C^\infty$, quando $f \in C^k$ para todo $k \geq 0$.

Teorema 1.1. *Toda função de classe C^1 é diferenciável.*

Se todas as funções $\frac{\partial f}{\partial x_i} : U \rightarrow \mathbb{R}$ são diferenciáveis num ponto $a \in U$, diz-se que f é *duas vezes diferenciável* em a . Neste caso, para todos os inteiros $i, j = 1, 2, \dots, n$ existem as *derivadas parciais de segunda ordem*

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right) (a) = \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i} (a).$$

Teorema 1.2 (Teorema de Schwarz). *Seja $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ duas vezes diferenciável no ponto $a \in U \subset \mathbb{R}^n$. Para quaisquer $1 \leq i, j \leq n$, tem-se*

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} (a) = \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i} (a).$$

A diferencial de uma função

Seja $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ definida no aberto $U \subset \mathbb{R}^n$, diferenciável no ponto $a \in U$. A *diferencial* de f em a é o funcional linear $df(a) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, cujo valor no vetor $v = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ é dado por

$$df(a) \cdot v = \frac{\partial f}{\partial v}(a) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i}(a) \cdot \alpha_i.$$

Como toda transformação linear $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, o funcional linear $df(a)$ possui uma matriz $1 \times n$ em relação à base canônica de \mathbb{R}^n . Se identificarmos o funcional com sua matriz, teremos

$$df(a) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(a) \cdots \frac{\partial f}{\partial x_n}(a) \right).$$

Quando $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ é diferenciável em todo ponto de U , obtemos uma aplicação $df : U \rightarrow (\mathbb{R}^n)^* = \mathcal{L}(\mathbb{R}^n; \mathbb{R})$, que associa a cada ponto $x \in U$ o funcional $df(x)$, cuja matriz é

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(x) \cdots \frac{\partial f}{\partial x_n}(x) \right).$$

A aplicação df é contínua se, e somente se, cada uma das suas funções coordenadas $\frac{\partial f}{\partial x_i} : U \rightarrow \mathbb{R}$ é contínua, isto é, se, e somente se, f é de classe C^1 . É comum indicar-se a base canônica de $(\mathbb{R}^n)^*$ com (dx_1, \dots, dx_n) , logo $dx_i \cdot v = \alpha_i$ se $v = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$. O motivo desta notação é o seguinte: como a i -ésima projeção $\pi_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ assume, em cada ponto $x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ o valor $\pi_i(x) = x_i$, escreve-se x_i em vez de π_i . Calculando a diferencial da i -ésima projeção $x_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, obtemos $dx_i(a) \cdot v = \alpha_i$ em todo ponto $a \in \mathbb{R}^n$. Escrevendo $dx_i \cdot v$ em vez de α_i , a definição da diferencial assume a seguinte expressão:

$$df(a) \cdot v = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i}(a) \cdot dx_i \cdot v.$$

Como esta igualdade vale para cada $v \in \mathbb{R}^n$, temos

$$df(a) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i}(a) dx_i.$$

Isto significa que o funcional linear $df(a)$ se exprime como combinação linear dos funcionais dx_i , sendo $(\partial f / \partial x_i)(a)$ os coeficientes da combinação e como a igualdade acima vale para todo ponto $a \in U$, podemos escrever

$$df = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i} dx_i.$$

Fórmula de Taylor

A fórmula de Taylor para uma função $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ definida no aberto $U \subset \mathbb{R}^n$ é dada pela seguinte expressão:

$$f(a+v) = f(a) + df(a) \cdot v + \frac{1}{2} d^2 f(a) \cdot v^2 + \cdots + \frac{1}{p!} d^p f(a) \cdot v^p + r_p(v). \quad (1.1)$$

Apresentamos a seguir as expressões de $d^p f(a) \cdot v$ para $p = \{2, 3\}$ onde $v = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$

$$d^2 f(a) \cdot v^2 = \sum_{i,j} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(a) \alpha_i \alpha_j,$$

$$d^3 f(a) \cdot v^3 = \sum_{i,j,k} \frac{\partial^3 f}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k}(a) \alpha_i \alpha_j \alpha_k.$$

Teorema 1.3 (Fórmula de Taylor Infinitesimal). *Se f é p vezes diferenciável no ponto a , então $\lim_{v \rightarrow 0} \frac{r_p(v)}{|v|^p} = 0$.*

Sejam $f : U \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $\mathbf{u} = (a, b)$ e $\mathbf{x} = (x, y)$. A fórmula de Taylor de f em torno de \mathbf{u} é dada por

$$\begin{aligned} f(x, y) = & f(a, b) + (x - a) \frac{\partial f}{\partial x}(a, b) + (y - b) \frac{\partial f}{\partial y}(a, b) + \frac{(x - a)^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(a, b) + \\ & (x - a)(y - b) \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(a, b) + \frac{(y - b)^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(a, b) + r_3(x, y). \end{aligned} \quad (1.2)$$

O gradiente de uma função

O produto interno natural induz um isomorfismo entre \mathbb{R}^n e seu dual $(\mathbb{R}^n)^*$. Tal isomorfismo faz corresponder a cada vetor $v \in \mathbb{R}^n$ o funcional $v^* \in (\mathbb{R}^n)^*$ com $v^*(x) = \langle v, x \rangle$ para todo $x \in \mathbb{R}^n$. Se $v = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ então $v^*(e_1) = \alpha_1, \dots, v^*(e_n) = \alpha_n$, logo a matriz de v^* em relação à base canônica de \mathbb{R}^n é $(\alpha_1 \ \dots \ \alpha_n)$.

Dada uma função diferenciável $f : U \rightarrow \mathbb{R}$, definida no aberto $U \subset \mathbb{R}^n$, define-se o *gradiente* de f no ponto $a \in U$ como o vetor $\nabla f(a)$ que corresponde ao funcional $df(a)$ segundo o isomorfismo acima descrito. Isto significa que:

$$\langle \nabla f(a), v \rangle = \frac{\partial f}{\partial v}(a) = df(a) \cdot v = \sum \frac{\partial f}{\partial x_i}(a) \cdot \alpha_i$$

para todo vetor $v = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$. Em particular $\langle \nabla f(a), e_i \rangle = \frac{\partial f}{\partial x_i}(a)$, logo

$$\nabla f(a) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(a), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(a) \right). \quad (1.3)$$

Diferenciabilidade de uma aplicação

A aplicação $f : U \rightarrow \mathbb{R}^n$, definida no aberto $U \subset \mathbb{R}^m$, diz-se *diferenciável* no ponto $a \in U$ quando existe uma aplicação linear $T : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$ tal que

$$f(a + v) - f(a) = T \cdot v + r(v),$$

onde $\lim_{v \rightarrow 0} \frac{r(v)}{|v|} = 0$ e $a + v \in U$.

A *derivada direcional* de f num ponto $a \in U$, relativamente a um vetor $v \in \mathbb{R}^m$, é por definição

$$\frac{\partial f}{\partial v}(a) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(a + tv) - f(a)}{t} \in \mathbb{R}^n,$$

quando tal limite existe.

Teorema 1.4. *A aplicação $f : U \rightarrow \mathbb{R}^n$ é diferenciável no ponto $a \in U$ se, e somente se, cada uma das suas funções-coordenadas $f_1, \dots, f_n : U \rightarrow \mathbb{R}$ é diferenciável nesse ponto.*

Um *campo de vetores* F num subconjunto $X \subset \mathbb{R}^n$ é simplesmente uma aplicação $F : X \rightarrow \mathbb{R}^n$. A terminologia se deve a exemplos físicos como campo gravitacional, campo eletrostático, campo de velocidades de um fluido que escoar, etc.

Divergente de um Campo de Vetores

Se imaginamos um campo de vetores como um campo de velocidades de um fluido ou de um gás, então a divergência do campo está relacionada com a expansão ou a contração do volume do gás pelo fluxo do campo. A definição do divergente é intrínseca ao campo e independe do sistema de coordenadas. No entanto, é comum considerarmos o sistema de coordenadas cartesianas e a partir deste defini-lo como a seguir.

O *divergente* de F num ponto $a \in X$, denotado por $\nabla \cdot F(a)$, é definido por

$$\nabla \cdot F(a) = \frac{\partial F_1}{\partial x_1}(a) + \cdots + \frac{\partial F_n}{\partial x_n}(a). \quad (1.4)$$

O Laplaciano em \mathbb{R}^n

O *laplaciano* de uma função $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ é definido como

$$\Delta f(x) = \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(x) + \cdots + \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2}(x), \quad (1.5)$$

onde (x_1, \dots, x_n) são coordenadas cartesianas. O laplaciano é também definido como o divergente do gradiente. Em símbolos

$$\Delta f = \nabla^2 f = \nabla \cdot (\nabla f). \quad (1.6)$$

O operador ∇ e suas propriedades

Inserimos aqui o operador diferencial ∇ . Este operador em termos da base canônica de \mathbb{R}^3 assume a seguinte expressão

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right). \quad (1.7)$$

Os operadores definidos nesta seção podem ser vistos como resultado de operações envolvendo o operador ∇ . Listaremos agora algumas identidades envolvendo o operador ∇ que nos serão úteis ao longo do trabalho.

$$\nabla(fg) = (\nabla f)g + f(\nabla g); \quad (1.8)$$

$$\nabla \cdot (Fg) = (\nabla \cdot F)g + F \cdot (\nabla g); \quad (1.9)$$

$$\int_{\Omega} (f\Delta g - g\Delta f)dV = \int_{\partial\Omega} \left(f \frac{\partial g}{\partial \mathbf{n}} - g \frac{\partial f}{\partial \mathbf{n}} \right) d\sigma. \quad (1.10)$$

Esta última identidade trata-se da *segunda identidade de Green*, onde \mathbf{n} é o vetor normal ao bordo apontando para fora da superfície. Uma exposição mais completa de tais propriedades pode ser encontrada no livro “Calculus of Vector Functions” (WILLIAMSON; CROWELL; TROTTER, 1972).

O teorema do divergente e integração por partes

O teorema do divergente é um teorema muito importante em cálculo avançado que relaciona a integral do divergente de um campo em um domínio com a integral do campo na fronteira. Como o divergente é uma “derivada”, este é um resultado similar ao Teorema Fundamental do Cálculo na reta.

Teorema 1.5 (Teorema do divergente). *Seja Ω um subconjunto aberto limitado de \mathbb{R}^n com borda suave. Então, para qualquer campo vetorial $F \in C^1$ em Ω e contínuo em $\bar{\Omega}$,*

$$\int_{\partial\Omega} F \cdot \nu d\sigma = \int_{\Omega} \nabla \cdot F d\mathbf{x}, \quad (1.11)$$

onde σ é o elemento de área em $\partial\Omega$ e ν é o vetor normal unitário apontando para fora em $\partial\Omega$.

Para toda função contínua f definida num conjunto aberto $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, define-se o suporte de f como sendo

$$\text{sup}(f) = \overline{\{x \in \Omega; f(x) \neq 0\}}, \quad (1.12)$$

onde o fecho é tomado em Ω . Se $u, v \in C^1(\Omega)$ e se um dos suporte, de u ou de v é compacto então vale a seguinte *fórmula de integração por partes*

$$\int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial x_k} v d\mathbf{x} = - \int_{\Omega} u \frac{\partial v}{\partial x_k} d\mathbf{x}, \quad (1.13)$$

que segue de (1.11) para $F = (uv)\mathbf{e}_k$, onde \mathbf{e}_k é o vetor unitário na direção do eixo \mathbf{x}_k .

1.2 Superfícies Regulares

Nesta seção definiremos superfícies regulares. Tomaremos como bibliografia básica o capítulo dois do livro "Geometria Diferencial de Curvas e Superfícies" (CARMO, 2012).

Superfícies Regulares

Definição 1.1. *Um subconjunto $S \subset \mathbb{R}^3$ é uma superfície regular se, para cada $p \in S$, existe uma vizinhança V de p em \mathbb{R}^3 e uma aplicação $\mathbf{x} : U \rightarrow V \cap S$ de um aberto $U \subset \mathbb{R}^2$ sobre $V \cap S \subset \mathbb{R}^3$ tal que*

1. \mathbf{x} é diferenciável. Isto significa que se escrevermos

$$\mathbf{x}(u, v) = (x(u, v), y(u, v), z(u, v)), \quad (u, v) \in U,$$

as funções $x(u, v), y(u, v), z(u, v)$ têm derivadas parciais contínuas de todas as ordens em U .

2. \mathbf{x} é um homeomorfismo. Como \mathbf{x} é contínua pela condição 1, isto significa que \mathbf{x} tem inversa $\mathbf{x}^{-1} : V \cap S \rightarrow U$ que é contínua.
3. (condição de regularidade) Para todo $q \in U$, a diferencial $d\mathbf{x}_q : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$ é injetiva.

A aplicação \mathbf{x} é chamada uma *parametrização* ou um sistema de coordenadas (locais) em (uma vizinhança de) p . A vizinhança $V \cap S$ de p em S é chamada uma *vizinhança coordenada*.

Exemplo 1.1. A esfera unitária $\mathbb{S} = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3; x^2 + y^2 + z^2 = 1\}$ é uma superfície regular. Utilizaremos o seguinte sistema de coordenadas $\mathbf{x} : U \rightarrow \mathbb{S}^2$ dada por

$$\mathbf{x}(u, v) = \begin{cases} x = x(u, v) = \text{sen}(u)\cos(v) \\ y = y(u, v) = \text{sen}(u)\text{sen}(v) \\ z = z(u, v) = \cos(u) \end{cases}, \quad (1.14)$$

onde $U = \{(u, v) \in \mathbb{R}^2; 0 < u < \pi \text{ e } 0 < v < 2\pi\}$.

Exemplo 1.2. O lugar geométrico dos pontos obtido pela rotação de um círculo de raio r em torno de uma reta pertencente ao plano que contém o círculo e a uma distância $R > r$ do centro do círculo, é uma superfície regular conhecida como Toro. Utilizaremos o seguinte sistema de coordenadas $\mathbf{x} : V \rightarrow \mathbb{T}$ dada por

$$\mathbf{x}(\theta, \varphi) = \begin{cases} x = x(\theta, \varphi) = (R + r\cos(\theta))\cos(\varphi) \\ y = y(\theta, \varphi) = (R + r\cos(\theta))\text{sen}(\varphi) \\ z = z(\theta, \varphi) = r\text{sen}(\theta) \end{cases}, \quad (1.15)$$

onde $V = \{(\theta, \varphi) \in \mathbb{R}^2; 0 < \theta < 2\pi, 0 < \varphi < 2\pi\}$.

Teorema 1.6. Se $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função diferenciável em um conjunto aberto $U \subset \mathbb{R}^2$, então o gráfico de f , isto é, o subconjunto de \mathbb{R}^3 dado por $(x, y, f(x, y))$ para $(x, y) \in U$, é uma superfície regular.

Definição 1.2. Seja $f : V \subset S \rightarrow \mathbb{R}$ uma função definida em um subconjunto aberto V de uma superfície regular S . Então f é diferenciável em $p \in V$ se, para alguma parametrização $\mathbf{x} : U \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow S$, com $p \in \mathbf{x}(U) \subset V$, a composição $f \circ \mathbf{x} : U \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ é diferenciável em $\mathbf{x}^{-1}(p)$. A função f é diferenciável em V se é diferenciável em todos os pontos de V .

Espaço Tangente

Dado um ponto $p \in S$, o vetor tangente a S em p é o vetor tangente $\alpha'(0)$ de uma curva parametrizada diferenciável $\alpha : (-\varepsilon, \varepsilon) \rightarrow S$, com $\alpha(0) = p$.

Teorema 1.7. *Seja $\mathbf{x} : U \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow S$ uma parametrização de uma superfície regular S e seja $q \in U$. O subespaço vetorial de dimensão 2,*

$$d\mathbf{x}_q(\mathbb{R}^2) \subset \mathbb{R}^3,$$

coincide com o conjunto de vetores tangentes a S em $\mathbf{x}(q)$.

O plano $d\mathbf{x}_q(\mathbb{R}^2)$ que passa por $\mathbf{x}(q) = p$, não depende da parametrização \mathbf{x} . Este plano será chamado de *plano tangente* a S em p , e será denotado por $T_p S$. A escolha de uma parametrização \mathbf{x} determina uma base $\{\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u}(q), \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial v}(q)\}$ de $T_p S$, chamada *base associada* a \mathbf{x} . Adotaremos a notação: $\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u}(q) = \mathbf{x}_u$ e $\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial v}(q) = \mathbf{x}_v$.

Exemplo 1.3. *A partir da parametrização da esfera apresentada no exemplo 1.1 temos a seguinte base associada a \mathbf{x}*

$$\mathbf{x}_u(u, v) = \begin{cases} \frac{\partial}{\partial u} x = \cos(u)\cos(v) \\ \frac{\partial}{\partial u} y = \cos(u)\sin(v) \\ \frac{\partial}{\partial u} z = -\sin(u) \end{cases}, \quad \mathbf{x}_v(u, v) = \begin{cases} \frac{\partial}{\partial v} x = -\sin(u)\sin(v) \\ \frac{\partial}{\partial v} y = \sin(u)\cos(v) \\ \frac{\partial}{\partial v} z = 0 \end{cases}. \quad (1.16)$$

Exemplo 1.4. *Para o toro, a partir da parametrização apresentada no exemplo 1.2, temos a seguinte base associada a \mathbf{x}*

$$\mathbf{x}_\theta(\theta, \varphi) = \begin{cases} \frac{\partial}{\partial \theta} x = -r\sin(\theta)\cos(\varphi) \\ \frac{\partial}{\partial \theta} y = -r\sin(\theta)\sin(\varphi) \\ \frac{\partial}{\partial \theta} z = r\cos(\theta) \end{cases}, \quad \mathbf{x}_\varphi(\theta, \varphi) = \begin{cases} \frac{\partial}{\partial \varphi} x = -(R + r\cos(\theta))\sin(\varphi) \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} y = (R + r\cos(\theta))\cos(\varphi) \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} z = 0 \end{cases}. \quad (1.17)$$

Definiremos a *diferencial de uma função* $f : U \subset S \rightarrow \mathbb{R}$ em $p \in U$ como a aplicação linear

$$df_p : T_p S \rightarrow \mathbb{R}$$

dada por $df_p(w) = \beta'(0)$, onde $\beta = f \circ \alpha$ com α dada acima de modo que $\alpha'(0) = w$.

Definição 1.3. *Um campo de vetores F em um conjunto aberto $U \subset S$ de uma superfície regular S é uma correspondência que associa a cada $p \in U$ um vetor $F(p) \in T_p S$. O campo de vetores é diferenciável em $p \in U$ se, para alguma parametrização $\mathbf{x}(u, v)$ em p , as funções $F^1(u, v)$ e $F^2(u, v)$ tais que*

$$F(p) = F^1(u, v)\mathbf{x}_u + F^2(u, v)\mathbf{x}_v$$

são funções diferenciáveis em p .

Primeira Forma Fundamental

O produto interno natural do $\mathbb{R}^3 \supset S$, induz em cada plano tangente $T_p S$ de uma superfície regular S um produto interno. A esse produto interno corresponde uma forma quadrática $g : T_p S \rightarrow \mathbb{R}$ dada por

$$g(w) = \langle w, w \rangle.$$

Como o plano tangente está associado ao ponto p , é evidente que a restrição do produto interno, bem como a forma quadrática, também estão associados a p . No entanto, omitiremos o subíndice p que em geral acompanha tais definições. A notação g para a primeira forma fundamental foi adotada tendo em vista que esta é o tensor métrico que aparece em situações mais gerais para definir variedades Riemannianas. A primeira forma fundamental pode ser expressa na base $\{\mathbf{x}_u, \mathbf{x}_v\}$ associada a uma parametrização $\mathbf{x}(u, v)$ em p , onde os coeficientes são dados da seguinte forma

$$g_{ij} = \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \rangle,$$

onde $1 \leq i, j \leq 2$, $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_u$ e $\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_v$. Denotaremos por (g^{ij}) a inversa de (g_{ij}) .

A seguir exibiremos a primeira forma fundamental da esfera e do toro com as parametrizações dadas pelos exemplos 1.1 e 1.2 respectivamente.

Exemplo 1.5. *A partir dos exemplos 1.1 e 1.3 temos a primeira forma fundamental para a esfera*

$$g(\mathbf{x}(u, v)) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \text{sen}^2 u \end{bmatrix}. \quad (1.18)$$

Exemplo 1.6. *A partir dos exemplos 1.2 e 1.4 temos a primeira forma fundamental para o toro*

$$g(\mathbf{x}(\theta, \varphi)) = \begin{bmatrix} r^2 & 0 \\ 0 & (R + r \cos \theta)^2 \end{bmatrix}. \quad (1.19)$$

1.3 Operadores sobre Superfícies

Nesta seção apresentaremos as definições dos operadores gradiente, divergente e laplaciano sobre uma superfície regular tendo em vista um sistema de coordenadas locais. Tais expressões são naturalmente estendidas para uma variedade qualquer como pode ser verificado no texto "Heat Kernel and Analysis on Manifolds" (GRIGORYAN, 2009) que utilizamos como base para nossos resultados.

Gradiente

O *gradiente* de uma função diferenciável $f : S \rightarrow \mathbb{R}$ é uma aplicação diferenciável $\nabla^S f : S \rightarrow \mathbb{R}^3$ que associa a cada ponto $p \in S$ um vetor $\nabla^S f(p) \in T_p S \subset \mathbb{R}^3$ tal que

$$\langle \nabla^S f(p), v \rangle = df_p(v), \quad \forall v \in T_p S.$$

Em coordenadas locais (u, v) , obtém-se a seguinte expressão para o gradiente

$$\nabla^S f = \left(g^{11} \frac{\partial f}{\partial u} + g^{12} \frac{\partial f}{\partial v}, g^{21} \frac{\partial f}{\partial u} + g^{22} \frac{\partial f}{\partial v} \right). \quad (1.20)$$

Observação:

Temos que $f = f(x, y, z)$ onde $x = x(u, v)$, $y = y(u, v)$ e $z = z(u, v)$, sendo assim utilizamos a regra da cadeia para obter as derivadas em relação a u e v

$$\frac{\partial f}{\partial u} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial u} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial u} + \frac{\partial f}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial u}, \quad \frac{\partial f}{\partial v} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial v} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial v} + \frac{\partial f}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial v}. \quad (1.21)$$

Divergente

Dado um campo de vetores diferenciável $F = F^1 + F^2$ sobre uma superfície regular S , o divergente $\operatorname{div}_S F$ é uma função diferenciável sobre S , definida por meio do seguinte resultado

Teorema 1.8 (Teorema do divergente). *Dado qualquer campo de vetores $F \in C^\infty$ sobre uma superfície regular S , existe uma única função diferenciável sobre S , denotada por $\operatorname{div}_S F$, tal que vale a seguinte identidade*

$$\int_S (\operatorname{div}_S F) f d\nu = - \int_S \langle F, \nabla^S f \rangle d\nu, \quad (1.22)$$

para todo $f \in C_0^\infty(S)$.

Em coordenadas locais (u, v) temos

$$\begin{aligned} \operatorname{div}_S F &= \frac{1}{\sqrt{\det(g)}} \left\{ \frac{\partial}{\partial u} \left(\sqrt{\det(g)} F^1 \right) + \frac{\partial}{\partial v} \left(\sqrt{\det(g)} F^2 \right) \right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\det(g)}} \left\{ F^1 \frac{\partial}{\partial u} \left(\sqrt{\det(g)} \right) + \sqrt{\det(g)} \frac{\partial}{\partial u} F^1 + F^2 \frac{\partial}{\partial v} \left(\sqrt{\det(g)} \right) + \sqrt{\det(g)} \frac{\partial}{\partial v} F^2 \right\} \\ &= \frac{\partial}{\partial u} F^1 + \frac{\partial}{\partial v} F^2 + \frac{1}{2\det(g)} F^1 \frac{\partial}{\partial u} (\det(g)) + \frac{1}{2\det(g)} F^2 \frac{\partial}{\partial v} (\det(g)). \end{aligned} \quad (1.23)$$

Laplace-Beltrami

Tendo definido o gradiente e o divergente definiremos agora o operador *laplaciano* (também chamado de Operador Laplace-Beltrami) sobre uma superfície regular S . O operador Laplace-Beltrami assim como o operador laplaciano em \mathbb{R}^n é definido como o divergente do gradiente. Isto é, para qualquer função diferenciável f sobre S

$$\Delta_S f = \operatorname{div}_S(\nabla^S f), \quad (1.24)$$

e portanto $\Delta_S f$ é também uma função diferenciável sobre S . Em coordenadas locais (u, v) temos

$$\Delta_S f = \frac{1}{\sqrt{\det(g)}} \left\{ \frac{\partial}{\partial u} \left[\sqrt{\det(g)} \left(g^{11} \frac{\partial f}{\partial u} + g^{12} \frac{\partial f}{\partial v} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial v} \left[\sqrt{\det(g)} \left(g^{21} \frac{\partial f}{\partial u} + g^{22} \frac{\partial f}{\partial v} \right) \right] \right\}, \quad (1.25)$$

onde $g = (g_{ij})$.

1.4 Aproximações da Identidade

Encerramos este capítulo com o conceito de aproximações da identidade. Uma leitura mais completa sobre o assunto pode ser encontrada no Apêndice do livro "Partial Differential Equations" (EVANS, 2002).

Dado $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ subconjunto aberto, definimos o *espaço* L^p , com $1 \leq p \leq \infty$, como sendo o conjunto de todas as funções mensuráveis f em Ω tal que

$$\int_{\Omega} |f(x)|^p dx < \infty.$$

Dada $f \in L_p$ definimos uma norma de f em L_p da seguinte forma,

$$\|f\|_{L^p} = \|f\|_p = \left(\int_{\Omega} |f(x)|^p dx \right)^{\frac{1}{p}}, \quad 1 \leq p < \infty$$

e para $p = \infty$

$$\|f\|_{\infty} = \sup_{x \in \Omega} |f(x)|.$$

Definiremos agora o conceito de convolução entre duas funções mensuráveis. Sejam dadas f e g funções mensuráveis em \mathbb{R}^n . A *convolução* de f e g é a função $f * g$ definida por

$$f * g(x) = \int_{\mathbb{R}^n} f(y)g(x - y)dy. \quad (1.26)$$

Utilizamos a convolução para introduzir o conceito de aproximações da identidade. Dada Φ uma função em \mathbb{R}^n e $\varepsilon > 0$, definimos uma nova função

$$\Phi_{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\varepsilon^n} \Phi \left(\frac{\mathbf{x}}{\varepsilon} \right).$$

Se $\Phi \in L^1(\mathbb{R}^n)$ temos

$$\int_{\mathbb{R}^n} \Phi_\varepsilon(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^n} \Phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x},$$

para cada $\varepsilon > 0$. Quando $\varepsilon \rightarrow 0$, a massa de Φ_ε torna-se mais concentrada na origem, de modo que, heurísticamente, Φ_ε está convergindo para um múltiplo do delta de Dirac. Esse é essencialmente o contexto dos próximos dois resultados.

Teorema 1.9 (Aproximação da Identidade - Convergência L^p). *Seja $\Phi \in L^1(\mathbb{R}^n)$ com $\int_{\mathbb{R}^n} \Phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = A$. Então valem as seguintes propriedades:*

- (i) *Se $f \in L^p(\mathbb{R}^n)$ onde $1 \leq p < \infty$, então $f * \Phi_\varepsilon \rightarrow Af$ na norma L^p , quando $\varepsilon \rightarrow 0$.*
- (ii) *Se f é limitada e uniformemente contínua, então $f * \Phi_\varepsilon \rightarrow Af$ uniformemente quando $\varepsilon \rightarrow 0$.*
- (iii) *Se $f \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$ e f é contínua em um aberto U , então $f * \Phi_\varepsilon \rightarrow Af$ uniformemente em subconjuntos compactos de U , quando $\varepsilon \rightarrow 0$.*

Teorema 1.10 (Aproximação da Identidade - Convergência Pontual). *Seja $\Phi \in L^1(\mathbb{R}^n)$ com $\int_{\mathbb{R}^n} \Phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = A$. Assuma que $|\Phi|$ possui um majorante radial não crescente $\psi \in L^1(\mathbb{R}^n)$. Se $f \in L^p(\mathbb{R}^n)$ com $1 \leq p \leq \infty$, temos*

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} f * \Phi_\varepsilon(\mathbf{x}) = Af(\mathbf{x})$$

para todo \mathbf{x} no conjunto de Lebesgue de f (em particular para quase todo ponto).

2 O Método SPH

2.1 Formulação Básica

A formulação básica do método SPH divide-se em duas etapas. A primeira etapa consiste na *representação integral* de uma função f , que é definida a partir da convolução entre f e uma função W com algumas propriedades especiais. A representação integral é então aproximada por uma soma em um conjunto de partículas. Esta segunda etapa é conhecida como *aproximação por partículas*.

2.1.1 Representação Integral

O conceito de representação integral de uma função em SPH é motivado pela seguinte identidade:

$$f(\mathbf{x}) = \int f(\mathbf{y})\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})d\mathbf{y} \quad (2.1)$$

onde $f : \Omega \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ e δ é a “função” delta de Dirac que é definida da seguinte forma:

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

e

$$\int_{\mathbb{R}^n} \delta(\mathbf{x})d\mathbf{x} = 1.$$

Observe que δ não é bem uma função, uma vez que $\delta(0)$ não é um número e como δ é nula a menos de um conjunto de medida nula, a integral de δ deveria ser nula, o que não acontece. Na verdade δ pode ser definida tendo em vista a teoria das distribuições (ADAMS, 1975). No entanto, procederemos de uma forma mais elementar para mostrar que a igualdade 2.1 está bem definida.

Considere uma sequência de funções contínuas $k_n : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ($n \in \mathbb{N}$), com as seguintes propriedades:

P1: $k_n(x) \geq 0$;

P2: $\int_{\mathbb{R}} k_n(x)dx = 1$;

P3: dados $\varepsilon > 0$ e $\eta > 0$, existe n_0 tal que, para $n \geq n_0$, $\int_{|x|>\eta} k_n(x)dx < \varepsilon$.

Tais funções são conhecidas como *sequência de núcleos de Dirac*. As áreas abaixo de $k_n(x)$ se acumulam junto ao eixo y , conforme verificamos na Figura 1 e, por esta razão, estas

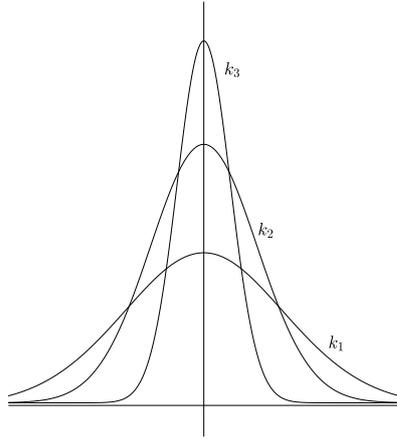


Figura 1 – Núcleos de Dirac. Observe que as áreas abaixo das funções k_n se acumulam junto ao eixo y à medida que n cresce.

podem ser entendidas de modo intuitivo como aproximações para δ e é razoável a definição a seguir:

$$\int_{\mathbb{R}} f(s)\delta(x-s)ds = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}} f(s)k_n(x-s)ds. \quad (2.2)$$

A partir desta definição e do teorema abaixo vamos mostrar que a igualdade (2.1) está bem definida.

Teorema 2.1. *Seja $(k_n)_{n \in \mathbb{N}}$ uma sequência de núcleos de Dirac e $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ uma função contínua e limitada. Então as funções f_n abaixo estão bem definidas*

$$f_n(x) = \int_{\mathbb{R}} f(s)k_n(x-s)ds$$

e a sequência $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ converge, uniformemente, para f em todo intervalo limitado fechado.

Demonstração. As funções f_n estão bem definidas, pois

$$|f_n(x)| = \left| \int_{\mathbb{R}} f(s)k_n(x-s)ds \right| \leq \int_{\mathbb{R}} |f(s)||k_n(x-s)|ds \leq M \int_{\mathbb{R}} k_n(y)dy = M,$$

ou seja, $f_n(x) \in \mathbb{R}$. Vamos provar agora a convergência uniforme. Dado um intervalo fechado $I = [a, b]$ e $\eta > 0$, defina $I' = [a - \eta, b + \eta]$. Dado $\varepsilon > 0$, existe $\delta > 0$ tal que se $x_1, x_2 \in I'$ e $|x_1 - x_2| < \delta$, então $|f(x_1) - f(x_2)| < \varepsilon$. Temos que

$$\begin{aligned} f_n(x) - f(x) &= \int_{\mathbb{R}} k_n(s)[f(x-s) - f(x)]ds \\ &= \int_{|s|>\delta} k_n(s)[f(x-s) - f(x)]ds + \int_{|s|\leq\delta} k_n(s)[f(x-s) - f(x)]ds \end{aligned}$$

daí,

$$|f_n(x) - f(x)| \leq 2M \int_{|s|>\delta} k_n(s)ds + \int_{|s|\leq\delta} k_n(s)|f(x-s) - f(x)|ds.$$

Fazendo $\delta < \eta$, segue que $x - s$ variará em I' se x percorrer I . Logo, a segunda integral da expressão acima será majorada por

$$\varepsilon \int_{|s|\leq\delta} k_n(s)ds \leq \varepsilon \int_{\mathbb{R}} k_n(s)ds = \varepsilon.$$

Para majorar a primeira usamos a propriedade (3) dos núcleos de Dirac. Logo, com esse $\varepsilon > 0$ e o correspondente $\delta > 0$, determinamos n_0 tal que a primeira integral seja menor que ε , para todo $n \geq n_0$. Portanto

$$|f_n(x) - f(x)| \leq (2M + 1)\varepsilon, \quad \forall x \in I \text{ e } \forall n \geq n_0.$$

□

Uma versão mais geral deste resultado pode ser encontrada em (FIGUEIREDO, 2000).

Interpretando o teorema acima temos que dado um intervalo I onde f é contínua, existem $\varepsilon > 0$ e $n_0 \in \mathbb{N}$ tais que, se $n > n_0$ então

$$\left| \int_{\mathbb{R}} f(s)k_n(x-s)ds - f(x) \right| < \varepsilon.$$

Portanto, além de mostrarmos que (2.1) está bem definida, pode-se concluir do teorema que

$$f(x) \approx \int_{\mathbb{R}} f(s)k_n(x-s)ds. \quad (2.3)$$

Motivados pelo fato que acabamos de mostrar, definimos a seguir a representação integral de uma função definida num domínio em \mathbb{R}^n .

Definição 2.1. A representação integral de uma função $f : \Omega \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é a convolução de f por uma função suave $W_h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$.

De acordo com a equação (1.26), a representação integral de uma função assume a seguinte expressão:

$$f_h(\mathbf{u}) = \int_{\Omega} f(\mathbf{x})W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x})d\mathbf{x}. \quad (2.4)$$

A função W_h na definição acima possui propriedades similares as funções k_n do teorema (2.1) e é conhecida como *núcleo*. Para que possamos fazer uso dos teoremas de convergência apresentados na seção (1.4), de maneira que f_h possa se comportar como uma aproximação para f ($f_h \approx f$), deve existir $W : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ e $h > 0$ tal que

$$W_h(\mathbf{x}) = \frac{1}{h^n}W\left(\frac{1}{h}\mathbf{x}\right). \quad (2.5)$$

O número h é chamado de *comprimento suave* e está relacionado com o suporte da função W_h .

2.1.2 Núcleos SPH

O núcleo desempenha um papel fundamental no método SPH. Além de determinar o padrão da aproximação, ele está relacionado com a consistência e a precisão de ambas as etapas da formulação do método: representação integral e por partículas.

Pelo Teorema (2.1) vimos que apenas três propriedades são suficientes para se obter uma aproximação de uma função via representação integral. No entanto, o método SPH baseia-se não apenas na representação integral, mas também na aproximação por partículas. Assim, para que se tenha um método consistente e preciso, são necessárias algumas propriedades adicionais para que uma função seja utilizada como núcleo. Listaremos agora algumas destas propriedades.

1. Suavidade

$$W_h \in C^k, k > 1. \quad (2.6)$$

Muito embora os teoremas (1.9) e (1.10) exijam $W_h \in L^1(\mathbb{R}^n)$, esta propriedade é requerida a fim de que se tenha boas aproximações para as funções e suas derivadas. Além disso, a suavidade faz com que o núcleo seja menos sensível a desordem das partículas na aproximação por partículas (Monaghan, 1992; Fulk, 1994).

2. Normalização

$$\int_{\mathbb{R}^n} W_h(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 1. \quad (2.7)$$

Esta propriedade decorre diretamente dos teoremas (1.9) e (1.10).

3. Compacidade

$$W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) = 0 \quad \text{quando} \quad \|\mathbf{u} - \mathbf{x}\| > \kappa h. \quad (2.8)$$

O domínio efetivo (não-nulo) do núcleo W_h no ponto $\mathbf{u} \in \Omega$ é definido por

$$V(\mathbf{u}) = \{\mathbf{x} \in \Omega; \|\mathbf{u} - \mathbf{x}\| \leq \kappa h\}.$$

O conjunto V é chamado de suporte compacto do núcleo no ponto \mathbf{u} , ou simplesmente de suporte compacto de \mathbf{u} , e depende do comprimento suave h e de um fator de escala κ associado ao núcleo. Esta propriedade dá um caráter local à aproximação.

4. Simetria Radial

$$W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x}_1) = W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x}_2) \quad \text{sempre que} \quad \|\mathbf{u} - \mathbf{x}_1\| = \|\mathbf{u} - \mathbf{x}_2\|. \quad (2.9)$$

Esta propriedade é importante para que pontos à mesma distância, porém em posições diferentes, exerçam a mesma influência no ponto posicionado no centro do núcleo.

5. Decrescimento

$$W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x}_1) < W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x}_2) \quad \text{se} \quad \|\mathbf{u} - \mathbf{x}_1\| > \|\mathbf{u} - \mathbf{x}_2\|. \quad (2.10)$$

Esta propriedade se baseia no fato de que quanto mais próximo um ponto está do centro do núcleo, maior a sua influência.

6. Positividade

$$W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) \geq 0. \quad (2.11)$$

Esta propriedade não é necessária para a convergência, mas é importante para assegurar aproximações coerentes com as propriedades físicas envolvidas no problema.

A propriedade de simetria radial do núcleo permite que este seja calculado efetivamente num domínio paramétrico (em \mathbb{R}), uma vez que este leva em consideração apenas as distâncias entre o ponto no qual está centrado e os pontos do seu suporte compacto. Mais precisamente, existe $W_1 : [0, \kappa] \rightarrow \mathbb{R}$ tal que

$$W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) = \alpha_d W_1(R)$$

onde α_d é uma constante de normalização e $R = \frac{\|\mathbf{u} - \mathbf{x}\|}{h}$ é a distância relativa dos pontos (Obs: o subíndice 1 em W_1 não está relacionado com o comprimento suave h). O parâmetro κh determina o suporte compacto no domínio do problema enquanto que κ determina o suporte em \mathbb{R} . A Figura 2 ilustra este resultado para o caso em que a dimensão do problema é igual a dois. O domínio do problema está discretizado e o núcleo W_h é calculado sobre as partículas da discretização.

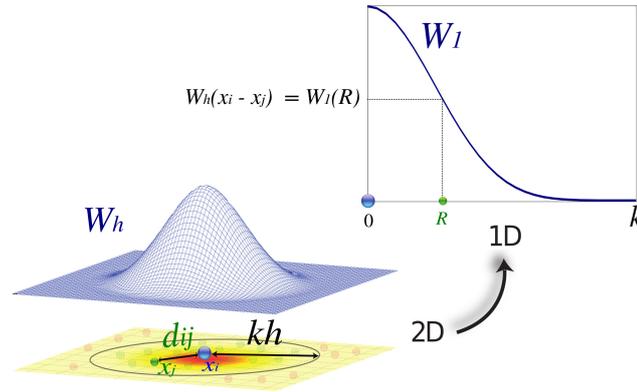


Figura 2 – A partir da propriedade de simetria radial o núcleo em dimensão dois é calculado efetivamente num domínio paramétrico de dimensão um.

Qualquer função com tais propriedades pode ser empregada como um núcleo em SPH. Diferentes funções são encontradas em diversos trabalhos que utilizam o método SPH (DESBRUN; GASCUEL, 1996; MÜLLER; CHARYPAR; GROSS, 2003). Neste trabalho utilizaremos o núcleo spline quíntico pois este é uma boa aproximação para a função gaussiana e é estável, além de possuir todas as propriedades listadas acima. Tal núcleo possui a seguinte expressão

$$W_h(R) = \alpha_d \begin{cases} (3 - R)^5 - 6(2 - R)^5 + 15(1 - R)^5, & 0 \leq R < 1 \\ (3 - R)^5 - 6(2 - R)^5, & 1 \leq R < 2 \\ (3 - R)^5, & 2 \leq R < 3 \\ 0 & 3 \leq R, \end{cases} \quad (2.12)$$

onde, dada a dimensão d do problema, temos

$$\alpha_d = \begin{cases} \frac{1}{120h} & \text{se } d = 1, \\ \frac{7}{478\pi h^2} & \text{se } d = 2. \end{cases} \quad (2.13)$$

Suas derivadas primeira e segunda são dadas por

$$W'_h(R) = \alpha_d \begin{cases} -5(3-R)^4 + 30(2-R)^4 - 75(1-R)^4, & 0 \leq R < 1 \\ -5(3-R)^4 + 30(2-R)^4, & 1 \leq R < 2 \\ -5(3-R)^4, & 2 \leq R < 3 \\ 0 & 3 \leq R \end{cases} \quad (2.14)$$

e

$$W''_h(R) = \alpha_d \begin{cases} 20(3-R)^3 - 120(2-R)^3 + 300(1-R)^3, & 0 \leq R < 1 \\ 20(3-R)^3 - 120(2-R)^3, & 1 \leq R < 2 \\ 20(3-R)^3, & 2 \leq R < 3 \\ 0 & 3 \leq R. \end{cases} \quad (2.15)$$

A Figura 3 ilustra o núcleo spline quíntico e suas derivadas.

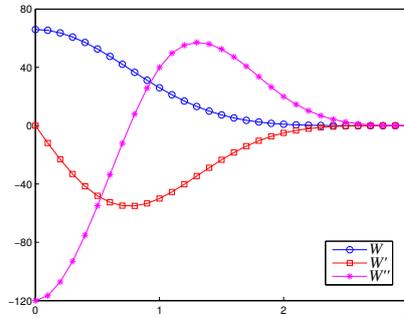


Figura 3 – Núcleo Spline Quíntico (azul) e suas derivadas primeira (vermelho) e segunda (magenta).

Uma maneira sistemática para construir núcleos com as propriedades listadas anteriormente é encontrada em (LIU; LIU, 2003). Uma análise do comportamento de vários núcleos em uma dimensão pode ser encontrada no trabalho de Fulk e Quinn (FULK; QUINN, 1996).

Finalizamos esta seção apresentando os cálculos das constantes de normalização para os casos $d = 1$ e $d = 2$ conforme discutido acima.

- Caso $d = 1$

$$\begin{aligned}
 1 &= \int_{\mathbb{R}} W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{-\kappa h}^{\kappa h} W_h(x) dx \\
 &= 2 \int_0^{\kappa h} W_h(x) dx = 2 \int_0^{\kappa h} \alpha_1 W_1\left(\frac{x}{h}\right) dx \\
 &= 2h \int_0^{\kappa} \alpha_1 W_1(R) dR,
 \end{aligned}$$

portanto

$$\alpha_1 = \frac{1}{2h \int_0^{\kappa} W_1(R) dR}. \quad (2.16)$$

- Caso $d = 2$

$$\begin{aligned}
 1 &= \int_{\mathbb{R}^2} W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d\mathbf{x} = 2\pi \int_0^{\kappa h} x W_h(x) dx \\
 &= 2\pi \int_0^{\kappa h} x \alpha_2 W_1\left(\frac{x}{h}\right) dx \\
 &= 2\pi h^2 \int_0^{\kappa} \alpha_2 R W_1(R) dR,
 \end{aligned}$$

portanto

$$\alpha_2 = \frac{1}{2\pi h^2 \int_0^{\kappa} R W_1(R) dR}. \quad (2.17)$$

2.1.3 Aproximação por Partículas

No método SPH todo o sistema é representado por um número finito de partículas distribuídas no domínio do problema como mostra a Figura 4. Tais partículas são definidas como pontos que discretizam o domínio do problema e em geral contêm informações físicas do fenômeno simulado tais como temperatura, densidade, etc. Além disso, as partículas também são utilizadas como a estrutura computacional para calcular as aproximações necessárias para obter uma solução numérica para o problema.

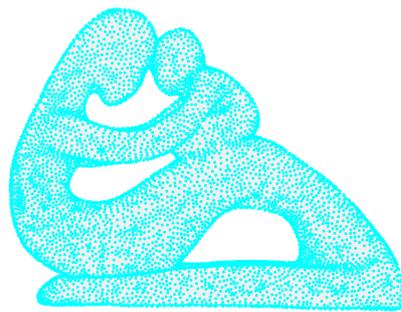


Figura 4 – Aproximação por partículas. No método SPH todo o sistema é representado por um número finito de partículas distribuídas no domínio do problema.

Tendo em vista o domínio discretizado do problema, a aproximação obtida pela representação integral é substituída por um somatório nas partículas que discretizam o domínio e o elemento de área infinitesimal $d\mathbf{x}$ é substituído pelo elemento de área discreto ΔA_j relacionado à uma partícula j que compõe a discretização. Em símbolos

$$\begin{aligned} f_h(\mathbf{x}_i) &= \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &\approx \sum_{j \in V_i} f(\mathbf{x}_j) W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \Delta A_j, \end{aligned} \quad (2.18)$$

onde o somatório percorre todas as partículas que pertencem ao suporte compacto do núcleo W_h centrado na partícula \mathbf{x}_i definido por

$$V_i = V(\mathbf{x}_i) = \{\mathbf{x}_j; \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| \leq \kappa h\}.$$

A aproximação da função na partícula i é obtida a partir de uma média dos valores da função nas demais partículas ponderadas pelo núcleo. Como o núcleo tem suporte compacto, este cálculo é reduzido às partículas j pertencentes ao seu suporte compacto (Figura 5).

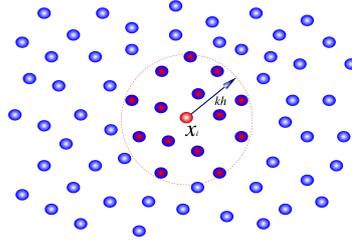


Figura 5 – Na aproximação por partículas o valor de uma função em um ponto x_i é aproximado utilizando-se apenas as partículas vizinhas, ou seja, as partículas x_j que pertencem ao suporte compacto de W_h .

O suporte compacto do núcleo depende do comprimento suave h . Este é muito importante na formulação do SPH pois se h é muito pequeno, não existem partículas suficientes no suporte para exercer influência em uma dada partícula, resultando em baixa precisão numérica. Por outro lado, se h é muito grande, propriedades locais serão suavizadas globalmente, e a simulação, além de muito cara computacionalmente, também não será precisa. Portanto a escolha correta do valor de h está diretamente ligado à eficiência e à precisão numérica do método.

Encerramos esta subseção apresentando o perfil das discretizações de um dado domínio. Neste trabalho utilizaremos três tipos de distribuições para as partículas. A distribuição das partículas podem ser dadas de maneira uniforme com densidade constante e com densidade variável e também tal distribuição pode ser não uniforme. As amostras em \mathbb{R}^2 serão obtidas pela amostragem de disco de Poisson (COOK, 1986) para o caso uniforme e pela sequência de Halton (HALTON, 1960) para o caso não uniforme. A Figura 6 ilustra os três tipos de distribuição sobre um domínio retangular.

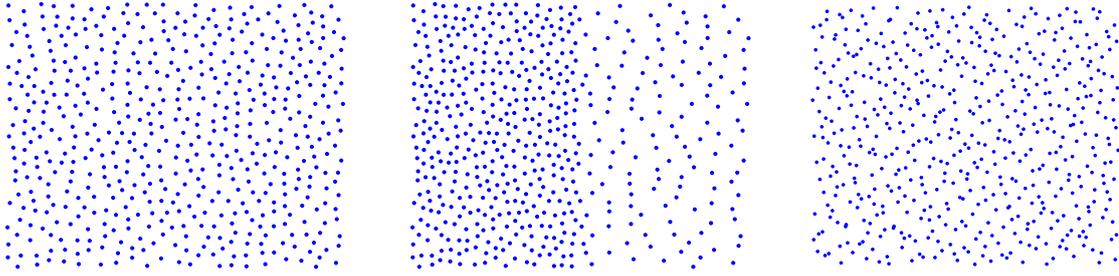


Figura 6 – A distribuição das partículas podem ser dadas de maneira uniforme com densidade constante (à esquerda), uniforme com densidade variável (no centro) e não uniforme (à direita).

2.1.4 Consistência do Método SPH

Embora a definição de representação integral não envolva uma discretização do domínio do problema, ela é ainda uma aproximação, pois temos a igualdade apenas no limite quando $W_h = \delta$. Nesta seção vamos analisar a precisão em que a representação integral aproxima f e a consistência da aproximação por partículas.

A representação integral é uma aproximação de segunda ordem quando o núcleo W_h utilizado é uma função de simetria radial. Para verificarmos este fato usaremos a expansão em Série de Taylor da função f em torno do ponto \mathbf{u} e substituiremos na integral que define f_h .

$$\begin{aligned} f_h(\mathbf{u}) &= \int_{\Omega} f(\mathbf{x})W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x})d\mathbf{x} \\ &= \int_{\Omega} [f(\mathbf{u}) - (\mathbf{u} - \mathbf{x})f'(\mathbf{u} - \mathbf{x}) + r(\mathbf{u} - \mathbf{x})]W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x})d\mathbf{x} \\ &= f(\mathbf{u}) \int_{\Omega} W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x})d\mathbf{x} + f'(\mathbf{u}) \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{u})W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x})d\mathbf{x} + O(h^2), \end{aligned}$$

onde $O(h^2)$ é um resíduo de segunda ordem. Se o núcleo é uma função de simetria radial, então

$$\int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{u})W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x})d\mathbf{x} = 0$$

e portanto

$$f_h(\mathbf{u}) = \int_{\Omega} f(\mathbf{x})W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x})d\mathbf{x} = f(\mathbf{u}) + O(h^2). \quad (2.19)$$

O conceito de consistência está relacionado como a maior ordem polinomial que pode ser exatamente reproduzida (BELYTSCHKO et al., 1996). É possível impor condições sobre o núcleo de modo a se obter aproximações com certa ordem de consistência (PAIVA et al., 2009b).

Muito embora a representação integral seja uma aproximação de segunda ordem, essa ordem não necessariamente é assumida pelo método SPH devido ao segundo passo de

sua formulação: a aproximação por partículas. A versão discreta das condições requeridas sobre o núcleo que gera a precisão de segunda ordem é dada por

$$\begin{cases} \sum_{j \in V_i} W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \Delta A_j = 1, \\ \sum_{j \in V_i} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \Delta A_j = 0. \end{cases} \quad (2.20)$$

No entanto, estas condições discretas não são sempre satisfeitas. Esse problema é conhecido como *inconsistência de partículas* (BELYTSCHKO et al., 1996). Citaremos dois casos onde as equações (2.20) não são satisfeitas. O primeiro caso é quando a partícula está próximo a fronteira de modo que o suporte compacto do núcleo intersecta a fronteira do domínio. Ressaltamos aqui que este problema ocorre também na formulação integral. O segundo caso, é restrito a aproximação por partículas e ocorre quando estas estão irregularmente distribuídas. Existem algumas técnicas na literatura que visam obter as condições de consistência na forma discreta (LIU; JUN; ZHANG, 1995; LIU; CHEN, 1995; LIU; LIU, 2003). A Figura 7 ilustra o problema da inconsistência de partículas para os casos apresentados.

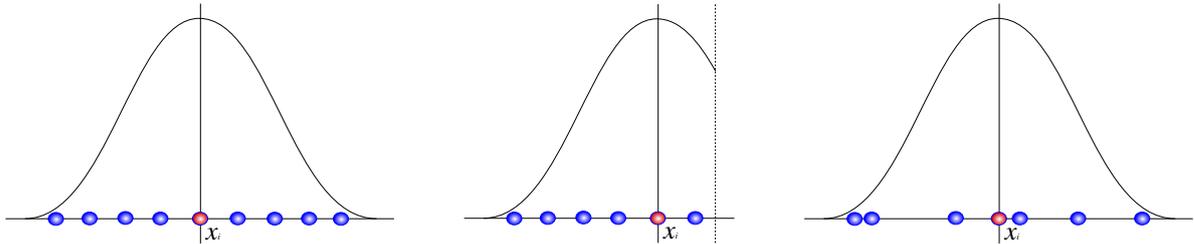


Figura 7 – Distribuição uniforme das partículas com o suporte do núcleo inteiramente contido (à esquerda) e com interseção (no centro) com o domínio do problema e distribuição não uniforme das partículas (à direita). As imagens no centro e à esquerda ilustram situações onde há inconsistência de partículas.

2.2 Elementos de Área

Os elementos de área utilizados na discretização do SPH em geral são definidos a partir de atributos físicos associados ao problema em questão. Por exemplo, este pode ser obtido a partir da relação $m_i = \Delta A_i \rho_i$, onde m_i é a massa e ρ_i é a densidade da partícula i . No nosso contexto não faremos uso de propriedades físicas para definir tais elementos, utilizaremos duas abordagens que chamaremos de elementos de área geométricos e elementos de área numéricos.

Elementos de Área Geométricos

A partir da definição de integral podemos criar uma intuição sobre como definir um elemento de área discreto de forma razoável. Os elementos de área contínuos que aparecem na integral dupla surgem como limite das áreas de retângulos que decompõem o domínio, sobre o qual a integral está sendo calculada, quando a quantidade desses retângulos tendem ao infinito. Em cada um desses retângulos é escolhido um ponto amostral e a cada ponto amostral esta associado um elemento de área ΔA , que é a área do retângulo no qual ele foi tomado. Quando a quantidade de retângulos tende ao infinito a quantidade de pontos também tende ao infinito e os elementos de área discretos ΔA tendem aos elementos de área contínuos dA .

A primeira abordagem para obtermos os elementos de área é baseada no procedimento descrito no parágrafo anterior. Para tal, dividiremos a área do domínio pela quantidade de partículas da discretização. Quando a distribuição das partículas é uniforme esta é uma boa aproximação pois as partículas se comportam como os pontos amostrais que citamos no paragrafo anterior, por isto chamamos tais elementos de *elementos de área geométricos*. A Figura 8 ilustra uma distribuição uniforme obtida pela distribuição de Poisson com raio $r = 0,079$ e 100 partículas no quadrado de lado 1. Cada elemento de área geométrico é igual a $\Delta A = 0,01$. Dividindo o domínio em 100 quadrados de tamanho 0.01 observamos que 9 deles possuem duas partículas enquanto 9 não possuem nenhuma. Portanto para 82% das partículas os elementos de área de fato representam a área de uma sub-região associada a partícula.

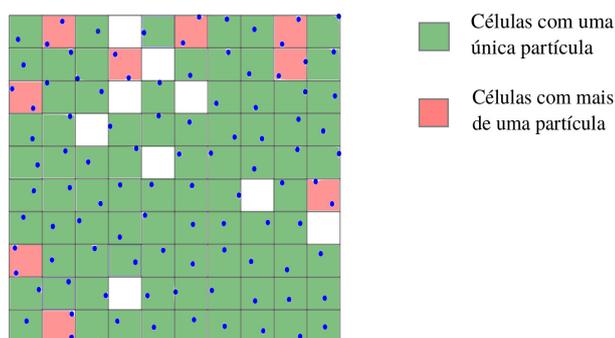


Figura 8 – Distribuição uniforme com uma decomposição do quadrado de lado 1 em 100 subquadrados. Os subquadrados verdes possuem apenas uma partícula, os vermelhos possuem duas ou mais partículas e os brancos não possuem partículas.

No entanto, dado um domínio com a área fixada, bem como a quantidade de partículas da discretização, o valor dos elementos de área são iguais para todas as partículas independentemente da distribuição. Assim, se a distribuição é uniforme com densidade variável ou não uniforme, o resultado obtido não é coerente com o resultado apresentado acima pois a decomposição do domínio em função da distribuição das partículas não resultara em sub-retângulos com áreas iguais. A Figura 9 ilustra as distribuições uniformes com densidade

variável e não uniforme com as mesmas condições da Figura 8. À esquerda observamos que onde a densidade das partículas é maior aumenta a quantidade de retângulos que são ocupados por mais de uma partícula, o que significa que para tais pontos o elemento de área deveria ser menor enquanto que na região de menor densidade aumenta a quantidade de retângulos sem pontos, o que significa que ali os elementos de área deveriam ser maior. À direita acontece algo similar pois os pontos que dividem o mesmo retângulo deveriam ter elemento de área menor, enquanto que pontos próximos a retângulos não ocupados deveriam ter elementos de área maior para compensar a ausência de pontos ali.

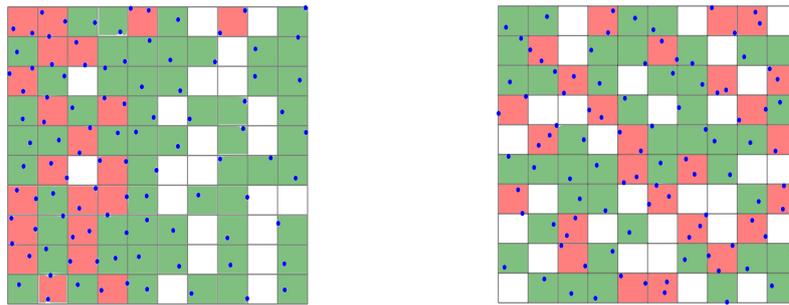


Figura 9 – Sobreposição da decomposição do quadrado de lado um em 100 subquadrados e sua discretização uniforme com densidade variável (à esquerda) e não uniforme (à direita). Os quadrados verdes possuem apenas uma partícula, os vermelhos possuem duas ou mais e os brancos não possuem partículas.

Portanto os elementos de área geométricos se comportam bem quando a distribuição é uniforme, mas não leva em consideração a distribuição das partículas, o que representa um problema na formulação do método.

Elementos de Área Numéricos

Na formulação básica do método SPH verificamos que o núcleo possui a propriedade de normalização. Esta propriedade na forma discreta assume a seguinte expressão

$$\sum_{j \in V_i} W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \Delta A_j = 1. \quad (2.21)$$

Considerando todas as partículas do domínio, uma vez que os valores de $W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$ e \mathbf{x}_i são conhecidos, a igualdade acima nos leva a um sistema linear da forma

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \quad (2.22)$$

onde o vetor solução \mathbf{x} serão os “elementos de área” ΔA . Por este motivo, nesta segunda abordagem chamamos tais elementos de *elementos de área numéricos*.

Para o sistema 2.22 as entradas da matriz \mathbf{A} são $a_{ij} = W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$ e as entradas do vetor \mathbf{b} são $b_i = 1, \forall 1 \leq i, j \leq n$. O gráfico apresentado na Figura 10 ilustra a diferença em valores absolutos entre a área do quadrado de lado 1 e a soma dos elementos de área

numéricos obtidos pela resolução do sistema 2.21 aumentando a quantidade de partículas para distribuições uniformes. Observe que os valores se mantêm próximos a zero. Assim, tais candidatos a elementos de área se comportam bem no sentido que a soma de todos os valores devem dar a área do domínio.

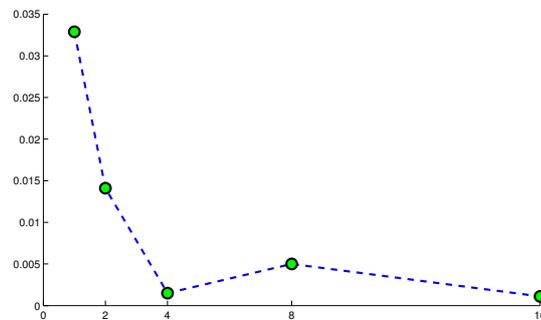


Figura 10 – Gráfico dos valores absolutos das diferenças da área do quadrado de lado um e das somas dos elementos de área obtidos pela resolução do sistema 2.22 para 1000, 2000, 4000, 8000 e 16000 mil partículas.

Vimos que os elementos de área geométrico não levavam em consideração a distribuição das partículas e isso representa um problema para o método. No caso dos elementos de área numéricos, tal problema é contornado como verificamos na Figura 11 que ilustra o comportamento dos elementos de área obtidos pela resolução do sistema 2.22 para o domínio $[0, 1] \times [0, 1]$ discretizado com as distribuições uniformes com densidade constante, com densidade variável e não uniforme para mil partículas.

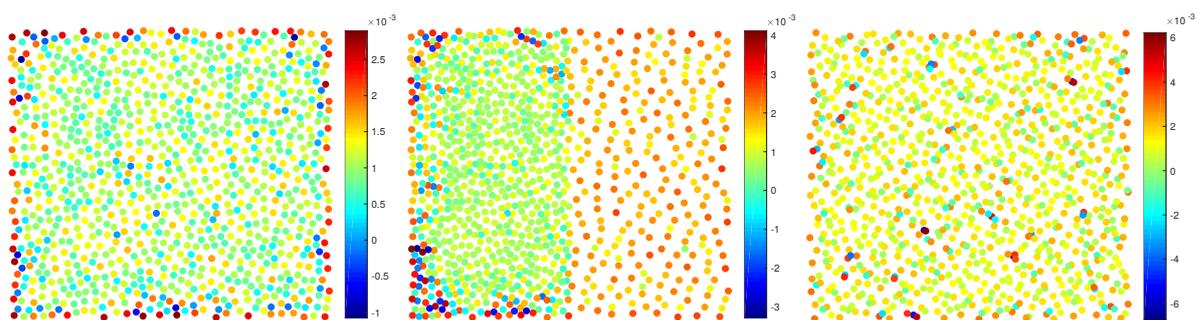


Figura 11 – Elementos de área numéricos no domínio $[0, 1] \times [0, 1]$ discretizado com 1000 partículas de maneira uniforme com densidade constante (à esquerda), uniforme com densidade variável (no centro) e não uniforme (à direita).

Muito embora os elementos de área numéricos se comportem bem quanto a convergência da soma de seus valores para a área do domínio e a sensibilidade à distribuição das partículas, na resolução do sistema alguns elementos assumem valores negativos, o que não é desejável para um elemento de área. Uma possibilidade para evitar tal resultado é

utilizar otimização para garantir a positividade, tal abordagem pode ser encontrada em (PETRONETTO et al., 2010).

Espelhamento de partículas

A inconsistência de partículas afeta diretamente a precisão do método SPH. Algumas correções têm sido propostas para tratar tal deficiência, por exemplo Libersky et al (LIBERSKY et al., 1993) introduziram as chamadas partículas fantasmas para simular a interação de partículas com a fronteira do domínio e Randles e Libersky (RANDLES; LIBERSKY, 1996) propuseram um tratamento mais geral para simular essa interação. Partículas fantasmas são partículas definidas fora do domínio do problema de acordo com partículas já existentes que discretizam o domínio ou de maneira aleatória, ou seja, sem nenhuma relação com as partículas do domínio. Como os elementos de área numéricos são definidos a partir de propriedades intrínsecas do método, eles herdam o problema de inconsistência de partículas. Portanto é razoável utilizar técnicas que melhoram os resultados do método para obter um melhor condicionamento dos elementos de área numéricos.

Utilizaremos as partículas fantasmas para melhor condicionarmos os elementos de área numéricos. No nosso caso, definiremos tais partículas de acordo com as partículas reais que discretizam o domínio do problema por meio de espelhamento. A ideia básica desta abordagem é simular um domínio sem fronteira a partir de um comportamento periódico. Considere um domínio retangular $R = [x_1, x_2] \times [y_1, y_2]$. Definimos um novo domínio $R' = \bigcup_{i=1}^9 R_i$, onde $R_1 = R$ e cada $R_i, i = \{2, \dots, 9\}$, é obtido a partir de R por translações horizontais (T_h) e verticais (T_v) com magnitudes $\pm(x_2 - x_1)$ e $\pm(y_2 - y_1)$ respectivamente e suas composições. No entanto, como estamos interessados em calcular os elementos de área em R , podemos transladar apenas uma faixa de largura κh a partir de cada lado. De fato, dada uma partícula $x_i \in R$ se $d(x_i, \partial R) > \kappa h$ então o suporte compacto de W_h centrado em x_i não intersecta a fronteira de R logo não são necessárias partículas fantasmas, se $d(x_i, \partial R) < \kappa h$ então o suporte compacto de W_h centrado em x_i intersecta a fronteira de R porém $d(x_E, \partial R) \leq \kappa h$, onde x_E é o ponto do suporte de W_h exterior a R mais distante de ∂R . A Figura 12 ilustra o espelhamento de faixa $[x_1, x_1 + \kappa h] \times [y_1, y_2]$.



Figura 12 – Uma faixa de tamanho κh é espelhada, assim os pontos que estão κh próximos à fronteira utilizam partículas do próprio domínio.

O espelhamento de partículas não resolve o problema dos valores negativos que surgem nos elementos de área numéricos não espelhados, mas distribuem os valores de forma mais uniforme (Figura 13).

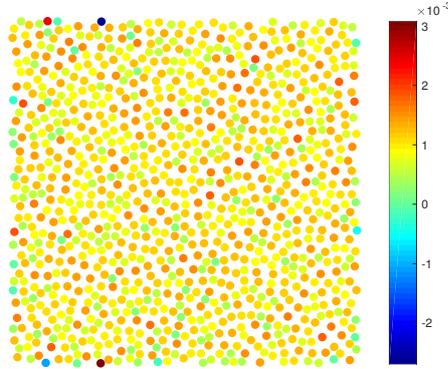


Figura 13 – Elementos de área numéricos com espelhamento de partículas no quadrado de lado um discretizado com 1000 partículas. Enquanto os elementos obtidos diretamente da resolução do sistema possui trinta partículas com elementos de área negativos, para os elementos de área com espelhamento apenas seis partículas apresentam valores negativos.

2.3 Operadores SPH Padrões

A representação integral da derivada de uma função é definida a partir de (2.4) simplesmente substituindo f por sua derivada. Por exemplo, para definirmos a representação integral da derivada parcial de f em relação a i -ésima coordenada, $\partial_i f = \frac{\partial f}{\partial x_i}$, temos:

$$(\partial_i f)_h(\mathbf{u}) = \int_{\Omega} \partial_i f(\mathbf{x}) W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (2.23)$$

Observe que a expressão acima depende dos valores da derivada para aproximar a mesma. No entanto, isto pode ser contornado utilizando a técnica de integração por partes e propriedades do núcleo. Vejamos o caso em que $\Omega = \mathbb{R}$.

$$\begin{aligned} f'_h(u) &= \int_{\mathbb{R}} f'(x) W_h(u - x) dx \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} f(x) W_h(u - x)|_{-t}^t - \int_{\mathbb{R}} f(x) \frac{d}{dx} W_h(u - x) dx. \end{aligned}$$

Como o núcleo W_h é definido com suporte compacto, o primeiro membro do lado direito da igualdade torna-se nulo e a partir da propriedade de simetria segue que

$$-\frac{d}{dx} W_h(u - x) = \frac{d}{du} W_h(u - x).$$

Portanto chegamos a seguinte expressão para a representação integral da derivada de uma função em \mathbb{R}

$$f'_h(u) = \int_a^b f(x) \frac{d}{du} W_h(u - x) dx. \quad (2.24)$$

Observe que a aproximação 2.24 não depende dos valores de f' .

Uma abordagem similar pode ser aplicada para operadores diferenciais definidos em \mathbb{R}^n . Utilizando o teorema do divergente podemos obter a representação do divergente de um campo de vetores F em \mathbb{R}^n .

$$\begin{aligned} (\nabla \cdot F)_h(\mathbf{u}) &= \int_{\Omega} \nabla \cdot F(\mathbf{x}) W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &\stackrel{(1)}{=} - \int_{\Omega} \langle F(\mathbf{x}), \nabla_{\mathbf{x}} W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) \rangle d\mathbf{x} \\ &\stackrel{(2)}{=} \int_{\Omega} \langle F(\mathbf{x}), \nabla_{\mathbf{u}} W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) \rangle d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

A igualdade (1) decorre da propriedade 1.9 e do teorema do divergente 1.5. A igualdade (2) é devido a simetria do núcleo e justificaremos a seguir. Temos que

$$W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) = W_1(R),$$

com $R = \frac{\|\mathbf{u} - \mathbf{x}\|}{h}$. Derivando em relação à \mathbf{x} temos

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{x}} W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) &= \nabla_{\mathbf{x}} W_1(R) \\ &= \nabla_{\mathbf{x}} R W_1'(R) \\ &= -\frac{1}{h} \frac{\mathbf{u} - \mathbf{x}}{\|\mathbf{u} - \mathbf{x}\|} W_1'(R). \end{aligned} \quad (2.26)$$

Em particular,

$$\nabla_{\mathbf{u}} W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) = \frac{1}{h} \frac{\mathbf{u} - \mathbf{x}}{\|\mathbf{u} - \mathbf{x}\|} W_1'(R) = - \left\{ -\frac{1}{h} \frac{\mathbf{u} - \mathbf{x}}{\|\mathbf{u} - \mathbf{x}\|} W_1'(R) \right\} = -\nabla_{\mathbf{x}} W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x}). \quad (2.27)$$

Assim a representação integral para o divergente de um campo de vetores é dada por

$$\nabla \cdot F(\mathbf{u}) = \int_{\Omega} \langle F(\mathbf{x}), \nabla_{\mathbf{u}} W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x}) \rangle d\mathbf{x} \quad (2.28)$$

e a aproximação por partícula é

$$(\nabla \cdot F)_h(\mathbf{x}_i) = \sum_{j \in V_i} \langle F(\mathbf{x}_j), \nabla_i W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \rangle \Delta V_j. \quad (2.29)$$

Seguindo este passo a passo e substituindo o teorema do divergente pela fórmula de integração por partes no \mathbb{R}^n (1.13) obtemos uma expressão para o operador gradiente SPH de uma função f .

$$(\nabla f)_h(\mathbf{x}_i) = \sum_{j \in V_i} f(\mathbf{x}_j) \nabla_i W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \Delta V_j. \quad (2.30)$$

Por fim, com operações análogas e a partir da segunda identidade de Green 1.10 obtemos uma aproximação para o laplaciano de uma função f .

$$(\Delta f)_h(\mathbf{x}_i) = \sum_{j \in V_i} f(\mathbf{x}_j) \Delta_i W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \Delta V_j. \quad (2.31)$$

Observe que a diferenciação numérica de uma função está presente no núcleo. Isto é, a diferenciação (contínua) em f é aproximada por uma diferenciação numérica com a derivada de W .

As aproximações que acabamos de definir são conhecidas como operadores SPH básicos. Estas aproximações são raramente usadas em trabalhos que utilizam o método SPH. Outras aproximações resultantes de propriedades implícitas do próprio método, ou de identidades para os operadores diferenciais, se mostraram mais adaptadas à física do problema ou à definição matemática (MORRIS; MONAGHAN, 1997).

A seguir apresentaremos os operadores gradiente e divergente SPH diferença e o operador laplaciano SPH taylor, que utilizaremos ao longo desta dissertação. A escolha de tais operadores é baseada em (PETRONETTO, 2008) que faz um estudo detalhado sobre o comportamento dos operadores SPH e conclui que estes operadores SPH se comportam melhor em detrimento dos operadores SPH básicos.

A análise de erro pontual será feita sobre o erro relativo (e_r) e o erro absoluto (e_a), definidos por

$$e_r = \frac{\|\bar{v} - v\|}{\|v\|} \quad \text{e} \quad e_a = \|\bar{v} - v\|, \quad (2.32)$$

onde v é o vetor exato e \bar{v} é o vetor aproximado. Para evitar problemas numéricos usaremos uma cota inferior para o valor de $\|v\|$ igual a 10^{-6} , ou seja, para valores de $\|v\| \leq 10^{-6}$ o erro relativo será substituído pelo erro absoluto. Utilizaremos a ferramenta estatística *boxplot* (Figura 14) para avaliar tais erros.

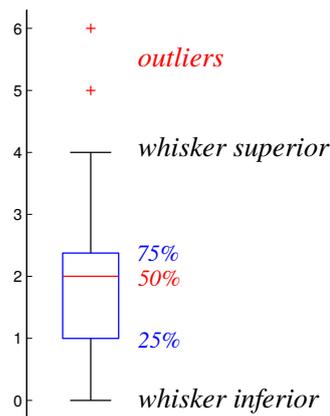


Figura 14 – Boxplot.

O boxplot ordena os dados da amostra, identifica os valores muito diferentes do conjunto, os chamados outliers, e exibe o menor e o maior valor da amostra desconsiderando os outliers (whisker inferior e superior), o primeiro quartil (25%), o segundo quartil (50%) e o terceiro quartil (75%) como mostra a Figura 14 que ilustra o boxplot de uma determinada amostra. Os pontos são classificados como outliers se são maiores que $q_3 + 1,5(q_3 - q_1)$ ou menor que $q_1 - 1,5(q_3 - q_1)$, onde q_1 e q_3 são o primeiro e o terceiro quartil respectivamente.

2.3.1 Operador Gradiente SPH Diferença

Aplicando o operador gradiente SPH (2.30) à função constante igual a 1, temos que

$$0 = \nabla f(\mathbf{x}_i) = \sum_{j \in V_i} f(\mathbf{x}_j) \nabla_i W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \Delta V_j,$$

ou seja,

$$\sum_{j \in V_i} \nabla_i W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \Delta V_j = 0. \quad (2.33)$$

Multiplicando ambos os lados da igualdade (2.33) por $f(\mathbf{x}_i)$ e subtraindo da equação (2.30) temos uma nova aproximação para o gradiente de f . Chamamos de *operador gradiente SPH diferença*

$$(\nabla f)_h(\mathbf{x}_i) = \sum_{j \in V_i} [f(\mathbf{x}_j) - f(\mathbf{x}_i)] \nabla_i W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \Delta V_j. \quad (2.34)$$

Como o objeto da aproximação trata-se de vetores, avaliaremos o erro da norma, que mensura a diferença entre os módulos dos vetores e o erro de fase, que mensura o ângulo entre os vetores. Em relação à norma, podemos considerar o erro absoluto e o erro relativo enquanto que para o erro de fase utilizaremos a expressão

$$e_f = \arccos \left(\frac{\langle \bar{v}, v \rangle}{\|\bar{v}\| \|v\|} \right) \quad (2.35)$$

sempre que os vetores forem ambos não-nulos. Quando um dos vetores é nulo, não é possível calcular o erro de fase.

A seguir utilizaremos o operador gradiente SPH diferença para obter uma aproximação para o gradiente da função $f(x, y) = xy$ definida em $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$ discretizado com 1007 partículas. O gradiente da função é dado por $\nabla f(x, y) = (y, x)$. Podemos visualizar a função e o seu gradiente analítico na Figura 15.

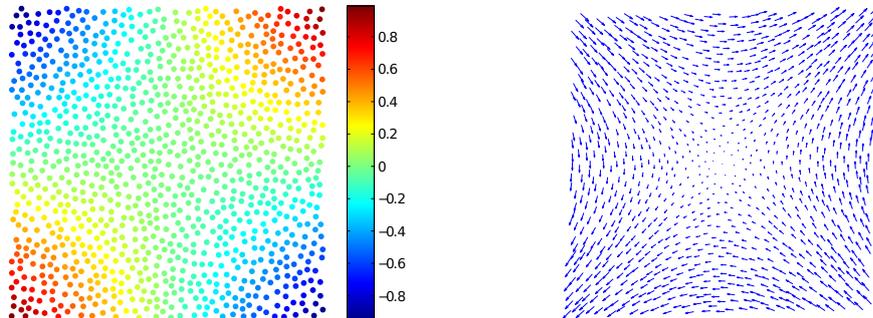


Figura 15 – À esquerda a função $f(x, y) = xy$ sobre o domínio $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$ discretizado com 1007 partículas e à direita o gradiente analítico de f sobre o mesmo domínio.

A Figura 16 ilustra o gradiente analítico de f à esquerda, no centro a aproximação obtida pelo operador gradiente SPH diferença e em seguida sobrepõe a aproximação e

o analítico. Observa-se que para os pontos no interior de Ω relativamente distantes da fronteira o operador gradiente SPH diferença apresenta bons resultados porém para os pontos próximos a fronteira há uma perda na qualidade da aproximação.

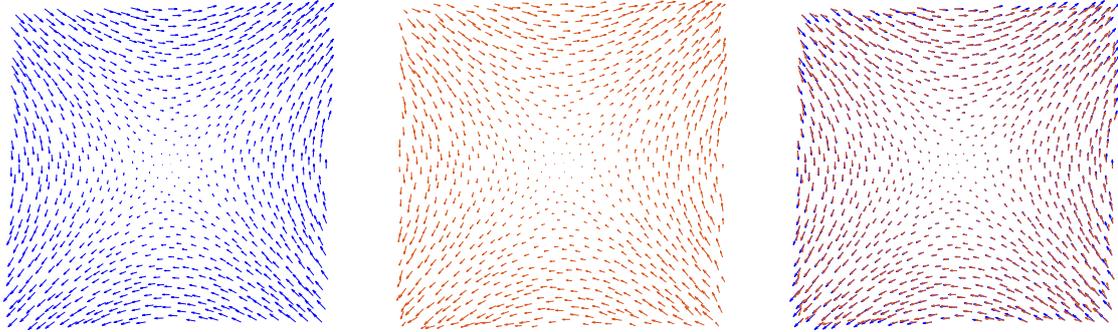


Figura 16 – Operador gradiente SPH diferença. À esquerda tem-se o gradiente analítico da função $f(x, y) = xy$, no centro a aproximação obtida pelo operador diferença e à direita o operador analítico e a aproximação são sobrepostas.

Faremos uma análise de erro pontual deste operador tendo em vista os erros de norma absoluto e relativo e o erro de fase. Exibiremos a aproximação e o boxplot dos erros de norma e de fase e destacaremos as partículas onde ocorrem os maiores erros que são os outliers. Tais resultados são ilustrados na Figura 17. Como já tínhamos notado ao sobrepor o gradiente analítico e a aproximação os maiores erros ocorrem em geral em partículas próximas a fronteira e este comportamento se justifica pelo problema de inconsistência de partículas.

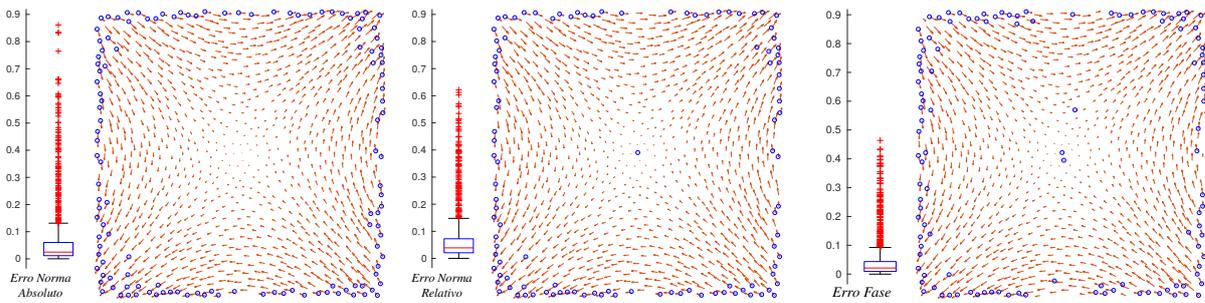


Figura 17 – Aproximação para o gradiente da função $f(x, y) = xy$ obtida pelo operador gradiente SPH diferença. Exibimos os boxplots com os erros e ao lado a posição no domínio onde ocorre os outliers destacadas.

2.3.2 Operador Divergente SPH Diferença

Procedendo de forma completamente análoga ao caso do operador gradiente SPH diferença substituindo apenas a função f pelo campo de vetores F obtemos o *operador divergente SPH diferença*

$$(\nabla \cdot F)_h(\mathbf{x}_i) = \sum_{j \in V_i} \langle F(\mathbf{x}_j) - F(\mathbf{x}_i), \nabla_i W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \rangle \Delta V_j. \quad (2.36)$$

Vamos aplicar tal operador para obter uma aproximação para o divergente do campo $F(x, y) = (\text{sen}(\pi x), \text{sen}(\pi y))$, onde $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$, discretizado com 1007 partículas. Ilustraremos inicialmente o campo F e o seu respectivo divergente analítico na Figura 18 e, em seguida, na Figura 19 o divergente SPH diferença para o campo F e uma análise do erro pontual utilizando o boxplot para os erros absoluto e relativo.

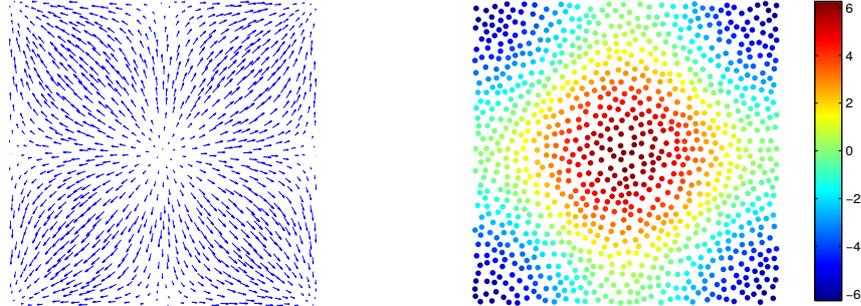


Figura 18 – Campo de vetores $F(x, y) = (\text{sen}(\pi x), \text{sen}(\pi y))$ à esquerda e o seu divergente analítico à direita calculado no domínio $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$ discretizado com 1007 partículas.

Observe que os outliers do boxplot para o erro absoluto se concentram próximos à fronteira enquanto que para o erro relativo estes ocorrem com mais frequência no interior da amostra. Em particular para o erro relativo nota-se que há uma partícula \mathbf{x}_M cujo erro muito difere do restante da amostra, destacamos tal partícula de vermelho. Isso se deve ao fato de que $\nabla \cdot F(\mathbf{x}_M) = -3,7e - 04$ enquanto que $(\nabla \cdot F)_h(\mathbf{x}_M) = 1,6$. A fim de visualizarmos o comportamento do erro relativo nas partículas cujos valores não são considerados outliers, retiramos do boxplot os outliers.

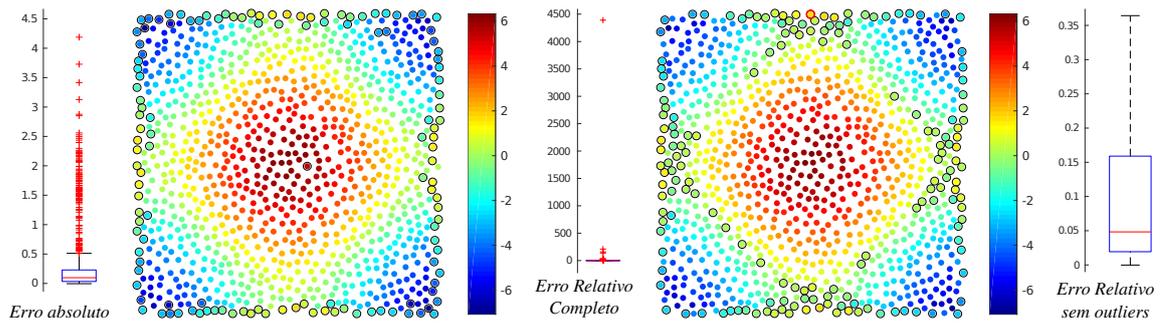


Figura 19 – Aproximação obtida pelo operador divergente SPH diferença para o campo $F(x, y) = (\text{sen}(\pi x), \text{sen}(\pi y))$. Destacamos na amostra as partículas cujos valores da aproximação são considerados outliers no boxplot do vetor de erro absoluto (à esquerda) e do vetor de erro relativo (à direita).

2.3.3 Operador Laplaciano SPH Taylor

Esta aproximação recebe este nome pois deriva da fórmula de Taylor. Assumindo a igualdade na fórmula de Taylor dada em (1.2) para termos de ordem superior a dois,

temos a seguinte aproximação para f em torno de um ponto $\mathbf{u} = (a, b)$

$$f(x, y) = f(a, b) + (x - a) \frac{\partial f}{\partial x}(a, b) + (y - b) \frac{\partial f}{\partial y}(a, b) + \frac{(x - a)^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(a, b) + (x - a)(y - b) \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(a, b) + \frac{(y - b)^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(a, b). \quad (2.37)$$

A partir das propriedades de simetria e normalização do núcleo, temos que

$$\int (\mathbf{u} - \mathbf{x}) \frac{\mathbf{u} - \mathbf{x}}{\|\mathbf{u} - \mathbf{x}\|^2} \nabla_{\mathbf{u}}(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d\mathbf{x} = 0$$

e

$$\int (\mathbf{u} - \mathbf{x})_i (\mathbf{u} - \mathbf{x})_j \frac{\mathbf{u} - \mathbf{x}}{\|\mathbf{u} - \mathbf{x}\|^2} \nabla_{\mathbf{u}}(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d\mathbf{x} = \delta_{ij}, \quad i, j \in \{1, 2\}$$

onde $(\mathbf{u} - \mathbf{x})_1 = (a - x)$, $(\mathbf{u} - \mathbf{x})_2 = (b - y)$ e δ_{ij} é o delta de Kronecker. Portanto, multiplicando a expressão (2.37) por

$$\frac{\mathbf{u} - \mathbf{x}}{\|\mathbf{u} - \mathbf{x}\|^2} \nabla_{\mathbf{u}}(\mathbf{u} - \mathbf{x})$$

e integrando-a, obtém-se a aproximação analítica

$$\Delta f(\mathbf{u}) = 2 \int \frac{f(\mathbf{u}) - f(\mathbf{x})}{\|\mathbf{u} - \mathbf{x}\|^2} (\mathbf{u} - \mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{u}}(\mathbf{u} - \mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (2.38)$$

A aproximação por partículas da igualdade acima define o *operador laplaciano SPH Taylor*, dado por

$$(\Delta f)_h(\mathbf{x}_i) = 2 \sum_{j \in V_i} \frac{f(\mathbf{x}_i) - f(\mathbf{x}_j)}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \cdot \nabla_i W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \Delta V_j. \quad (2.39)$$

Pela equação (2.26) segue que

$$\nabla_i W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) = \frac{1}{h} \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|} W_1'(R) \quad (2.40)$$

e substituindo (2.40) em (2.39) e simplificando os termos temos

$$(\Delta f)_h(\mathbf{x}_i) = 2 \sum_{j \in V_i} [f(\mathbf{x}_i) - f(\mathbf{x}_j)] \frac{1}{h \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|} W_1'(R) \Delta V_j. \quad (2.41)$$

Utilizaremos o operador laplaciano SPH Taylor para aproximar o laplaciano analítico da função $f(x, y) = \text{sen}(\pi x) \cos(\pi y)$ em $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$ discretizado com 1007 partículas. Na Figura 20 temos a função f e o seu laplaciano analítico.

A exemplo do que fizemos com o operador divergente diferença, vamos fazer uma análise de erro pontual para o laplaciano SPH Taylor a partir de informações obtidas do boxplot dos erros absolutos e relativos (Figura 21). Note que para o erro relativo há uma partícula cujo erro é próximo a $1,8e3$, destacamos tal partícula na amostra com um círculo vermelho. Isso acontece pois o valor do laplaciano analítico nesse ponto é $-7,2e-04$

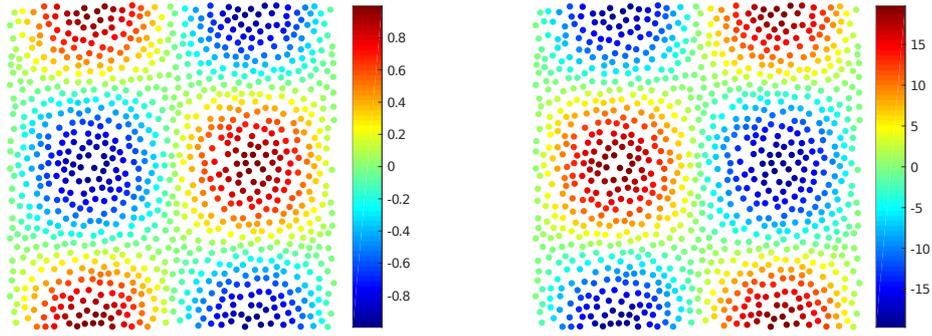


Figura 20 – À esquerda a função $f(x, y) = \text{sen}(\pi x)\text{cos}(\pi y)$ em $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$ discretizado com 1007 partículas e à direita o laplaciano analítico de f .

enquanto que o valor obtido pela aproximação é 12,8. Porém, muito embora haja pontos com valores de erros muito altos, para a maior parte das partículas o laplaciano SPH Taylor resulta em uma boa aproximação como mostra o boxplot sem os outliers.

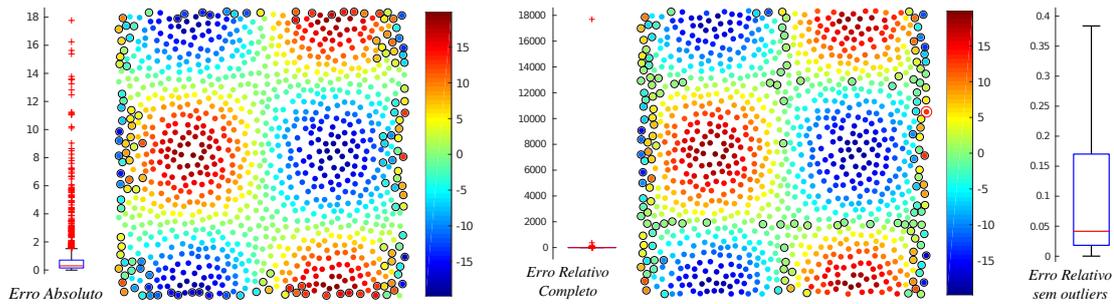


Figura 21 – Aproximação para o laplaciano da função $f(x, y) = \text{sen}(\pi x)\text{cos}(\pi y)$ obtida pelo operador laplaciano SPH Taylor. Destacamos na amostra as partículas cujos valores da aproximação são considerados outliers no boxplot do vetor de erro absoluto (à esquerda) e do vetor de erro relativo (à direita).

Mais uma vez podemos notar que os pontos com maiores erros concentram-se próximo a fronteira do domínio. Como a função $f(x, y) = \text{sen}(\pi x)\text{cos}(\pi y)$ é periódica em x e em y , vamos utilizar o espelhamento de partículas apresentado na subseção 2.2 para obter uma nova aproximação para o laplaciano da função. Com o espelhamento de partículas simulamos um domínio sem fronteira e esperamos resolver parcialmente o problema de inconsistência de partículas. A Figura 22 mostra que de fato com o espelhamento de partículas a aproximação para o laplaciano apresenta uma melhora considerável.

Observe que com o espelhamento de partículas o boxplot do erro absoluto possui um único valor outlier. A partícula que possui o maior erro relativo sem espelhamento, destacada em vermelho na Figura 21, é a mesma partícula que possui o maior erro relativo com espelhamento, destacada em vermelho na Figura 22. O erro relativo se propaga na região interior ao domínio onde os valores do laplaciano analítico são próximos a zero, o que sugere que tais erros são gerados por um problema numérico.

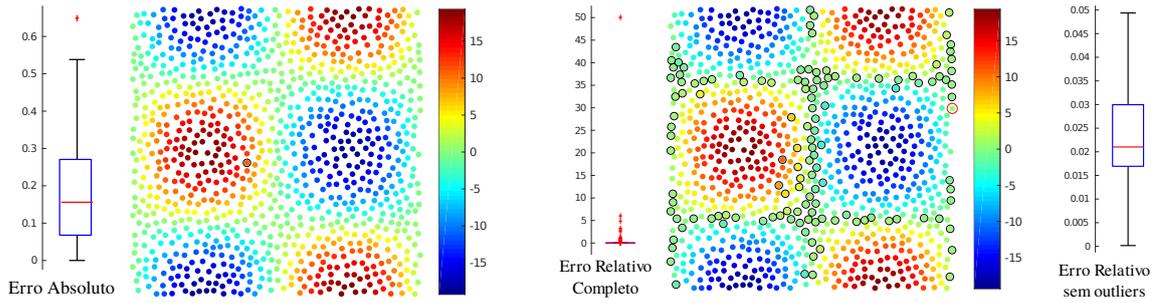


Figura 22 – Aproximação para o laplaciano da função $f(x, y) = \text{sen}(\pi x)\text{cos}(\pi y)$ obtida pelo operador laplaciano SPH Taylor utilizando o espelhamento de partículas.

Encerramos esta seção chamando a atenção ao fato de que existem muitas versões para os operadores SPH disponíveis na literatura. Como já justificamos acima, a escolha dos operadores apresentados nesta seção é baseada (PETRONETTO, 2008). A fim de diferenciarmos tais operadores com as correções que apresentaremos na seção seguinte, chamaremos estes de operadores SPH padrões.

2.4 Operadores SPH Corrigidos

Nesta seção apresentaremos três propostas de correções ao método SPH. Estas propostas não retornam operadores compactos em uma expressão como os apresentados na subseção anterior, pelo contrário, elas aproximam de forma isolada cada derivada parcial. A ferramenta principal a ser utilizada em ambas as correções é a série de Taylor.

A fim de facilitar a compreensão das expressões que envolvem tais correções, fixaremos algumas notações. Em geral, utilizamos os subíndices i e j para identificar partículas, ou seja, para o caso discreto. No entanto, vamos utilizar tais subíndices mesmo no caso contínuo, para a representação integral. Seja f uma função, $\mathbf{u} = (a, b)$ e $\mathbf{x} = (x, y)$ e $\alpha, \beta \in \{x, y\}$. Fixaremos a notação conforme a Tabela 1 abaixo

Contínuo	Discreto	Notação
$\mathbf{u} - \mathbf{x}$	$\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$	\mathbf{x}_{ij}
$a - x$	$x_i - x_j$	x_{ij}
$b - y$	$y_i - y_j$	y_{ij}
$f(\mathbf{u})$	$f(\mathbf{x}_i)$	f^i
$\partial_\alpha f(\mathbf{u})$	$\partial_\alpha f(\mathbf{x}_i)$	f_α^i
$\partial_{\alpha\beta} f(\mathbf{u})$	$\partial_{\alpha\beta} f(\mathbf{x}_i)$	$f_{\alpha\beta}^i$
$W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x})$	$W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$	W_h^{ij}
$\partial_\alpha W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x})$	$\partial_\alpha W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$	$W_{h,\alpha}^{ij}$
$\partial_{\alpha\beta} W_h(\mathbf{u} - \mathbf{x})$	$\partial_{\alpha\beta} W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$	$W_{h,\alpha\beta}^{ij}$

Tabela 1 – Notação simplificada envolvendo as variáveis utilizadas na seção corrente.

2.4.1 CSPM

O primeiro método que apresentaremos trata-se do CSPM (do inglês *Corrective Smoothed Particle Method*). Proposto em 1999 por (CHEN; BERAUN; CARNEY, 1999) o CSPM utiliza-se da série de Taylor para obter aproximações para as derivadas parciais de uma função.

Considere a série de Taylor em torno do ponto $\mathbf{u} = (a, b)$ com $\mathbf{x} = (x, y)$. Utilizando a nossa notação compacta temos

$$f^j = f^i + x_{ij}f_x^i + y_{ij}f_y^i + \frac{x_{ij}^2}{2}f_{xx}^i + x_{ij}y_{ij}f_{xy}^i + \frac{y_{ij}^2}{2}f_{yy}^i + \dots \quad (2.42)$$

Para obtermos as aproximações para a função e suas respectivas derivadas, multiplicamos (2.42) por W_h^{ij} , $W_{h,\alpha}^{ij}$ e $W_{h,\alpha\beta}^{ij}$ e em seguida integramos em Ω .

Aproximação para a função

Multiplicando (2.42) por W_h^{ij} , integrando em Ω e rearranjando os termos temos

$$\int_{\Omega} f^j W_h^{ij} d\mathbf{x} = f^i \int_{\Omega} W_h^{ij} d\mathbf{x} + f_x^i \int_{\Omega} x_{ij} W_h^{ij} d\mathbf{x} + f_y^i \int_{\Omega} y_{ij} W_h^{ij} d\mathbf{x} + \dots \quad (2.43)$$

Já verificamos que a propriedade de normalização do núcleo não é sempre satisfeita no caso discreto por causa do problema de inconsistência de partículas. Por esta razão, assumir tal igualdade como verdadeira gera uma perda de precisão nas aproximações. Na proposta de correção CSPM, em vez de considerarmos a igualdade, dividimos a equação (2.43) pela integral do núcleo, obtendo assim uma nova aproximação para a função

$$f^i \approx \frac{\int_{\Omega} f^j W_h^{ij} d\mathbf{x}}{\int_{\Omega} W_h^{ij} d\mathbf{x}}, \quad (2.44)$$

cuja aproximação por partícula é

$$f^i \approx \frac{\sum_{j \in V_i} f^j W_h^{ij} dV_j}{\sum_{j \in V_i} W_h^{ij} dV_j}. \quad (2.45)$$

A aproximação da função é utilizada para interpolar pontos da amostra cujos valores não são conhecidos. Como este não é o objetivo desta dissertação, omitiremos resultados sobre a aproximação para a função.

Aproximação para a derivada primeira

Para obtermos uma aproximação para a função, desprezamos os termos de ordem maior ou igual a 1 na série de Taylor. No entanto, as derivadas possuem mais de um termo de mesma ordem, o que torna sua aproximação um pouco mais complexa que o caso anterior.

Para obtermos uma aproximação para a derivada em relação a x , poderíamos proceder como no caso da função, substituindo W_h^{ij} por $W_{h,x}^{ij}$ obtendo assim a seguinte expressão

$$\int_{\Omega} f^j W_{h,x}^{ij} d\mathbf{x} = f^i \int_{\Omega} W_{h,x}^{ij} d\mathbf{x} + f_x^i \int_{\Omega} x_{ij} W_{h,x}^{ij} d\mathbf{x} + f_y^i \int_{\Omega} y_{ij} W_{h,x}^{ij} d\mathbf{x} + \dots \quad (2.46)$$

Rearranjando a expressão, chegaríamos a possível aproximação para derivada em x

$$f_x^i = \frac{\int_{\Omega} (f^j - f^i) W_{h,x}^{ij} d\mathbf{x}}{\int_{\Omega} x_{ij} W_{h,x}^{ij} d\mathbf{x}} - f_y^i \frac{\int_{\Omega} y_{ij} W_{h,x}^{ij} d\mathbf{x}}{\int_{\Omega} x_{ij} W_{h,x}^{ij} d\mathbf{x}} + \dots \quad (2.47)$$

Para ser possível realizar este cálculo é necessário desprezar o segundo termo do lado direito da igualdade. Porém tal termo possui a mesma ordem que a derivada em questão, o que reduziria a precisão da aproximação. Para contornar esta situação montamos um sistema envolvendo a derivada em x e em y e resolvemos obtendo simultaneamente as aproximações. Para chegarmos ao sistema repetimos o processo para a derivada em y , que dependerá da derivada em x

$$\int_{\Omega} f^j W_{h,y}^{ij} d\mathbf{x} = f^i \int_{\Omega} W_{h,y}^{ij} d\mathbf{x} + f_x^i \int_{\Omega} x_{ij} W_{h,y}^{ij} d\mathbf{x} + f_y^i \int_{\Omega} y_{ij} W_{h,y}^{ij} d\mathbf{x} + \dots \quad (2.48)$$

As equações (2.46) e (2.48) levam ao seguinte sistema

$$\begin{cases} \int_{\Omega} (f^j - f^i) W_{h,x}^{ij} d\mathbf{x} \approx f_x^i \int_{\Omega} x_{ij} W_{h,x}^{ij} d\mathbf{x} + f_y^i \int_{\Omega} y_{ij} W_{h,x}^{ij} d\mathbf{x} \\ \int_{\Omega} (f^j - f^i) W_{h,y}^{ij} d\mathbf{x} \approx f_x^i \int_{\Omega} x_{ij} W_{h,y}^{ij} d\mathbf{x} + f_y^i \int_{\Omega} y_{ij} W_{h,y}^{ij} d\mathbf{x} \end{cases}, \quad (2.49)$$

cujas versão discreta matricial é dada por

$$\begin{bmatrix} \sum_{j \in V_i} (f^j - f^i) W_{h,x}^{ij} dV_j \\ \sum_{j \in V_i} (f^j - f^i) W_{h,y}^{ij} dV_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{j \in V_i} x_{ij} W_{h,x}^{ij} dV_j & \sum_{j \in V_i} y_{ij} W_{h,x}^{ij} dV_j \\ \sum_{j \in V_i} x_{ij} W_{h,y}^{ij} dV_j & \sum_{j \in V_i} y_{ij} W_{h,y}^{ij} dV_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_x^i \\ f_y^i \end{bmatrix}. \quad (2.50)$$

A solução do sistema 2.50 retorna as aproximação para as derivadas de primeira ordem da função f .

Aproximação para a derivada segunda

Para obtermos uma aproximação para as derivadas de segunda ordem, procedemos de maneira análoga ao caso das derivadas primeira. Sendo assim, exibiremos somente a versão matricial discreta do sistema gerado pelo procedimento descrito acima, cuja solução resultará em aproximações para as derivadas segundas da função.

O sistema resultante do método CSPM para calcular as derivadas segundas

$$Ax = b$$

é dado por

$$A = \begin{bmatrix} \sum_{j \in V_i} \frac{x_{ij}^2}{2} W_{h,xx}^{ij} dV_j & \sum_{j \in V_i} x_{ij} y_{ij} W_{h,xx}^{ij} dV_j & \sum_{j \in V_i} \frac{y_{ij}^2}{2} W_{h,xx}^{ij} dV_j \\ \sum_{j \in V_i} \frac{x_{ij}^2}{2} W_{h,xy}^{ij} dV_j & \sum_{j \in V_i} x_{ij} y_{ij} W_{h,xy}^{ij} dV_j & \sum_{j \in V_i} \frac{y_{ij}^2}{2} W_{h,xy}^{ij} dV_j \\ \sum_{j \in V_i} \frac{x_{ij}^2}{2} W_{h,yy}^{ij} dV_j & \sum_{j \in V_i} x_{ij} y_{ij} W_{h,yy}^{ij} dV_j & \sum_{j \in V_i} \frac{y_{ij}^2}{2} W_{h,yy}^{ij} dV_j \end{bmatrix}, \quad (2.51)$$

$$x = \begin{bmatrix} f_{xx}^i \\ f_{xy}^i \\ f_{yy}^i \end{bmatrix}, \quad (2.52)$$

$$b = \begin{bmatrix} \sum_{j \in V_i} (f^j - f^i) W_{h,xx}^{ij} dV_j - f_x^i \sum_{j \in V_i} x_{ij} W_{h,xx}^{ij} dV_j - f_y^i \sum_{j \in V_i} y_{ij} W_{h,xx}^{ij} dV_j \\ \sum_{j \in V_i} (f^j - f^i) W_{h,xy}^{ij} dV_j - f_x^i \sum_{j \in V_i} x_{ij} W_{h,xy}^{ij} dV_j - f_y^i \sum_{j \in V_i} y_{ij} W_{h,xy}^{ij} dV_j \\ \sum_{j \in V_i} (f^j - f^i) W_{h,yy}^{ij} dV_j - f_x^i \sum_{j \in V_i} x_{ij} W_{h,yy}^{ij} dV_j - f_y^i \sum_{j \in V_i} y_{ij} W_{h,yy}^{ij} dV_j \end{bmatrix}. \quad (2.53)$$

Operador gradiente CSPM

Utilizaremos o operador CSPM para obter uma aproximação para o gradiente da função $f(x, y) = xy$ definida em $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$ discretizado com 1007 partículas. Mantivemos as condições que usamos para o gradiente diferença porém agora apresentaremos apenas o gradiente analítico, a aproximação e o boxplot com os erros de norma absoluto e relativo e o erro de fase sem destacar os outliers na amostra nem mesmo fazer qualquer tipo de comparação, uma vez que faremos isso mais adiante no texto.

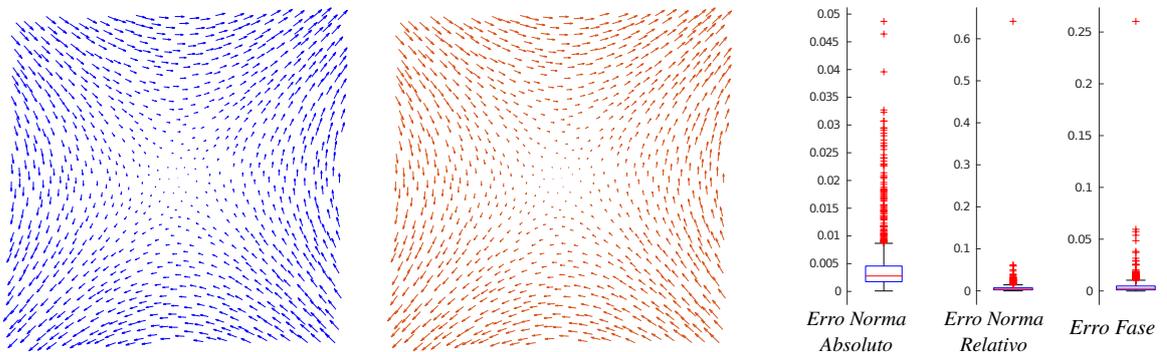


Figura 23 – À esquerda o gradiente da função $f(x, y) = xy$, no centro a aproximação obtida pela correção CSPM e à direita os boxplots com os erros da norma absoluto e relativo e o erro de fase.

Operador divergente CSPM

A seguir apresentamos uma aproximação obtida pelo operador divergente CSPM para o divergente analítico do campo $F(x, y) = (\text{sen}(\pi x), \text{sen}(\pi y))$, onde $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$, discretizado com 1007 partículas. Destacamos na amostra as partículas cujos valores da aproximação são considerados outliers no boxplot do erro absoluto em vermelho, do erro relativo em preto e em magenta as partículas que possuem valores outliers para ambos os erros.

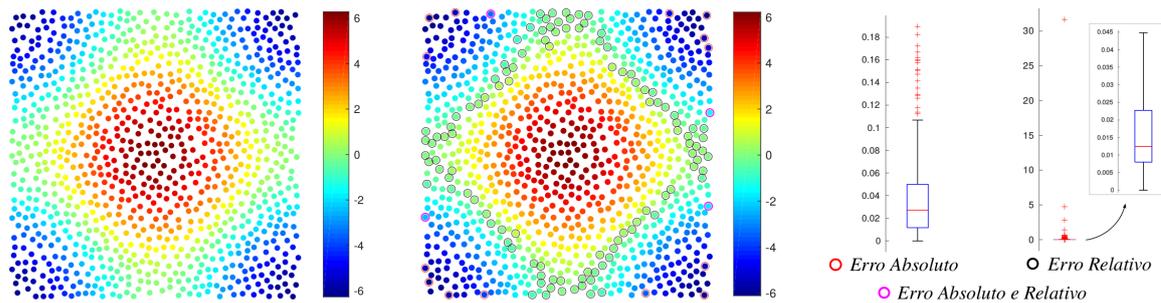


Figura 24 – À esquerda o divergente da função $F(x, y) = (\text{sen}(\pi x), \text{sen}(\pi y))$, no centro a aproximação obtida pela correção CSPM e à direita os boxplots com os erros absoluto e relativo. Em destaque na amostra as partículas cujos valores dos erros são considerados outliers nos respectivos boxplot.

Operador laplaciano CSPM

Para finalizar esta seção aplicamos o operador CSPM para obter uma aproximação do laplaciano da função $f(x, y) = \text{sen}(\pi x)\text{cos}(\pi y)$ em $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$ discretizado com 1007 partículas. Em destaques os outliers do boxplot do erro absoluto em vermelho, do erro relativo em preto e em magenta as partículas que possuem valores outliers para ambos os erros.

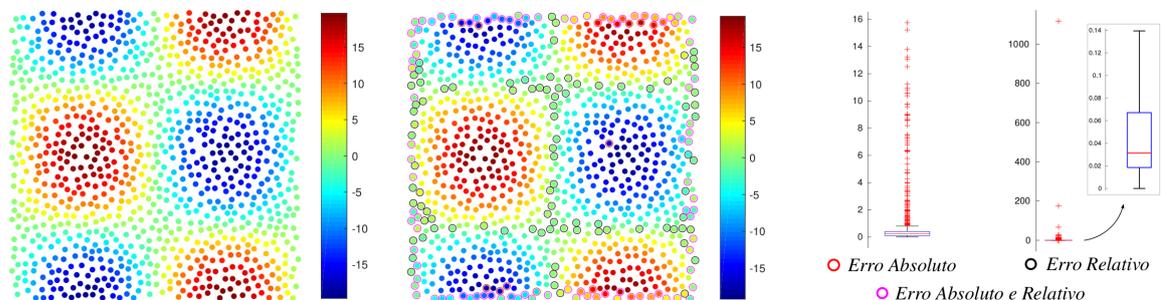


Figura 25 – À esquerda o laplaciano analítico da função $f(x, y) = \text{sen}(\pi x)\text{cos}(\pi y)$, no centro a aproximação obtida pela correção CSPM e à direita os boxplots com os erros absoluto e relativo. Em destaque na amostra as partículas cujos valores dos erros são considerados outliers nos respectivos boxplot.

2.4.2 MSPH

Conforme vimos na subseção anterior, o método CSPM obtém aproximações para uma função, suas derivadas primeira e segunda ordens resolvendo sistemas de dimensões 1×1 , 2×2 e 3×3 respectivamente. A correção que apresentaremos agora, sugere a solução de um único sistema 6×6 envolvendo simultaneamente a função e suas derivadas de primeira e segunda ordem. Proposto em 2004 por (ZHANG; BATRA, 2004) este método recebe o nome de MSPH, que é a sigla do inglês para *Modified Smoothed Particle Hydrodynamics*.

Devido ao fato desta correção ser uma modificação ao CSPM e a formulação básica ser análoga, a menos da resolução do sistema, não apresentaremos este passo a passo, exibindo diretamente o sistema final cuja solução resultará nas aproximações para a função e suas derivadas de primeira e segunda ordem. Tal sistema é da seguinte forma

$$A_{rs}x_s = b_r \tag{2.54}$$

onde

$$A_{rs} = \sum_{j \in V_i} \Phi(r)\Theta(s)dV_j \quad b_r = \sum_{j \in V_i} f^j\Phi(r)dV_j \tag{2.55}$$

com $\Phi = \{W_h^{ij}, W_{h,x}^{ij}, W_{h,y}^{ij}, W_{h,xx}^{ij}, W_{h,xy}^{ij}, W_{h,yy}^{ij}\}$, $\Theta = \{1, x_{ij}, y_{ij}, \frac{1}{2}x_{ij}^2, x_{ij}y_{ij}, \frac{1}{2}y_{ij}^2\}$ e $x_s \in \{f^i, f_x^i, f_y^i, f_{xx}^i, f_{xy}^i, f_{yy}^i\}$.

Operador gradiente MSPH

Utilizaremos o operador MSPH para obter uma aproximação para o gradiente da função $f(x, y) = xy$ definida em $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$ discretizado com 1007 partículas.

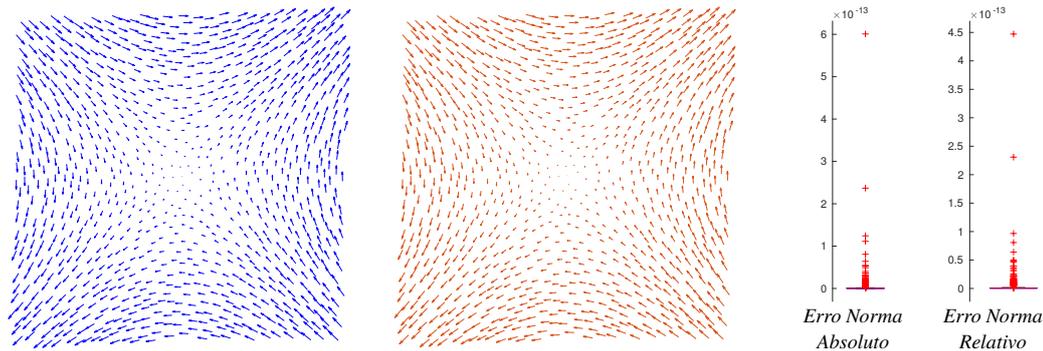


Figura 26 – À esquerda o gradiente analítico da função $f(x, y) = xy$, no centro a aproximação obtida pela correção MSPH e à direita os boxplots com os erros da norma absoluto e relativo. O boxplot do erro de fase foi omitido pois não apresentava informações relevantes sobre o comportamento do erro, uma vez que a maioria dos valores eram nulos.

Mantivemos as condições que usamos para o gradiente CSPM, porém neste caso não exibimos o erro de fase, pois para esta função a aproximação apresentou valores maiores

que zero para este erro apenas em algumas partículas, mais ainda, constatou-se que tais valores eram da grandeza de $10e-8$ e por esta razão o boxplot não apresentava informações relevantes, uma vez que, como a maioria das partículas assumiam o valor nulo para o erro, os valores diferentes de zero já eram considerados outliers.

Operador divergente MSPH

Apresentaremos agora uma aproximação obtida pelo operador divergente MSPH para o divergente analítico do campo $F(x, y) = (\text{sen}(\pi x), \text{sen}(\pi y))$, onde $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$, discretizado com 1007 partículas. Para esta aproximação o erro absoluto apresentou apenas onze partículas cujos valores foram considerados outliers, sendo assim destacamos os outliers na amostra mas apresentamos o boxplot sem tais valores. Em relação ao erro relativo, a exemplo do operador CSPM, os outliers se propagam para o interior da amostra nos pontos cujos valores do divergente analítico são próximos a zero e por esta razão não destacamos as partículas onde ocorrem tais erros. Chamamos a atenção para o boxplot do erro relativo que apresenta valores outliers abaixo do whisker inferior. Isso ocorre porque os valores dos erros se concentram próximos a 0,01 e conseqüentemente valores muito abaixo deste passam a ser outliers. Mas isso não representa um problema uma vez que o whisker superior é menor que 0,02, o que significa que 75% das partículas da amostra apresentam valores de erro menor que 0,02 o que para o erro relativo representa uma boa aproximação.

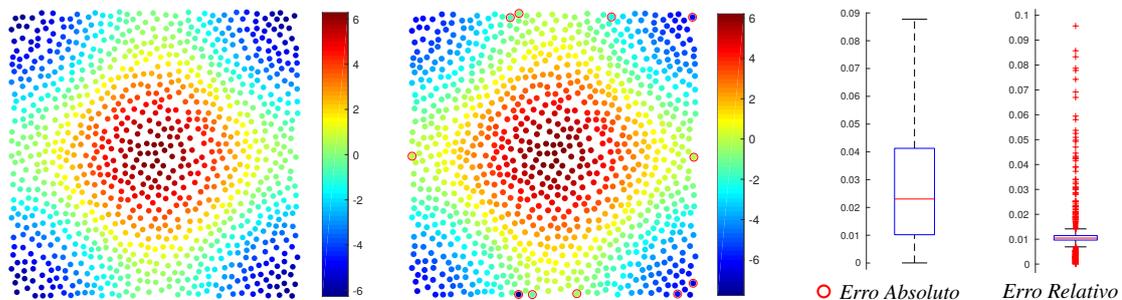


Figura 27 – À esquerda o divergente analítico da função $F(x, y) = (\text{sen}(\pi x), \text{sen}(\pi y))$, no centro a aproximação obtida pela correção MSPH e à direita os boxplots com os erros absoluto e relativo. Em destaque na amostra os pontos cujos valores dos erros são considerados outliers do boxplot do erro absoluto. Os onze valores outliers do boxplot do erro absoluto foram omitidos do boxplot para melhor visualização.

Operador laplaciano MSPH

Para finalizar esta seção aplicamos o operador MSPH para obter uma aproximação do laplaciano da função $f(x, y) = \text{sen}(\pi x)\text{cos}(\pi y)$ em $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$ discretizado com 1007 partículas. Destacamos na amostra as partículas cujos valores da aproximação são

considerados outliers no boxplot do erro absoluto em vermelho, do erro relativo em preto e em magenta as partículas que possuem valores outliers para ambos os erros (Figura 28).

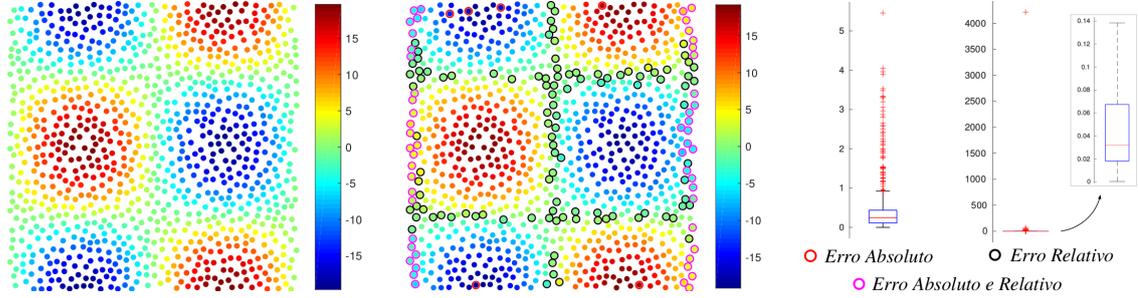


Figura 28 – À esquerda o laplaciano analítico da função $f(x, y) = \text{sen}(\pi x)\cos(\pi y)$, no centro a aproximação obtida pela correção MSPH e à direita os boxplots com os erros absoluto e relativo. Em destaque na amostra as partículas cujos valores dos erros são considerados outliers nos respectivos boxplot.

2.4.3 NCSPH

A última proposta de correção que apresentaremos é muito similar ao método a CSPM. Em particular para a aproximação de uma função ambos os métodos possuem exatamente a mesma expressão. Esta correção proposta em (STRANEX; WHEATON, 2011) chamaremos de NCSPH, do inglês *New Corective Smoothed Particle Hydrodynamics*.

Considere a seguinte expressão obtida da série de Taylor multiplicando-a pelo núcleo W_h^{ij} e integrando em Ω

$$\int_{\Omega} f^j W_h^{ij} d\mathbf{x} = f^i \int_{\Omega} W_h^{ij} d\mathbf{x} + f_x^i \int_{\Omega} x_{ij} W_h^{ij} d\mathbf{x} + f_y^i \int_{\Omega} y_{ij} W_h^{ij} d\mathbf{x} + f_{xx}^i \int_{\Omega} \frac{1}{2} x_{ij}^2 W_h^{ij} d\mathbf{x} + f_{xy}^i \int_{\Omega} x_{ij} y_{ij} W_h^{ij} d\mathbf{x} + f_{yy}^i \int_{\Omega} \frac{1}{2} y_{ij}^2 W_h^{ij} d\mathbf{x} + \dots \quad (2.56)$$

Reescreveremos esta equação da seguinte forma

$$f_h = f^i M_0^0 + f_x^i M_{1,x}^0 + f_y^i M_{1,y}^0 + f_{xx}^i M_{2,xx}^0 + f_{xy}^i M_{2,xy}^0 + f_{yy}^i M_{2,yy}^0 + \dots \quad (2.57)$$

onde cada $M_{\alpha,\beta}^\gamma$ é igual à respectiva integral na equação (2.56). Estes valores são conhecidos como *momentos*. Utilizaremos esta notação ao longo desta subseção e faremos um esclarecimento sobre a mesma. O subíndice α está relacionado com a ordem do termo da série de Taylor o qual o momento multiplica e assume valores numéricos variando de um a três. O subíndice β é utilizado para identificar as parcelas de mesma ordem, seus valores são literais e variam entre x, y, xx, xy e yy . O superíndice γ diz respeito a derivada do núcleo, com exceção do caso apresentado acima onde utilizamos o superíndice 0 para identificar o núcleo, e os valores assumidos por este variam no mesmo conjunto que o subíndice β .

Dividindo a expressão (2.57) por M_0^0 temos

$$f^i = \frac{f_h}{M_0^0} - f_x^i \frac{M_{1,x}^0}{M_0^0} - f_y^i \frac{M_{1,y}^0}{M_0^0} - f_{xx}^i \frac{M_{2,xx}^0}{M_0^0} - f_{xy}^i \frac{M_{2,xy}^0}{M_0^0} - f_{yy}^i \frac{M_{2,yy}^0}{M_0^0} - \dots \quad (2.58)$$

Como vimos no método CSPM, a aproximação de uma função é dada pela seguinte expressão

$$f^i \approx \frac{\int_{\Omega} f^j W_h^{ij} d\mathbf{x}}{\int_{\Omega} W_h^{ij} d\mathbf{x}}. \quad (2.59)$$

Esta aproximação é obtida a partir da igualdade (2.58) desprezando os termos de ordem maior ou igual a um. Como já mencionamos acima, esta mesma aproximação é utilizada no NCSPH.

Vejam agora o caso para as derivadas de primeira ordem. Com a notação de momentos, temos a seguinte representação para as igualdades oriundas da série de Taylor multiplicando lado a lado pelas derivadas do núcleo e integrando

$$(f_{\gamma})_h = f^i M_0^{\gamma} + f_x^i M_{1,x}^{\gamma} + f_y^i M_{1,y}^{\gamma} + f_{xx}^i M_{2,xx}^{\gamma} + f_{xy}^i M_{2,xy}^{\gamma} + f_{yy}^i M_{2,yy}^{\gamma} + \dots, \quad (2.60)$$

onde $\gamma \in \{x, y\}$.

Diferentemente do CSPM, que constrói e resolve um sistema a partir de (2.60) para obter as derivadas primeira, o NCSPH propõe a substituição da equação (2.58) em (2.60). Evidentemente se o valor analítico de f é conhecido em todos os pontos da amostra não há vantagens em substituir tais valores pelas aproximações dadas pela equação (2.58). No entanto, esta estratégia é boa quando a função f não é conhecida em todos os pontos. Porém este não é o caso desta dissertação e utilizando os valores analíticos de f , novamente o NCSPH reduz-se ao CSPM.

Para obtermos uma aproximação para a segunda derivada, utilizaremos a mesma expressão (2.60) modificando apenas as possibilidades de valores para γ , que neste caso pertencem a $\{xx, xy, yy\}$. O CSPM obtém as aproximações para a derivada primeira e substitui diretamente na expressão (2.60) a fim de gerar um sistema onde as incógnitas são as derivadas segunda. O NCSPH retorna os valores das aproximações da derivada primeira às séries de Taylor das quais estas resultaram e então substitui a série de Taylor resultante em (2.60). Explicaremos esta última frase a seguir.

A partir de (2.60) obtemos o seguinte sistema para as derivadas primeira

$$\begin{cases} (f_x)_h - f^i M_0^x = f_x^i M_{1,x}^x + f_y^i M_{1,y}^x + f_{xx}^i M_{2,xx}^x + f_{xy}^i M_{2,xy}^x + f_{yy}^i M_{2,yy}^x + \dots \\ (f_y)_h - f^i M_0^y = f_x^i M_{1,x}^y + f_y^i M_{1,y}^y + f_{xx}^i M_{2,xx}^y + f_{xy}^i M_{2,xy}^y + f_{yy}^i M_{2,yy}^y + \dots \end{cases} \quad (2.61)$$

cuja versão matricial é

$$\begin{bmatrix} M_{1,x}^x & M_{1,y}^x \\ M_{1,x}^y & M_{1,y}^y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_x^i \\ f_y^i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (f_x)_h - f^i M_0^x \\ (f_y)_h - f^i M_0^y \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} M_{2,xx}^x & M_{2,xy}^x & M_{2,yy}^x \\ M_{2,xx}^y & M_{2,xy}^y & M_{2,yy}^y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_{xx}^i \\ f_{xy}^i \\ f_{yy}^i \end{bmatrix} - \dots \quad (2.62)$$

A matriz 2×2 à esquerda da igualdade acima, que denotaremos por M , é invertível sempre que existir pelo menos 3 partículas no suporte compacto do núcleo conforme observado experimentalmente por (STRANEX; WHEATON, 2011). Sendo assim, é possível obter as expressões das derivadas analíticas em função das aproximações que são dadas a por

$$\begin{bmatrix} f_x^i \\ f_y^i \end{bmatrix} = M^{-1} \left\{ \begin{bmatrix} (f_x)_h - f^i M_0^x \\ (f_y)_h - f^i M_0^y \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} M_{2,xx}^x & M_{2,xy}^x & M_{2,yy}^x \\ M_{2,xx}^y & M_{2,xy}^y & M_{2,yy}^y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_{xx}^i \\ f_{xy}^i \\ f_{yy}^i \end{bmatrix} - \dots \right\}. \quad (2.63)$$

Substituímos os valores de f_x^i e f_y^i obtidos em (2.63) na equação (2.60) e rearranjamos os termos a fim de construirmos um sistema cuja solução será as derivadas parciais de segunda ordem. Omitiremos o sistema final devido à complexidade na escrita do mesmo.

Como as aproximações para os operadores de primeira ordem obtidas pelo NCSPH são exatamente iguais as aproximações obtidas pelo CSPM, ilustraremos apenas a aproximação para o operador laplaciano.

Operador laplaciano NCSPH

Para finalizar esta seção aplicamos o operador NCSPH para obter uma aproximação do laplaciano da função $f(x, y) = \text{sen}(\pi x)\text{cos}(\pi y)$ em $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$ discretizado com 1007 partículas. Novamente destacamos os outliers do boxplot do erro absoluto em vermelho, do erro relativo em preto e em magenta as partículas que possuem valores outliers para ambos os erros.

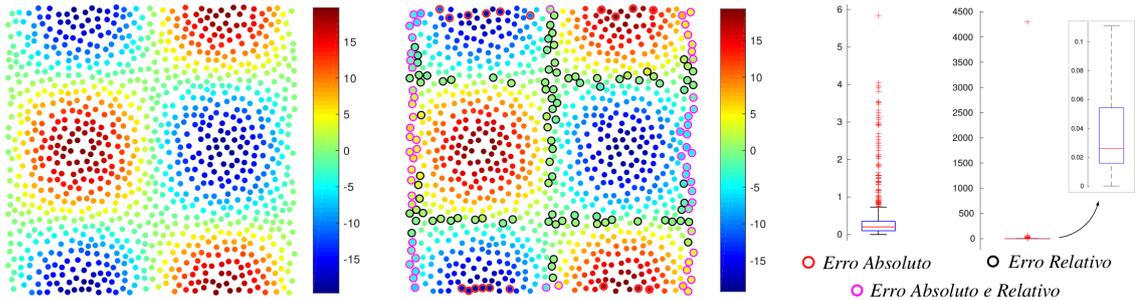


Figura 29 – À esquerda o laplaciano analítico da função $f(x, y) = \text{sen}(\pi x)\text{cos}(\pi y)$, no centro a aproximação obtida pela correção NCSPH e à direita os boxplots com os erros absoluto e relativo. Em destaque na amostra as partículas cujos valores dos erros são considerados outliers nos respectivos boxplot.

2.5 Consistência dos Operadores SPH Padrões e Corrigidos

As seções anteriores cuidaram apenas de apresentar a formulação de alguns operadores SPH e ilustrar resultados básicos sem muitas considerações. Nesta seção, porém, faremos

uma análise mais robusta dos operadores SPH discutidos na seção (2.3) e das correções da seção (2.4). Três tipos de análise serão utilizadas para verificar a consistência e a precisão dos operadores:

1. Análise da Representação Integral

Nesta análise fixamos o número de partículas e variamos o valor do comprimento suave h . Esta recebe tal nome pois está relacionada com a representação integral, uma vez que quando $h \rightarrow 0$ na representação integral devemos ter $f_h \rightarrow f$. Mas por se tratar de um domínio discreto é razoável que um valor de h muito pequeno produza uma inconsistência de partículas, o que significa que existe um $h > 0$ que otimiza a aproximação.

2. Análise da Aproximação por Partículas

Nesta fixamos o valor do comprimento suave e alteramos o número de partículas. Tendo em vista que o domínio discreto é uma aproximação para o domínio contínuo, esta análise avalia a aproximação por partículas, uma vez que quando $n \rightarrow \infty$ devemos ter $\sum \rightarrow f$, onde n é a quantidade de pontos da discretização, por esta razão recebe o nome de análise da aproximação por partículas.

3. Análise da Consistência dos Operadores

Por fim, nesta análise variamos o número de partículas e o comprimento suave h , o que significa avaliar simultaneamente a representação integral e a aproximação por partículas e por isso chamaremos esta última análise de consistência pois envolve os dois passos da formulação do método.

Os resultados serão apresentados como forma de erro global utilizando as normas do máximo (L_∞) e a norma euclidiana (L_2) a partir do erro absoluto e do erro relativo. Apresentaremos tais resultados em gráficos que serão plotados em escala logarítmica (loglog), sendo que as curvas pretas representam a norma do máximo aplicada ao erro absoluto, as azuis a norma do máximo aplicada ao erro relativo, as vermelhas a norma euclidiana aplicada ao erro absoluto e as magentas a norma euclidiana aplicada ao erro relativo.

Operadores de Primeira Ordem

Os operadores gradiente e divergente são operadores de primeira ordem pois envolvem apenas derivadas primeira de uma dada função. Por se tratarem de operadores de primeira ordem, analisaremos apenas os operadores SPH divergentes. O campo analítico para o qual aproximaremos o divergente é o mesmo utilizado ao longo do texto, trata-se do campo $F(x, y) = (\text{sen}(\pi x), \text{sen}(\pi y))$ em $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$ cuja quantidade de partículas na discretização do domínio depende do tipo de análise. Como para aproximações de primeira ordem os operadores CSPM e NCSPH retornam a mesma aproximação, exibiremos apenas os resultados obtidos para o CSPM.

Análise da Representação Integral

Para esta análise fixamos o domínio $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$ discretizado de maneira uniforme com 8052 partículas e variamos os valores de h em $\{0,045; 0,055; 0,082; 0,096; 0,109\}$. O resultado na análise é plotado na Figura 30.

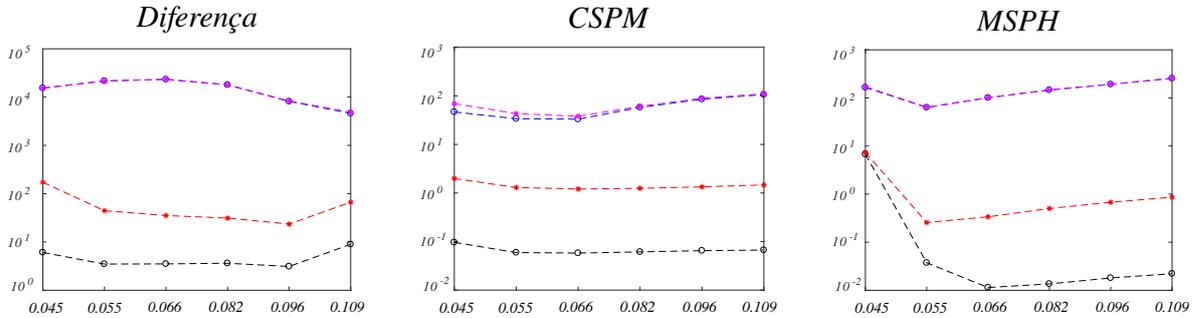


Figura 30 – Análise da representação integral dos operadores de primeira ordem.

Na análise atual os valores de h equivalem, respectivamente, a 13, 19, 27, 41, 55 e 70 vizinhos por partículas. Em geral, para o caso bidimensional, sugere-se uma média de 27 vizinhos por partículas o que no nosso caso equivale a $h = 0,066$. Muito embora os operadores apresentem pequenas variações de desempenho, tanto ao comparar um com os outros quanto em relação ao tipo de erro analisado, por exemplo em relação ao erro relativo o h “ideal” para o MSPH é $h = 0,055$ enquanto que para o erro absoluto é $h = 0,066$, vamos manter o valor de h que resulta da média de 27 vizinhos por partículas.

Análise da aproximação por partícula

A análise da aproximação por partículas será feita fixando o valor de $h = 0.1$ e variando a quantidade de partículas na discretização em 1007, 2009, 4005 e 8052 (Figura 31). A quantidade média de vizinhos para este h em cada discretização é, respectivamente, 7, 14, 29 e 59.

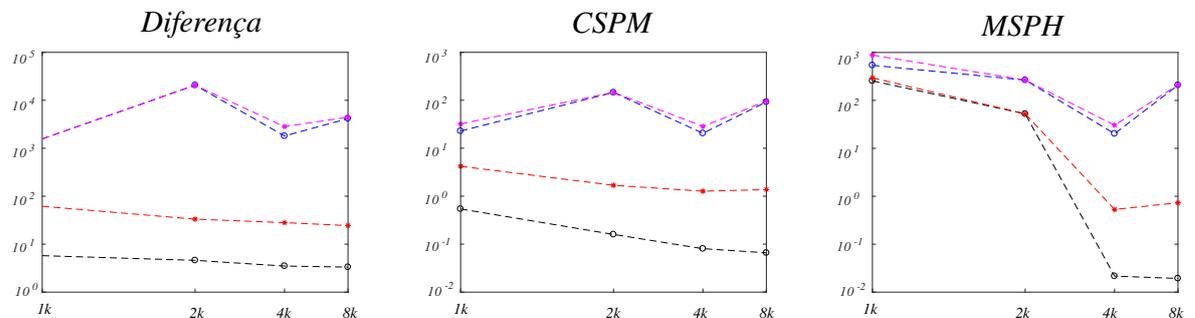


Figura 31 – Análise da aproximação por partículas para operadores de primeira ordem. Mantemos o comprimento suave $h = 0,1$ fixo e variamos a quantidade de partículas entre 1007, 2009, 4005 e 8052.

Novamente o comportamento dos operadores é condicional ao tipo de erro e a norma que estamos avaliando este erro. Os operadores diferença e CSPM apresentam melhores resultados em relação as normas avaliadas para os erros absolutos quando a discretização possui 8052 partículas, mas quando as normas são avaliadas nos erros relativos, os melhores resultados aparecem quando a discretização possui 1007 partículas e este resultado é muito semelhante ao resultado obtido quando a discretização possui 4005 partículas. Já o MSPH, independente do erro e da norma, apresenta melhor resultado quando a discretização possui 4005 partículas.

Pontualmente esta análise causa o mesmo efeito que a análise da representação integral pois a consequência de fixar h e aumentar a quantidade de partículas da amostra é aumentar a quantidade de vizinhos de cada partícula. Porém globalmente está análise explicita o caráter da aproximação obtida discretizando a integral em um domínio contínuo para o somatório num domínio discreto.

Análise da consistência

Por fim faremos a análise da consistência dos operadores SPH de primeira ordem. Para esta análise fixamos uma média de 27 vizinhos por partícula, o que significa variar o valor do comprimento suave h em função da quantidade de partículas da amostra e variamos a quantidade de partículas em 1007, 2009, 4005 e 8052 (Figura 32).

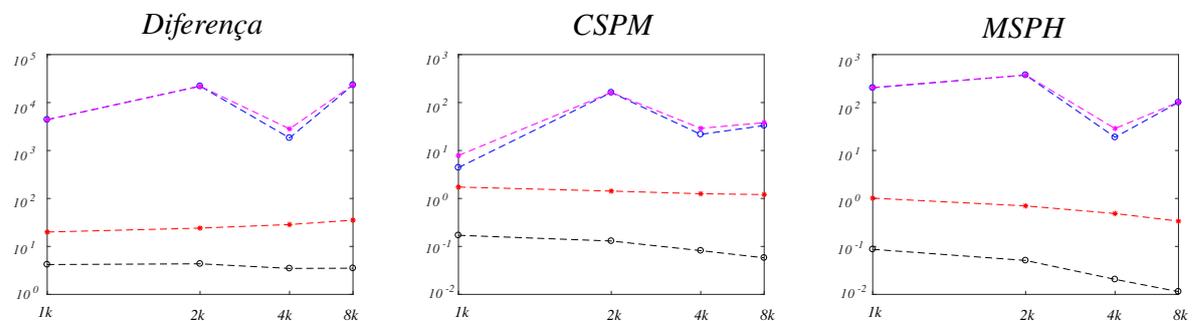


Figura 32 – Análise da consistência dos operadores de primeira ordem.

Muito embora o objetivo desta análise não seja comparar tais operadores, é possível notar a partir do gráfico que de fato os operadores corrigidos apresentam melhores resultados em relação ao operador padrão. Embora possua um custo computacional mais alto que os demais operadores o MSPH apresenta o melhor desempenho quando avaliamos o erro absoluto. No entanto, para os erros relativos o CSPM apresenta melhores resultados.

Apesar das normas euclidiana e infinita apresentarem uma variação para ambos os operadores quando avaliadas nos erros relativos, estas se mantêm estáveis e decaindo quando avaliadas nos erros absolutos, com exceção da norma euclidiana do operador diferença. Este resultado confirma a consistência dos operadores de primeira ordem apresentados.

Operadores de Segunda Ordem

O operador laplaciano é um operador de segunda ordem pois este envolve as derivadas de segunda ordem de uma função. As análises da representação integral e da aproximação por partículas dizem respeito a formulação do método de uma forma geral e aponta para quais valores de h um dado operador apresenta melhor desempenho em função da quantidade de partículas da discretização. Por esta razão não faremos tais análises para o operador laplaciano, uma vez que os resultados obtidos para os operadores de primeira ordem já garantem que tais passos da formulação do método de fato definem numericamente bons operadores. Sendo assim faremos apenas a análise da consistência para tal operador.

Análise da consistência

Faremos a análise da consistência dos operadores a partir da aproximação do laplaciano da função $f(x, y) = \text{sen}(\pi x)\text{cos}(\pi y)$ em $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$ com a quantidade de partículas na discretização do domínio variando em 1007, 2009, 4005 e 8052, porém fixando a quantidade média de 27 vizinhos por partículas.

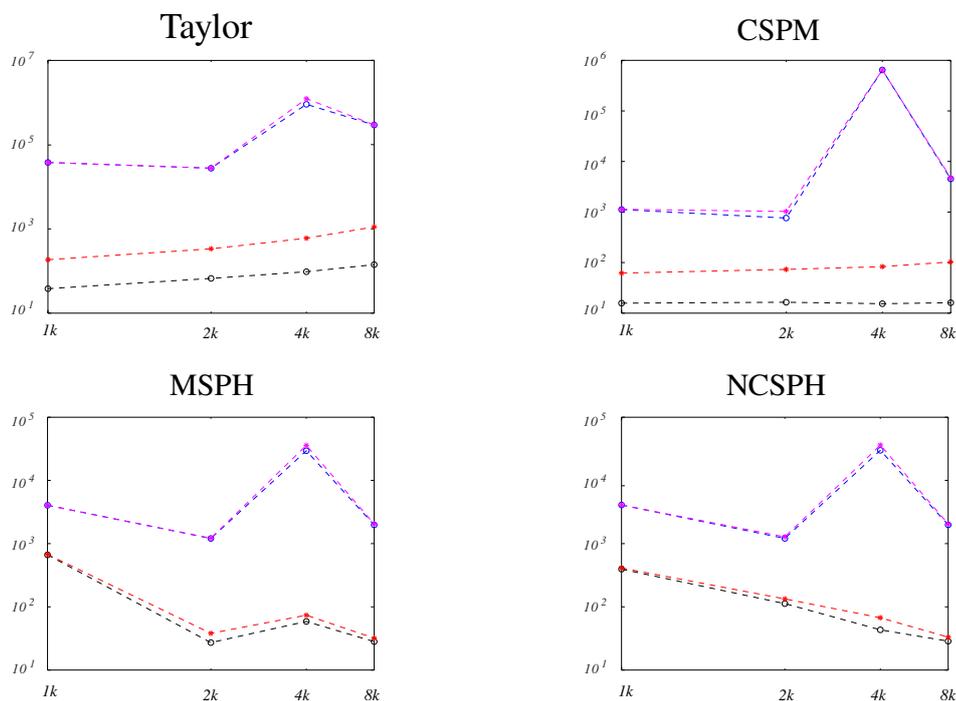


Figura 33 – Análise da consistência dos operadores SPH laplacianos.

Assim como os operadores de primeira ordem, os operadores de segunda ordem apresentam um comportamento irregular quando analisamos os erros relativos. Ambos os gráficos possuem um pico quando a amostra está discretizada com 4005 partículas mas apenas para o erro relativo. Em relação ao erro absoluto os operadores apresentam um comportamento estável e o MSPH e o NCSPH possuem um decaimento considerável à

medida que o número de partículas da discretização aumenta. Chamamos a atenção para o fato de que os métodos de correções utilizam-se da derivada segunda do núcleo para obter as aproximações o que torna os métodos sensíveis a elementos da formulação do método como distribuição das partículas, escolha dos elementos de área e etc.

As aproximações apresentam resultados menos expressivos em pontos próximos a fronteira devido à inconsistência de partículas. Podemos notar tal comportamento na análise de erro pontual feita nas seções anteriores, pois as partículas cujos os valores dos erros são considerados outliers estão próximas à fronteira. Em geral, tais valores muito diferem do restante da amostra, o que pode ocasionar uma má percepção dos resultados na maioria das partículas. Para evitar tal situação, repetiremos a análise de consistência dos operadores laplacianos, porém agora retirando os outliers a fim de verificarmos o comportamento dos operadores nos pontos onde a aproximação é mais homogênea. Tal resultado é exibido na Figura 34.

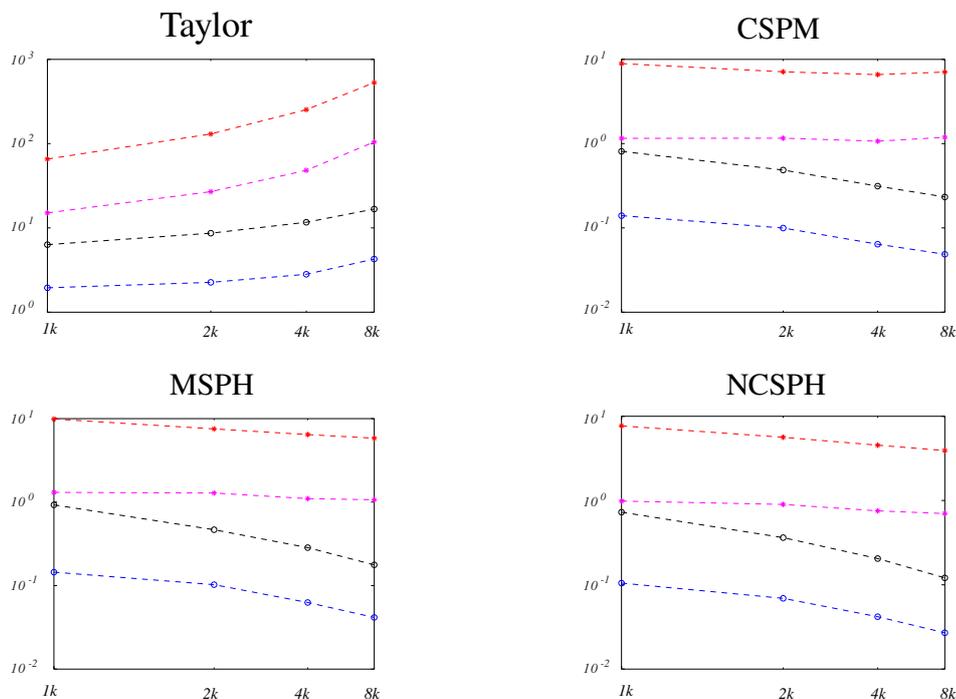


Figura 34 – Análise da consistência dos operadores SPH laplacianos desconsiderando os valores considerados outliers nos boxplot dos erros.

Sem os outliers os operadores corrigidos se comportam muito bem porém o operador Taylor apresenta um crescimento para todos os erros e todas as normas, o que já acontecia com os dados sem tratamento. O operador NCSPH apresenta os melhores resultados e ao contrário do que acontecia com os operadores de primeira ordem, onde ele era idêntico ao CSPM, agora fica evidente o caráter da proposta de correção do método.

A análise de consistência desconsiderando os valores outliers dos boxplots dos erros se justifica pois tais valores em geral acontecem em partículas próximas à fronteira do

domínio, no entanto o objetivo principal desta dissertação é estender os operadores SPH para domínios sem fronteira, que é o assunto do capítulo seguinte.

2.5.1 Comparando os Operadores SPH

Encerramos este capítulo apresentando por meio de tabelas as principais vantagens e desvantagens dos operadores SPH padrões e corrigidos. Não comentaremos as aproximações para a função pois não é o interesse desta dissertação.

Método	Vantagens
Diferença	Possui uma formulação simples e de fácil implementação.
Taylor	Possui uma expressão que permite definir um operador inverso que pode ser utilizado, por exemplo, para resolver o problema de Poisson.
CSPM	Se comporta bem em relação ao problema de inconsistência de partícula e melhora os operadores padrões.
MSPH	Possui aproximações de ordens $O(h^2)$ e $O(h)$ para a derivada primeira e segunda respectivamente.
NCSPH	É equivalente ao MSPH no caso dos operadores de segunda ordem mas resolve dois sistemas menores para obter as derivadas de primeira e segunda ordem.

Tabela 2 – Vantagens dos operadores SPH padrões e corrigidos

Método	Desvantagens
Diferença	É sensível a inconsistência de partículas e possui uma baixa precisão de aproximação.
Taylor	É sensível a inconsistência de partículas.
CSPM	As aproximações para as derivadas são obtidas simultaneamente por meio de um sistema, o que dificulta a definição de operadores inversos.
MSPH	As aproximações para as derivadas são obtidas simultaneamente por meio de um sistema com seis variáveis para cada partícula, o que gera um alto custo computacional e dificulta a definição de operadores inversos. Além disso, para os operadores de segunda ordem utiliza a derivada segunda do núcleo.
NCSPH	As aproximações para as derivadas são obtidas simultaneamente por meio de um sistema, o que dificulta a definição de operadores inversos e possui uma formulação complexa.

Tabela 3 – Desvantagens dos operadores SPH padrões e corrigidos

Por fim, vale ressaltar que as correções de fato melhoram consideravelmente os operadores padrões, mas estes, mesmo com suas limitações, apresentam resultados razoáveis. Comparando os operadores corrigidos entre si, não há um critério global que defina qual apresenta melhores resultados sempre. Por exemplo, no que diz respeito ao custo computacional, a classificação seria em primeiro lugar o CSPM, seguido do NCSPH e por fim o MSPH. Se porém o objetivo é precisão, então inverte-se a ordem, ou seja, primeiro o MSPH, depois o NCSPH e em último lugar o CSPM. Se porém os valores das funções não são conhecidas em todos os pontos, então o NCSPH leva vantagem em relação aos demais. Mais ainda, se estamos interessados em resolver problemas como a equação de Poisson, então temos que recorrer ao operador padrão Taylor, pois obter uma expressão inversa para os operadores corrigidos é uma tarefa muito complicada, uma vez que o valor da aproximação em cada partícula é obtido a partir da resolução de um sistema específico para aquela partícula.

3 Operadores SPH sobre Variedades

A formulação do método SPH consta de duas etapas, a representação integral de uma função e a aproximação por partículas. A representação integral é definida a partir da convolução da função que se deseja aproximar com um núcleo que tem a propriedade de ser aproximação da identidade. A aproximação por partículas, por sua vez, é a discretização da representação integral para um domínio discreto. Assim, uma extensão natural do método SPH a variedades seria possível se tivéssemos a mesma noção de representação integral de uma função definida sobre variedades. Porém a representação integral não é naturalmente estendida a variedades, mais ainda, mesmo definindo uma representação integral para variedades faltaria o processo de discretização desta representação. Portanto mesmo que este caminho pareça o mais natural, este não é a melhor opção, tendo em vista a dificuldade que encontraríamos ao percorrê-lo.

Uma abordagem usual para aproximar os operadores sobre variedades baseia-se no uso de projeções no espaço tangente (PETRONETTO et al., 2013; LIANG; ZHAO, 2013; MERCIER et al., 2015). Neste capítulo apresentaremos uma nova metodologia para se obter aproximações de operadores diferenciais sobre variedades. Esta nova metodologia também baseia-se no fato de que o plano tangente aproxima localmente a variedade, porém diferentemente das demais abordagens encontradas na literatura, utilizamos o fato de que para uma parametrização conveniente os operadores diferenciais definidos sobre a variedade assumem a mesma expressão que os operadores definidos no espaço euclidiano, uma vez que a matriz da métrica é a identidade e com isso evitamos o cálculo da métrica sem perdas das propriedades e sem a necessidade de resultados que garantam a igualdade dos operadores sobre a variedade com os operadores definidos no espaço euclidiano.

3.1 Aproximações no Espaço Tangente

Dada uma variedade (M, g) de dimensão n e uma parametrização $\mathbf{x} : U \subset \mathbb{R}^n \rightarrow M$, temos que as expressões em coordenadas locais dos operadores diferenciais gradiente, divergente e laplaciano definidos em M dependem da métrica g e possuem um “fator de correção” em relação aos operadores definidos em \mathbb{R}^n , como vimos na seção 1.3. No entanto, se a matriz da métrica é a identidade, as expressões dos operadores definidos sobre a variedade são exatamente as mesmas que as dos operadores definidos em \mathbb{R}^n .

A aproximação dos operadores diferenciais definidos sobre variedades que propomos a seguir baseia-se em resultados que permitem aproximar a matriz da métrica pela matriz identidade. Tais resultados serão apresentados para superfícies regulares em \mathbb{R}^3 a fim de facilitarmos a compreensão e visualização de resultados gráficos. No entanto, estes

valem para uma variedade qualquer, desde que esta cumpra os requisitos impostos para as superfícies, que são variedades de dimensão 2.

O resulta principal desta seção que anunciamos a seguir, diz respeito a parametrização de uma superfície S em uma vizinhança de um ponto $p \in S$ utilizando o plano tangente $T_p S$ à S em p .

Teorema 3.1. *Se p é um ponto de uma superfície regular S , é sempre possível, com uma escolha conveniente de coordenadas (x, y, z) , representar uma vizinhança de p em S na forma $z = f(x, y)$ de modo que $f(0, 0) = 0$, $f_x(0, 0) = 0$ e $f_y(0, 0) = 0$.*

Dada uma base ortonormal $\beta = \{\mathbf{u}, \mathbf{v}\}$ de $T_p S$, a partir do teorema acima obtemos a seguinte parametrização para S numa vizinhança de p

$$\mathbf{x}(u, v) = (u, v, f(u, v)), \tag{3.1}$$

onde u é a coordenada em \mathbf{u} , v é a coordenada em \mathbf{v} e $f(u, v)$ é a coordenada em \mathbf{n} , onde \mathbf{n} é o vetor normal à S em p . A função f é dada pela distância entre o ponto $(u, v) \in T_p S$ e o ponto na superfície que intersecta a reta perpendicular a $T_p S$ em (u, v) . A Figura 35 ilustra tal fato.

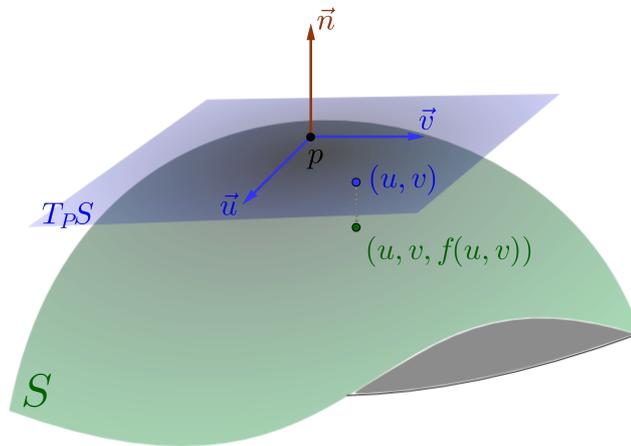


Figura 35 – Parametrização local da superfície S a partir de uma base do plano tangente à S em um ponto p .

Para esta parametrização a primeira forma fundamental de S assume a seguinte expressão

$$g = \begin{bmatrix} 1 + [\partial_u f(u, v)]^2 & \partial_u f(u, v) \partial_v f(u, v) \\ \partial_u f(u, v) \partial_v f(u, v) & 1 + [\partial_v f(u, v)]^2 \end{bmatrix}. \tag{3.2}$$

Se S é suficientemente suave, então para uma vizinhança conveniente de p tem-se que o valor da função $f(u, v)$ é pequena uma vez que o plano tangente aproxima localmente

a superfície. Mais ainda, a vizinhança pode ser escolhida de modo que os valores das derivadas parciais $\partial_u f(u, v)$ e $\partial_v f(u, v)$ também assumam valores pequenos para todo ponto na vizinhança. Ilustramos tal fato na Figura 36.

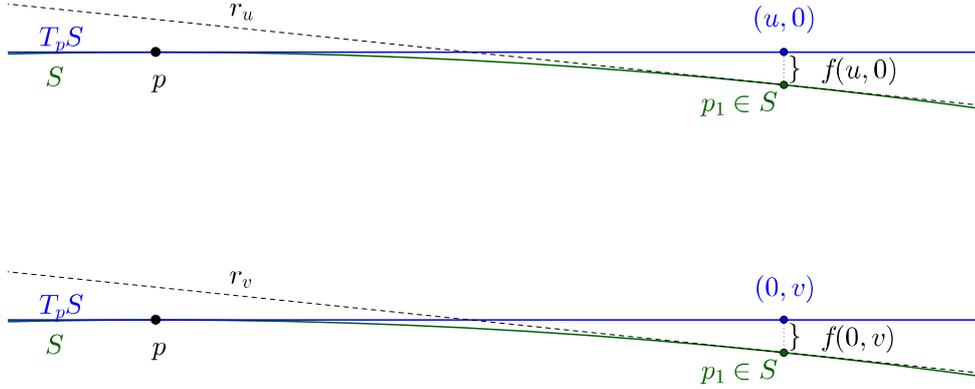


Figura 36 – Se S é suficientemente suave, então existe uma vizinhança de p tal que as derivadas parciais da função “altura” são pequenas. Na figura, as derivadas parciais $\partial_u f$ e $\partial_v f$ são as inclinações das retas r_u e r_v respectivamente.

Fazendo $\partial_u f(u, v) = \varepsilon_u$ e $\partial_v f(u, v) = \varepsilon_v$ temos que a primeira forma fundamental de S é dada por

$$g = \begin{bmatrix} 1 + \varepsilon_u^2 & \varepsilon_u \varepsilon_v \\ \varepsilon_u \varepsilon_v & 1 + \varepsilon_v^2 \end{bmatrix}. \quad (3.3)$$

Para os pontos na vizinhança descrita acima temos que ε_u e ε_v são suficientemente pequenos e podemos aproximar matriz da equação 3.3 pela matriz identidade. Assim dada uma função $f : S \rightarrow \mathbb{R}$ e um campo $F : S \rightarrow T_p S$, com $F = F^1 \mathbf{u} + F^2 \mathbf{v}$, onde $\beta = \{\mathbf{u}, \mathbf{v}\}$ é uma base ortonormal de $T_p S$, os operadores gradiente, divergente e laplaciano definidos sobre S podem ser aproximados das seguintes formas:

1. Gradiente

$$\nabla^S f \approx f_u \mathbf{u} + f_v \mathbf{v}, \quad (3.4)$$

2. Divergente

$$\operatorname{div}_S F \approx F_u^1 + F_v^2, \quad (3.5)$$

3. Laplaciano

$$\Delta_S f \approx f_{uu} + f_{vv}. \quad (3.6)$$

3.2 O Método SPH sobre Superfícies

Nesta seção definiremos alguns operadores diferenciais discretos sobre superfícies a partir do método SPH. Estas superfícies serão dadas como nuvens de pontos, ou seja, a entrada do nosso problema são as coordenadas de pontos em \mathbb{R}^3 sem nenhuma conexão entre eles. Este tipo de estrutura de fato pode ser considerado como um objeto matemático e computacional que se comporta como uma superfície (ALEXA et al., 2003; AMENTA; KIL, 2004). Consideramos como parte dos dados os vetores normais em cada ponto.

Os resultados apresentados na seção anterior mostram que uma boa escolha da base de $T_p S$ com a condição de S ser suficientemente suave, produzem boas aproximações para os operadores gradiente, divergente e laplaciano no sentido destes possuem uma expressão simples (como os operadores em \mathbb{R}^2 com coordenadas cartesianas). Mas observe que as derivadas direcionais que aparecem em tais operadores, ainda são avaliadas em uma vizinhança de p contida em S . Isto impossibilita a aplicação dos operadores SPH, pelo fato destes não estarem definidos em superfícies.

A hipótese de suavidade de S além de ajudar na simplificação das expressões dos operadores será usada para permitir que tais derivadas sejam avaliadas em $T_p S$, onde poderemos usar o SPH. Uma vez que S é suficientemente suave, para pontos numa vizinhança conveniente de p , a distância de p a $p_1 \in S$ medida sobre S é aproximadamente a distância de p a $\bar{p}_1 \in T_p S$, onde \bar{p}_1 é a projeção ortogonal de p_1 em $T_p S$ como mostra a Figura 37.

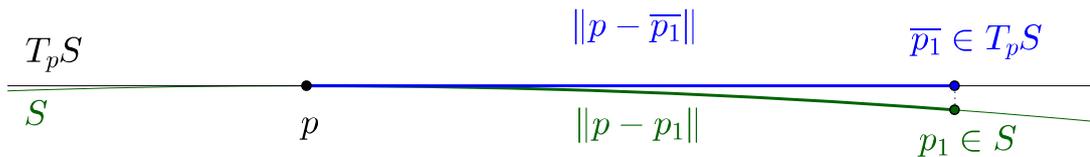


Figura 37 – Para uma vizinhança V_p de $p \in S$, S suficientemente suave, a distância entre p e um ponto $p_1 \in V_p$ é aproximadamente a distância entre p e a projeção ortogonal de p_1 em $T_p S$.

Sabemos pela propriedade 2.9 (simetria radial) que o núcleo é calculado levando em consideração apenas as distâncias entre as partículas. Portanto pelo que vimos acima, podemos calcular os operadores SPH num ponto $p \in S$ projetando seus vizinhos em $T_p S$. A hipótese de suavidade em geral é sempre satisfeita, porém para pontos de alta curvatura, a vizinhança pode se tornar muito pequena. Num domínio contínuo, isso não representa

problema, mas para um domínio discreto, uma vizinhança muito pequena pode ocasionar um problema devido a baixa quantidade de partículas no suporte do núcleo. Para se obter boas aproximações espera-se que nos pontos de alta curvatura a densidade de pontos da amostra seja muito maior que em pontos de baixa curvatura, o suficiente para garantir vizinhos numa vizinhança onde os argumentos apresentados acima façam sentido.

3.2.1 Definindo uma Base para $T_p S$

Seja S uma superfície regular, $p = (x_0, y_0, z_0) \in S$, $\vec{n}_p = (a, b, c)$ o vetor normal à S em p e $T_p S$ o plano tangente à S em p . Uma base $\{\vec{u}, \vec{v}\}$ ortonormal de $T_p S$ será calculada da seguinte forma:

1. Se $\vec{n}_p \neq \alpha \mathbf{e}_2$ então a interseção do plano gerado por \vec{n}_p passando por p e o plano vertical $y = y_0$ está bem definido e mais ainda, o resultado desta interseção é uma reta.
2. Tomamos \vec{u} um vetor unitário nessa interseção (há duas possibilidades).
3. Uma vez que \vec{u} esteja definido, definimos $\vec{v} = \frac{\vec{n}_p \times \vec{u}}{\|\vec{n}_p \times \vec{u}\|}$.

Se porém $\vec{n}_p = \alpha \mathbf{e}_2$, então $\vec{n}_p \neq \alpha \mathbf{e}_1$ e repetimos o argumento para o plano vertical $x = x_0$. Quando a colinearidade entre \vec{n}_p e \mathbf{e}_2 é verificada os planos coincidem, o que gera infinitas possibilidades para \vec{u} . Muito embora isso não represente um problema significativo, procuramos evitá-lo ao identificar quando tais vetores são colineares, pois assim mantemos sempre duas possibilidades para \vec{u} . Ilustramos a base para os planos tangentes ao Toro obtida pela metodologia descrita na Figura 38.

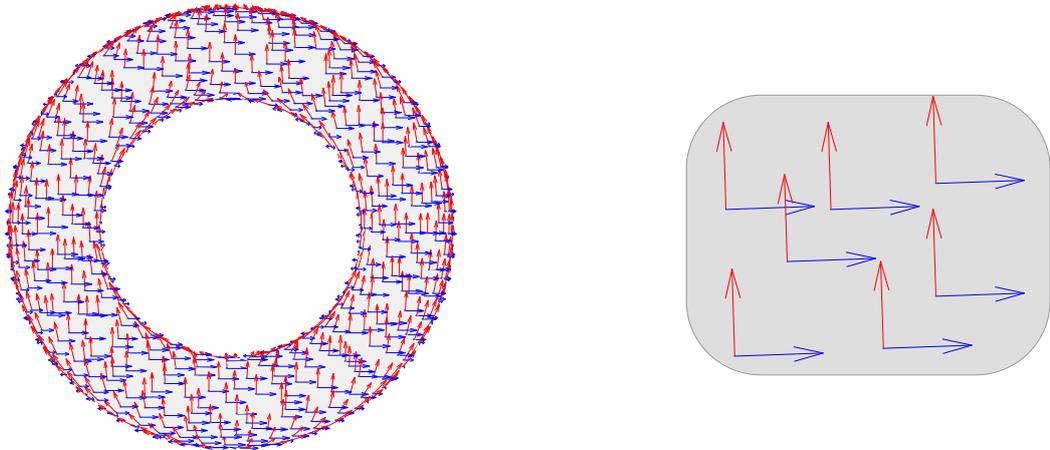


Figura 38 – Visualização da base para os planos tangentes ao Toro obtida pelo algoritmo descrito no texto.

3.2.2 Definindo uma Vizinhança em $p \in S$

Dada uma partícula \mathbf{x}_i na discretização de S , definiremos uma vizinhança de \mathbf{x}_i a partir da distância de \mathbb{R}^3 . Como o comprimento suave é pequeno, a distância sobre a superfície é aproximadamente a distância euclidiana entre os pontos. Porém a distância que é utilizada como critério para determinar a vizinhança não é a mesma utilizada no cálculo dos operadores pois para calcularmos os operadores, uma vez definida a vizinhança, utilizamos a distância calculada para a vizinhança projetada, ou seja, sobre o espaço tangente.

A fim de evitar que pontos próximos no sentido da distância euclidiana, porém distantes na superfície, sejam considerados vizinhos, um tratamento com a normal é feito. Assim para uma partícula \mathbf{x}_j pertencer a vizinhança de \mathbf{x}_i , \mathbf{x}_j deve pertencer ao suporte compacto de \mathbf{x}_i , ou seja, a distância euclidiana entre \mathbf{x}_i e \mathbf{x}_j deve ser menor que κh e o produto interno entre os vetores normais à superfície em \mathbf{x}_i e \mathbf{x}_j deve ser positivo. A Figura 39 ilustra a vizinhança de um ponto sobre a superfície Sausage. Verificamos que apenas pontos próximos sobre a superfície são considerados vizinhos, muito embora existam pontos próximos em relação à distância no espaço porém distantes se observados sobre a superfície.

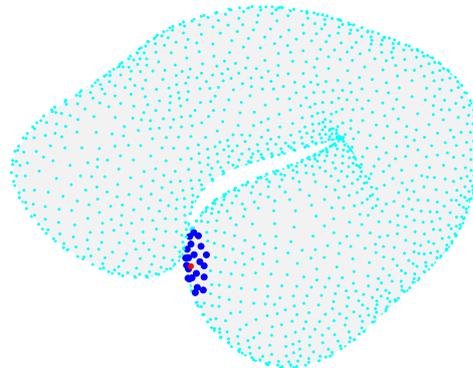


Figura 39 – Visualização dos vizinhos de um ponto sobre a superfície Sausage. Embora existam partículas sobre a Sausage que estão próximas em relação a distância em \mathbb{R}^3 eles não são considerados vizinhos pois quando medida sobre a superfície tais pontos não estão próximos o suficiente.

3.2.3 Definindo os Elementos de Área

Definiremos os elementos de área sobre superfícies a partir dos resultados apresentados na seção 2.2 do capítulo anterior, mais precisamente, tratam-se dos elementos de área numéricos. As superfícies que consideraremos neste trabalho são superfícies sem bordo, o que reduz o problema de inconsistência de partículas. No entanto, a ausência de bordo não soluciona completamente o problema de inconsistência de partículas, uma vez que este

também é gerado pela distribuição das partículas no domínio. Sendo assim, chamamos a atenção para o fato de que os elementos de área ainda assumem valores negativos.

A Figura 40 exibe os elementos de área obtidos a partir de uma distribuição uniforme com densidade constante e com densidade variável sobre a esfera. Na distribuição com densidade variável os elementos do hemisfério sul, que é mais denso, possuem valores menores que os elementos do hemisfério norte, que é menos denso. As áreas obtidas pelas somas de tais elementos são 12,6 para a densidade constante e 12,0 para a densidade variável, tais valores são boas aproximações para a área da esfera que é aproximadamente 12,6.

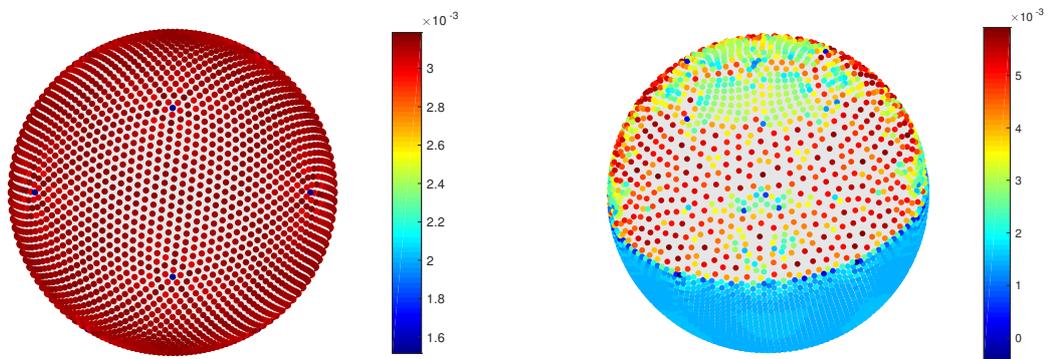


Figura 40 – Elementos de área numéricos para a esfera com distribuição uniforme com densidade constante (à esquerda) e com densidade variável (à direita).

3.2.4 Operadores Diferenciais Discretos

Temos todos os elementos necessários para definir os operadores diferenciais discretos sobre superfícies a partir do método SPH. Nesta seção apresentaremos as expressões que cada operador assume tendo em vista a metodologia desenvolvida.

Operador Gradiente SPH sobre Superfícies

Para definirmos o operador gradiente discreto de uma função f em uma nuvem de pontos que discretiza uma superfície, faremos uso da expressão 3.4 que é a versão contínua da aproximação. Dado um ponto \mathbf{x}_i na discretização de S e tendo definida a vizinhança V_i de \mathbf{x}_i , projetamos os pontos que pertencem a V_i em $T_{\mathbf{x}_i}S$, calculamos as distâncias dessas projeções à \mathbf{x}_i e mantemos o valor de $f(\mathbf{x}_j)$. Portanto temos

$$(\nabla^S f)_h \approx (f_u)_h \mathbf{u} + (f_v)_h \mathbf{v}. \quad (3.7)$$

Operadores Divergente SPH sobre Superfícies

O operador divergente aplica-se a um campo vetorial $F : S \rightarrow T_p S$. Em geral este campo está definido intrinsecamente em $T_p S$, não dependendo de escolha de coordenadas e neste caso

$$F(x, y, z) = (F_1(x, y, z), F_2(x, y, z), F_3(x, y, z)), \quad (3.8)$$

onde $(x, y, z) \in S$ e $F(x, y, z) \in T_p S$. Fixando porém uma parametrização $\mathbf{x}(u, v)$, segue que os vetores coordenados $\{\mathbf{x}_u, \mathbf{x}_v\} = \{(u_1, u_2, u_3), (v_1, v_2, v_3)\}$ formam uma base para $T_p S$ e escrevendo o campo F em termos desta base temos

$$F(u, v) = \bar{F}_1 \mathbf{x}_u + \bar{F}_2 \mathbf{x}_v = (\bar{F}_1 u_1 + \bar{F}_2 v_1, \bar{F}_1 u_2 + \bar{F}_2 v_2, \bar{F}_1 u_3 + \bar{F}_2 v_3), \quad (3.9)$$

onde as funções \bar{F}_i são tais que vale a igualdade entre os lados direitos das equações (3.8) e (3.9).

Podemos também definir um campo sobre uma superfície que dependa estritamente da parametrização. Para tal, escolhemos as “funções coordenadas” $F_1(x, y, z)$ e $F_2(x, y, z)$ do campo e, uma vez fixada uma parametrização $\mathbf{x}(u, v)$, definimos o campo F como sendo

$$F(u, v) = F_1(u, v) \mathbf{x}_u + F_2(u, v) \mathbf{x}_v. \quad (3.10)$$

Sempre que for possível definir uma parametrização e conseqüentemente uma base coordenada, definiremos F da segunda maneira. Se porém não for possível obter uma parametrização simples para a superfície, procederemos como no primeiro caso para obtermos o campo F .

Tendo esclarecido como definimos um campo sobre uma superfície, vamos agora definir o operador divergente discreto de um campo F . Dado um campo de vetores F sobre uma superfície S e uma partícula \mathbf{x}_i na discretização de S , o divergente de F em \mathbf{x}_i é obtido a partir do divergente do campo gerado pela projeção do campo F , apenas nas partículas vizinhas a \mathbf{x}_i , em $T_{\mathbf{x}_i} S$. Assim,

$$(\operatorname{div}_S F)_h(\mathbf{x}_i) \approx (\nabla \cdot \tilde{F})_h(\mathbf{x}_i), \quad (3.11)$$

onde \tilde{F} é o campo F projetado em $T_{\mathbf{x}_i} S$ numa vizinhança de \mathbf{x}_i .

Operador Laplace-Beltrami SPH

O operador Laplace-Beltrami SPH é definido de maneira análoga ao gradiente SPH sobre superfícies. Fixada uma partícula \mathbf{x}_i , projetamos as partículas consideradas vizinhas em $T_{\mathbf{x}_i} S$ e mantemos o valor de cada $f(\mathbf{x}_j)$. A partir da aproximação (3.6) temos

$$(\Delta^S f)_h \approx (f_u u)_h \mathbf{u} + (f_v v)_h \mathbf{v}. \quad (3.12)$$

Os operadores SPH Diferença e Taylor também são aplicáveis a superfícies, neste caso os novos operadores são obtidos a partir daqueles aplicados ao espaço tangente. Chamaremos os operadores discretos definidos acima apenas de operadores SPH sobre superfícies.

3.3 Operadores SPH sobre a Esfera

Apresentaremos nesta seção os resultados obtidos pelos operadores SPH sobre a esfera, pois esta cumpre as condições exigidas na formulação do método e temos os resultados analíticos, o que permite uma análise da consistência dos novos operadores. Com base nos resultados obtidos no capítulo dois, exibiremos a análise de consistência apenas para o operador SPH sobre variedades obtido pela correção CSPM. No entanto, apresentaremos o boxplot do erro pontual para os operadores SPH sobre variedades obtidos pelos operadores padrões e pelas demais correções. Faremos a análise de consistência dos operadores fixando a média de 27 vizinhos por partículas e variando a quantidade de partículas da discretização em 1002, 2012, 4032, 8672, 15872 e 32672 partículas. Exibimos o gráfico em escala logarítmica com as normas do máximo (\circ) e euclidiana ($*$) aplicadas aos erros absoluto (preto) e relativo (azul).

Gradiente SPH

Analisamos a seguir a consistência do operador gradiente SPH sobre a esfera. Para tal, avaliaremos o operador em quatro funções que possuem características distintas:

função linear

$$f(x, y, z) = x + y + z;$$

função não linear

$$f(x, y, z) = xyz;$$

função trigonométrica

$$f(x, y, z) = \cos(xz - \text{sen}(y)).$$

A Figura 41 ilustra os gráficos com as análises de consistência do operador laplaciano SPH sobre a esfera aplicado nas funções listadas acima.

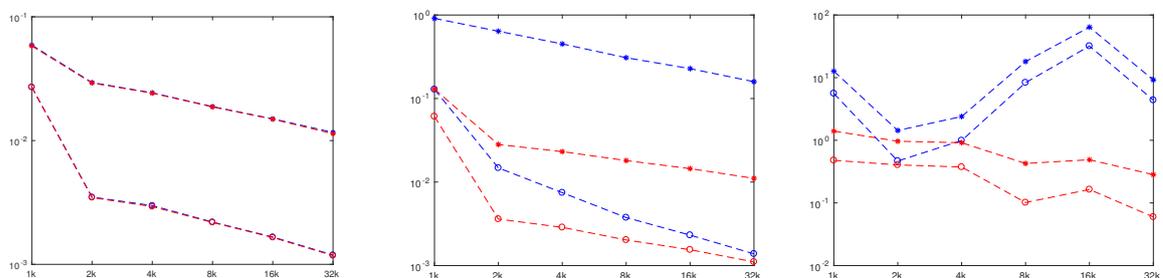


Figura 41 – Análise de consistência do operador gradiente SPH sobre a esfera obtido pela correção CSPM. As curvas em azul representam as normas do máximo (\circ) e euclidiana ($*$) aplicadas ao erro relativo da norma enquanto que as curvas em vermelho representam as normas do máximo e euclidiana aplicadas ao erro de fase.

Podemos observar que a função linear e a função não linear possuem uma estabilidade na convergência para ambos os erros, enquanto que a função trigonométrica apresenta uma certa instabilidade para o erro relativo, mas em relação ao erro absoluto tal convergência é observada.

Ilustramos na Figura 42 os boxplots com os erros da norma absoluto, da norma relativo e o erro de fase para aproximações do gradiente da função $f(x, y, z) = \cos(xz - \sin(y))$ sobre a esfera discretizada com 4032 partículas, obtidas pelos operadores SPH sobre a esfera.

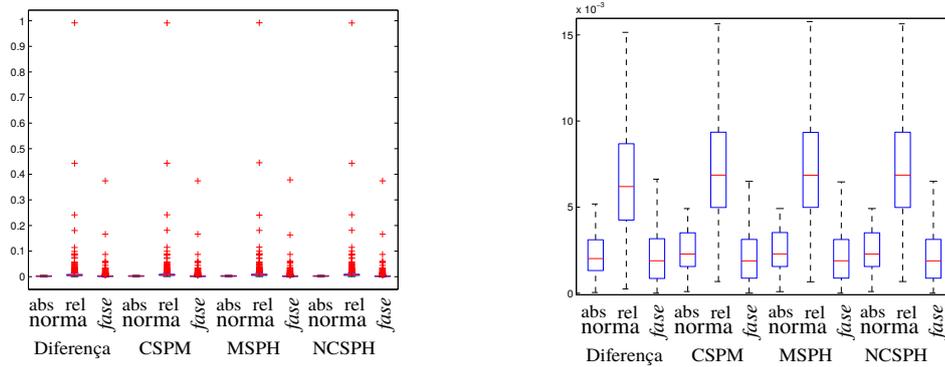


Figura 42 – Boxplot com os erros absolutos e relativos das aproximações do gradiente obtidos pelos operadores Diferença, CSPM, MSPH e NCSPH. À direita descartamos os outliers para facilitar a análise.

Ambos os operadores possuem um comportamento muito similar e destacamos na Figura 43 o operador gradiente CSPM. Exibimos a função analítica à esquerda, o gradiente analítico no centro e a aproximação obtida pelo operador CSPM à direita.

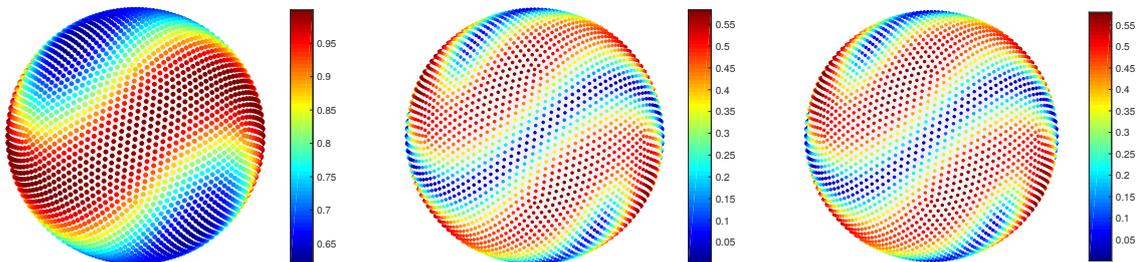


Figura 43 – Gradiente da função $f(x, y, z) = \cos(xz - \sin(y))$ sobre a esfera discretizada com 4032 partículas. À esquerda visualizamos a função, no centro o gradiente analítico e à direita o gradiente CSPM.

Divergente SPH

Utilizaremos a parametrização 1.1 para definir um campo sobre a esfera. Como já mencionamos na subseção 3.2.4, o nosso campo $F(u, v) = F^1(u, v)\mathbf{x}_u + F^2(u, v)\mathbf{x}_v$ será

dado em termos das funções coordenadas $F^1(x, y, z)$ e $F^2(x, y, z)$. Com isso temos que o divergente analítico de F será dado por

$$\operatorname{div}_S = \frac{\partial}{\partial u} F^1 + \frac{\partial}{\partial v} F^2 + \frac{1}{2\det(g)} F^1 \frac{\partial}{\partial u} (\det(g)) + \frac{1}{2\det(g)} F^2 \frac{\partial}{\partial v} (\det(g)). \quad (3.13)$$

Avaliaremos os campos cujas as funções coordenadas são:

funções lineares

$$F(x, y, z) = (x + y + z)\mathbf{x}_u + (x + y + z)\mathbf{x}_v;$$

funções não lineares

$$F(x, y, z) = (xy)\mathbf{x}_u + (yz)\mathbf{x}_v;$$

funções trigonométricas

$$F(x, y, z) = \operatorname{sen}(x + yz)\mathbf{x}_u + \operatorname{cos}(z - \operatorname{sen}(xy))\mathbf{x}_v.$$

Ilustramos a seguir os resultados obtidos pela análise de consistência dos operadores SPH aplicados nos campos acima.

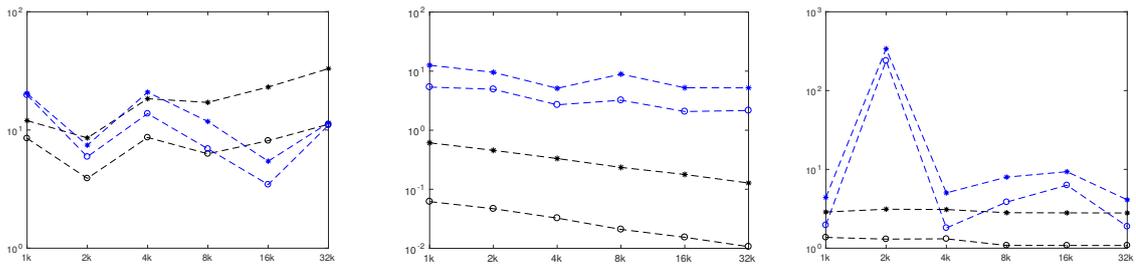


Figura 44 – As curvas em azul representam as normas do máximo (o) e euclidiana (*) aplicadas ao erro relativo enquanto que as curvas em preto representam as normas do máximo e euclidiana aplicadas ao erro absoluto.

Observe que o campo cujas funções coordenadas são funções trigonométricas apresenta um pico no erro relativo quando a quantidade de partículas da discretização é igual a 2012, isto é devido ao fato que para as partículas $x_1(-0, 96; 0, 25; 0, 09)$ e $x_2(-0, 96; -0, 25; -0, 09)$ o divergente analítico é igual a $3,29e-05$ enquanto que a aproximação obtida pelo operador CSPM é igual a $7,9e-03$. Verificamos pelo erro pontual que apenas tais partículas apresentam um erro com esta magnitude, e isto pode ser concluído a partir do gráfico, uma vez que a norma do máximo e a norma euclidiana apresentam valores muito próximos, ou seja, a soma dos valores diferentes do máximo é pequena.

Faremos agora uma análise pontual para o divergente do campo cujas coordenadas são funções trigonométricas $F(x, y, z) = \operatorname{sen}(x + yz)\mathbf{x}_u + \operatorname{cos}(z - \operatorname{sen}(xy))\mathbf{x}_v$. Discretizamos a esfera de maneira uniforme com 4032 partículas e avaliamos o boxplot com os erros absolutos e relativos para os operadores Diferença, CSPM, MSPH e NCSPH. A Figura 45 ilustra o divergente analítico de F à esquerda, a aproximação obtida pelo operador CSPM no centro e o boxplot contendo os erros absolutos e relativos para todos os operadores divergente SPH sobre a esfera.

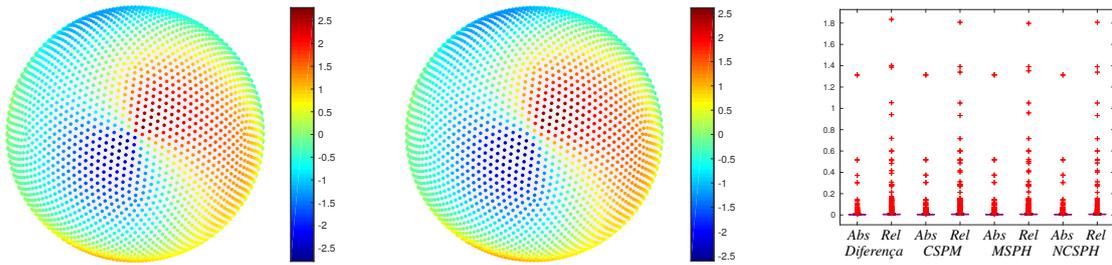


Figura 45 – Divergente do campo $F(x, y, z) = \text{sen}(x + yz)\mathbf{x}_u + \text{cos}(z - \text{sen}(xy))\mathbf{x}_v$ sobre a esfera discretizada com 4032 pontos. À esquerda o divergente analítico de F , no centro uma aproximação obtida pelo operador CSPM e à direita o boxplot com os erros absoluto e relativo dos operadores Diferença, CSPM, MSPH e NCSPH.

Laplace-Beltrami SPH

Esta seção encerra o estudo dos operadores SPH definidos sobre a esfera. Analisaremos as aproximações para o Laplace-Beltrami das funções

função linear

$$f(x, y, z) = x + y + z;$$

função não linear

$$f(x, y, z) = xyz;$$

função trigonométrica

$$f(x, y, z) = \text{cos}(xz - \text{sen}(y)).$$

Ilustramos na Figura abaixo os resultados da análise de consistência do operador Laplace-Beltrami SPH para as funções listadas acima.

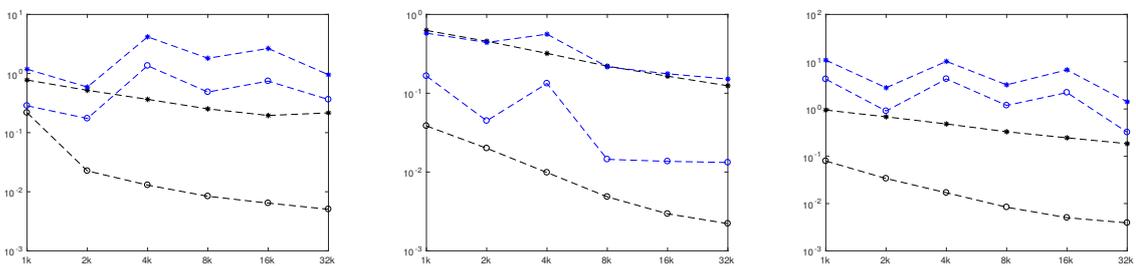


Figura 46 – Análise de consistência do operador Laplace-Beltrami SPH sobre a esfera obtido pela correção CSPM.

Observe que as normas para os erros absolutos possuem um padrão bem-comportado de decaimento, enquanto que para os erros relativos tal padrão não acontece, muito embora os valores se mantenham numa faixa. Para a função não linear, quando a discretização possui 4032 partículas o erro relativo máximo é igual à $1,3e-1$, tal erro não é tão significativo, porém como os valores dos erros para as demais quantidades de partículas são muito

pequenos, tal erro aparece como um pico no gráfico. Podemos notar também que, mesmo o operador Laplace-Beltrami sendo um operador de segunda ordem, as aproximações obtém bons resultados.

Faremos agora uma análise pontual do laplaciano da função trigonométrica a partir dos erros absolutos e relativos para uma discretização uniforme contendo 4032 pontos. A Figura 47 ilustra o laplaciano analítico de f , a aproximação obtida pelo operador CSPM e o boxplot com os erros para os operadores Taylor, CSPM, MSPH e NCSPH.

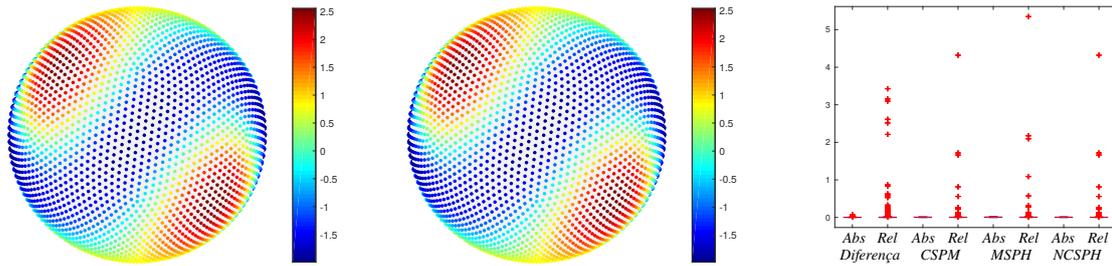


Figura 47 – Laplaciano da função $f(x, y, z) = \cos(xz - \text{sen}(y))$ sobre a esfera discretizada com 4032 pontos. À esquerda o laplaciano analítico de f , no centro uma aproximação obtida pelo operador CSPM e à direita o boxplot com os erros absoluto e relativo dos operadores Taylor, CSPM, MSPH e NCSPH.

3.4 Operadores SPH sobre Outras Superfícies

Nesta seção vamos apresentar o operador laplaciano SPH sobre outras superfícies, mais precisamente, para o Toro e para o Bitoro.

Toro

Assim como a esfera, o Toro é uma superfície que possui boas propriedades e por isso é a segunda na nossa lista de apresentação dos operadores estendidos. Uma vez que já fizemos a análise dos operadores gradiente e divergente sobre a esfera, neste caso apresentaremos os resultados da análise do operador Laplace-Beltrami. A nuvem de pontos que utilizaremos é uma discretização para o Toro com $R = 0,8$ e $r = 0,2$.

Vamos calcular o laplaciano para as mesmas funções que calculamos na esfera

função linear

$$f(x, y, z) = x + y + z;$$

função não linear

$$f(x, y, z) = xyz;$$

função trigonométrica

$$f(x, y, z) = \cos(xz - \text{sen}(y)).$$

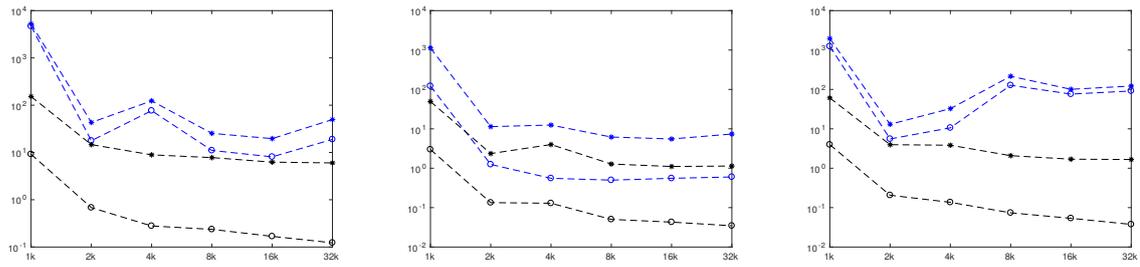


Figura 48 – Análise de consistência do operador Laplace-Beltrami SPH sobre o Toro obtido pela correção CSPM.

Ilustramos na Figura 49 uma análise pontual dos operadores laplaciano SPH Taylor, CSPM, MSPH e NCSPH sobre o Toro discretizado com 4800 partículas. Aproximamos o laplaciano da função não linear $f(x, y, z) = xyz$ e avaliamos os erros absolutos e relativos.

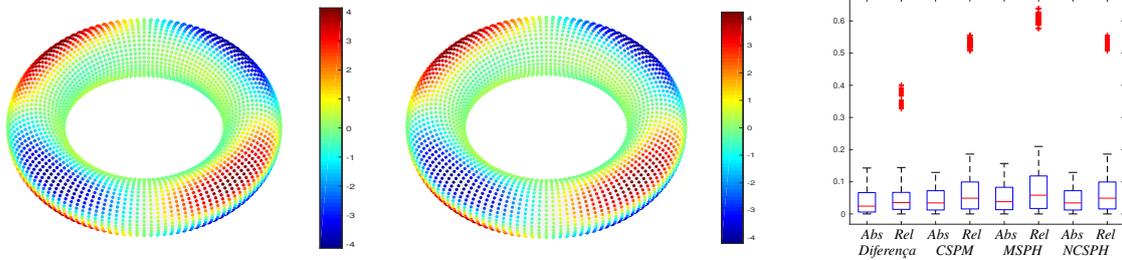


Figura 49 – Aproximação do Laplace-Beltrami para a função $f(x, y, z) = xyz$ obtida pelo operador CSPM. À esquerda temos o laplaciano analítico, no centro a aproximação e à direita o boxplot com os erros absolutos e relativos.

Chamamos a atenção o padrão do boxplot, que possui os outliers relativamente distante do whisker superior. Os valores outliers do erro relativo são assumidos pelas mesmas partículas em todos os operadores. Observe que para os boxplots com os erros absolutos não possuem valores outliers, e ainda, o operador padrão Taylor possui os menores erros relativos e retorna resultados muito próximos aos operadores corrigidos.

Bitoro

A superfície Bitoro não possui uma parametrização simples e portanto não temos disponíveis os operadores diferenciais analíticos sobre esta superfície. No entanto, fazendo uso da interpretação do operador podemos intuir sobre a aproximação obtida. O gradiente de uma função é um campo de vetores que aponta para as regiões de maior crescimento da função. O divergente de um campo de vetores, a grosso modo, identifica a movimentação do “fluxo”, ou seja, o divergente é positivo em uma região quando fluxo está saindo desta e negativo quando o fluxo está entrando. O laplaciano, por sua vez, sendo o divergente do gradiente identifica a concavidade da função, pois se uma região possui concavidade pra baixo então o campo gradiente está “entrando” na região e neste caso o divergente é

negativo, por outro lado se a região possui concavidade para cima então o fluxo do campo gradiente está “saindo” e consequentemente o divergente retorna valores positivos.

Vamos calcular o laplaciano sobre um Bitoro discretizado com 3070 pontos. A Figura 50 ilustra a aproximação para o laplaciano da função $f(x, y, z) = z\cos(xy)$ obtido pelo laplaciano CSPM.

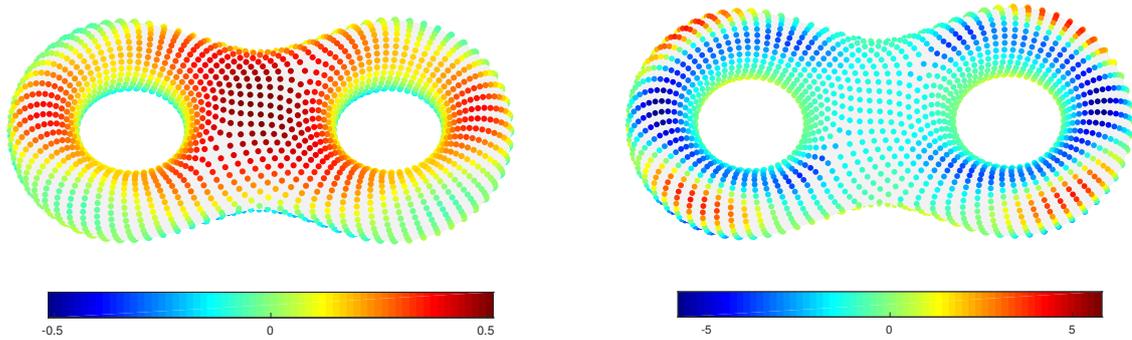


Figura 50 – Aproximação do laplaciano da função $f(x, y, z) = z\cos(xy)$ sobre o Bitoro, discretizado com 3070 partículas, obtido pelo operador CSPM. À esquerda a função analítica e à direita aproximação para o laplaciano.

3.5 Aplicações

Vamos utilizar o operador Laplace-Beltrami desenvolvido neste capítulo para resolver as equações da onda e do calor sobre a esfera.

3.5.1 Equação do Calor

A equação do calor é definida em uma superfície S de forma similar a formulação em \mathbb{R}^3 substituindo o operador laplaciano de \mathbb{R}^3 pelo operador Laplace-Beltrami de S (Δ_S)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = k\Delta_S u, \quad (3.14)$$

onde $k > 0$ é o coeficiente de condutividade.

Faremos a discretização temporal da derivada do lado esquerdo utilizando o método de Euler, e portanto temos a expressão

$$u(t + \Delta t, \mathbf{x}) = u(t, \mathbf{x}) + \Delta t k \Delta_S u(t, \mathbf{x}). \quad (3.15)$$

Para discretizar o operador Laplace-Beltrami de S utilizaremos o operador SPH com a sua notação usual para a aproximação por partículas. Sendo assim a equação da onda, agora discretizada no tempo e no espaço, possui a seguinte expressão

$$u(t + \Delta t, \mathbf{x}_i) = u(t, \mathbf{x}_i) + \Delta t k (\Delta_S u(t, \mathbf{x}_i))_h. \quad (3.16)$$

Utilizando uma notação mais compacta, chegamos a uma expressão final para a equação do calor discretizada

$$u_i^{t+1} = u_i^t + \Delta t k (\Delta_S u_i^t)_h. \quad (3.17)$$

Faremos uma aplicação da equação do calor sobre a esfera discretizada com 8672 partículas. Utilizaremos uma fonte de calor no polo norte e a manteremos fixa ao longo da evolução no tempo. A discretização no tempo é dada com os parâmetros $\Delta t = 0,001$, $\kappa = 1,5$ e para a aproximação do Laplace-Beltrami de u utilizaremos o operador CSPM como fizemos ao longo do capítulo.

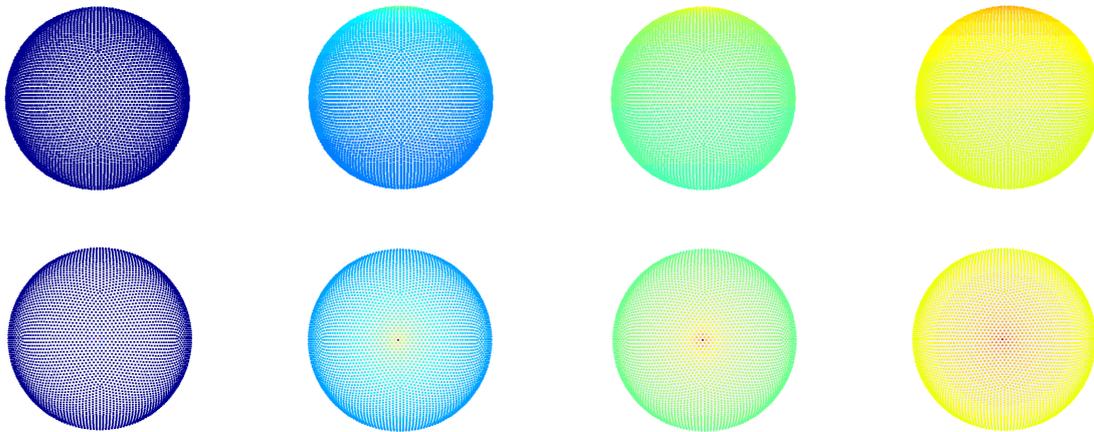


Figura 51 – Evolução da equação do calor sobre a esfera nos instantes de tempo real de simulação $t=0$, $t=3,5s$, $t=7s$ e $t=10s$. As figuras acima são do ponto de vista do equador e as figuras abaixo são do ponto de vista do polo norte.

3.5.2 Equação da Onda

Assim como a equação do calor, a equação da onda sobre uma superfície é definida a partir da equação da onda em \mathbb{R}^3 substituindo o laplaciano do \mathbb{R}^3 pelo Laplace-Beltrami da superfície, assumindo a expressão

$$\frac{\partial u}{\partial t^2} = c^2 \Delta_S u, \quad (3.18)$$

onde c é uma constante relacionada com a velocidade da onda.

Como a equação possui uma derivada temporal de segunda ordem, utilizaremos o método de diferenças finitas para discretizá-la obtendo assim a discretização temporal

$$u(t + 2\Delta t, \mathbf{x}) = -u(t, \mathbf{x}) + 2u(t + \Delta t, \mathbf{x}) + c^2(\Delta t)^2 \Delta_S u(t, \mathbf{x}). \quad (3.19)$$

Novamente utilizaremos o método SPH para aproximar o Laplace-Beltrami de S obtendo uma versão discreta para a equação já em notação reduzida

$$u_i^{t+2} = u_i^{t+1} - u_i^t + 2c^2(\Delta t)^2 (\Delta_S u_i^t)_h. \quad (3.20)$$

Faremos uma aplicação da equação da onda sobre a esfera com 8672 pontos. Apresentaremos dois estados iniciais distintos para o nosso sistema com $c = 0,5$, $\Delta t = 0,005$ e para a aproximação do Laplace-Beltrami de u utilizaremos o operador CSPM. No primeiro exemplo o sistema possui apenas uma fonte de propagação de onda no polo norte e no segundo exemplo o sistema possui duas fontes de propagação.

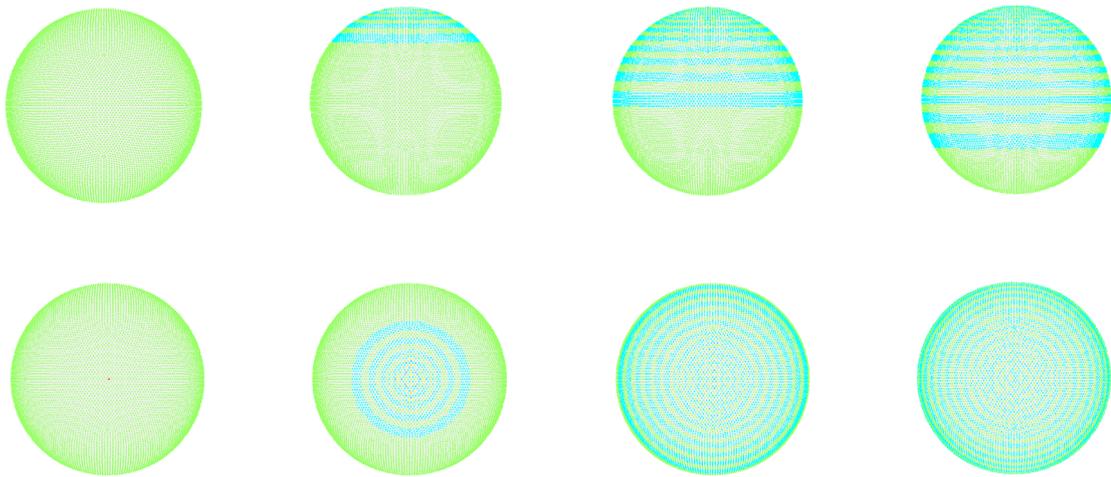


Figura 52 – Evolução da equação da onda sobre a esfera com uma fonte de propagação no polo norte nos instantes $t = 0s$, $t = 0,75s$, $t = 1,5s$ e $t = 2s$. As figuras acima são do ponto de vista do equador e as figuras abaixo do ponto de vista do polo norte.

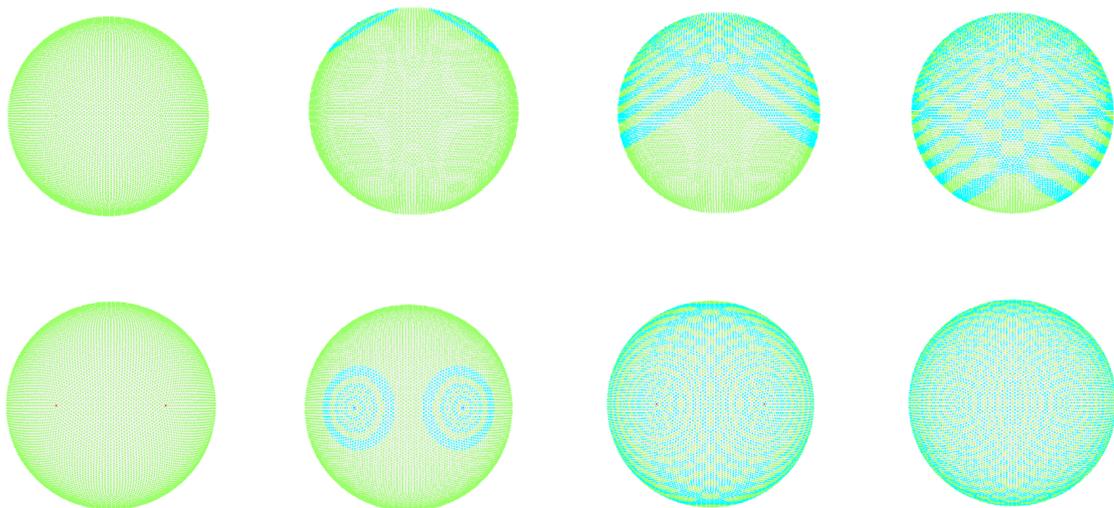


Figura 53 – Evolução da equação da onda sobre a esfera com duas fontes de propagação no hemisfério norte nos instantes $t = 0s$, $t = 0,75s$, $t = 1,5s$ e $t = 2s$. As figuras acima são do ponto de vista do equador e as figuras abaixo do ponto de vista do polo norte.

3.6 Limitações e Comentários

Como na formulação do método é exigido que a superfície seja suficientemente suave, quando tal condição não é satisfeita o método apresenta limitações. A seguir apresentamos o laplaciano obtido pelo operador CSPM sobre a superfície Sausage. Tal superfície possui uma região de alta curvatura. A Figura 54 ilustra a função $f(x, y, z) = xyz$ sobre a Sausage discretizada com 2652 partículas e a aproximação do laplaciano CSPM.



Figura 54 – À esquerda a função $f(x, y, z) = xyz$ sobre a Sausage, no centro o a aproximação para o laplaciano de f obtida pelo operador CSPM e à direita um zoom na região de alta curvatura.

A aproximação inicial parece não ser coerente com o resultado esperado, tendo em vista a interpretação do laplaciano, uma vez que esta parece retornar um valor constante. No entanto, isto acontece por que algumas partículas que estão na região de alta curvatura assumem valores muito discrepantes em relação as demais. Na Figura 54 à direita damos um zoom em tal região para identificarmos tais partículas. Observe que apenas algumas partículas assumem tais valores, o que sugere que as demais podem estar aproximando o laplaciano da função sobre a superfície.

A Figura 55 ilustra o mesmo resultado alterando a paleta de cores, utilizando a função “caxis” do MatLab e fixando o intervalo $[-2, 2]$.

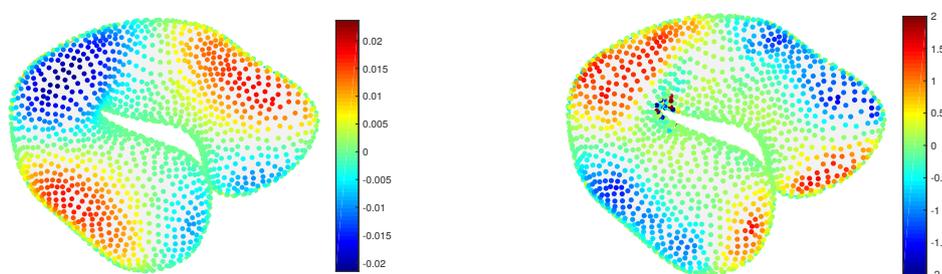


Figura 55 – À esquerda a função $f(x, y, z) = xyz$ sobre a sausage à direita temos uma aproximação para o laplaciano de f obtida pelo operador CSPM.

Como esta superfície não possui uma parametrização simples, de modo que possamos obter resultados analíticos, não temos como identificar o erro da aproximação. Porém, a

partir da interpretação do laplaciano de uma função, percebemos que de fato tal resultado é uma boa aproximação para o laplaciano de f sobre a superfície.

Uma possibilidade para contornar tal problema é requerer que regiões de alta curvatura possuam uma densidade maior de partículas em relação as regiões de baixa curvatura. A consequência de tornar densas certas regiões da amostra, é alterar a distribuição uniforme constante para uma distribuição uniforme com densidade variável. Mais ainda, para evitar problemas de inconsistência de partículas, o comprimento suave h deve depender da posição de cada partícula, ou seja, não pode ser constante.

Como a exigência de maior densidade de partículas em regiões de alta curvatura é equivalente a uma distribuição com densidade variável, ilustramos na Figura 56 o comportamento do operador laplaciano CSPM sobre a esfera com 5820 partículas distribuídas de maneira uniforme porém com densidade variável.

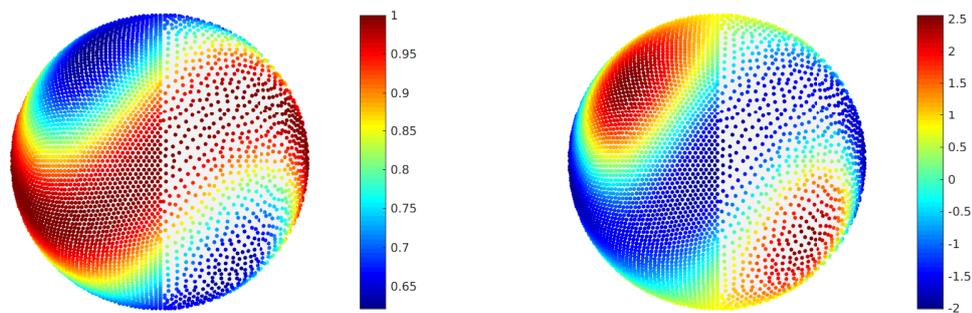


Figura 56 – À esquerda a função $f(x, y, z) = \cos(xz - \text{sen}(y))$ sobre a esfera com distribuição uniforme, porém com densidade variável. À direita temos a função f e à esquerda uma aproximação para o laplaciano de f obtida pelo operador CSPM.

Observe que o laplaciano CSPM sobre a esfera se comporta muito bem mesmo para o caso de distribuição uniforme com densidade variável. O laplaciano analítico de f pode ser observado na Figura 47.

Limitações

As principais limitações do método são:

1. Regiões de alta curvatura;
2. Elementos de área;
3. Problemas envolvendo expressões inversas dos operadores.

Comentários

1. A abordagem apresentada é muito similar ao trabalho “Solving differential equations on point clouds” (LIANG; ZHAO, 2013), no entanto não utilizamos nenhum método para calcular a função distância, nem mesmo o tensor métrico, pelo contrário, utilizamos resultados analíticos que nos permitiram evitar tais cálculos;
2. O trabalho “Mesh-free Discrete Laplace-Beltrami Operator” (PETRONETTO et al., 2010) também utiliza o espaço tangente da variedade para obter o operador Laplace-Beltrami SPH sobre superfícies, porém tal operador é uma aproximação do operador laplaciano do \mathbb{R}^3 . No nosso caso, os operadores são aproximações dos operadores analíticos sobre a variedade;
3. Muito embora tenhamos apresentados todos os nossos resultados sobre superfícies, os novos operadores podem ser obtidos sobre uma variedade qualquer. Nos limitamos às superfícies pelo suporte gráfico e pela falta de dados que representem uma variedade em dimensões maiores como nuvem de pontos.
4. As rotinas utilizadas ao longo do trabalho foram implementadas no MatLab[®] devido à facilidade de implementação. Utilizamos uma máquina com Processador Intel[®] Core[™] i5-3570 CPU @ 3.40GHz x 4 com 16Gb de Memória.

Conclusão

O método SPH é um método muito eficiente e aplicado nas mais diversas áreas. No entanto, possui limitações inerentes a sua formulação, problemas que surgem com a má distribuição das partículas e com a presença de fronteira no domínio. Para remediar tais limitações, correções têm sido propostas ao longo dos anos. Listamos nesta dissertação três propostas de correções que apresentam uma melhora considerável em relação aos operadores padrões que derivam diretamente da formulação do método. Quando comparadas entre si, nota-se que as correções possuem resultados muito similares de modo que a escolha do melhor operador deve ser feita tendo em vista o objetivo, por exemplo nesta dissertação foi escolhido o operador CSPM para definir novos operadores sobre variedades pois este têm um custo computacional menor que os demais, e como foi feita uma análise aumentando a quantidade de partículas, esta propriedade era necessária para otimizar o tempo das rotinas.

Os operadores SPH e suas correções são definidos no espaço euclidiano e extensões a outros espaços têm sido propostas. A abordagem proposta nesta dissertação, pelo conhecimento do autor é nova dentre as literaturas disponíveis. Muito embora um dos pontos fundamentais da formulação, a saber, o plano tangente é uma boa aproximação local para a variedade, seja utilizado em alguns trabalhos como (PETRONETTO et al., 2013; LI-ANG; ZHAO, 2013; MERCIER et al., 2015) o que diferencia este trabalho dos demais é a forma que se emprega tal propriedade. Aqui o plano tangente é utilizado para simplificar as expressões dos operadores diferenciais sobre a variedade a partir de uma base conveniente que torna a matriz da métrica a identidade, o que reduz os operadores sobre a variedade aos operadores definidos no espaço euclidiano. Finalmente, após uma aproximação analítica, utilizamos a propriedade de simetria radial do núcleo para a aproximação dos operadores no espaço tangente.

Os novos operadores apresentam bons resultados sobre a esfera, onde foi feita uma análise de consistência dos mesmos. Isto é devido ao fato da esfera possuir curvatura constante e em particular as amostras avaliadas possuíam um alto nível de uniformidade. No entanto, os resultados também foram satisfatórios para demais superfícies que possuem o mínimo de “boas propriedades”.

Como era de se esperar, o método estendido para variedades possui limitações. Algumas dessas limitações são inerentes à formulação do método, que requer que a superfície seja suficientemente suave, e também de cunho numérico, o que está relacionado com a quantidade de partículas da amostra e a distribuição da mesma. Regiões de alta curvatura exigem uma maior densidade de partículas para o bom funcionamento do método. Mas em geral, os dados são obtidos por meio de leitura óptica que extraem os pontos de uma determinada superfície gerando assim a nuvem de pontos e estes dados não distribuem a

densidade tendo em vista a curvatura das regiões. Criar rotinas que identifiquem e tornem densas regiões de alta curvatura é uma possibilidade para trabalhos futuros. Algumas dessas rotinas já existem na literatura (ALEXA et al., 2003), porém fazem uso do Diagrama de Voronoi, o que insere malha no método e a nossa abordagem é totalmente livre de malha.

Como os operadores definidos sobre as variedades surgem a partir dos operadores SPH definidos no espaço euclidiano, todas as características do método em \mathbb{R}^n são transferidos para os operadores sobre a variedade, por exemplo a influência do comprimento suave, do núcleo, a distribuição das partículas e os elementos de área. As limitações resultantes da existência de fronteiras em domínios em \mathbb{R}^n não são verificadas nas variedades sem bordo. Porém, como os elementos de área na variedade são obtidos da mesma maneira que em \mathbb{R}^n , estes apresentam valores negativos e isto interfere diretamente no método. Esta é uma limitação que requer uma atenção especial e pode ser tema de um trabalho futuro.

Uma das principais limitações do método é a dificuldade em se obter versões inversas dos operadores. Achar uma maneira de inverter tais operadores é o principal desafio posterior a este trabalho, uma vez que solucionando esta limitação tais operadores poderão ser utilizados para resolver o problema de Poisson, decomposição de campo de vetores, mais precisamente a decomposição de Helmholtz-Hodge e simulação de fluidos sobre variedades, aumentando em muito a aplicabilidade destes novos operadores.

Referências

- ADAMS, R. A. *Sobolev Spaces*. [S.l.]: Academic Press, 1975. Citado na página 33.
- ALEXA, M. et al. Computing and rendering point set surfaces. *IEEE Transactions on visualization and computer graphics*, IEEE, v. 9, n. 1, p. 3–15, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 75 e 93.
- AMENTA, N.; KIL, Y. J. Defining point-set surfaces. In: ACM. *ACM Transactions on Graphics (TOG)*. [S.l.], 2004. v. 23, n. 3, p. 264–270. Citado na página 75.
- BELYTSCHKO, T. et al. Meshless methods: an overview and recent developments. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, Elsevier, v. 139, n. 1, p. 3–47, 1996. Citado 2 vezes nas páginas 41 e 42.
- CARMO, M. P. do. *Geometria Diferencial de Curvas e Superfícies*. [S.l.]: SBM, 2012. Citado na página 26.
- CHEN, J.; BERAUN, J.; CARNEY, T. A corrective smoothed particle method for boundary value problems in heat conduction. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, John Wiley & Sons, Ltd, v. 46, n. 2, p. 231–252, 1999. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 56.
- COOK, R. L. Stochastic sampling in computer graphics. *ACM Transactions on Graphics (TOG)*, ACM, v. 5, n. 1, p. 51–72, 1986. Citado na página 40.
- DESBRUN, M.; GASCUEL, M.-P. Smoothed particles: A new paradigm for animating highly deformable bodies. In: *Computer Animation and Simulation'96*. [S.l.]: Springer, 1996. p. 61–76. Citado na página 37.
- EVANS, L. C. *Partial differential equations*. [S.l.]: American Mathematical Society, 2002. (Graduate studies in mathematics). Citado na página 31.
- FIGUEIREDO, D. G. de. *Análise de Fourier e equações diferenciais parciais*. [S.l.]: Instituto de Matemática Pura e Aplicada, 2000. Citado na página 35.
- FULK, D. A.; QUINN, D. W. An analysis of 1-d smoothed particle hydrodynamics kernels. *Journal of Computational Physics*, Academic Press, v. 126, n. 128, p. 165–180, 1996. Citado na página 38.
- GINGOLD, R. A.; MONAGHAN, J. J. Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars. *Monthly notices of the royal astronomical society*, Oxford University Press, v. 181, n. 3, p. 375–389, 1977. Citado na página 18.
- GRIGORYAN, A. *Heat kernel and analysis on manifolds*. [S.l.]: American Mathematical Soc., 2009. v. 47. Citado na página 29.
- HALTON, J. H. On the efficiency of certain quasi-random sequences of points in evaluating multi-dimensional integrals. *Numerische Mathematik*, Springer, v. 2, n. 1, p. 84–90, 1960. Citado na página 40.

- IHMSEN, M. et al. SPH Fluids in Computer Graphics. In: LEFEBVRE, S.; SPAGNUOLO, M. (Ed.). *Eurographics 2014 - State of the Art Reports*. [S.l.]: The Eurographics Association, 2014. ISSN 1017-4656. Citado na página 18.
- KUM, O.; HOOVER, W. G.; POSCH, H. A. Viscous conducting flows with smooth-particle applied mechanics. *Physical Review E*, APS, v. 52, n. 5, p. 4899, 1995. Citado na página 18.
- LIANG, J.; ZHAO, H. Solving partial differential equations on point clouds. *SIAM Journal on Scientific Computing*, SIAM, v. 35, n. 3, p. A1461–A1486, 2013. Citado 4 vezes nas páginas 19, 72, 91 e 92.
- LIBERSKY, L. D. et al. *High strain Lagrangian hydrodynamics: a three dimensional SPH code for dynamic material response*. [S.l.], 1993. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 46.
- LIMA, E. L. *Curso de Análise 2*. [S.l.]: IMPA, 2014. Citado na página 21.
- LIU, G.-R.; LIU, M. B. *Smoothed particle hydrodynamics: a meshfree particle method*. [S.l.]: World Scientific, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 38 e 42.
- LIU, W. K.; CHEN, Y. Wavelet and multiple scale reproducing kernel methods. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Wiley Online Library, v. 21, n. 10, p. 901–931, 1995. Citado na página 42.
- LIU, W. K.; JUN, S.; ZHANG, Y. F. Reproducing kernel particle methods. *International journal for numerical methods in fluids*, Wiley Online Library, v. 20, n. 8-9, p. 1081–1106, 1995. Citado na página 42.
- LUCY, L. B. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *The astronomical journal*, v. 82, p. 1013–1024, 1977. Citado na página 18.
- MERCIER, O. et al. Surface turbulence for particle-based liquid simulations. *ACM Transactions on Graphics (TOG)*, ACM, v. 34, n. 6, p. 202, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 72 e 92.
- MONAGHAN, J. J. Simulating free surface flows with sph. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 110, n. 2, p. 399–406, 1994. Citado na página 18.
- MORRIS, J.; MONAGHAN, J. A switch to reduce sph viscosity. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 136, n. 1, p. 41–50, 1997. Citado na página 49.
- MÜLLER, M.; CHARYPAR, D.; GROSS, M. Particle-based fluid simulation for interactive applications. In: EUROGRAPHICS ASSOCIATION. *Proceedings of the 2003 ACM SIGGRAPH/Eurographics symposium on Computer animation*. [S.l.], 2003. p. 154–159. Citado na página 37.
- PAIVA, A. et al. Particle-based viscoplastic fluid/solid simulation. *Computer-Aided Design*, Elsevier, v. 41, n. 4, p. 306–314, 2009. Citado na página 18.
- PAIVA, A. et al. Simulação de fluidos sem malha: Uma introdução ao método sph. *IMPA: Rio de Janeiro*, v. 27, 2009. Citado na página 41.

- PETRONETTO, F. *A Equação de Poisson e a Decomposição de Helmholtz-Hodge com Operadores SPH*. Tese (Doutorado) — PUC-Rio, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 49 e 55.
- PETRONETTO, F. et al. Mesh-free discrete laplace–beltrami operator. In: WILEY ONLINE LIBRARY. *Computer Graphics Forum*. [S.l.], 2013. v. 32, n. 6, p. 214–226. Citado 3 vezes nas páginas 19, 72 e 92.
- PETRONETTO, F. et al. Meshless helmholtz-hodge decomposition. *IEEE transactions on visualization and computer graphics*, IEEE, v. 16, n. 2, p. 338–349, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 46 e 91.
- RANDLES, P.; LIBERSKY, L. Smoothed particle hydrodynamics: some recent improvements and applications. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, Elsevier, v. 139, n. 1-4, p. 375–408, 1996. Citado na página 46.
- STRANEX, T.; WHEATON, S. A new corrective scheme for sph. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier, v. 200, n. 1, p. 392–402, 2011. Citado 3 vezes nas páginas 18, 62 e 64.
- WILLIAMSON, R. E.; CROWELL, R. H.; TROTTER, H. F. *Calculus of vector functions*. [S.l.]: Prentice Hall, 1972. Citado na página 25.
- ZHANG, G.; BATRA, R. Modified smoothed particle hydrodynamics method and its application to transient problems. *Computational mechanics*, Springer, v. 34, n. 2, p. 137–146, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 60.