



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA “JÚLIO DE MESQUITA FILHO”
Instituto de Geociências e Ciências Exatas
Campus de Rio Claro

Interpolação Integral e Estimadores de Densidade

Flaviani Cristina da Silva Cruz

2018



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA "JÚLIO DE MESQUITA FILHO"
Instituto de Geociências e Ciências Exatas
Campus de Rio Claro

Interpolação Integral e Estimadores de Densidade

Flaviani Cristina da Silva Cruz

Dissertação apresentada ao Programa de
Pós-Graduação – Mestrado Profissional em
Matemática Universitária como requisito
parcial para a obtenção do grau de Mestre

Orientador
Prof. Dr. Eraldo Pereira Marinho

2018

517.5 Cruz, Flaviani Cristina da Silva
C957i Interpolação integral e estimadores de densidade / Flaviani
Cristina da Silva Cruz. - Rio Claro, 2018
78 f. : il., figs., gráfs., fots.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista,
Instituto de Biociências de Rio Claro
Orientador: Eraldo Pereira Marinho

1. Análise funcional. 2. Interpolação integral. 3. Teoria de
distribuição. 4. Anisotropia. 5. SPH. I. Título.

Ficha Catalográfica elaborada pela STATI - Biblioteca da UNESP
Campus de Rio Claro/SP - Adriana Ap. Puerta Buzzá / CRB 8/7987

TERMO DE APROVAÇÃO

Flaviani Cristina da Silva Cruz

INTERPOLAÇÃO INTEGRAL E ESTIMADORES DE DENSIDADE

Dissertação APROVADA como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre no Curso de Pós-Graduação Mestrado Profissional em Matemática Universitária do Instituto de Geociências e Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, pela seguinte banca examinadora:

Prof. Dr. Eraldo Pereira Marinho
Orientador

Prof. Dr. Geraldo Nunes Silva
Departamento de Matemática Aplicada
Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas (IBILCE)
Universidade Estadual Paulista (UNESP), Campus de São José de Rio Preto

Profa. Dra. Suzete Maria Silva Afonso
Departamento de Matemática
Instituto de Geociências e Ciências Exatas (IGCE)
Universidade Estadual Paulista (UNESP), Campus de Rio Claro

Rio Claro, 07 de maio de 2018

*Aos meus filhos Anna Luiza e Guilherme que s ao a minha razão de existir e querer
ser sempre melhor a cada dia das nossas vidas.*

Agradecimentos

Primeiramente, gostaria de expressar minha sincera gratidão ao meu orientador, Professor Eraldo Pereira Marinho, pela confiança e paciência e por todo conhecimento transmitido no decorrer destes anos no Programa de Pós-graduação em Matemática.

Agradeço aos professores e funcionários do Departamento de Matemática do Instituto de Geociências e Ciências Exatas, IGCE, da Universidade Estadual Paulista Julio de Mesquita Filho, UNESP, Rio Claro.

Gostaria, também, de manifestar meu agradecimento aos membros da banca examinadora, Professor Geraldo Nunes Silva, do Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas, da UNESP, Campus de São José do Rio Preto, e à Professora Suzete Maria Silva Afonso, docente e coordenadora do nosso Programa de Pós-graduação em Matemática, pela leitura cuidadosa da versão submetida da dissertação, e pelas críticas construtivas e sugestões, durante a apresentação do presente trabalho de mestrado.

Expresso meu carinhoso agradecimento ao meu querido esposo, Edinaldo, pelo companherismo, amizade, paciência e apoio, e à minha querida mãe, Marilene, que sempre esteve presente em todos os momentos da minha vida. Sem os dois, este trabalho jamais poderia ser concretizado.

Resumo

Esta dissertação objetiva-se ao estudo analítico de técnicas de interpolação integral – fundamentadas na teoria de distribuição, também conhecida como teoria de funções generalizadas – e suas aplicações a reconstrução de imagens formadas por partículas (noise image) e à forma anisotrópica das equações da hidrodinâmica com partículas suavizadas, no inglês smoothed particle hydrodynamics, bem conhecida como SPH. A aplicação a processamento de imagens é um caso particular da técnica de interpolação utilizada em SPH. A imagem original é fragmentada na forma de partículas (em duas dimensões), aleatoriamente colhidas dos píxeis da imagem original, cuja densidade de probabilidade é proporcional à escala de cinza de cada píxel vizinho. Então é feita uma reconstrução da imagem através de interpolação anisotrópica, evidenciando que detalhes estruturais do contexto original são mais bem recuperados do que a correspondente técnica isotrópica. Apesar de não realizarmos diretamente simulações de mecânica dos fluidos neste trabalho, o que é proposto aqui é uma revisão das equações fundamentais da técnica de simulação SPH para o caso anisotrópico. As interpolações apresentadas neste trabalho foram feitas a partir de um núcleo normalizado de suavização, definido na forma de uma função regulada por partes, conhecida como cubic-B-spline, que é de classe analítica C^2 .

Palavras-chave: teoria de distribuição, interpolação integral, anisotropia, SPH.

Abstract

This master's dissertation aims at the analytical study of integral interpolation techniques – based on the theory of distribution, also known as generalized function theory – and its applications: the reconstruction of images formed by particles (noise image) and the anisotropic form of the fundamental equations of smoothed particle hydrodynamics, well known as SPH. The application to image processing is a particular case of the interpolation technique used in SPH. The original image is fragmented in the form of particles (in two dimensions), randomly drawn from the pixels of the original image, whose density is proportional to the gray scale of each neighboring pixel. Then a reconstruction of the image is made through anisotropic interpolation, evidencing that structural details of the original context are better recovered than the corresponding isotropic technique. Although we do not directly perform fluid mechanics simulations in this work, what is proposed here is a review of the fundamental equations of the SPH simulation technique for the anisotropic case. The interpolations presented in this work were made from a normalized smoothing kernel, defined as cubic-B-spline, which is of analytic class C^2 .

Keywords: distribution theory, integral interpolation, anisotropy, SPH.

Lista de Figuras

| | | |
|------|--|----|
| 2.1 | A função $ x $ no intervalo $[-1, 1]$ | 31 |
| 2.2 | Núcleo de interpolação $W_h(x)$, conforme Equação (2.48), adotando $h = 0,0625$ | 32 |
| 2.3 | Gráfico da forma suavizada de $ x $, obtidas pelas Equações (2.49) e (2.50). | 32 |
| 2.4 | Gráfico da função derivada do núcleo de acordo com (2.51). | 33 |
| 2.5 | Gráfico da derivada fraca $\frac{\partial \tilde{u}(x,y)}{\partial x}$ de $u(x,y) = x $ | 33 |
| 2.6 | Plot da cubic-B-spline da Equação (2.54) | 34 |
| 2.7 | Primeira derivada da cubic-B-spline | 35 |
| 2.8 | Segunda derivada da função núcleo cubic-B-spline | 36 |
| 2.9 | Terceira derivada da cubic-B-spline | 37 |
| 2.10 | Visualização 2D do cubic-B-spline | 37 |
| 2.11 | Densidade SPH estimada para 16384 partículas distribuídas no intervalo $[0,1]$, após uma densidade de probabilidade arbitrária. | 38 |
| 2.12 | Plotagem logaritmica do comprimento de suavização como função da posição das partículas para o exemplo mostrado na Figura 2.11. | 39 |
| 2.13 | Erro de normalização para a densidade SPH plotado na Figura 2.11. | 39 |
| 2.14 | Gradientes de densidade SPH para o exemplo dado na Figura 2.11. | 40 |
| 4.1 | Elipsoide que circunscreve uma massa de dados. Os vetores e_1 , e_2 e e_3 definem as direções dos autovetores do tensor covariância da massa de dados. O centro é a espectância dos pontos ilustrados. | 56 |
| 5.1 | Foto RGB da galáxia M51, tirada do Hubble Space Telescope. | 60 |
| 5.2 | Imagem da M51 com partículas colhidas por amostragem com probabilidade proporcional à escala de cinza da imagem anterior. | 60 |
| 5.3 | Interpolação convencional (isotrópica) sobre a amostragem aleatória ilustrada na figura anterior. | 61 |
| 5.4 | Similar à figura anterior mas utilizando núcleo de interpolação anisotrópico. | 61 |
| A.1 | Versão 1D da integral de Lebesgue. Diferentemente da integral de Riemann, os elementos de integração são faixas horizontais. | 76 |
| A.2 | Funções idênticas em quase todo domínio. | 77 |

Sumário

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Introdução | 17 |
| 1.1 | Notação e convenções adotadas | 18 |
| 1.2 | Estrutura do Trabalho | 19 |
| 2 | Teoria de Distribuição | 21 |
| 2.1 | Funções generalizadas e distribuições | 22 |
| 2.1.1 | Função teste | 22 |
| 2.1.2 | Distribuição | 23 |
| 2.1.3 | Derivada distribucional e derivadas clássicas | 24 |
| 2.1.4 | Derivadas distribucionais de ordem superior | 26 |
| 2.1.5 | Convergência da distribuição | 27 |
| 2.2 | Núcleos suavizantes no contexto de distribuições | 29 |
| 2.2.1 | Estudo de caso: solução fraca de equações diferenciais parciais . | 30 |
| 2.3 | Modelo de núcleo de suavização. A curva cubic-B-spline | 34 |
| 2.4 | Exemplo: estimador de densidade em uma dimensão | 38 |
| 3 | Interpolação Integral | 41 |
| 3.1 | Resolução espacial, isotropia e anisotropia | 42 |
| 3.2 | Formulação contínua | 43 |
| 3.3 | Formulação discreta | 44 |
| 3.3.1 | Interpolação por partículas | 44 |
| 3.3.2 | Estimadores de densidade. Janelas de Parzen | 45 |
| 3.3.3 | Interpolação adaptativa à densidade | 46 |
| 4 | Interpolação Anisotrópica | 49 |
| 4.1 | Espaços vetoriais anisotrópicos | 49 |
| 4.1.1 | Produto tensor e espaços tensores | 50 |
| 4.1.2 | Métrica tensorial | 53 |
| 4.1.3 | Métrica de Mahalanobis | 54 |
| 4.2 | Interpolação com núcleos elipsoidais | 55 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 5 | Aplicações | 59 |
| 5.1 | Estimador anisotópico de densidades para recuperação de imagens ruidosas | 59 |
| 5.2 | Reescrevendo as equações fundamentais da técnica SPH para o caso anisotrópico | 60 |
| 5.3 | Equações básicas da SPH anisotrópica | 62 |
| 5.4 | Equações SPH simetrizadas | 63 |
| 5.5 | Viscosidade artificial SPH | 65 |
| 5.6 | Sumário das equações anisotrópicas SPH | 67 |
| 5.7 | Modelo termodinâmico | 67 |
| 5.8 | Requisitos computacionais | 68 |
| 6 | Conclusão | 69 |
| | Referências | 71 |
| A | Integral de Lebesgue | 75 |

1 Introdução

O presente texto de dissertação concentra-se no estudo analítico da teoria de distribuição e funções generalizadas (BASTIAANS, 1993; ALPAY; BALL; GOHBERG, 1990; NATANSON, 1965; SAKHNOVICH, 1997), bem como suas aplicações às técnicas de interpolação integral e suas variantes discretas, utilizadas em métodos computacionais de reconhecimento de padrões (DUDA; HART; STORK, 2001), processamento de imagens e simulações computacionais, sejam essas por métodos em malhas espaciais ou mesmo baseadas em partículas, como é o caso da recém criada astrofísica computacional (MÜLLER, 2016; MARINHO, 1997, vide também as referências internas).

A simulação computacional tornou-se uma importante ferramenta para solucionar problemas em engenharia e ciências, testando e examinando as teorias, proporcionando uma complexidade física significativa, e ajudando na interpretação e até mesmo na descoberta de novos fenômenos. Apesar de seu êxito, os métodos basados em malha apresentam dificuldades que limitam sua aplicação em vários tipos de problemas complexos tais como os de superfícies livres, fronteiras deformáveis, interfaces móveis e deformações extremamente grandes.

Além disso, há dificuldade em tempo e custo computacional para fazer uma malha de qualidade para geometrias complexas. Durante as últimas quatro décadas, vários novos métodos de simulação sem malha, baseados somente em partículas, foram objeto de grande atenção.

Dos métodos de simulação de hidrodinâmica baseados em partículas destaca-se a técnica, conhecida na literatura, em inglês, como *Smoothed Particle Hydrodynamics* (SPH), originalmente introduzida em dois trabalhos independentes por Lucy (LUCY, 1977) e o outro por Gingold e Monaghan em (GINGOLD; MONAGHAN, 1977).

A técnica SPH tem recebido grandes inovações ao longo desses anos, e, nos dias atuais, a técnica é utilizada não somente em astrofísica computacional, mas também vem ganhando espaço na mecânica dos fluidos computacional (MONAGHAN, 2012).

Na modelagem computacional de SPH, o fluido é representado por amostragem estatística, através de partículas. Essas representam dinamicamente as propriedades intrínsecas do fluido. Cada uma dessas partículas está localizada no centro de um elemento de volume, definido primariamente como o volume da menor região esférica (ou elipsoidal, no nosso caso) que circunscreve os k -vizinhos mais próximos (no inglês,

k -nearest neighbors, kNN) da referida partícula.

As partículas que modelam o fluido são denominadas partículas SPH, e essas interagem entre si através de forças hidrodinâmicas, obtidas das equações de interpolação, conhecidas como equações SPH. Assim, o problema do fluido passa a ser equivalente ao problema de n -corpos, onde as forças internas do fluido são substituídas por forças de ação a distância de alcance limitado pelo tamanho da região kNN (GINGOLD; MONAGHAN, 1977; HERNQUIST; KATZ, 1989; MARINHO, 1997, e referências internas).

Portanto, a técnica SPH é inerentemente lagrangiana e dispensa a utilização de malhas 3D, como é o caso dos, computacionalmente complexos, métodos de elementos finitos, muito empregadas em problemas de engenharia (HOCKNEY; EASTWOOD, 1988). Ainda assim, é possível combinar as equações SPH com tais técnicas de malhas (MONAGHAN, 2012, por exemplo).

Em meados dos anos de 1990, surgiram versões adaptativas anisotrópicas de SPH. Em especial os trabalhos pioneiros de Owen, Villumsen, Shapiro e Martel (MARTEL et al., 1993; OWEN et al., 1998, daqui em diante, denominamos o método ASPH) que introduziram o conceito de SPH anisotrópico, pela simples substituição do parâmetro de suavização, h , que é um escalar, por um tensor de suavização \mathbf{H} , representado em coordenadas cartesianas, fixada uma base desse espaço, na forma de uma matriz 3×3 .

Uma crítica à técnica ASPH é que o tensor de suavização não é conhecido *a priori*, mas é inicialmente esférico, independentemente da possível correlação espacial entre as partículas da simulação. Somente ao longo de vários passos de integração temporal é que o tensor manifesta seu teor anisotrópico, em decorrência das componentes do tensor taxa de deformação do fluido (THOMPSON, 1972), representado por partículas.

Assim, um dos objetivos do presente trabalho de mestrado é o de propor uma primeira modificação na técnica ASPH, mesmo que teórica, conforme proposta pelo meu orientador em publicações anteriores (MARINHO; ANDREAZZA, 2010; MARINHO, 2014). Na presente abordagem, o tensor de suavização, \mathbf{H} , da ASPH, é substituído pelo tensor de covariância, $\mathbf{\Sigma}$, que é estimado sobre a região anisotrópica, dos k -vizinhos mais próximos, conforme o método introduzido por Marinho e Andrezza (MARINHO; ANDREAZZA, 2010).

1.1 Notação e convenções adotadas

Escalares serão representados por letras em caracteres itálicos, como, por exemplo, a , b etc. Vetores, tensores e matrizes serão representados em caracteres negritos como, por exemplo, \mathbf{a} , \mathbf{b} etc. Vetores unitários são especialmente representados de forma similar aos vetores ordinários, mas utilizando a notação chapéu, como, por exemplo, $\hat{\mathbf{e}}$.

1.2 Estrutura do Trabalho

A estrutura do restante do material discutido na presente dissertação é feita como segue:

Um estudo das funções generalizadas e a teoria das distribuições será feito no Capítulo 2. Os conceitos estudados no Capítulo 2 circunstanciam as técnicas de interpolação integral e de estimadores de densidade, cuja versão isotrópica, discretizada por partículas, será discutida no Capítulo 3. A versão anisotrópica de interpolação por partículas será apresentada no Capítulo 4.

No Capítulo 5, fazemos uma breve aplicação de estimadores de densidade anisotrópicos num problema simples de recuperação de imagem a partir de uma distribuição bidimensional de partículas, aleatoriamente colhidos de uma imagem de referência, cuja probabilidade *a priori* de escolha é proporcional à intensidade de cinza da imagem. Ainda neste capítulo, consideraremos um estudo de caso sobre a versão anisotrópica da técnica de simulação SPH, utilizando o conceito de árvores octais de covariância (MARINHO; ANDREAZZA, 2010; MARINHO, 2014), reescrevendo equações SPH de conservação de movimento para esse caso particular, baseados em vizinhanças anisotrópicas por covariância.

Os comentários conclusivos sobre o trabalho serão discutidos no Capítulo 6.

2 Teoria de Distribuição

Para chegarmos na definição de interpolação por núcleo, seja esta interpolação integral ou discreta, precisamos rever os fundamentos teóricos da teoria de distribuição. Neste caso, a função núcleo de suavização é um caso particular de funções generalizadas.

As funções generalizadas são aplicadas especialmente em física e engenharia, tais processos podem ser naturais ou mesmo resultantes da dinâmica social como, por exemplo, o comportamento do mercado de ações em função de diversas variáveis macroeconômicas (MANTEGNA; STANLEY, 1999, vide também as referências internas) ou mesmo projeções sobre resultados de eleições através de aprendizado de máquina (DUDA; HART; STORK, 2001) a partir do histórico de eleições prévias com base em diversas variáveis sociais.

Na matemática do século XIX, surgiram, informalmente, conceitos que fomentaram a teoria das funções generalizadas. Por exemplo, na definição da função de Green, na transformada de Laplace e na teoria de Riemann das séries trigonométricas, sendo que estas ainda não eram necessariamente a forma elegante da série generalizada de Fourier.

O uso intensivo da transformada de Laplace na engenharia levou ao uso heurístico de métodos simbólicos, chamados de cálculo operacional, que utilizaram séries divergentes, estes métodos tinham uma má reputação do ponto de vista da matemática pura.

O termo “distribuição” é uma generalização do conceito de função. A teoria das distribuições foi desenvolvida por Sergei Sobolev (1936) a fim de manipular determinadas singularidades que surgem na física matemática, tais como na mecânica quântica, em problemas de fenômenos de transporte em geral, onde podem ocorrer singularidades. Por exemplo, a distribuição delta de Dirac é adequada para descrever distribuição de grandezas infinitamente concentradas, tais como massa ou carga elétrica pontuais. Curiosamente, de tais singularidades é possível abstrair propriedades íntegro-diferenciais como, por exemplo, a função de Green, $\mathcal{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, para o problema gravitacional

$$\mathcal{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (2.1)$$

cuja laplaciana $\nabla^2\mathcal{G}$ resulta na distribuição Delta de Dirac

$$\nabla^2\mathcal{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.2)$$

que é abstraída como uma função densidade tridimensional de uma massa unitária, infinitamente concentrada no ponto \mathbf{r}' , sendo esta nula em todos os pontos $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$. Contudo, a integral volumétrica da função densidade, em todo espaço, inclusive a singularidade, é unitária

$$\int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dx^3 = 1. \quad (2.3)$$

Se $A : \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}$ é uma função em todo espaço, então a seguinte identidade é válida

$$\int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') A(\mathbf{r}') dx'^3 = A(\mathbf{r}). \quad (2.4)$$

O mesmo ocorre para as derivadas espaciais, por exemplo, o gradiente de A mesmo sem computar essas derivadas diretamente sobre A mas, somente sobre δ em cada elemento diferencial de integração

$$\int [\nabla' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] A(\mathbf{r}') dx'^3 = \nabla A(\mathbf{r}). \quad (2.5)$$

Contudo, $\nabla \delta$ é contraintuitivo nos padrões clássicos do cálculo diferencial e integral.

Não existe função ordinária que satisfaça as propriedades da distribuição Delta. No entanto, sendo as integrais acima interpretadas como funcionais, é possível descrever a densidade, $\rho(\mathbf{r})$, de uma massa pontual, m , localizada no ponto \mathbf{r}' , como uma distribuição delta de Dirac

$$\rho(\mathbf{r}) = m \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.6)$$

Uma distribuição, ou função generalizada, é uma forma linear contínua F no espaço \mathbb{V} de funções complexas

$$F : \mathbb{V} \mapsto \mathbb{V}. \quad (2.7)$$

Isto significa que uma distribuição é uma transformação F que associa a toda função teste $f \in \mathbb{V}$ uma função transformada $\tilde{f} \in \mathbb{V}$, tal que o escalar complexo $\tilde{f}(z)$ é obtido de f e F pela seguinte convolução

$$\tilde{f}(z) = \int_{\mathbb{C}} F(z - z') f(z') dz'. \quad (2.8)$$

O conjunto das distribuições com suas correspondentes relações é portanto o espaço dual topológico \mathbb{V}^\dagger do espaço \mathbb{V} das funções teste.

A definição formal de função generalizada será feita na seção seguinte deste capítulo.

2.1 Funções generalizadas e distribuições

2.1.1 Função teste

No estudo das funções generalizadas é necessário que se introduza o conceito de espaço das funções das funções infinitamente diferenciáveis no \mathbb{R}^n , que possuem suporte

fechado $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, conforme a definição a seguir:

Definição 2.1. *Define-se espaço $C_c^\infty(\Omega)$ a coleção das funções complexas φ no \mathbb{R}^n , que sejam indefinidamente diferenciáveis em todo o domínio, isto é, $\varphi \in C^\infty$, e que tenham como suporte a região $\Omega \subset \mathbb{R}^n$. Simbolicamente:*

$$C_c^\infty(\Omega) = \{\varphi : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{C} \mid \Omega = \text{supp}(\varphi)\} \quad (2.9)$$

Definição 2.2. *Define-se função teste, φ , toda função pertencente ao espaço $C_c^\infty(\Omega)$, que tenha Ω como suporte compacto.*

Convém notar que as funções teste correspondem à família das boas funções de Borel. Essas últimas são funções, cujas derivadas de qualquer ordem, inclusive a ordem zero, que é a própria função, tendem para zero no infinito, ou se tratando de funções teste, todas suas derivadas são nulas no contorno do suporte compacto, conforme enunciado no seguinte teorema:

Teorema 2.1. *Seja $\varphi(x_1, \dots, x_n)$ uma função teste, cujo suporte é uma n -bola \mathcal{B}^n , centrada na origem. Então, a derivada de φ com respeito a qualquer das coordenadas x_j , $j = 1, \dots, n$, de um ponto $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ do \mathbb{R}^n , é nula no contorno de \mathcal{B}^n , que é a hipersfera $\mathcal{S}^{n-1} = \partial\mathcal{B}^n$.*

Prova: Decorre imediatamente do fato de φ ser uma boa função de Borel ■

2.1.2 Distribuição

As distribuições são especialmente úteis quando o objetivo de um problema é o de suavizar funções com variações espúrias, ou mesmo uma categoria de funções generalizadas, compostas de singularidades, denominadas (do inglês) *steepy functions*, bem como o de remover possíveis descontinuidades inerentes a um modelo matemático.

Para darmos significado ao propósito da definição da função teste, é necessário primeiramente que o conceito de distribuição seja conhecido:

Definição 2.3. *Define-se distribuição o seguinte funcional:*

$$\langle f, \varphi \rangle(\mathbf{x}) \equiv \int_{\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}') \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') dx'^m, \quad (2.10)$$

onde f é uma função complexa, ou mesmo real, definida num domínio convexo, $\mathbb{D} \subseteq \mathbb{R}^n$, e $\varphi \in C_c^\infty(\Omega)$ é uma função teste.

Observação 2.1. Se tivermos $\varphi_1, \varphi_2 \in C_c^\infty(\Omega)$, e o escalar $\lambda \in \mathbb{C}$, então temos as seguintes propriedades:

1. $\langle f, \varphi_1 \rangle(\mathbf{x}) + \lambda \langle f, \varphi_2 \rangle(\mathbf{x}) = \langle f, \varphi_1 + \lambda \varphi_2 \rangle(\mathbf{x});$

2. Se $f = 0$, para todo $\mathbf{x} \in \mathbb{D}$, então $\langle 0, \varphi \rangle(\mathbf{x}) = 0$.

Esta última observação induz um conceito mais abrangente, que é o de espaço das distribuições, definido a seguir:

Definição 2.4. *Seja \mathcal{F} o espaço das funções complexas, ou mesmo reais, definidas sobre regiões convexas do \mathbb{R}^n , ou seja, $f \in \mathcal{F} \iff f : \mathbb{D} \mapsto \mathbb{C}$, com $\mathbb{D} \subseteq \mathbb{R}^n$ e \mathbb{D} é uma região convexa. Um funcional linear contínuo, $\langle \cdot, \varphi \rangle : \mathcal{F} \mapsto \mathbb{C}$, com $\varphi \in C_c^\infty(\Omega)$, é dito o espaço das distribuições em Ω , e é denotado como $\tilde{D}(\Omega)$.*

Proposição 2.1. *O espaço $\tilde{D}(\Omega)$ é um espaço vetorial sobre o corpo dos complexos.*

Prova: Vide Observação 2.1 ■

2.1.3 Derivada distribucional e derivadas clássicas

Definição 2.5. *Seja a distribuição $\langle f, \varphi \rangle \in \tilde{D}(\Omega)$. Define-se derivada distribucional de f , também conhecida como derivada fraca de f , o seguinte vetor de $\tilde{D}(\Omega)$:*

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial x_j}, \varphi \right\rangle(\mathbf{x}) \equiv \int_{\mathbb{D}} \frac{\partial f(\mathbf{x}')}{\partial x'_j} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') dx'^m. \quad (2.11)$$

A seguir, enunciamos o teorema de regularização, que garante que a derivada fraca de f , com respeito a alguma coordenada de $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, equivale à derivada clássica da distribuição $\langle f, \varphi \rangle$.

Teorema 2.2. *Sejam $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{C}^3$ contínua e diferenciável, com suporte compacto $V = \text{supp}(f)$, e a função teste φ é par: $\varphi(\mathbf{x}) = \varphi(-\mathbf{x})$. Então, a derivada fraca de f pode ser diretamente computada como sendo a derivada clássica da sua distribuição $\langle f, \varphi \rangle$:*

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial x_j}, \varphi \right\rangle \equiv \frac{\partial \langle f, \varphi \rangle}{\partial x_j}. \quad (2.12)$$

Prova: Pela Definição 2.5, temos

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial x_j}, \varphi \right\rangle(\mathbf{x}) = \int_V \frac{\partial f(\mathbf{x}')}{\partial x'_j} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') dx'^m. \quad (2.13)$$

Expandindo a derivada parcial no integrando da equação anterior (pela regra da cadeia), temos

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial f}{\partial x_j}, \varphi \right\rangle(\mathbf{x}) &= \int_V \frac{\partial}{\partial x'_j} \left[f(\mathbf{x}') \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \right] dx'^m \\ &- \int_V f(\mathbf{x}') \frac{\partial}{\partial x'_j} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') dx'^m. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Lembrando que um dos requisitos da função teste é que a mesma tenha suporte compacto, $\Omega_{\mathbf{x}}$ com centro em \mathbf{x} :

$$\Omega_{\mathbf{x}} = \text{supp} [\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] = \overline{\{\mathbf{x} \mid \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \neq 0\}}, \quad (2.15)$$

onde \bar{A} é o fecho da região A (FOLLAND, 1999).

Como, por hipótese, φ é par, ou seja, $\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \varphi(\mathbf{x}' - \mathbf{x})$, então

$$\frac{\partial}{\partial x'_j} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = -\frac{\partial}{\partial x_j} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (2.16)$$

Portanto, reescrevemos a integral anterior com o domínio de integração um pouco mais restrito:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial f}{\partial x_j}, \varphi \right\rangle(\mathbf{x}) &= \int_{V \cap \Omega_{\mathbf{x}}} \frac{\partial}{\partial x'_j} \left[f(\mathbf{x}') \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \right] dx'^m \\ &+ \int_{V \cap \Omega_{\mathbf{x}}} f(\mathbf{x}') \frac{\partial}{\partial x_j} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') dx'^m. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Considerando o comportamento analítico da função teste nas fronteiras da interseção do suporte compacto $V_{\mathbf{x}}$ com o domínio Ω , digamos $V \cap \Omega_{\mathbf{x}}$, temos que tecer as seguintes considerações:

1. $V \cap \Omega_{\mathbf{x}} = V_{\mathbf{x}}$, ou seja, $V_{\mathbf{x}} \subseteq \Omega$. Neste caso, como a função teste, bem como sua primeira derivada, desaparecem no contorno do compacto, $\partial\Omega_{\mathbf{x}}$, temos, pelo teorema de Green, que

$$\int_{\Omega_{\mathbf{x}}} \frac{\partial}{\partial x'_j} \left[f(\mathbf{x}') \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \right] dx'^m = \int_{\partial\Omega_{\mathbf{x}}} f(\mathbf{x}') \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \mathbf{e}_j^T dx'^{m-1} = 0, \quad (2.18)$$

onde $\mathbf{e}_j^T dx'^{m-1}$ é análogo a um elemento de área no \mathbb{R}^n , projetado na direção do unitário \mathbf{e}_j .

2. $V \cap \Omega_{\mathbf{x}} \neq \Omega_{\mathbf{x}}$, ou seja, $V_{\mathbf{x}} \not\subseteq \Omega$. Neste caso, temos a superposição do problema do item anterior com o fato de f e sua primeira derivada zerarem na fronteira de seu suporte compacto V , digamos no contorno ∂V . Portanto, a integral do item anterior, após aplicar o teorema de Green, fica restrita ao contorno $\partial(V \cap \Omega_{\mathbf{x}})$ da interseção $V \cap \Omega_{\mathbf{x}}$, a saber

$$\int_{V \cap \Omega_{\mathbf{x}}} \frac{\partial}{\partial x'_j} \left[f(\mathbf{x}') \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \right] dx'^m = \int_{\partial(V \cap \Omega_{\mathbf{x}})} f(\mathbf{x}') \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \mathbf{e}_j^T dx'^{m-1}. \quad (2.19)$$

Agora, quebramos o contorno, $\partial(V \cap \Omega_{\mathbf{x}})$, da interseção em duas superfícies abertas, que são as cascas $S_f = \partial V \cap \Omega_{\mathbf{x}}$ e $S_{\varphi} = \partial\Omega_{\mathbf{x}} \cap \Omega$ – lembrando que estas são variedades de dimensão $n - 1$ – onde, obviamente, $S_f \cup S_{\varphi} = \partial(V \cap \Omega_{\mathbf{x}})$. Como f desaparece no contorno ∂V , esta também desaparece na casca S_f . Concomi-

tantemente, pelo mesmo argumento anterior, φ desaparece na casca S_φ . Então, a última integral pode ser quebrada em duas componentes que se anulam individualmente, seja porque a integração se dá sobre a casca S_f ou porque se dá sobre a casca S_φ :

$$\int_{S_f} f(\mathbf{x}')\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\mathbf{e}_j^T dx'^{m-1} + \int_{S_\varphi} f(\mathbf{x}')\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\mathbf{e}_j^T dx'^{m-1} = 0 + 0. \quad (2.20)$$

Logo, em qualquer um dos itens anteriores, ficamos sempre com o resultado final

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial f}{\partial x_j}, \varphi \right\rangle(\mathbf{x}) &= \int_{V \cap \Omega_{\mathbf{x}}} f(\mathbf{x}') \frac{\partial}{\partial x_j} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') dx'^m \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \int_{V \cap \Omega_{\mathbf{x}}} f(\mathbf{x}') \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') dx'^m \right\} \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} [\langle f, \varphi \rangle(\mathbf{x})]. \quad \blacksquare \end{aligned} \quad (2.21)$$

O resultado do último teorema pode ser generalizado conforme o seguinte corolário:

Corolário 2.1. *Se f é uma função em \mathbb{R}^n , integrável em quase todo \mathbb{R}^n , e f se anula no infinito, ou seja*

$$\lim_{x_j \rightarrow \infty} f(x_1, \dots, x_j, \dots, x_n) = 0, \quad j = 1, \dots, n, \quad (2.22)$$

então, o resultado do Teorema 2.2 continua válido.

Prova: Para provar a afirmação do presente corolário, basta mostrar que todo o raciocínio feito na prova do Teorema 2.2 pode ser repetido, mas, considerando a região V não mais um suporte e sim uma n -bola, centrada na origem, e passando ao limite quando o raio da mesma tende para infinito, onde tanto f quanto φ anulam-se. Portanto,

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial f}{\partial x_j}, \varphi \right\rangle(\mathbf{x}) &= \int_{\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}') \frac{\partial}{\partial x_j} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') dx'^m \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \int_{\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}') \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') dx'^m \right\} \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} [\langle f, \varphi \rangle(\mathbf{x})]. \quad \blacksquare \end{aligned} \quad (2.23)$$

2.1.4 Derivadas distribucionais de ordem superior

Revisitando o Teorema 2.2, passamos pelo resultado intermediário via Equação (2.14). Como, no final do referido teorema, o primeiro termo do lado direito da referida equação foi anulado em decorrência da hipótese do teorema, a saber, que f tem suporte compacto e a função teste φ é par, podemos sintetizar o seguinte corolário:

Corolário 2.2. *Seja f dada nas condições do Teorema 2.2 e sendo $\varphi \in C_c^\infty(\Omega)$ uma função teste qualquer, então sua derivada fraca pode ser escrita como*

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial x_j}, \varphi \right\rangle(\mathbf{x}) = - \left\langle f, \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right\rangle(\mathbf{x}). \quad (2.24)$$

Usando o resultado do Corolário 2.2, comecemos por investigar o que acontece ao calcularmos $\left\langle \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_k}, \varphi \right\rangle$.

Substituindo f por $\frac{\partial f}{\partial x_j}$, obtemos

$$\left\langle \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_k}, \varphi \right\rangle(\mathbf{x}) = - \left\langle \frac{\partial f}{\partial x_j}, \frac{\partial \varphi}{\partial x_k} \right\rangle(\mathbf{x}). \quad (2.25)$$

Por indução, o lado direito da equação acima pode ser escrito como

$$- \left\langle \frac{\partial f}{\partial x_j}, \frac{\partial \varphi}{\partial x_k} \right\rangle(\mathbf{x}) = (-1)^2 \left\langle f, \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_j \partial x_k} \right\rangle(\mathbf{x}). \quad (2.26)$$

Dando prosseguimento ao processo de indução que nos conduziu a este último resultado, chegamos ao seguinte teorema:

Teorema 2.3. *Sejam f e φ nas mesmas condições do Corolário 2.2. Então, a derivada parcial de ordem m , com respeito às variáveis $\{x_1, \dots, x_n\}$, em qualquer ordem, de m dos n , é escrita como*

$$\left\langle \frac{\partial^m f}{\partial x_{j_1} \dots \partial x_{j_m}}, \varphi \right\rangle(\mathbf{x}) = (-1)^m \left\langle f, \frac{\partial^m \varphi}{\partial x_{j_1} \dots \partial x_{j_m}} \right\rangle(\mathbf{x}) \quad (2.27)$$

Observemos que a ordem de diferenciação, no teorema acima, não altera o resultado, uma vez que $\varphi \in C^\infty$. Deste modo, obtemos imediatamente a forma combinatória do teorema de Schwartz para a função teste, ou seja,

$$\frac{\partial^m \varphi}{\partial x_{j_1} \dots \partial x_{j_m}} = \frac{\partial^m \varphi}{\partial x_{k_1} \dots \partial x_{k_m}}, \quad (2.28)$$

onde a listagem de índices (j_1, \dots, j_m) é uma permuta sobre a listagem (k_1, \dots, k_m) , com $k_1, \dots, k_m \in \{1, \dots, n\}$.

2.1.5 Convergência da distribuição

Dizemos que uma seqüência de funções, $\{f_n\}$, tem convergência simples se, e somente se, em todo ponto \mathbf{x} do domínio \mathbb{D} , temos

$$\lim_{n \rightarrow \infty} f_n(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}). \quad (2.29)$$

Dizemos que $\{f_n\}$ tem convergência uniforme se, e somente se, para todo $\varepsilon > 0$,

existe $N \in \mathbb{N}$ tal que

$$|f_n(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x})| < \varepsilon, \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{D}, \quad n \geq N. \quad (2.30)$$

Isto significa que, a partir de um N suficientemente grande, todas as funções f_n aproximam-se de f , dentro de um raio ε , quaisquer que sejam \mathbf{x} do domínio. Equivalentemente,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{D}} |f_n(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x})|_{n \geq N} = 0. \quad (2.31)$$

Alternativamente, a convergência do supremo pode ser substituída pela convergência da integral do módulo da diferença em todo o domínio:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{D}} |f_n(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x})| dx^n(\mathbf{x}) = 0, \quad n \geq N, \quad (2.32)$$

onde $dx^n(\mathbf{x})$ é um elemento de volume em \mathbb{D} .

Utilizaremos daqui em diante a notação $f_n \xrightarrow{\text{unif}} f$ para representar a convergência uniforme.

Prova-se que, para uma sequência $\{f_n\}$, de funções localmente integráveis, qualquer uma das classes de convergência acima aplica-se à convergência das distribuições, conforme o seguinte teorema:

Teorema 2.4. *Dada uma sequência $\{f_n\}$, de funções localmente integráveis na região Ω , tal que $f_n \xrightarrow{\text{unif}} f$, então a sequência de funcionais $\langle f_n, \varphi \rangle$ também é convergente uniforme na região Ω , ou seja, $\langle f_n, \varphi \rangle \xrightarrow{\text{unif}} \langle f, \varphi \rangle$.*

Prova: Queremos mostrar que, para toda função teste, φ , e um real positivo, ε , arbitrariamente pequeno ($\varepsilon \ll 1$, temos

$$|\langle f_n - f, \varphi \rangle| < \varepsilon, \quad n \geq N, \quad (2.33)$$

para algum inteiro $N \gg 1$. Aplicando a desigualdade de Cauchy-Schwartz, temos

$$|\langle f_n - f, \varphi \rangle| \leq \langle |f_n - f|, \varphi \rangle. \quad (2.34)$$

Contudo, por hipótese, $f_n \xrightarrow{\text{unif}} f$, em $\Omega \subseteq \mathbb{D}$, e como

$$\int_{\Omega} \varphi dx^n = 1,$$

chegamos, finalmente, à relação

$$|\langle f_n - f, \varphi \rangle| \leq \langle |f_n - f|, \varphi \rangle < \langle \varepsilon, \varphi \rangle = \varepsilon. \quad (2.35)$$

■

Corolário 2.3. *Se a sequência $\{f_n\}$, de funções, localmente integráveis é uniformemente convergente para a função f , ou seja, $f_n \xrightarrow{\text{unif}} f$, então $\langle f_n, \varphi \rangle \xrightarrow{\text{unif}} \langle f, \varphi \rangle$.*

Prova: Como a região Ω pode ser arbitrariamente relocada para um novo vértice \mathbf{x} , digamos $\Omega_{\mathbf{x}}$, e que a mesma seja conveniente transformada, por algum homomorfismo, de modo a se adaptar às bordas de \mathbb{D} , tal região pode varrer todos os pontos do domínio. Assim, podemos afirmar que, fazendo-se as devidas integrações em $\Omega_{\mathbf{x}}$, o Teorema 2.4 vale para todos os pontos em \mathbb{D} . ■

Concluimos, deste último corolário, que é suficiente que a sequência $\{f_n\}$ seja uniformemente convergente no domínio, mesmo que a função teste, φ , seja compactamente definida em Ω , para que a sequência de funcionais $\langle f_n, \varphi \rangle$ também seja convergente uniforme em \mathbb{D} .

Para bem fundamentarmos a teoria de interpolação integral, que será discutida no Capítulo 3, é conveniente definirmos o conceito de núcleo de suavização, que é um caso especial da função teste, conforme a seção seguinte.

2.2 Núcleos suavizantes no contexto de distribuições

Uma forma bastante cômoda de se trabalhar com a função teste é reescrevê-la na seguinte forma uniparametrizada:

$$W_h(\mathbf{x}) \equiv h^{-n} \varphi(\mathbf{x}/h) \quad (2.36)$$

onde fica evidente o conceito de distribuição, cujo núcleo de convolução tem a dimensão geométrica de densidade no \mathbb{R}^n . Definimos *núcleo suavizante* à função no lado esquerdo da equação acima.

Via de regra, o núcleo suavizante W_h tem como suporte a bola unitária:

$$\text{supp}(W_h) \subseteq \{\mathbf{x} \mid |\mathbf{x}| \leq 1\}. \quad (2.37)$$

Ademais, W_h é normalizada em Ω , ou seja

$$\int_{\Omega} W_h(\mathbf{x}) dx^n = 1. \quad (2.38)$$

Tal condição de normalização do núcleo suavizante, W_h , implica

$$\int_{\Omega} \text{Im}(W_h) dx^n = 0. \quad (2.39)$$

Ademais esta condição se estende a todo \mathbb{R}^n e é invariante a translações com deslocamento \mathbf{a} em W_h :

$$\int_{\mathbb{R}^n} W_h(\mathbf{x} - \mathbf{a}) dx^n = 1. \quad (2.40)$$

A Equação (2.36) pode ser, então, reescrita como

$$\langle f(\mathbf{x}), W_h \rangle \equiv \int_{\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}') W_h(\mathbf{x} - \mathbf{x}') dx'^m. \quad (2.41)$$

Observemos que, de certo modo, h pode ser interpretado como uma medida de largura da função W_h . O Leitor pode se sentir tentado a achar que φ_ϵ tem suporte com contorno esférico de raio h no \mathbb{R}^n . Contudo, isto não é necessariamente verdade, a menos que seja explicitamente imposta tal condição como uma propriedade subsidiária de um dado problema, como será discutido no Capítulo 3.

As distribuições $\langle f(\mathbf{x}), W_h \rangle$ possuem propriedades que decorrem da integrabilidade da função argumento f que requerem primeiramente o conceito de função localmente integrável, enunciado na seguinte definição:

Definição 2.6. *Se $f : \Omega \mapsto \mathbb{C}$ é uma função complexa, Lebesgue mensurável, tal que, para cada compacto $K \subset \Omega$, temos:*

$$\int_K |f| dx < \infty. \quad (2.42)$$

Neste caso, dizemos que f é localmente integrável, e escrevemos $f \in L^1_{loc}(\Omega)$.

Teorema 2.5. *Sejam W_h um núcleo suavizante e f uma função localmente integrável. Definamos o funcional $f_h(\mathbf{x}) = \langle f, W_h \rangle$. Então:*

1. W_h é classe C^∞ no \mathbb{R}^n ;
2. Se f é contínua e $\text{supp}(f)$ é compacto, temos $f_h \xrightarrow{\text{unif}} f$, quando $h \rightarrow 0$.

2.2.1 Estudo de caso: solução fraca de equações diferenciais parciais

Ilustremos o emprego de distribuições, tomando como exemplo as seguintes equações diferenciais parciais de segunda ordem:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} = 0 \quad (2.43)$$

e

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y \partial x} = 0. \quad (2.44)$$

A Equação (2.43) é prontamente satisfeita pela solução $u(x, y) = |x|$. Contudo, a essa mesma solução não satisfaz a Equação (2.44) em todos os valores de $x \in \mathbb{R}$, uma vez que a derivada $\frac{\partial u}{\partial x}$ não existe para $x = 0$. De fato, a Figura 2.1 ilustra o comportamento da função $|x|$ e sua mudança abrupta de direção, passando da inclinação $\frac{\partial u}{\partial x} = -1$ ($x < 0$) para a inclinação $\frac{\partial u}{\partial x} = 1$ ($x > 0$).

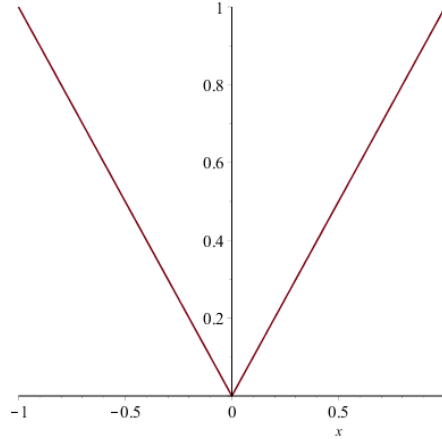


Figura 2.1: A função $|x|$ no intervalo $[-1, 1]$.

Uma forma alternativa para resolvermos tal descontinuidade em $\frac{\partial u}{\partial x}$, no ponto $x = 0$, consiste em recorrer a métodos interpolativos, com o intuito de obtermos uma forma aproximada do problema e, por conseguinte, obtermos uma solução fraca para o mesmo.

Observemos que ambas equações, (2.43) e (2.44), naturalmente satisfazem o Teorema de Schwarz,

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y \partial x} = \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}, \quad (2.45)$$

devido à identidade de seus respectivos lados direitos – ambas idênticas a zero em todo $(x, y) \in \mathbb{R}^2$.

Numa primeira tentativa, deveras informal, fazemos a seguinte modificação em u :

$$\tilde{u}(x, y) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sqrt{x^2 + \epsilon^2}, \quad (2.46)$$

para obtermos

$$\frac{\partial \tilde{u}(x, y)}{\partial x} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{x}{\sqrt{x^2 + \epsilon^2}}. \quad (2.47)$$

Outra forma de se aproximar o problema exposto consiste em empregarmos o conceito de distribuição, de modo que a derivação fraca $\frac{\partial u}{\partial x}$ seja contínua em todo $x \in \mathbb{R}$, a despeito de $|x|$ não ser diferenciável em $x = 0$. Assim, encontraremos a solução fraca, $\tilde{u}(x, y)$, para satisfazer a Equação (2.44).

Ao utilizarmos as funções generalizadas devemos preservar sempre as propriedades dos espaços das funções o quanto possível. Como desejamos que u seja diferenciável em $x = 0$, fazemos a seguinte convolução com um núcleo $W_h(x)$, $h > 0$, definido como:

$$W_h(x) = \frac{3}{4h} \begin{cases} 1 - \frac{x^2}{h^2}, & \text{se } |x| \leq h, \\ 0, & \text{se } |x| \geq h, \end{cases} \quad (2.48)$$

que é uma função de classe C^0 – cuja ilustração encontra-se na Figura 2.2 – de modo

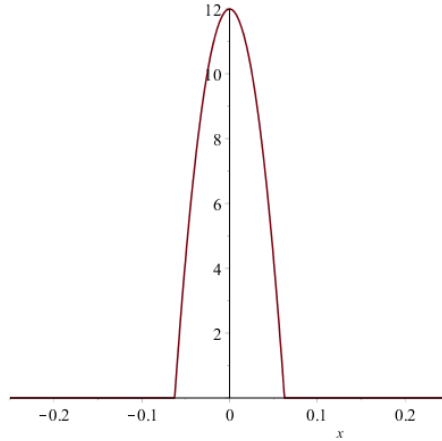


Figura 2.2: Núcleo de interpolação $W_h(x)$, conforme Equação (2.48), adotando $h = 0,0625$.

que uma forma aproximada $\tilde{u}(x, y)$ de $u(x, y)$ é obtida pelo seguinte funcional:

$$\tilde{u}(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} W_h(x - x') u(x', y) dx' \quad (2.49)$$

que resulta em

$$\tilde{u}(x, y) = \begin{cases} \frac{1}{8} \frac{3h^4 + 6h^2x^2 - x^4}{h^3}, & |x| \leq h, \\ |x|, & |x| \geq h, \end{cases} \quad (2.50)$$

conforme ilustrada na Figura 2.3.

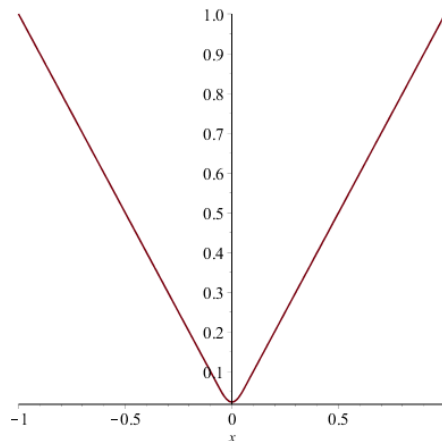


Figura 2.3: Gráfico da forma suavizada de $|x|$, obtidas pelas Equações (2.49) e (2.50).

A derivada espacial da função núcleo $\frac{dW_h(x)}{dx}$ é escrita como

$$\frac{dW_h(x)}{dx} = \frac{3}{4h^2} \begin{cases} -\frac{2x}{h}, & \text{se } |x| < h, \\ 0, & \text{se } |x| \geq h, \end{cases} \quad (2.51)$$

conforme ilustrada na Figura 2.4.

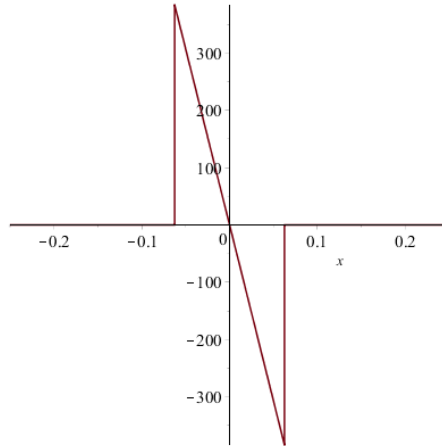


Figura 2.4: Gráfico da função derivada do núcleo de acordo com (2.51).

Com base no Teorema 2.2, a derivada $\partial u/\partial x$ pode ser aproximada da seguinte forma:

$$\frac{\partial \tilde{u}(x, y)}{\partial x} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial W_h(x - x')}{\partial x} u(x', y) dx', \quad (2.52)$$

obtendo-se

$$\frac{\partial \tilde{u}(x, y)}{\partial x} = \begin{cases} -1, & \text{se } x \leq -h, \\ \frac{1}{2} \frac{x(3h^2 - x^2)}{h^3}, & \text{se } |x| \leq h, \\ 1, & \text{se } x \geq h, \end{cases} \quad (2.53)$$

que é ilustrada na Figura 2.5.

Observa-se que este último resultado satisfaz o teorema de Schwarz, mesmo no limite $h \rightarrow 0$.

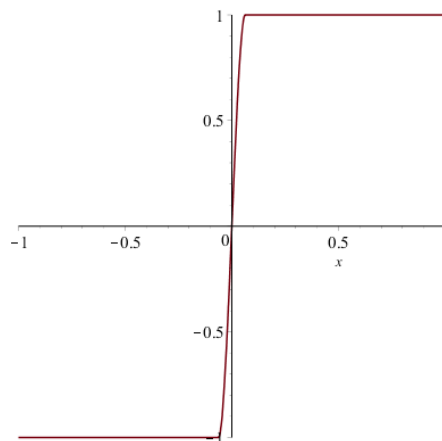


Figura 2.5: Gráfico da derivada fraca $\frac{\partial \tilde{u}(x, y)}{\partial x}$ de $u(x, y) = |x|$.

Em ambos os casos houve um parâmetro de precisão, cujo limite tornou possível satisfazer o referido teorema. Antes de passar ao limite, vemos que essas funções foram aproximadas, tornando analítico o que antes não era no ponto $x = 0$.

Mesmo nos casos limite, a descontinuidade de u , na primeira derivada em x , foi

removida. Esse tipo de solução é denominada *solução fraca* de uma equação diferencial mediante funções generalizadas.

2.3 Modelo de núcleo de suavização. A curva cubic-B-spline

Consideremos a seguinte função, denominada cubic-B-spline (SCHOENBERG, 1973)

$$K(u) = \frac{1}{6} \begin{cases} 3|u|^3 - 6u^2 + 4, & 0 \leq |u| \leq 1, \\ (2 - |u|)^3, & 1 \leq |u| \leq 2, \\ 0, & |u| \geq 2, \end{cases} \quad (2.54)$$

cujo domínio é o conjunto dos números reais.

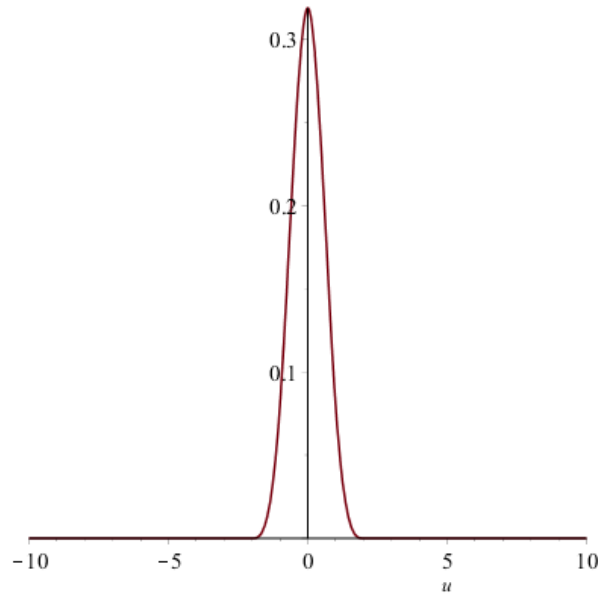


Figura 2.6: Plot da cubic-B-spline da Equação (2.54)

O gráfico de $K(u)$, na Equação (2.54), é ilustrado na Figura 2.6, a menos de um fator de escala, que foi desconsiderado no momento em que a mesma foi elaborada utilizando o pacote matemático MapleTM.

É fácil verificar que a função acima possui núcleo compacto de raio 2, sendo a mesma normalizada em seu domínio

$$\int_{-\infty}^{\infty} K(u) du^3 = 2 \int_0^2 K(u) du^3 = 1. \quad (2.55)$$

A primeira derivada $\frac{dK}{du}$ é facilmente calculada da Equação (2.54), observando que

$$\frac{d|u|}{du} = \frac{u}{|u|}.$$

Assim, obtemos a fórmula da derivada do núcleo cubic-B-spline escrita como

$$\frac{dK(u)}{du} = \frac{1}{2} \frac{u}{|u|} \begin{cases} (3u^2 - 4|u|) & 0 \leq |u| \leq 1 \\ -(2 - |u|)^2 & 1 \leq |u| \leq 2 \\ 0 & |u| \geq 2 \end{cases} \quad (2.56)$$

cujo gráfico é ilustrado na Figura 2.7, valendo a mesma observação que foi feita sobre a Figura 2.6 quanto ao fator de escala.

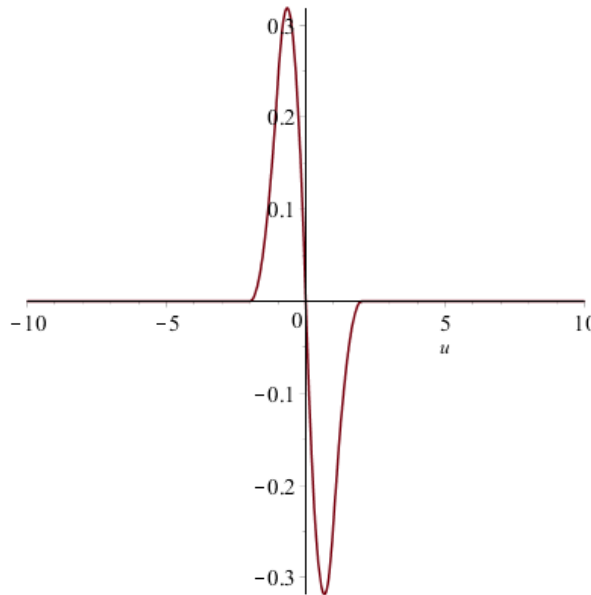


Figura 2.7: Primeira derivada da cubic-B-spline

De modo análogo à obtenção da derivada do núcleo, encontramos facilmente a segunda derivada deste, observando que

$$\frac{d^2|u|}{du^2} = \frac{d(u/|u|)}{du} = \frac{1}{|u|} \frac{du}{du} - \frac{u}{|u|^2} \frac{d|u|}{du} = \frac{1}{|u|} - \frac{1}{|u|} = 0,$$

donde obtemos a fórmula para a segunda derivada

$$\frac{d^2K(u)}{du^2} = \begin{cases} 3|u| - 4, & 0 \leq |u| \leq 1, \\ 2 - |u|, & 1 \leq |u| \leq 2, \\ 0, & |u| \geq 2, \end{cases} \quad (2.57)$$

cujo gráfico é ilustrado na Figura 2.8, a menos de um fator de escala no eixo vertical,

como mencionado nas figuras anteriores.

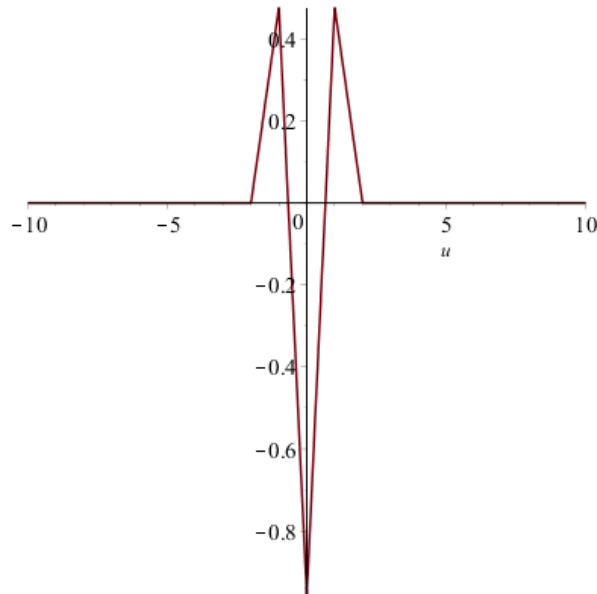


Figura 2.8: Segunda derivada da função núcleo cubic-B-spline

Observemos que, nas Equações (2.54 - 2.57), os intervalos de regularização, $0 \leq |u| \leq 1$, $1 \leq |u| \leq 2$ e $|u| \geq 2$ possuem 5 (cinco) vínculos, a saber $u = 0, \pm 1, \pm 2$, denominados vértices de spline, que geralmente causam uma primeira impressão negativa ao leitor. Contudo, a representação não somente está matematicamente correta, como é justamente o que impõe as condições de regularidade da função definida aos pedaços (piecewise), que tem que ser continuamente diferenciável, até a segunda ordem, quando esta se transforma em um B-spline linear.

O mesmo raciocínio no parágrafo anterior já não vale para a terceira derivada, que está fora do nosso propósito, seja em interpolação de imagens, seja em simulações SPH, como será discutido no Capítulo 5.

A função B-spline d^3K/du^3 é corretamente representada nos intervalos de existência, a saber $0 \leq |u| < 1$, $1 \leq |u| < 2$ e $|u| \geq 2$, que não são intervalos reguladores pois a terceira derivada B-spline é descontínua nos vértices $u = 0, \pm 1, \pm 2$.

A fórmula que representa a terceira derivada é dada por

$$\frac{d^3K(u)}{du^3} = \begin{cases} 3\frac{u}{|u|}, & 0 \leq |u| < 1, \\ -\frac{u}{|u|}, & 1 \leq |u| < 2, \\ 0, & |u| \geq 2, \end{cases} \quad (2.58)$$

que é obviamente descontínua nos vértices de spline.

A Figura 2.9 ilustra o comportamento descontínuo da terceira derivada do kernel.

O emprego das funções apresentadas nesta seção depende da dimensionalidade do espaço de representação dos dados, ou partículas. Por exemplo, em simulações SPH

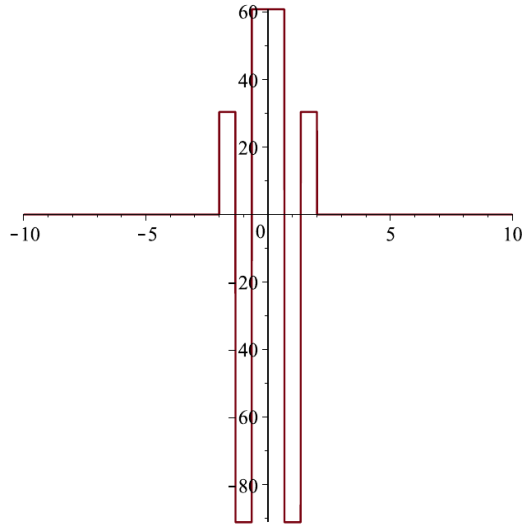


Figura 2.9: Terceira derivada da cubic-B-spline

nos interessa a representação tridimensional das mesmas.

Retomemos o núcleo definido na Equação (2.54) e podemos redefinir o mesmo para o caso tridimensional (3D), levando em conta sua representação em coordenadas esféricas, uma vez que o núcleo é simétrico. Alternativamente, e de modo muito mais simplificado, consideramos sua versão tridimensional $K^{(3D)}$ escrita como a seguinte decomposição

$$K^{(3D)}(\mathbf{r}) = K(x)K(y)K(z), \quad (2.59)$$

onde cada um dos fatores $K(x)$, $K(y)$, $K(z)$ é definido pela Equação (2.54) e assumimos que $\mathbf{r} \equiv (x, y, z)$.

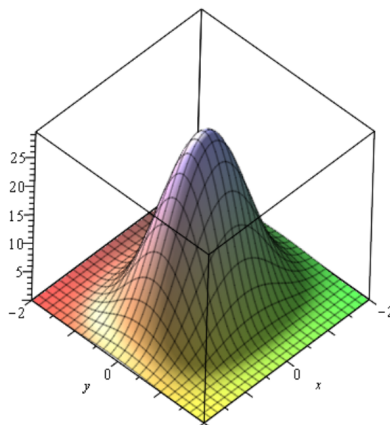


Figura 2.10: Visualização 2D do cubic-B-spline

A Figura 2.10 ilustra a representação no caso bidimensional (2D) do referido cubic-B-spline, análogo à Equação (2.59):

$$K^{(2D)}(\mathbf{r}) = K(x)K(y). \quad (2.60)$$

2.4 Exemplo: estimador de densidade em uma dimensão

Para ilustrar o erro de normalização, consideremos o caso de uma dimensão cuja densidade SPH estimada é mostrada na Figura 2.11. Para realizar o teste onde adotamos a função B-spline cúbica discutida na seção 2.3. O número de partículas utilizadas no teste foi 16384. A distribuição de partículas vem da simulação de variável aleatória normal.

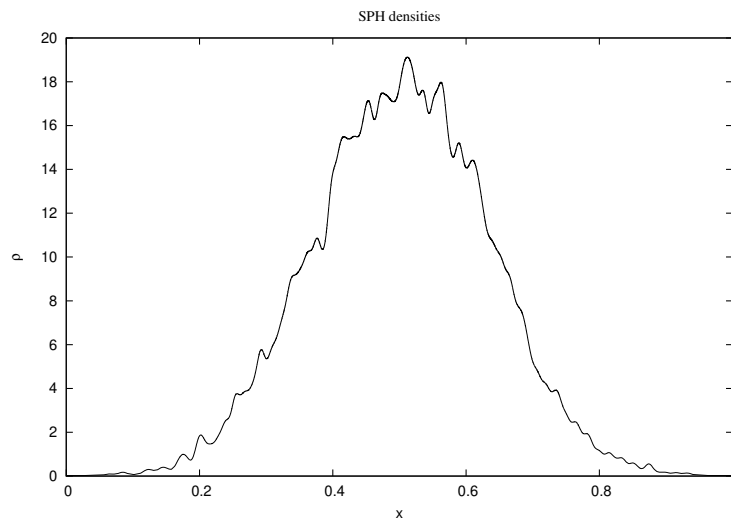


Figura 2.11: Densidade SPH estimada para 16384 partículas distribuídas no intervalo $[0,1]$, após uma densidade de probabilidade arbitrária.

Os comprimentos de suavização h foram estimados como metade da semi-largura (dimensão do raio) do suporte compacto que inclui os $k = 62$ vizinhos mais próximos de cada partícula SPH, cujo plano contra a coordenada x é observado em Figura 2.12.

O erro de normalização correspondente para o exemplo de estimativa de densidade plotado na Figura 2.11 é mostrado na Figura 2.13.

O gradiente de densidade SPH, estimado para o teste de uma dimensão é mostrado na Figura 2.11, e ilustrado na Figura 2.14.

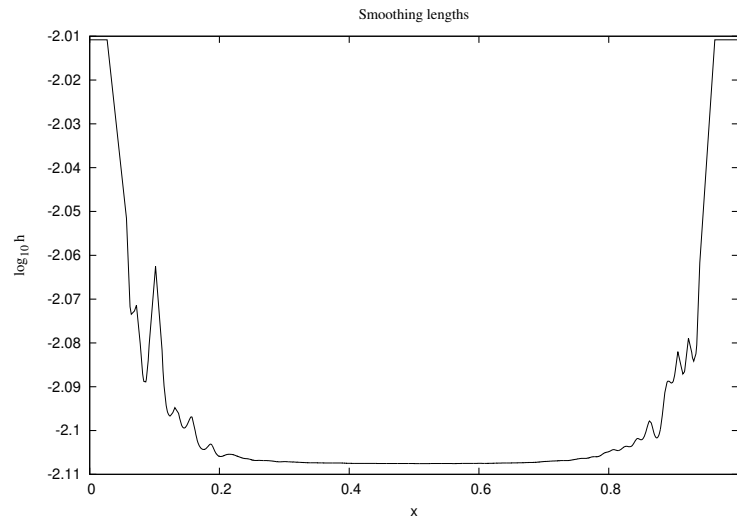


Figura 2.12: Plotagem logarítmica do comprimento de suavização como função da posição das partículas para o exemplo mostrado na Figura 2.11.

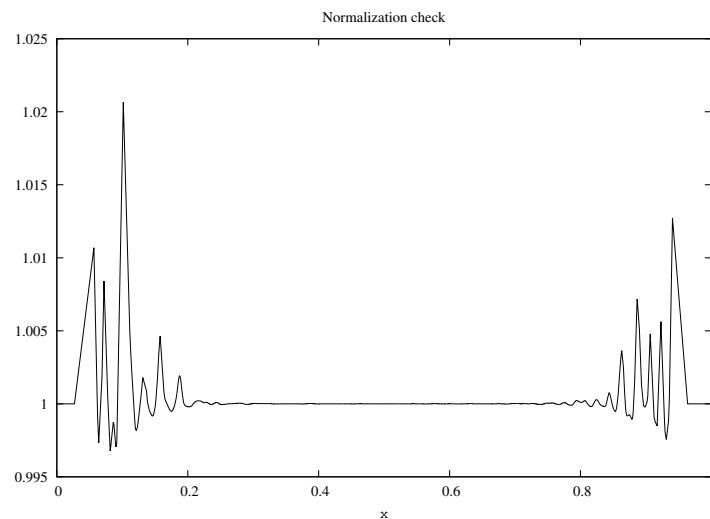


Figura 2.13: Erro de normalização para a densidade SPH plotado na Figura 2.11.

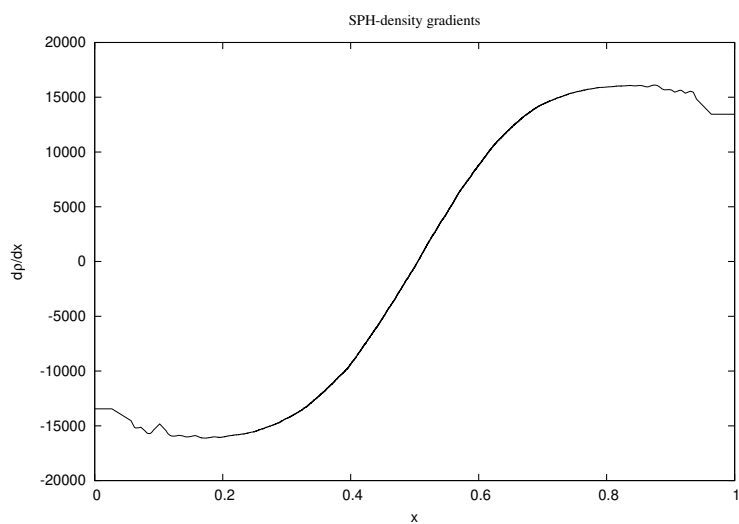


Figura 2.14: Gradientes de densidade SPH para o exemplo dado na Figura 2.11.

3 Interpolação Integral

Neste Capítulo, serão discutidas técnicas de interpolação integral, como uma aplicação da teoria discutida no capítulo anterior. As técnicas aqui empregadas, tanto na sua forma contínua (integral), quanto na sua forma discreta ou seja por métodos de grades ou malhas, seja por partículas (HOCKNEY; EASTWOOD, 1988; DUDA; HART; STORK, 2001; GINGOLD; MONAGHAN, 1977).

Interpolação integral é uma técnica de interpolação baseada na suposição de que as propriedades estatísticas de uma distribuição de dados no \mathbb{R}^n podem ser resgatadas através de integrais de suavização, similares ao que foi visto no capítulo anterior, na definição de distribuição como funções generalizadas.

Formalmente, o núcleo suavizante é uma função teste, a menos de uma mudança de escala. Apesar disso, na literatura de reconhecimento de padrões e de SPH (smoothed particle hydrodynamics), é comum se fazer uma adaptação desta função para um espaço aproximado $C_c^m(\Omega)$, das funções de classe C^m com suporte compacto Ω .

Na sua forma mais ortodoxa, os métodos de interpolação integral são ditos métodos isotrópicos, no sentido de que os núcleos de suavização (c.f. Capítulo 2, Sec. 2.2) são esféricos. Assim, o núcleo esférico, no \mathbb{R}^3 , pode ser escrito como

$$W_h(\mathbf{x}) = \frac{K(|\mathbf{x}|/h)}{h^3}. \quad (3.1)$$

A função K , na equação anterior, seria, em princípio, a função teste φ já estudada no Capítulo 2. Contudo, como mencionado mais acima, esta pode ser aproximada para $C_c^n(B_1)$, onde B_1 é uma bola unitária, centrada na origem.

Os requisitos de K é que esta seja uma “*bump-function*” – assemelhada a uma gaussiana – e que seja normalizada, isto é

$$\int_{B_1} K(|\mathbf{x}|)d^3x = 1. \quad (3.2)$$

A integral acima pode ser resolvida tanto em coordenadas polares (r, θ, ϕ) ou em coordenadas cartesianas (x, y, z) , no \mathbb{R}^3 , sendo estas últimas preferencialmente adotadas em trabalhos de SPH adaptativo (HERNQUIST; KATZ, 1989; MARINHO, 1997; MARTEL et al., 1993; OWEN et al., 1998). Ademais, em espaços multidimensionais,

a forma cartesiana é invariante e dispensa as formas generalizadas para hiper-esferas.

Particularmente, adotamos W_h como membro de uma generalização da sequência Delta de Dirac (GEL'FAND; SHILOV, 1968), de modo que:

$$\lim_{h \rightarrow 0} W_h(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x}). \quad (3.3)$$

Consistentemente, W_h deve ser simétrico, $W_h(\mathbf{x}) = W_h(-\mathbf{x})$, e satisfaz as seguintes condições:

$$\int_{\mathbb{R}^3} W_h(\mathbf{s} - \mathbf{x}) d\mathbf{s}^3 = 1. \quad (3.4)$$

Por consistência à condição de normalização acima, e em decorrência do Teorema 2.2, temos imediatamente que a seguinte condição deve ser satisfeita:

$$\int_{\mathbb{R}^3} \nabla W_h(\mathbf{s} - \mathbf{x}) d\mathbf{s}^3 = \mathbf{0}, \quad (3.5)$$

para todo $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$.

Alguns autores se desviam da definição formal de que as funções teste tenham suporte compacto e adotam uma definição alternativa onde W_h se anula no infinito, como é caso do núcleo gaussiano.

Para os propósitos da presente dissertação, trabalharemos com o espaço euclidiano tridimensional, \mathbb{R}^3 , sem comprometer a quase imediata generalização para o \mathbb{R}^n .

3.1 Resolução espacial, isotropia e anisotropia

Um aspecto importante, que reflete a precisão com que a distribuição se aproxima da função alvo, é a adaptatividade do núcleo suavizante à densidade de probabilidade dos dados distribuídos no espaço. Nestas técnicas adaptativas à densidade é necessário recorrer-se a algum método de estimador de densidades.

Como mencionado ao fim do parágrafo anterior, o processo de interpolação integral, de uma forma geral, requer o conhecimento prévio da função distribuição de probabilidades, ou simplesmente função densidade de probabilidades. Assim, o processo de interpolação requer um préprocessamento no qual se estima a densidade de probabilidades, conhecido como estimador de densidades. A densidade estimada, no presente contexto, é uma distribuição, tal qual apresentada e discutida no Capítulo 2, também chamada suavização.

A própria função utilizada como núcleo de suavização é utilizada no processo de estimação de densidades. No caso do presente trabalho, a estimação de densidades vale-se de núcleos com suporte compacto no \mathbb{R}^3 , definido como a região esférica que retém os k vizinhos mais próximos (no inglês, k -nearest neighbors).

Esta região compacta, que define o suporte do núcleo, é denominada região de influência, também denominada região interpoladora.

As técnicas de interpolação integral que utilizam núcleos sensíveis a direções – também denominadas espacialmente correlacionadas – da distribuição de densidades, são ditas interpolação anisotrópica. Geralmente, em tais modelos sensíveis a direções principais de distribuição de uma massa contínua de dados (informação), os núcleos suavizantes possuem perfil elipsoidal (hiper-elipsoidal no \mathbb{R}^n), como será discutido no Capítulo 4.

3.2 Formulação contínua

Nesta formulação, admite-se que o número de pontos de dados, ou partículas, na base é grande o suficiente para que médias e demais momentos, computados através de somatórias, sejam satisfatoriamente abstraídas através de integrais, de Riemann ou de Lebesgue. Assim, a massa de dados passa a ser representada como um contínuo, um fluido, onde as regiões mais prováveis são aquelas onde os dados mais se adensam, ou de maiores valores para a densidade de probabilidades que deve ter gerado o conjunto de pontos.

Interpolação integral é uma generalização da técnica de estimador de densidade de Parzen (PARZEN, 1962) (vide também em (MARVASTI, 1993) e (SHANKAR et al., 2014)), utilizada para se estimar uma função através do funcional $\tilde{A} : A \times W_h \mapsto R$, de uma função medida, $A : \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}$, através de um núcleo de suavização (interpolação), $W_h : \mathbb{R}^3 \mapsto R$, onde h parametriza a largura de W_h que, em geral, é uma função de Borel (MARVASTI, 1993). Assim, tem-se a fórmula de interpolação sobre o espaço euclidiano tridimensional:

$$\tilde{A}(\mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} W_h(\mathbf{x} - \mathbf{x}') A(\mathbf{x}') dx^3 \mathfrak{Z}'. \quad (3.6)$$

O gradiente interpolado $\tilde{\nabla} A(\mathbf{x})$ é obtido de forma análoga ao que foi estudado na Seção 2.1.3, pelo Teorema 2.2, ficando o seguinte funcional:

$$\tilde{\nabla} A(\mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} \nabla W_h(\mathbf{x} - \mathbf{x}') A(\mathbf{x}') dx^3 \mathfrak{Z}'. \quad (3.7)$$

Observação 3.1. Em nenhum momento é necessário computar diretamente o gradiente de A , e nem se quer ter conhecimento de seu comportamento analítico no domínio em questão. Ao invés, apenas o gradiente do núcleo, ∇W_h , é suficiente para se estimar os gradientes dos valores associados aos pontos de dados, como o funcional $\tilde{\nabla} A$ na equação acima.

3.3 Formulação discreta

Para fins computacionais, devemos apresentar uma forma aproximada do problema de interpolação integral.

Uma versão mais simples e clássica da discretização da interpolação integral é a que esses pontos sejam regularmente espaçados, formando os nós de uma grade cúbica, unitária se devidamente normalizados.

Uma forma um pouco mais sofisticada que a do parágrafo anterior é que esses pontos sejam obtidos de uma grade regular e transformados por um homeomorfismo, obedecendo a geometria exigida de um problema, como é o caso das malhas utilizadas em computação gráfica 3D e suas aplicações na engenharia.

Contudo, recorreremos à natureza estocástica do problema de n -corpos, de modo que a formulação nas equações (3.6) e (3.7) tenham que ser revistas para um conjunto N de pontos distintos, aleatoriamente colhidos de uma base de dados, B , mas igualmente prováveis, cujas coordenadas distribuem-se conforme uma densidade de probabilidades a se descobrir, ou estimar.

Primeiramente, tentemos discretizar a integral em (3.6) para uma versão grosseira da soma de Riemann:

$$\tilde{A}(\mathbf{x}) = \sum_{j \in \mathcal{I}} W_h(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}) A(\mathbf{x}_j) \Delta V_j, \quad (3.8)$$

onde $\mathcal{I} : B \mapsto N$ é a função índice da base de dados B , que transforma um ponto \mathbf{x}_j de B em um inteiro j , enquanto ΔV_j é um elemento de volume, centrado em \mathbf{x}_j , que pode ter um tamanho e forma fixos, se a interpolação não é adaptativa. Caso ΔV_j deve ter um vínculo topológico com a vizinhança do ponto interpolador \mathbf{x}_j , então o problema passa a ser bem mais complexo que o da adoção de volumes prefixados.

Um caso especial da formulação discreta é a interpolação sobre partículas, como veremos a seguir.

3.3.1 Interpolação por partículas

No modelo de interpolação discreta usando partículas, ao invés de uma discretização regular do espaço, admitimos que a amostra de dados é um extrato, aleatoriamente colhido do contínuo, de modo que cada partícula representa uma porção deste.

Na técnica de simulação SPH, que será estudada no Capítulo 5, é justamente a ideia esboçada no parágrafo anterior que utilizada para se reproduzir, através da teoria de distribuição, o comportamento contínuo do fluido, por exemplo, velocidade, densidade de massa, pressão, temperatura etc.

A cada partícula j é subentendido um volume interpolador ΔV_j . É intuitivo que ΔV_j tenha suas dimensões proporcionais a h^3 . Por este motivo, o núcleo $W_h(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j)$, centrado na partícula identificada por j , está intimamente ligado a ΔV_j e à sua

morfologia. Assim, se W_h tem um perfil esférico, é intuitivo que ΔV_j seja também esférico.

Via de regra, Δv_j deve ser grande o suficiente para que a interpolação tenha bom significado estatístico. Volumes muito pequenos irão causar flutuações indesejáveis, uma vez que W_h tende a ser mais concentrada (densa) à medida que h diminui. Por outro lado, volumes interpoladores muito grandes tornam W_h bastante alargada e achatada, transformando-se num filtro passa-baixas, atenuando drasticamente quaisquer estruturas em pequena escala.

Para reforçar o que foi dito acima, consideremos o caso em que h é tão diminuto se comparado com as escalas espaciais típicas da amostra de dados, de modo que a equação (3.8) torna-se

$$\tilde{A}_{\text{steepy}}(\mathbf{x}) = \sum_{j \in \mathcal{I}} \delta(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}) A(\mathbf{x}_j) \Delta V_j. \quad (3.9)$$

Esta última equação é a versão *steepy* da distribuição de densidades, sendo esta fortemente concentradas em pontos (partículas), abstraídos pela função delta de Dirac.

3.3.2 Estimadores de densidade. Janelas de Parzen

Recorrendo à Equação (3.9), fazendo $A(\mathbf{x}_j) = \rho(\mathbf{x}_j)$, que é a função densidade de probabilidade da medida \mathbf{x}_j – observando que $p_j = \rho(\mathbf{x}_j) \Delta V_j$ é a probabilidade de se encontrar a mesma no interior do volume ΔV_j , centrado em \mathbf{x}_j – temos a forma “*steepy*” da densidade de probabilidade escrita como

$$\tilde{\rho}_{\text{steepy}}(\mathbf{x}) = \sum_{j \in \mathcal{I}} \delta(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}) p_j. \quad (3.10)$$

Por outro lado, valendo-nos da ideia expressa na equação de interpolação integral (3.6), e aplicando à equação acima, temos a forma suavizada (distribuição) da densidade de probabilidade escrita como

$$\tilde{\rho}(\mathbf{x}) = \int W_h(\mathbf{s} - \mathbf{x}) \tilde{\rho}_{\text{steepy}}(\mathbf{s}) d\mathbf{s}^3 = \sum_{j \in \mathcal{I}} W_h(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}) p_j, \quad (3.11)$$

que é um resultado interessante, pois este é um préprocessamento necessário na computação de funções interpoladas, quando não se conhece os volumes de suavização, mas faz parte da amostra de dados seus respectivos pesos estatísticos p_j .

Por consistência, a somatória das probabilidades, associadas a cada ponto da amostra, é igual à unidade:

$$\sum_{j \in \mathcal{I}} p_j = 1. \quad (3.12)$$

Sendo $N = |B|$ o número de amostras na base B , então, se os pontos são igualmente prováveis, que aliás já foi considerado como hipótese há alguns parágrafos atrás, temos

que $p_j = 1/N$ e, neste caso, ficamos com o seguinte resultado:

$$\tilde{\rho}(\mathbf{x}) = \frac{1}{N} \sum_{j \in \mathcal{I}} W_h(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}). \quad (3.13)$$

3.3.3 Interpolação adaptativa à densidade

Nos primeiros trabalhos de Parzen (PARZEN, 1962), a largura da janela de estimação, que corresponde ao presente h , era mantida constante. O mesmo problema surgiu nos primeiros trabalhos de SPH (LUCY, 1977; GINGOLD; MONAGHAN, 1977), onde h era uniformemente distribuído por todas as partículas, independentemente do grau de concentração das mesmas ao longo do espaço das partículas.

Para contornar o problema de se ter regiões de coleta muito grandes em regiões densas, ou muito pequenas em regiões rarefeitas, adota-se h variável. Uma forma simples, e bastante intuitiva, consiste em definir os volumes de interpolação, ΔV_j , de modo que estes colem, para cada partícula j , um número constante k de vizinhos mais próximos de j . Intuitivamente, $\Delta V_j = 4\pi h_j^3$ é uma estimativa do volume associado à partícula j , se h_j é definido como o raio do suporte de W_{h_j} . Este suporte é então a região que contém os k vizinhos mais próximos de j .

Admitindo que temos posse de um algoritmo eficiente de busca dos k vizinhos mais próximos (no inglês, *k-nearest neighbor algorithm*, KNN), vide o método de Marinho-Andreazza (MARINHO; ANDREAZZA, 2010), reescrevemos a fórmula de estimador de densidade, vide Equação (3.11). Assim, para o caso de partículas com probabilidades p_i , $i = 1, \dots, N$, ou, mais adequadamente para o caso de SPH, estas partículas com massas m_i , $i = 1, \dots, N$. Adotemos esta última interpretação, então a densidade em massa escrita como

$$\rho_i = \sum_{j \in \mathcal{N}_i^k} W_{h_j}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j), \quad (3.14)$$

onde i é o identificador da partícula interpolada, \mathcal{N}_i^k é a lista dos k vizinhos mais próximos de i , e h_j é o raio da região esférica englobando as partículas listadas em \mathcal{N}_i^k .

Segue naturalmente, do raciocínio exercido no parágrafo acima, que

$$\tilde{A}_i = \sum_{j \in \mathcal{N}_i^k} W_{h_j}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) A_j \frac{m_j}{\rho_j}, \quad (3.15)$$

onde é feita a consideração de que $\Delta V_j = m_j/\rho_j$ é uma razoável aproximação para o volume interpolador, A_j é o valor da informação transportada pela partícula j e, por último, \tilde{A}_i é o valor interpolado sobre a partícula i .

Analogamente, da Equação (3.7), temos a forma de partículas para o gradiente interpolado sobre a partícula i :

$$\tilde{\nabla}_i A_i = \sum_{j \in \mathcal{N}_i^k} \nabla_i W_{h_j}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) A_j \frac{m_j}{\rho_j}. \quad (3.16)$$

Observação 3.2. A variável usada como notação indicial h_j , da sequência W_{h_j} , muda com a posição da partícula j , uma vez que o elemento de volume ΔV_j é comóvel. Contudo, esta grandeza h_j depende somente da posição \mathbf{x}_j da partícula j e, portanto, não participa dos deslocamentos virtuais que definem o operador gradiente $\tilde{\nabla}_i$, sobre a posição da partícula i .

Para os problemas de SPH, é suficiente termos o gradiente de uma grandeza do fluido, bem como o divergente de campos vetoriais representados pelas partículas interpoladoras. Se necessário, principalmente em problemas de fluidos com modelagem de turbulência, ou em problemas de teoria de elasticidade e eletrodinâmica, é também necessário estimar-se o rotacional dos campos associados às partículas e o laplaciano dessas grandezas.

O divergente, $\tilde{\nabla}_i \cdot \mathbf{F}_i$, de uma grandeza vetorial, \mathbf{F} , associada à partícula i , pode ser facilmente transcrito da Equação (3.16), ou seja

$$\tilde{\nabla}_i \cdot \mathbf{F}_i = \sum_{j \in \mathcal{N}_i^k} \nabla_i W_{h_j}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \cdot \mathbf{F}_j \frac{m_j}{\rho_j}. \quad (3.17)$$

Analogamente, o rotacional, $\tilde{\nabla}_i \times \mathbf{F}_i$, do vetor do parágrafo anterior é facilmente deduzido como

$$\tilde{\nabla}_i \times \mathbf{F}_i = \sum_{j \in \mathcal{N}_i^k} \nabla_i W_{h_j}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \times \mathbf{F}_j \frac{m_j}{\rho_j}. \quad (3.18)$$

O laplaciano pode ser computado tomando-se o divergente suavizado, $\tilde{\nabla}_i \cdot$, da distribuição $\tilde{\nabla}_i A_i$, inferindo-se das equações (3.16) e (3.17), ficando a seguinte forma quadrática em W_h :

$$\tilde{\nabla}_i^2 A_i = \sum_{j \in \mathcal{N}_i^k} \sum_{l \in \mathcal{N}_j^k} \left[\nabla_i W_{h_j}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \cdot \nabla_j W_{h_l}(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l) \right] A_l \frac{m_l}{\rho_l} \frac{m_j}{\rho_j}. \quad (3.19)$$

Esta versão de estimador do laplaciano é computacionalmente complexa. Uma forma alternativa consiste em aplicar a Equação (2.27), obtendo

$$\tilde{\nabla}_i^2 A_i = \sum_{j \in \mathcal{N}_i^k} \nabla_i^2 W_{h_j}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) A_j \frac{m_j}{\rho_j}. \quad (3.20)$$

4 Interpolação Anisotrópica

Levar em consideração as direções preferenciais das distribuições recai num problema de multivariabilidade covariante (DUDA; HART; STORK, 2001), que somente será discutida na seção a seguir.

Se as direções com que os dados se dispersam em torno de seus vizinhos mais próximos são igualmente prováveis, dizemos que o espaço de dados é *isotrópico*. Por outro lado, se existem direções privilegiadas com que os dados se dispersam em torno de seus vizinhos mais próximos, então o espaço amostral é dito *anisotrópico*.

Interpolação anisotrópica é um nível adicional de adaptatividade, só que agora é com respeito às direções que oferecem tendências de dispersão local dos dados. Neste caso, além de se permitir um aumento de eficácia quanto ao auto ajuste do núcleo de interpolação com as densidades, ainda permite um ajuste da forma do núcleo, alongando em algumas direções e se achantando em outras, conforme a tendência local.

4.1 Espaços vetoriais anisotrópicos

Anisotropia em espaços vetoriais refere-se a uma classe particular de operadores lineares que alteram o módulo de um vetor conforme a orientação deste no espaço original. Portanto, não são isometrias frente à métrica euclidiana.

No espaço euclidiano tridimensional, \mathbb{R}^3 , o operador rotação rígida

$$\Omega(\theta, \phi) \equiv \begin{pmatrix} \cos \phi & -\text{sen } \phi & 0 \\ \cos \theta \text{ sen } \phi & \cos \theta \cos \phi & \text{sen } \theta \\ -\text{sen } \theta \text{ sen } \phi & -\text{sen } \theta \cos \phi & \cos \theta \end{pmatrix}$$

é uma isometria e, portanto, o espaço gerado por este operador é um espaço isotrópico.

Já o operador definido como o tensor momento de inércia

$$\mathcal{I} \equiv \int_{\mathcal{V}} \rho(\mathbf{r}) \left(r^2 \mathbf{1} - \mathbf{r} \otimes \mathbf{r} \right) dx^3,$$

de um corpo rígido de volume \mathcal{V} e função densidade de massa $\rho(\mathbf{r})$, transforma o espaço euclidiano em um espaço vetorial não necessariamente isotrópico, a depender

da simetria do sólido que é refletida sobre as transformações realizadas por este tensor (SYMON, 1982). A propósito, \mathbf{I} não é sequer um invariante galileano.

Um outro exemplo de transformação anisotópica é a resultante do tensor de covariância Σ , que será estudado mais adiante. Contudo, é importante fazer um breve resumo de álgebra tensorial no \mathbb{R}^3 , conforme a seção seguinte.

4.1.1 Produto tensor e espaços tensores

Definição 4.1. *Sejam \mathbb{U} e \mathbb{V} espaços vetoriais reais¹. Define-se produto tensorial, também denominado produto tensor, a seguinte operação*

$$\otimes : \mathbb{U} \times \mathbb{V} \mapsto \mathbb{U} \otimes \mathbb{V},$$

que transforma o par $(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \in \mathbb{U} \times \mathbb{V}$ no vetor $\boldsymbol{\omega} = \mathbf{u} \otimes \mathbf{v}$ do espaço produto, ou espaço tensor, $\mathbb{U} \otimes \mathbb{V} = \{\mathbf{w} \mid \mathbf{w} = \mathbf{u} \otimes \mathbf{v}, \forall \mathbf{u} \in \mathbb{U} \wedge \forall \mathbf{v} \in \mathbb{V}\}$, onde \otimes obedece as seguintes propriedades:

1. Existe $\mathbf{0} \in \mathbb{U} \otimes \mathbb{V}$ tal que, se $\mathbf{0}$ é um vetor nulo de \mathbb{U} , então $\mathbf{0} \otimes \mathbf{v} \equiv \mathbf{0}$ – o mesmo vale para um vetor nulo de \mathbb{V} , então $\mathbf{u} \otimes \mathbf{0} \equiv \mathbf{0}$.
2. Seja $\alpha \in \mathbb{R}$, então $(\alpha \mathbf{u}) \otimes \mathbf{v} = \mathbf{u} \otimes (\alpha \mathbf{v})$
3. $\forall \mathbf{w} \in \mathbb{V}$, $\mathbf{u} \otimes (\mathbf{v} + \mathbf{w}) = \mathbf{u} \otimes \mathbf{v} + \mathbf{u} \otimes \mathbf{w}$.
4. $\forall \mathbf{t} \in \mathbb{U}$, $(\mathbf{u} + \mathbf{t}) \otimes \mathbf{v} = \mathbf{u} \otimes \mathbf{v} + \mathbf{t} \otimes \mathbf{v}$.
5. $\mathbf{u} \otimes \mathbf{v} + \mathbf{t} \otimes \mathbf{w} \in \mathbb{U} \otimes \mathbb{V}$, quaisquer que sejam $\mathbf{u}, \mathbf{t} \in \mathbb{U}$ e $\mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{V}$.

Das propriedades constitutivas do produto tensor, da Definição 4.1, podemos enunciar o seguinte teorema:

Teorema 4.1. *O espaço tensor, $\mathbb{U} \otimes \mathbb{V}$, entre os espaços vetoriais \mathbb{U} e \mathbb{V} , é um espaço vetorial.*

Demonstração. Decorre imediatamente do Item 1 da Definição 4.1 que $\exists! \mathbf{0} \in \mathbb{U} \otimes \mathbb{V}$. Ademais, combinando as propriedades listadas nas Linhas 2 a 5, é sempre possível encontrar uma combinação linear $\alpha \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\tau} \in \mathbb{U} \otimes \mathbb{V}$ para quaisquer vetores $\boldsymbol{\sigma}$ e $\boldsymbol{\tau}$ de $\mathbb{U} \otimes \mathbb{V}$. ■

Apesar de o espaço tensor ser um espaço vetorial, é conveniente denominarmos o elemento genérico desse espaço como simplesmente um *tensor*.

Como todo espaço vetorial, o espaço tensor também deve ter sua base, obtida em termos das respectivas bases de seus espaços quocientes.

¹poderiam ser complexos, mas para os nossos propósitos, espaços reais são suficientes

Sejam $B = \{\hat{\mathbf{e}}_j, j = 1, 2, \dots, m\}$ base de \mathbb{U} e $C = \{\hat{\mathbf{f}}_j, j = 1, 2, \dots, n\}$ base de \mathbb{V} . Neste caso, qualquer que seja $\mathbf{u} \in \mathbb{U}$, temos

$$\mathbf{u} = \sum_{j=1}^m u_j \hat{\mathbf{e}}_j \quad (4.1)$$

e, similarmente, para todo $\mathbf{v} \in \mathbb{V}$, temos

$$\mathbf{v} = \sum_{j=1}^n v_j \hat{\mathbf{f}}_j. \quad (4.2)$$

Assim, $\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}$ é escrito como

$$\mathbf{u} \otimes \mathbf{v} = \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^n u_j v_k (\hat{\mathbf{e}}_j \otimes \hat{\mathbf{f}}_k). \quad (4.3)$$

Com base neste último resultado, e da propriedade apresentada na Linha 5 da Definição 4.1, podemos generalizar que qualquer tensor $\mathbf{w} \in \mathbb{U} \otimes \mathbb{V}$ pode ser escrito como

$$\mathbf{w} = \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^n w_{jk} (\hat{\mathbf{e}}_j \otimes \hat{\mathbf{f}}_k), \quad (4.4)$$

donde se conclui que $\{\hat{\mathbf{e}}_j \otimes \hat{\mathbf{f}}_k, 1 \leq j \leq m, 1 \leq k \leq n\}$ é base do espaço tensor $\mathbb{U} \otimes \mathbb{V}$.

Observemos que o número de dimensões do espaço tensor $\mathbb{U} \otimes \mathbb{V}$ não é o mesmo que o número de dimensões do espaço produto cartesiano $\mathbb{U} \times \mathbb{V}$, como fica claro no seguinte teorema:

Teorema 4.2. *Seja $\mathbb{W} = \mathbb{U} \otimes \mathbb{V}$ um espaço tensor entre os espaços vetoriais \mathbb{U} e \mathbb{V} . Então, a dimensão de \mathbb{W} é igual ao produto das dimensões de \mathbb{U} e \mathbb{V} , respectivamente.*

Demonstração. Sejam $\dim \mathbb{U} = m$, $\dim \mathbb{V} = n$ e $B = \{\hat{\mathbf{e}}_j, j = 1, 2, \dots, m\}$, $C = \{\hat{\mathbf{f}}_j, j = 1, 2, \dots, n\}$ bases de \mathbb{U} e \mathbb{V} , respectivamente. Como já foi visto mais acima, $\{\hat{\mathbf{e}}_j \otimes \hat{\mathbf{f}}_k, 1 \leq j \leq m, 1 \leq k \leq n\}$ é base de \mathbb{W} . O número de componentes desta base é, portanto, mn , que é igual ao produto das dimensões individuais dos espaços \mathbb{U} e \mathbb{V} . ■

Para satisfazer a curiosidade, consideremos o produto cartesiano $\mathbb{U} \times \mathbb{V}$. Qualquer vetor desse espaço é escrito como um par ordenado (\mathbf{u}, \mathbf{v}) . Neste caso, com base nas Equações (4.1) e (4.2), temos que

$$(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \left(\sum_{j=1}^m u_j \hat{\mathbf{e}}_j, \sum_{k=1}^n v_k \hat{\mathbf{f}}_k \right),$$

cujos número de componentes é igual a $m + n$. Portanto, $(\hat{\mathbf{e}}_j, \hat{\mathbf{f}}_k)$ não é sequer uma base do produto cartesiano $\mathbb{U} \times \mathbb{V}$.

A importância dos tensores, no contexto da mecânica clássica, e mesmo em outras

áreas como computação gráfica e processamento de imagem, é o seu significado operacional. A saber, um tensor no espaço $\mathbb{U} \otimes \mathbb{V}$ está associado a uma transformação linear $\mathbf{T} : \mathbb{U} \mapsto \mathbb{V}$, ou equivalentemente a uma forma bilinear $L(\mathbb{U}, \mathbb{V})$. Para tanto, comecemos com a definição de produto interno (ou redução) entre um tensor $\mathbf{T} \in \mathbb{U} \otimes \mathbb{V}$ e um vetor $\mathbf{v} \in \mathbb{V}$.

Definição 4.2. *Define-se produto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathbb{U} \otimes \mathbb{V} \times \mathbb{V} \mapsto \mathbb{U}$ entre um tensor*

$$\mathbf{T} = \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^n T_{jk} (\hat{\mathbf{e}}_j \otimes \hat{\mathbf{f}}_k)$$

e um vetor

$$\mathbf{v} = \sum_{j=1}^n v_j \hat{\mathbf{f}}_j,$$

frente às respectivas bases $B = \{\hat{\mathbf{e}}_j, j = 1, 2, \dots, m\}$, de \mathbb{U} , e $C = \{\hat{\mathbf{f}}_j, j = 1, 2, \dots, n\}$, de \mathbb{V} , o vetor $\mathbf{u} = \langle \mathbf{T}, \mathbf{v} \rangle \in \mathbb{U}$ escrito como

$$\mathbf{u} = \sum_{j=1}^m \hat{\mathbf{e}}_j \sum_{k=1}^n T_{jk} v_k. \quad (4.5)$$

Equação (4.5) pode ser interpretada como a ação de uma transformação linear \mathbf{T} sobre um vetor do espaço \mathbb{V} para o espaço \mathbb{U} : $\mathbf{u} = \mathbf{T}\mathbf{v}$, cujos coeficientes T_{jk} correspondem aos elementos da matriz $(T_{ij})_{m \times n}$.

Definição 4.3. *Define-se redução a um escalar $\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathbb{U} \times \mathbb{U} \otimes \mathbb{V} \times \mathbb{V} \mapsto \mathbb{R}$ entre um vetor*

$$\mathbf{u} = \sum_{j=1}^m \hat{\mathbf{e}}_j u_j,$$

um tensor

$$\mathbf{T} = \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^n T_{jk} (\hat{\mathbf{e}}_j \otimes \hat{\mathbf{f}}_k)$$

e um vetor

$$\mathbf{v} = \sum_{j=1}^n v_j \hat{\mathbf{f}}_j,$$

frente às respectivas bases $B = \{\hat{\mathbf{e}}_j, j = 1, 2, \dots, m\}$, de \mathbb{U} , e $C = \{\hat{\mathbf{f}}_j, j = 1, 2, \dots, n\}$, de \mathbb{V} , o escalar $\alpha = \langle \mathbf{u}, \mathbf{T}, \mathbf{v} \rangle \in \mathbb{R}$ escrito como

$$\alpha = \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^n u_j T_{jk} v_k. \quad (4.6)$$

Equação (4.6) representa o resultado da operação de uma forma bilinear entre os vetores \mathbf{u} e \mathbf{v} , o que inspira o seguinte teorema:

Teorema 4.3. $\mathbb{U} \otimes \mathbb{V}$ é isomorfo ao espaço das matrizes das formas bilineares $\mathbb{L}(\mathbb{U}, \mathbb{V})$.

Demonstração. Imediata. ■

No preâmbulo do presente capítulo, apresentamos informalmente as componentes de um tensor na forma matricial. Com base no teorema anterior, podemos fazer a seguinte associação entre tensores \mathbf{T} e matrizes $(T_{jk})_{m \times n}$ se não houver dúvidas quanto às bases envolvidas na decomposição matricial. Assim, denotamos $\mathbf{T} \equiv (T_{jk})_{m \times n}$.

Por consistência com a notação matricial, o produto interno entre o tensor \mathbf{T} e o vetor \mathbf{v} será denotado como

$$\langle \mathbf{T}, \mathbf{v} \rangle \equiv \mathbf{T}\mathbf{v} \equiv \begin{pmatrix} T_{11} & \dots & T_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{m1} & \dots & T_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

Analogamente, a redução a escalar, entre \mathbf{u} , \mathbf{T} e \mathbf{v} fica escrita como

$$\langle \mathbf{u}, \mathbf{T}, \mathbf{v} \rangle \equiv \mathbf{u}^T \mathbf{T} \mathbf{v} \equiv (u_1 \dots u_m) \begin{pmatrix} T_{11} & \dots & T_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{m1} & \dots & T_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

O produto tensor $\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}$ fica sendo equivalente ao produto matricial

$$\mathbf{u} \otimes \mathbf{v} \equiv \mathbf{u}\mathbf{v}^T \quad (4.9)$$

Iremos dar uma atenção especial para o espaço tensor $\mathbb{U} \otimes \mathbb{U}$. Em particular, $\mathbb{U} = \mathbb{R}^3$, que resulta no espaço tensor $\mathbb{R}^3 \otimes \mathbb{R}^3 \equiv \mathbb{R}^{3 \times 3} \equiv \mathbb{R}^9$, portanto, isomorfo ao espaço dos operadores lineares em \mathbb{R}^3 .

Uma aplicação imediata para os tensores em \mathbb{R}^3 é a definição da métrica euclidiana generalizada, também chamada de métrica tensor.

4.1.2 Métrica tensorial

Definição 4.4. *Um tensor \mathbf{T} é positivamente definido se, e somente se, para todo $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$, não nulo, tem-se que*

$$\langle \mathbf{r}, \mathbf{T}, \mathbf{r} \rangle \equiv \mathbf{r}^T \mathbf{T} \mathbf{r} > 0.$$

De modo análogo às matrizes quadradas, definimos o traço de um tensor $\mathbf{T} = (T_{jk})_{3 \times 3}$, dada uma base do \mathbb{R}^3 , o seguinte escalar

$$\text{tr } \mathbf{T} = \sum_{j=1}^3 T_{jj}.$$

Definimos a métrica tensor, como uma generalização da métrica euclidiana, com

respeito a um tensor \mathbf{T} positivamente definido, da seguinte forma

$$d(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \sqrt{(\mathbf{a} - \mathbf{b})^T \mathbf{T} (\mathbf{a} - \mathbf{b})}. \quad (4.10)$$

Um caso particular dessa métrica tensor é a métrica de Mahalanobis, que será estudada na seção seguinte.

4.1.3 Métrica de Mahalanobis

A forma mais bem sucedida de adaptatividade trópica (direcional) dá-se através da computação da matriz de covariância, Σ , (DUDA; HART; STORK, 2001), e a aplicação da métrica de Mahalanobis (MAHALANOBIS, 1936) na definição de região de interpolação como uma generalização da interpolação com núcleos esféricos.

A ideia original de Mahalanobis é a de realizar medidas de erros multivariados – é o mesmo que dizer que os dados se dispersam em torno da média, de forma não isotrópica – utilizando-se tensor covariância, Σ , que é definido com base na convenção (4.9) da seguinte forma

$$\Sigma = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^N (\mathbf{x}_i - \langle \mathbf{x} \rangle) (\mathbf{x}_l - \langle \mathbf{x} \rangle)^T, \quad (4.11)$$

onde $\langle \mathbf{x} \rangle$ é a expectância da massa de dados $\mathbb{X}_N = \{\mathbf{x}_l, l = 1, \dots, N\}$.

Se a base considerada na equação anterior é a base dos autovetores de Σ , cujos autovalores σ_j^2 são as medidas das variâncias tomadas nas respectivas direções principais, $j = 1, \dots, d$ – dirigidas pelos autovetores $\hat{\mathbf{u}}_j$ – então temos a forma diagonal

$$\Sigma = \sum_{j=1}^d \sigma_j^2 \hat{\mathbf{u}}_j \hat{\mathbf{u}}_j^T, \quad (4.12)$$

cujo traço $tr \Sigma = \sigma^2$ é a variância, cujo valor independe de transformações ortogonais realizadas sobre Σ (DUDA; HART; STORK, 2001).

Uma vez conhecida a forma diagonal, dada na equação anterior, obtemos facilmente a sua inversa Σ^{-1} :

$$\Sigma^{-1} = \sum_{j=1}^d \frac{1}{\sigma_j^2} \hat{\mathbf{u}}_j \hat{\mathbf{u}}_j^T. \quad (4.13)$$

Distância de Mahalanobis, ξ , cujo quadrado é a forma usual de ser abordada, a menos que especificado em contrário, $\xi^2(\mathbf{x}_l, \langle \mathbf{x} \rangle)$, de um ponto de dados \mathbf{x}_l , $l \in \{1, \dots, N\}$ à média $\langle \mathbf{x} \rangle$, é definida como

$$\xi(\mathbf{x}_l, \langle \mathbf{x} \rangle) \equiv (\mathbf{x}_l - \langle \mathbf{x} \rangle)^T \Sigma^{-1} (\mathbf{x}_l - \langle \mathbf{x} \rangle) = \sum_{j=1}^d \frac{|\hat{\mathbf{u}}_j^T (\mathbf{x}_l - \langle \mathbf{x} \rangle)|^2}{\sigma_j^2}. \quad (4.14)$$

Um resultado interessante dessa métrica é que o conjunto solução da equação $\xi^2(\mathbf{x}_l, \langle \mathbf{x} \rangle) = 1$ é o lugar geométrico de um hiperelipsóide, cujos semieixos principais

são os comprimentos $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_d$, nas respectivas direções principais, definidas pelos autovetores de Σ : $\{\hat{\mathbf{u}}_j, j = 1, \dots, d\}$, admitindo que a ordem crescente dos índices j corresponde à ordem decrescente dos valores de σ_j . Assim, $\sigma_j \geq \sigma_{j+1}$.

O grau de anisotropia η do espaço de dados – definido como o espaço vetorial no qual se computa a matriz de covariância – é definido como

$$\eta = 1 - \frac{\sum_{j=2}^d \sigma_j}{\sigma_1(d-1)}, \quad (4.15)$$

que denota uma dispersão esférica se $\eta = 0$ e, no limite quando todos os demais semieixos, exceto o primeiro, tenderem para zero, teríamos a situação extrema de η tornando-se essencialmente igual à unidade.

4.2 Interpolação com núcleos elipsoidais

Uma aplicação da métrica discutida na subseção anterior é a generalização da interpolação com núcleos esféricos para o caso de núcleos simétricos.

Novamente admitindo que a base do espaço vetorial é o conjunto de autovetores da matriz de covariância, definimos a matriz/operador de aspecto, $\Sigma^{-1/2}$, como sendo o seguinte operador diagonalizado:

$$\Sigma^{-1/2} = \sum_{j=1}^d \frac{1}{\sigma_j} \hat{\mathbf{u}}_j \hat{\mathbf{u}}_j^T. \quad (4.16)$$

Observemos que o tensor $\Sigma^{1/2}$ é, de certo modo, o tensor raiz quadrada do tensor covariância Σ , uma vez que $\Sigma^{1/2} \Sigma^{1/2} = \Sigma$.

Sendo \mathbf{x} um vetor qualquer do conjunto de dados \mathbb{X}_N , definimos o vetor anamorfizado, $\boldsymbol{\xi}$:

$$\boldsymbol{\xi} = \Sigma^{-1/2}(\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle) = \sum_{j=1}^d \hat{\mathbf{u}}_j \frac{\hat{\mathbf{u}}_j^T(\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle)}{\sigma_j}, \quad (4.17)$$

onde $\langle \mathbf{x} \rangle$ é a expectância (média) de \mathbb{X}_N

$$\langle \mathbf{x} \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{x}_i \quad (4.18)$$

e

$$M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^N m_i \quad (4.19)$$

é a massa total de \mathbb{X}_N .

Ao conjunto de dados \mathbb{X}_N associamos o conjunto anamorfizado \mathcal{X}_N , cujos pontos são obtidos pela transformação expressa na Equação (4.17).

Definição 4.5. *Ao conjunto \mathbb{M}^d de todos os pontos obtidos a partir da transformação*

feita na Equação (4.17) sobre o espaço euclidiano \mathbb{R}^d define-se espaço de Mahalanobis,

$$\mathbb{M}^d = \{\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle), \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d\}.$$

É fácil verificar que, sendo

$$\gamma^2 = \|\mathcal{X}_N\| = \max\{|\boldsymbol{\xi}_i|^2, i = 1, \dots, N\}, \quad (4.20)$$

a norma do conjunto de dados anamorfizados \mathbb{X}_N , então todos os pontos de $\{\boldsymbol{\xi}_i, i = 1, \dots, N\}$ estão todos circunscritos por uma esfera de raio γ , centrada na origem do espaço de Mahalanobis.

Conseqüentemente, tal esfera no espaço de Mahalanobis corresponde à região contornada pelo hiperelipsóide, com centro na expectância $\langle \mathbf{x} \rangle$, cujos semieixos principais, \mathbf{a}_j , correspondem ao produto das componentes principais, $\sigma_j \hat{\mathbf{u}}_j$, pelo fator de escala γ , que é o raio da esfera que circunscribe \mathcal{X}_N . Portanto,

$$\mathbf{a}_j = \gamma \sigma_j \hat{\mathbf{u}}_j, \quad j = 1, \dots, d. \quad (4.21)$$

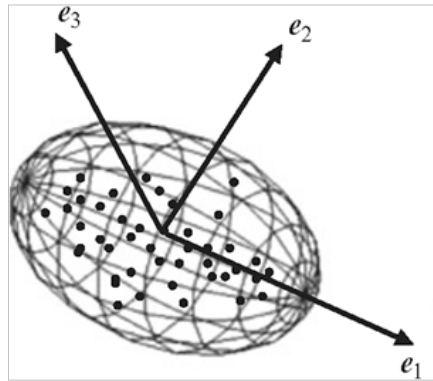


Figura 4.1: Elipsoide que circunscribe uma massa de dados. Os vetores \mathbf{e}_1 , \mathbf{e}_2 e \mathbf{e}_3 definem as direções dos autovetores do tensor covariância da massa de dados. O centro é a expectância dos pontos ilustrados.

No caso 3D, $d = 3$, temos na Figura 4.1 a ilustração de um conjunto de dados circunscrito por um elipsoide cujos semieixos principais são definidos pela equação anterior.

Decorre dos parágrafos preliminares desta seção, que o problema de suavização anisotrópica com suporte na métrica de Mahalanobis, corresponde a utilizar o núcleo de suavização, sobre uma vizinhança elipsoidal em torno do centro de suavização.

Equivalentemente, a suavização anisotrópica corresponde à suavização esférica (isotrópica) no espaço de Mahalanobis. Logo, o novo núcleo de suavização, W_{Σ} – esférico no espaço \mathbb{M}^d , hiperelipsoidal no \mathbb{R}^d – fica definido como

$$W_{\Sigma} = \left[V_d(\gamma) \prod_{j=1}^d \sigma_j \right]^{-1} K(\xi), \quad (4.22)$$

onde $K(\xi)$ é uma distribuição adimensional, par em $\xi = \|\xi\|$, com

$$\int_{\mathbb{R}^3} K(\xi) d\xi^3 = V_d(\xi), \quad (4.23)$$

e γ é o raio da massa de dados definida na Equação (4.20).

Para o nosso propósito, consideraremos γ , tal qual calculado da Equação (4.20), como sendo o raio da hiperesfera que encerra um número k , predeterminado, de vizinhos mais próximos no espaço de Mahalanobis, \mathbb{M}^d , onde, obviamente, tanto Σ quanto $\langle \mathbf{x} \rangle$ são estimados em função desta vizinhança, o que requer aprendizado de máquina, uma vez que tal região não é conhecida *a priori*.

O volume $V_d(\gamma)$ é o volume da hiperesfera no espaço \mathbb{M}^d , que é dado por

$$V_d(\gamma) = \frac{\pi^{\frac{d}{2}} \gamma^d}{\Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)}, \quad (4.24)$$

onde $\Gamma(z)$ a função Gama, muito conhecida de teoria de probabilidade, definida como

$$\Gamma(z) \equiv \int_0^{\infty} x^{z-1} e^{-x} dx, \quad (4.25)$$

cujos comportamento torna-se exatamente ao de um fatorial, quando o argumento z é um inteiro positivo n , a saber:

$$\Gamma(n) = (n - 1)! \quad (4.26)$$

No caso 3D, $d = 3$, temos

$$W_{\Sigma}(\xi) = \left[\frac{4}{3} \pi \gamma^3 \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \right]^{-1} K(\xi). \quad (4.27)$$

A densidade anisotropicamente interpolada é estimada de modo semelhante à Equação (3.13) mas utilizando o núcleo anisotrópico acima:

$$\tilde{\rho}(\mathbf{x}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N W_{\Sigma}(\xi_i), \quad (4.28)$$

onde

$$\xi_i = |\xi_i| = \sqrt{\xi_i \cdot \xi_i} = \sqrt{\xi_i^T \xi_i}$$

e

$$\boldsymbol{\xi}_i = \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\mathbf{x}_i - \langle \mathbf{x} \rangle)$$

para um ponto i de \mathbb{X} .

Estamos presumindo, que o argumento de ρ na Equação (4.28) é aproximadamente o ponto médio $\langle \mathbf{x} \rangle$ na região estimada, $\mathbf{x} \approx \langle \mathbf{x} \rangle$, caso contrário, a estimativa ficaria estatisticamente injustificada.

Todas as subsequentes interpolações sobre as grandezas do fluido (simulação) serão estimadas de modo análogo ao que foi feito na Equação (4.28). A saber

$$\tilde{A}_i = \sum_{l \in \mathcal{N}_i} W_{\boldsymbol{\Sigma}}(\xi_l) A_l \frac{m_l}{\rho_l}, \quad (4.29)$$

onde os termos A a ρ com subíndices significam valores estimados no ponto i ou l , por exemplo, $A_j = A(\mathbf{x}_j)$.

Com algum esforço algébrico, podemos encontrar $\nabla W_{\boldsymbol{\Sigma}}(\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle))$, donde obtemos

$$\tilde{\nabla}_i A_i = \sum_{l \in \mathcal{N}_i} \nabla_i W_{\boldsymbol{\Sigma}}(\xi_l) A_l \frac{m_l}{\rho_l}. \quad (4.30)$$

5 Aplicações

Neste capítulo serão mostradas duas aplicações de interpolação anisotrópica, discretizada por partículas. A primeira se refere à reconstrução de imagens, cuja forma bruta é uma distribuição de partículas. A segunda é uma aplicação à forma de se fazer interpolações anisotrópicas sobre as partículas da técnica SPH. Mais especificamente, esta última se refere apenas à adaptação dos conceitos estudados nos capítulos anteriores à forma de construir as equações SPH de movimento.

5.1 Estimador anisotrópico de densidades para recuperação de imagens ruidosas

A forma com que transformamos imagem RGB em uma forma ruidosa, representada por partículas no espaço bidimensional, requer um pré-processamento, conforme descrito nos parágrafos seguintes.

As partículas são obtidas, da imagem, por simulação estocástica, através do sorteio de pixels que serão associados a partículas, cujas coordenadas são geradas a partir das coordenadas do pixel, com uma perturbação gaussiana δx , δy , cuja dispersão, σ^2 , é definida pelo usuário. Portanto, cada partícula sorteada recebe coordenadas $(x + \delta x, y + \delta y)$, lembrando que (x, y) são inteiros não negativos e apenas a perturbação $(\delta x, \delta y)$ é definida em ponto flutuante.

A probabilidade $P(x, y)$ de um pixel ser escolhido como partícula, no espaço bidimensional, é definida como o nível de cinza normalizado do pixel localizado na linha y e coluna x da imagem, tratada como uma matriz (grade), num total de $NX \times NY$ pixels.

A Figura 5.1 ilustra a imagem original, de onde serão extraídos algumas partículas, conforme descrito nos parágrafos acima. O resultado da simulação que sorteia os pixels para serem representados por partículas é ilustrado na Figura 5.2.

O software utilizado foi desenvolvido pelo Professor Eraldo Pereira Marinho, ao longo de suas atividades de pesquisa, desde seu doutorado (MARINHO, 1997).

Para ilustrar os efeitos positivos do estimador anisotrópico de densidades, em comparação com a abordagem isotrópica, discutida no capítulo anterior, utilizamos o Mé-



Figura 5.1: Foto RGB da galáxia M51, tirada do Hubble Space Telescope.

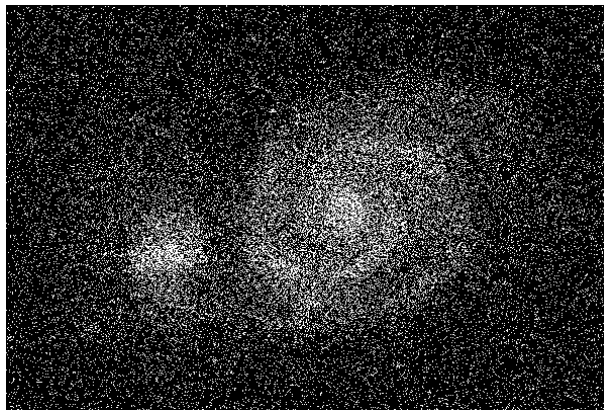


Figura 5.2: Imagem da M51 com partículas colhidas por amostragem com probabilidade proporcional à escala de cinza da imagem anterior.

todo de Quadriárvores de Covariância, com busca anisotrópica dos k vizinhos mais próximos (MARINHO; ANDREAZZA, 2010), para aplicar a Equação (4.28), vide as Figuras 5.3 e 5.4.

5.2 Reescrevendo as equações fundamentais da técnica SPH para o caso anisotrópico

Neste capítulo, discute-se a técnica de hidrodinâmica com partículas suavizadas (no inglês, *smoothed particle hydrodynamics*), mas introduzindo o modelo anisotrópico de interpolação, baseado em covariância dos k vizinhos mais próximos pela métrica de Mahalanobis, já discutida no capítulo anterior.

Antes de incorporar a técnica anisotrópica de interpolação no método SPH, façamos

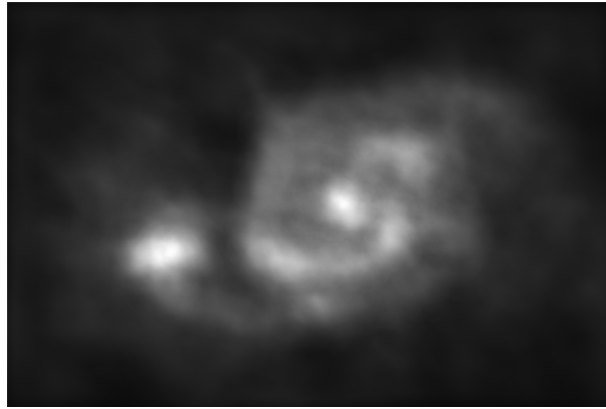


Figura 5.3: Interpolação convencional (isotrópica) sobre a amostragem aleatória ilustrada na figura anterior.

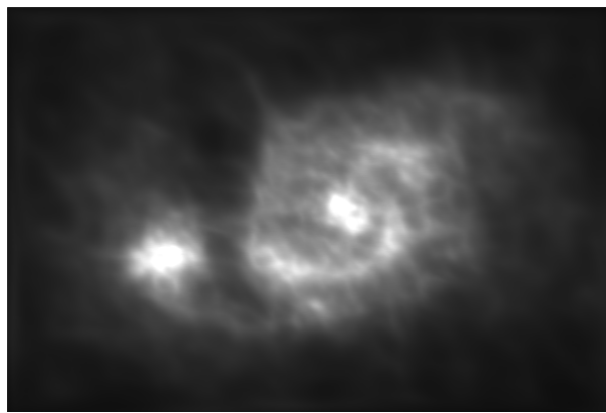


Figura 5.4: Similar à figura anterior mas utilizando núcleo de interpolação anisotrópico.

uma breve revisão da versão clássica deste método de simulação baseada em partículas.

O método SPH é um método Lagrangiano de simulação da mecânica dos fluidos baseada em partículas, originalmente introduzida em dois trabalhos simultâneos na segunda metade da década de 1970 (LUCY, 1977; GINGOLD; MONAGHAN, 1977).

Na técnica SPH, o estado do fluido é representado por um conjunto de partículas, sendo que essas possuem propriedades materiais individuais que se movem de acordo com as equações de conservação de movimento.

O método utiliza as técnicas de interpolação, que foram discutidas nos capítulos anteriores, para interpolar sobre cada partícula os valores amostrados pelas suas vizinhas mais próximas. Assim, a partir das propriedades de distribuição e do núcleo de suavização (smoothing Kernel) podemos determinar as derivadas espaciais até a ordem desejada.

A cada partícula, portanto, é associada uma lista de suas vizinhas mais próximas, em princípio uma k -vizinhança, o que determina uma complexidade espacial de $\mathcal{O}(k N)$, com N sendo o total de partículas na simulação. Obviamente, a complexidade temporal é maior que $\mathcal{O}(k N)$. Por exemplo, o método HK89 (HERNQUIST; KATZ, 1989) tem complexidade temporal de $\mathcal{O}(k N \log N)$. No modelo proposto por Marinho e Baldassin

(MARINHO; BALDASSIN, 2012), esta complexidade torna-se $\mathcal{O}(k \lceil N/P \rceil \log N)$, onde P é o número de núcleos de processamento de uma GPU (do inglês *graphics processor unit*).

5.3 Equações básicas da SPH anisotrópica

A versão SPH anisotrópica das densidades suavizadas é escrita como

$$\rho_i = \sum_{j \in \mathcal{N}_i} W_{\Sigma}(\xi_{ij}) m_j. \quad (5.1)$$

A equação lagrangiana, SPH, de conservação de momento linear, onde cada partícula está submetida a uma força externa \mathbf{f} , por unidade de massa – por exemplo a aceleração da gravidade é um campo externo ao elemento de volume lagrangiano, representado pela partícula i :

$$\dot{\mathbf{v}}_i = -\frac{\tilde{\nabla}_i P_i}{\rho_i} + \mathbf{f}_i, \quad (5.2)$$

onde $\dot{\mathbf{v}}_i$ é a aceleração do elemento de fluido representado pela partícula i , P_i é a pressão isotrópica exercida pela vizinhança sobre i , ρ_i é a densidade de massa, estimada sobre i .

A equação SPH de conservação de massa, admitindo que não haja fontes nem sorvedouros, é escrita como

$$\frac{\dot{\rho}_i}{\rho_i} = -\tilde{\nabla}_i \cdot \mathbf{v}_i, \quad (5.3)$$

A equação SPH para a segunda lei da termodinâmica, que faz o balanço entre trabalho de compressão, energia interna, calor liberado e calor absorvido por fontes externas, é escrita como

$$\dot{u}_i = -\frac{P_i}{\rho_i} \tilde{\nabla}_i \cdot \mathbf{v}_i + \Gamma_i - \Lambda_i, \quad (5.4)$$

onde

1. u_i é a energia interna específica do volume representado pela partícula i e \dot{u}_i é a sua taxa de variação;
2. $-\frac{P_i}{\rho_i} \tilde{\nabla}_i \cdot \mathbf{v}_i$ é a taxa de trabalho de compressão que a vizinhança exerce contra o volume representado pela partícula i ;
3. Γ_i é a taxa de calor absorvido pelo volume, também é chamado de aquecimento específico;
4. Λ_i é a taxa de calor perdido, ou radiado, também chamado resfriamento específico. Todas essas grandezas térmicas são representadas em unidades de energia, por unidade de tempo, por unidade de massa.

Em simulações adiabáticas, não há fuga nem entrada de calor, ficando apenas o balanço entre a taxa de trabalho de compressão $-\frac{P_i}{\rho_i} \tilde{\nabla}_i \cdot \mathbf{v}_i$ e a taxa de variação da energia interna \dot{u}_i . Assim, em tais simulações simplificadas descartamos os termos de perda e aquecimento, Λ_i e Γ_i , respectivamente.

5.4 Equações SPH simetrizadas

Para darmos início a esta seção, é conveniente reescrevermos a Equação (4.30) para a interpolação por partículas:

$$\tilde{\nabla}_i A_i = \sum_{j \in \mathcal{N}_i} \frac{m_j}{\rho_j} \nabla_i W_{\Sigma}(\xi_{ij}) A_j. \quad (5.5)$$

As equações SPH padrão podem ser derivadas, quase que imediatamente, de tudo que foi visto nos Capítulos 2 até 4. Por exemplo, poderíamos utilizar a Equação (5.5) para estimar o gradiente de pressão, substituindo A_i por P_i , obtendo assim

$$\tilde{\nabla}_i P_i = \sum_{j \in \mathcal{N}_i} \frac{m_j}{\rho_j} \nabla_i W_{\Sigma}(\xi_{ij}) P_j, \quad (5.6)$$

onde

$$\xi_{ij} \equiv \sqrt{(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)^T \Sigma^{-1} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)}. \quad (5.7)$$

No entanto, no que diz respeito à simetria de comutação de pares (terceira lei de Newton), para que se cumpra a conservação do momento linear, momento angular, bem como a energia térmica, então é necessário que se faça alguns arranjos nas fórmulas dos gradientes interpolados (e demais derivadas espaciais).

Por exemplo, a componente da aceleração devida ao gradiente de pressão, é dada por

$$\mathbf{a}_i = -\tilde{\nabla}_i P_i / \rho_i.$$

Examinando a Equação (5.6), e o resultado acima, temos que a força de interação de pressão SPH entre o par i e j , fica escrito como

$$\mathbf{F}_{ij} = -\nabla_i W_{\Sigma}(\xi_{ij}) P_j \frac{m_i m_j}{\rho_i \rho_j}. \quad (5.8)$$

Ao comutarmos as partículas i e j – isto é, mudar a perspectiva da partícula i para a partícula j – ficamos com

$$\mathbf{F}_{ji} = -\nabla_j W_{\Sigma}(\xi_{ij}) P_i \frac{m_i m_j}{\rho_i \rho_j}.$$

Nos valendo da simetria do núcleo suavizante, ficamos com

$$\mathbf{F}_{ji} = \nabla_i W_{\Sigma}(\xi_{ij}) P_i \frac{m_i m_j}{\rho_i \rho_j}.$$

Contudo, este resultado contradiz o princípio de ação-reação uma vez que $\mathbf{F}_{ij} \neq -\mathbf{F}_{ji}$, enquanto era esperada a identidade $\mathbf{F}_{ij} = -\mathbf{F}_{ji}$. Isso se deu ao fato de, após a permuta, o fator P_j mudou para o fator P_i .

O método convencional de se obter uma forma simetrizada para o gradiente de pressão (GINGOLD; MONAGHAN, 1977) consiste em escrever o gradiente interpolado de P_i/ρ_i , após aplicar a regra da cadeia:

$$\nabla\left(\frac{P}{\rho}\right) = \frac{\nabla P}{\rho} - \frac{P \nabla \rho}{\rho^2}$$

donde se obtém

$$\frac{\nabla P}{\rho} = \nabla\left(\frac{P}{\rho}\right) + \frac{P \nabla \rho}{\rho^2}$$

Então, a forma interpolada pode ser escrita como

$$\frac{\tilde{\nabla}_i P_i}{\rho_i} = \tilde{\nabla}_i\left(\frac{P_i}{\rho_i}\right) + \frac{P_i \tilde{\nabla}_i \rho_i}{\rho_i^2}. \quad (5.9)$$

Finalmente, usando raciocínio semelhante ao obtermos a Equação (5.6), chegamos à seguinte forma simetrizada do gradiente interpolado de pressões:

$$\frac{\tilde{\nabla}_i P_i}{\rho_i} = \sum_{j \in \mathcal{N}_i} m_j \nabla_i W_{\Sigma}(\xi_{ij}) \left(\frac{P_i}{\rho_i^2} + \frac{P_j}{\rho_j^2} \right) \quad (5.10)$$

Para o divergente das velocidades, utilizamos a equação de conservação de massa, representada na forma suavizada na Equação (5.3).

Primeiramente, calculemos a derivada temporal total da densidade interpolada, da Equação (5.1):

$$\dot{\rho}_i = \frac{d}{dt} \sum_{j \in \mathcal{N}_i} m_j W_{\Sigma}(\xi_{ij}). \quad (5.11)$$

Como $W_{\Sigma}(\xi_{ij}) = \varphi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$, uma vez que ξ_{ij} é função de $(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$, temos que a derivada total na equação acima fica escrita como

$$\dot{\rho}_i = \sum_{j \in \mathcal{N}_i} m_j \nabla_i W_{\Sigma}(\xi_{ij}) \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j). \quad (5.12)$$

Combinando a equação acima com a equação de conservação de massa, Equação (5.3), temos

$$\tilde{\nabla}_i \cdot \mathbf{v}_i = -\frac{1}{\rho_i} \sum_{j \in \mathcal{N}_i} m_j \nabla_i W_{\Sigma}(\xi_{ij}) \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j). \quad (5.13)$$

A forma simetrizada da taxa de trabalho de compressão, $-\frac{P_i}{\rho_i} \tilde{\nabla}_i \cdot \mathbf{v}_i$, requer uma elaboração um pouco mais longa que os passos executados nas equações anteriores. Podemos escrever a taxa de trabalho de compressão utilizando o resultado anterior, na equação SPH do divergente:

$$-\frac{P_i}{\rho_i} \tilde{\nabla}_i \cdot \mathbf{v}_i = \sum_{j \in \mathcal{N}_i} m_j \nabla_i W_{\Sigma}(\xi_{ij}) \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \frac{P_i}{\rho_i^2}. \quad (5.14)$$

Contudo, esta última forma não é simetrizada, uma vez que os termos de pressão e densidade aparecem apenas para a partícula i .

De modo semelhante ao que foi feito para derivarmos a Equação (5.10), podemos escrever

$$-\frac{P_i}{\rho_i} \tilde{\nabla}_i \cdot \mathbf{v}_i = -\tilde{\nabla}_i \cdot \left(\frac{P_i}{\rho_i} \mathbf{v}_i \right) + \mathbf{v}_i \cdot \tilde{\nabla}_i \left(\frac{P_i}{\rho_i} \right)$$

Transcrevendo cada termo do lado direito da equação anterior, através da Equação (5.5), temos

$$\begin{aligned} -\tilde{\nabla}_i \cdot \left(\frac{P_i}{\rho_i} \mathbf{v}_i \right) &= -\sum_{j \in \mathcal{N}_i} \nabla_i W_{\Sigma}(\xi_{ij}) \cdot \left(\frac{P_j}{\rho_j^2} \mathbf{v}_j \right), \\ \mathbf{v}_i \cdot \tilde{\nabla}_i \left(\frac{P_i}{\rho_i} \right) &= \sum_{j \in \mathcal{N}_i} m_j \mathbf{v}_i \cdot \nabla_i W_{\Sigma}(\xi_{ij}) \left(\frac{P_i}{\rho_j^2} \right). \end{aligned}$$

Combinando esses dois últimos resultados, temos

$$-\frac{P_i}{\rho_i} \tilde{\nabla}_i \cdot \mathbf{v}_i = \sum_{j \in \mathcal{N}_i} m_j \nabla_i W_{\Sigma}(\xi_{ij}) \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \frac{P_i}{\rho_j^2}. \quad (5.15)$$

Esta última equação incide no mesmo problema de quebra de simetria reportada mais acima sobre a Equação (5.14), só que, agora, é com respeito à partícula j . Contudo, somando ambas equações, membro a membro, em seguida, dividindo os resultado, membro a membro por dois, chegamos finalmente à forma simetrizada da equação adiabática SPH da segunda lei da termodinâmica

$$\dot{u}_i = -\frac{P_i}{\rho_i} \tilde{\nabla}_i \cdot \mathbf{v}_i = \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{N}_i} m_j \nabla_i W_{\Sigma}(\xi_{ij}) \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \left(\frac{P_i}{\rho_i^2} + \frac{P_j}{\rho_j^2} \right). \quad (5.16)$$

5.5 Viscosidade artificial SPH

A equação adiabática de conservação de energia, Equação (5.16), bem como a equação de conservação de momento, Equação (5.2), envolvem variações de pressão em velocidade, que podem funcionar bem em situações de baixas taxas de compressão ou de expansão. Contudo, em regimes de fortes taxas de compressão, ou mesmo de rarefação, denominados choques, o modelo adotado para pressão, com base em livros clássicos de mecânica dos fluidos e termodinâmica, essas equações falham.

O motivo é que, em situações de choque, as colisões entre as moléculas ou átomos

do gás passam a dominar o regime de escoamento no que, macroscopicamente, é chamado de viscosidade aerodinâmica. No caso de simulações computacionais, não temos como entrar nesses pormenores de natureza microscópica devido à altíssima, digamos exponencial, diferença de escalas entre o que é modelado em SPH e o que é modelado na física atômica e molecular.

John von Neumann, no desenvolvimento do computador do Projeto Manhattan, ao realizar simulações de choque, introduziu um modelo de viscosidade artificial (BAL-SARA, 1995, vide referências internas), que simula os efeitos microscópicos dos choques reais.

Simulações de fluidos, que não possuem um modelo de viscosidade artificial, não são robustas a situação de choque, podendo ocorrer desde erros numéricos e instabilidade do integrador de órbitas, como também pode ocorrer atropelos entre as partículas (OWEN, 2004; CARTWRIGHT; STAMATELLOS, 2010; HOSONO; SAITOH; MAKINO, 2016).

Numa boa simulação SPH, as partículas não atropelam umas as outras. Ao invés, essas devem reter qualquer tendência a furar os elementos de volume lagrangiano. Particularmente, (OWEN, 2004) propõe um modelo tensorial de viscosidade artificial que é mais adequado a simulações com SPH anisotrópico.

O modelo proposto por Marinho (MARINHO, 1997) é adequado para choques magneto-hidrodinâmicos. Contudo, o modelo ainda é baseado na versão isotrópica de SPH.

Admitimos que já adotamos algum modelo tensor de viscosidade artificial, \mathbf{Q}_{ij} , que detecta rápida aproximação entre as partículas i e j de modo a impedir a superposição da vizinhança de suavização \mathcal{N}_i , centrada na partícula i , e \mathcal{N}_j , centrada em j , respectivamente. Assim, generalizamos os termos entre paênteses nas equações (5.10) e (5.16) na seguinte forma

$$\mathbf{T}_{ij} = \frac{P_i}{\rho_i^2} + \frac{P_j}{\rho_j^2} + \mathbf{Q}_{ij}, \quad (5.17)$$

onde \mathbf{P} é uma forma generalizada, tensor, da pressão hidrodinâmica, que pode incorporar tensões elásticas, o tensor de tensões eletromagnéticas de Maxwell etc. No caso mais simples, em que só temos pressão isotrópica, consideramos apenas $\mathbf{P} = \mathbf{1}P$ na equação acima.

Da Equação (5.17), podemos reescrever a equação de conservação de momento (5.2) numa forma mais abrangente

$$\dot{\mathbf{v}}_i = - \sum_{\forall \beta \in \mathcal{N}_i} m_j \nabla_i W_{\Sigma}(\xi_{ij}) \cdot \mathbf{T}_{ij} + \mathbf{f}_i. \quad (5.18)$$

A Equação (5.4), de conservação de energia, ganha um novo aspecto

$$\dot{u}_i - \frac{1}{2} \sum_{\forall \beta \in \mathcal{N}_i} m_j \nabla_i W_{\Sigma}(\xi_{ij}) \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \cdot \mathbf{T}_{ij} = \Gamma_i - \Lambda_i. \quad (5.19)$$

5.6 Sumário das equações anisotrópicas SPH

Sumariamente, listamos todas as equações SPH de movimento, utilizando um núcleo anisotrópico de interpolação:

1. Taxa de variação da partícula i :

$$\dot{\mathbf{x}}_i = \mathbf{v}_i; \quad (5.20)$$

2. taxa de variação da velocidade, equação de conservação do momento:

$$\dot{\mathbf{v}}_i = - \sum_{\forall \beta \in \mathcal{N}_i} m_j \nabla_i W_{\Sigma}(\xi_{ij}) \cdot \mathbf{T}_{ij} + \mathbf{f}_i; \quad (5.21)$$

3. taxa de variação da energia interna específica, equação da segunda lei da termodinâmica:

$$\dot{u}_i - \frac{1}{2} \sum_{\forall \beta \in \mathcal{N}_i} m_j \nabla_i W_{\Sigma}(\xi_{ij}) \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \cdot \mathbf{T}_{ij} = \Gamma_i - \Lambda_i; \quad (5.22)$$

4. taxa de variação de densidade, equação de conservação de massa, também conhecida como equação de continuidade:

$$\dot{\rho}_i = \sum_{j \in \mathcal{N}_i} m_j \nabla_i W_{\Sigma}(\xi_{ij}) \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j); \quad (5.23)$$

5.7 Modelo termodinâmico

Tanto a pressão P quanto a densidade ρ se relacionam com a energia térmica específica u através da equação de estado $F(P, \rho, u) = 0$.

Em se tratando de simulações adiabáticas, a pressão pode ser escrita em função da densidade e da energia térmica específica como

$$P_i = (\gamma - 1)\rho_i u_i, \quad (5.24)$$

onde γ é o coeficiente de expansão adiabática, que é definido como a razão entre a capacidade térmica a pressão constante, C_P , e a capacidade térmica a volume constante C_V (SERWAY; JR., 2004):

$$\gamma = \frac{C_P}{C_V} \quad (5.25)$$

Caso seja adotado um modelo de transformação isotérmica – a temperatura T é constante e, como u é proporcional a T , u também é constante – a relação entre

pressão e densidade é de simples proporcionalidade:

$$P_i = c_{\text{iso}}^2 \rho_i, \quad (5.26)$$

onde c_{iso} é a velocidade isotérmica do som no gás.

Modelos mais realistas e, portanto, mais sofisticados podem ser vistos, por exemplo, na tese de doutorado de Marinho (1997).

5.8 Requisitos computacionais

As primeiras simulações computacionais remontam desde a Segunda Guerra Mundial, durante o Projeto Manhattan, e, especificamente, as primeiras simulações de grande porte foram realizadas no início dos anos 1960 com os trabalhos de Aarseth (1963). Essas últimas foram realizadas com programas implementados em Fortran, em computadores que ocupavam uma sala de uma Central de Processamento de Dados, mas, que hoje em dia, poderiam ser realizadas num simples smart-phone.

Via de regra, as partículas computacionais são representadas na forma de uma matrix $N \times (M + 6)$, usualmente chamadas de data-sets. Cada uma das N linhas corresponde a uma partícula. A primeira coluna é geralmente reservada para armazenar as massas $m_{i=1, \dots, N}$ individuais das partículas. Cada partícula é identificada, sem duplicata, pelas suas 3 coordenadas, (x, y, z) .

par O número 6, na fórmula no parágrafo acima, significa que necessariamente deve haver, também, mais 3 colunas para as velocidades (v_x, v_y, v_z) . No caso de simulações SPH adiabáticas, ou mesmo mais sofisticadas, deve haver uma coluna para armazenar as energias térmicas específicas. Tal requisito não é necessário no caso de simulações isotérmicas. Neste caso, a velocidade isotérmica do som, c_{iso} , passa a ser um parâmetro global.

Um requisito essencial para simulações SPH é que se tenha, ou se implemente, um algoritmo rápido para busca dos k vizinhos mais próximos. Geralmente, este é o que causa maior carga na eficiência da simulação. Um método eficiente para busca anisotrópica dos k vizinhos mais próximos é o proposto por Marinho e Andrezza (2010). O mesmo algoritmo é reusado como o método de busca das contribuições para força gravitacional exercida por cada elemento do fluido sobre o outro, necessário para simulações de sistemas auto-gravitantes (MARINHO; LÉPINE, 2000; MARINHO; ANDREAZZA; LÉPINE, 2001).

Por último, deve-se adotar um integrador temporal para prever as novas posições, velocidades etc. através das equações diferenciais listadas na Seção 5.6. Para simulações baseadas em métodos de árvore (HERNQUIST; KATZ, 1989; MARINHO, 1997) é suficiente um integrador leap-frog com múltiplas escalas temporais.

6 Conclusão

Neste trabalho foi feito um estudo das funções generalizadas e teoria de distribuição, que serviram de alicerce teórico para o estudo de técnicas de interpolação integral e de estimadores de densidade.

O modelo de interpolação isotrópica e respectivo estimador de densidades serviu de base para uma revisão do modelo matemático das equações de movimento da smoothed particle hydrodynamics (SPH), o qual denominamos SPH anisotrópico.

A proposta de viscosidade artificial desenvolvida por (GINGOLD; MONAGHAN, 1977; LATTANZIO et al., 1985), nos permitiu ter simulações de ondas de choque que previne a sobreposição das partículas que segundo (LIU; LIU, 2003) essa proposta de viscosidade artificial é a mais utilizada na literatura de SPH.

Das possíveis fontes de erro da técnica SPH, podemos ressaltar que uma das mais importantes contribuições deve-se à maneira usual de se escrever a equação SPH de continuidade, sem levar em conta os efeitos de variações dos comprimentos. A equação de continuidade SPH é utilizada por muitos autores para se deduzir a equação SPH da primeira lei da termodinâmica, arrastando assim contribuições de erro no cálculo do divergente da velocidade.

Geralmente, SPH aparece na literatura como um modelo relativamente simples e os autores dão poucas referências aos fundamentos matemáticos do método. De fato, se compararmos a simplicidade da teoria exposta no Capítulo 5 com a alta complexidade teórica desde o Capítulo 2 até o Capítulo 4, percebemos o esforço matemático necessário para justificar cada uma das equações utilizadas na técnica SPH, tanto na formulação clássica (isotrópica) quanto na presente formulação anisotrópica.

Referências

ALPAY, D.; BALL, J. A.; GOHBERG, I. *Extension and Interpolation of Linear Operators and Matrix Functions*. 1st. ed. [S.l.]: Birkhäuser Basel, 1990. (Operator Theory: Advances and Applications 47). ISBN 978-3-7643-2530-5,978-3-0348-7701-5.

BALSARA, D. S. Von neumann stability analysis of smooth particle hydrodynamics – suggestions for optimal algorithms. *Journal of Computational Physics*, v. 121, p. 357–372, 1995.

BASTIAANS, M. J. *Advanced Topics in Shannon Sampling and Interpolation Theory*. [S.l.]: Springer-Verlag New York, 1993. (Springer Texts in Electrical Engineering). ISBN 978-1-4613-9759-5,978-1-4613-9757-1.

CARTWRIGHT, A.; STAMATELLOS, D. Controlling artificial viscosity in smoothed particle hydrodynamics simulations of accretion disks. *A&A*, v. 516, p. A99, jun. 2010.

DUDA, R. O.; HART, P. E.; STORK, D. G. *Pattern Classification*. [S.l.]: Wiley, 2001. 680 p. ISBN 978-0-471-05669-0.

FOLLAND, G. B. *Real Analysis*. 2nd. ed. New York: [s.n.], 1999. 132 p.

GEL'FAND, I. M.; SHILOV, G. E. *Generalized Functions: Spaces of Fundamental and Generalized Functions*. New ed. [S.l.]: Academic Press, 1968. v. 1. 271 p. ISBN 9780122795022,0122795024.

GINGOLD, R. A.; MONAGHAN, J. J. *Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars*. [S.l.]: Royal Astronomic Society, 1977. v. 181. 375–389 p.

HERNQUIST, L.; KATZ, N. A unification of SPH with the hierarchical tree method. *Astrophysical Journal Supplement Series*, v. 70, p. 419–446, June 1989. ISSN 0067-0049.

HOCKNEY, R. W.; EASTWOOD, J. W. *Computer Simulation Using Particles*. First. [S.l.]: Institute of Physics Publishing, 1988. 540 p. Printed. ISBN 0-85274-392-0.

HOSONO, N.; SAITOH, T. R.; MAKINO, J. A comparison of SPH artificial viscosities and their impact on the keplerian disk. *Astrophysical Journal Supplement Series*, v. 224, p. 32, jun. 2016.

LATTANZIO, J. et al. Interstellar cloud collisions. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 215,, p. 125–147, 1985.

- LIU, G. R.; LIU, M. B. *Smoothed Particle Hydrodynamics: A Meshfree Particle Method*. [S.l.]: World Scientific, 2003.
- LUCY, L. B. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *Astronomical Journal*, v. 82, p. 1013–1024, dez. 1977.
- MAHALANOBIS, P. C. On the generalised distance in statistics. In: *Proceedings of the National Institute of Sciences of India*. [S.l.: s.n.], 1936. (Proceedings of the National Institute of Sciences of India, v. 2), p. 49–55.
- MANTEGNA, R. N.; STANLEY, H. E. *An Introduction to Econophysics: Correlations and Complexity in Finance*. [S.l.]: Cambridge University Press (Cambridge, UK), 1999. 145 p.
- MARINHO, E. P. *Implementação de um código lagrangiano tridimensional para o estudo da dinâmica do meio Interestelar*. 133 p. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo (USP), Instituto Astronômico e Geofísico (IAG), Maio 1997.
- MARINHO, E. P. Pattern recognition issues on anisotropic smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Physics: Conference Series*, IOP Publishing, v. 490, n. 2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013, p. 012063, 2014.
- MARINHO, E. P.; ANDREAZZA, C. M. Anisotropic k-nearest neighbor search using covariance quadtree. In: _____. *Mecánica Computacional. Computational Geometry (A)*. Buenos Aires, Argentina: Asociación Argentina de Mecánica Computacional, 2010. (Mecánica Computacional, XXIX), cap. Anisotropic K-nearest Neighbor Search Using Covariance Quadtree, p. 6045–6064.
- MARINHO, E. P.; ANDREAZZA, C. M.; LÉPINE, J. R. D. SPH simulations of clumps formation by dissipative collisions of molecular clouds. ii. magnetic case. *Astronomy and Astrophysics*, v. 379, p. 1123–1137, dez. 2001.
- MARINHO, E. P.; BALDASSIN, A. Vectorized algorithms for quadtree construction and descent. In: . [S.l.: s.n.], 2012.
- MARINHO, E. P.; LÉPINE, J. R. D. SPH simulations of clumps formation by dissipative collision of molecular clouds. i. non magnetic case. *Astronomy and Astrophysics Supplement*, v. 142, p. 165–179, fev. 2000.
- MARTEL, H. et al. Adaptive smoothed particle hydrodynamics with application to galaxy and large-scale structure formation. *Memorie Della Societa Astronomica Italiana*, XX, p. 11pp, 1993.
- MARVASTI, F. Nonuniform sampling. In: II, R. J. M. (Ed.). *Advanced Topics in Shannon Sampling and Interpolation Theory*. [S.l.: s.n.], 1993, (Springer Texts in Electrical Engineering). cap. 4, p. 121–156. ISBN ISBN-13: 978-1-4613-9759-5.
- MONAGHAN, J. *Smoothed Particle Hydrodynamics and Its Diverse Applications*. [S.l.]: Annual Review of Fluid Mechanics , 44(1):323-346, 2012.
- MÜLLER, E. Living reviews in computational astrophysics. Springer Nature, 2016. ISSN 2365-0524.

- NATANSON, I. P. *Constructive function theory, - interpolation and approximation quadratures*. 1st. ed. [S.l.]: Ungar Pub Co, 1965. v. 3. ISBN 0804446970,9780804446976.
- OWEN, J. M. A tensor artificial viscosity for SPH. *Journal of Computational Physics*, v. 201, p. 601–629, dez. 2004.
- OWEN, J. M. et al. Adaptive smoothed particle hydrodynamics : Methodology. ii. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, v. 116, p. 155–209, June 1998.
- PARZEN, E. On estimation of a probability density function and mode. *Ann. Math. Statist.*, The Institute of Mathematical Statistics, v. 33, n. 1, p. 1065–1076, September 1962.
- SAKHNOVICH, L. A. *Interpolation Theory and Its Applications*. 1st. ed. [S.l.]: Springer Netherlands, 1997. (Mathematics and Its Applications 428). ISBN 978-94-010-6516-0,978-94-009-0059-2.
- SCHOENBERG, I. J. *Cardinal Spline Interpolation*. [S.l.]: Society for Industrial and Applied Mathematics, 1973.
- SERWAY, R.; JR., J. J. *Princípios de Física*. [S.l.]: São Paulo: Cengage Learning, 2004. v. 2. 609-611 p. ISBN 85-221-0413-1.
- SHANKAR, V. et al. A radial basis function (rbf) finite difference method for the simulation of reaction–diffusion equations on stationary platelets within the augmented forcing method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 75, n. 1, p. 1–22, 2014. ISSN 1097-0363. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/flid.3880>>.
- SYMON, K. R. *Mecânica*. [S.l.]: Editora Campus Ltda, 1982. 685 p. ISBN 85-7001-087-7.
- THOMPSON, P. A. *Compressible fluid dynamics*. New York: McGraw-Hill Book Company, 1972. 665 pp p.

A Integral de Lebesgue

Conforme a teoria de Lebesgue (NATANSON, 1965, por exemplo, para uma leitura mais detalhada), uma função $f : \mathbb{D} \mapsto \mathbb{R}^+$ é dita *função Lebesgue mensurável*, sobre um domínio $\mathbb{D} \subseteq \mathbb{R}^n$, se e somente se a restrição $f(\mathbf{x}) > t$ na sua imagem reflete *subconjuntos mensuráveis* $\mathbb{E}_t \subseteq \mathbb{D}$, definidos como

$$\mathbb{E}_t = \{\mathbf{x} \in \mathbb{D} \mid f(\mathbf{x}) > t\}. \quad (\text{A.1})$$

Denominamos o parâmetro t como parâmetro de corte da função f , que é um número real arbitrariamente escolhido.

Certamente, a reunião integral de todos os subconjuntos \mathbb{E}_t , com $t \geq 0$, é o próprio domínio \mathbb{D} da função mensurável f , a saber

$$\bigcup_{t \geq 0} \mathbb{E}_t = \mathbb{E}_0 = \mathbb{D}. \quad (\text{A.2})$$

Os subconjuntos \mathbb{E}_t são ditos mensuráveis porque supõe-se que existe uma função medida $\mu : 2^{\mathbb{D}} \mapsto \mathbb{R}_*^+$, que expressa o tamanho de qualquer subconjunto $\mathbb{A} \subseteq \mathbb{D}$, na forma de um número não negativo $\mu(\mathbb{A})$. Por conseguinte, intui-se a seguinte definição:

Definição A.1. *Define-se função transformada de Lebesgue, denota-se f^* , como sendo a medida dos subconjuntos mensuráveis de f , ou seja, dado o corte t :*

$$f^*(t) = \mu(\mathbb{E}_t). \quad (\text{A.3})$$

No caso do domínio \mathbb{D} ser um intervalo real, então a função $\mu(\mathbb{E}_t)$ reflete o comprimento total das faixas em \mathbb{D} que satisfazem a condição $f(x) > t$ (vide Figura A.1). Já no caso de \mathbb{D} ser uma região com dimensionalidade superior à unidade, então $\mu(\mathbb{E}_t \subseteq \mathbb{D})$, é uma medida de volume de \mathbb{E}_t . Assim, o produto $f^*(t)dt$ corresponde ao volume do corte infinitesimal, cuja espessura é dt , e cuja base corresponde ao subconjunto mensurável \mathbb{E}_t , vide exemplo unidimensional ilustrado na Figura A.1. De acordo com a figura, o elemento de integração é o retângulo horizontal, formado aproximadamente pelas interseções entre as retas $y = t$ e $y = t + dt^3$ e a curva $y = f(x)$, cuja área sombreada $\mu(\mathbb{E}_t)dt^3$.

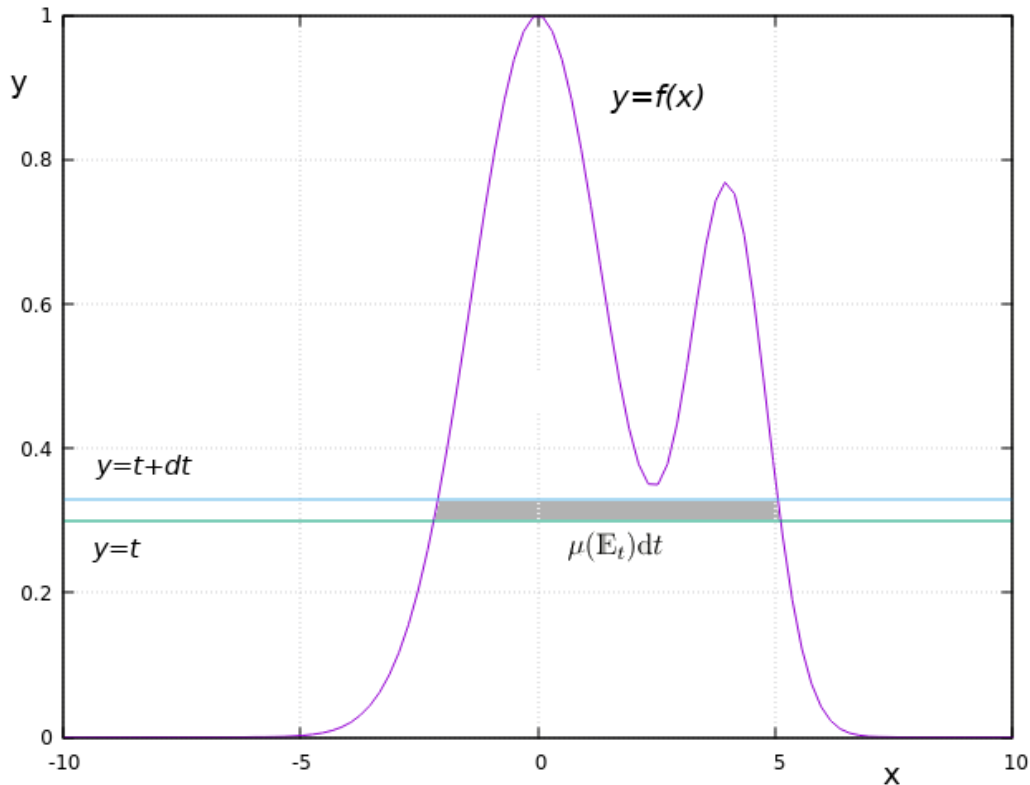


Figura A.1: Versão 1D da integral de Lebesgue. Diferentemente da integral de Rieman, os elementos de integração são faixas horizontais.

Observemos, ainda com base na figura, que a função medida, $f^*(t)$, é decrescente em t , e esta torna-se nula para algum t_{\max} , correspondendo ao valor máximo de f .

Seguindo a intuição fornecida nos parágrafos anteriores, a integral de Lebesgue é definida como segue:

Definição A.2. A integral de Lebesgue, denota-se $\int_{\mathbb{D}} f d\mu$, de uma função mensurável $f : \mathbb{D} \mapsto \mathbb{R}$, é definida como

$$\int_{\mathbb{D}} f d\mu = \int_0^{\infty} f^*(t) dt. \quad (\text{A.4})$$

As contribuições não nulas para a integral acima devem-se a subconjuntos, ou intervalos, cujas medidas são também não nulas, $f^*(t) > 0$. Contudo, podem existir regiões (intervalos) onde as medidas são nulas, $f^*(t) = 0$. Uma medida $\mu(\mathbb{E}_t)$ é nula se, e somente se, a condição $f(\mathbf{x}) > t$ não pode ser satisfeita, o que equivale a ter $\mathbb{E}_t = \emptyset$ na Equação (A.1). Um bom exemplo de tal situação, é considerar, tal qual na Figura A.1, que f possui um máximo absoluto, $f(\mathbf{x}_c) = t_{\max}$, em \mathbb{D} , e tentarmos encontrar \mathbb{E}_t para $t > t_{\max}$, que obviamente é um conjunto vazio.

Duas funções f e g , ambas definidas no mesmo domínio \mathbb{D} , são iguais em quase todo lugar se, e somente se, para algum $t > 0$, tivermos $\mu(\{\mathbf{x} \in \mathbb{D} \mid f(\mathbf{x}) \neq g(\mathbf{x})\}) = 0$. Chamemos tais funções, satisfazendo a condição anterior, como *Lebesgue idênticas*.

A Figura A.2 ilustra o problema de identificação de funções iguais em quase todo

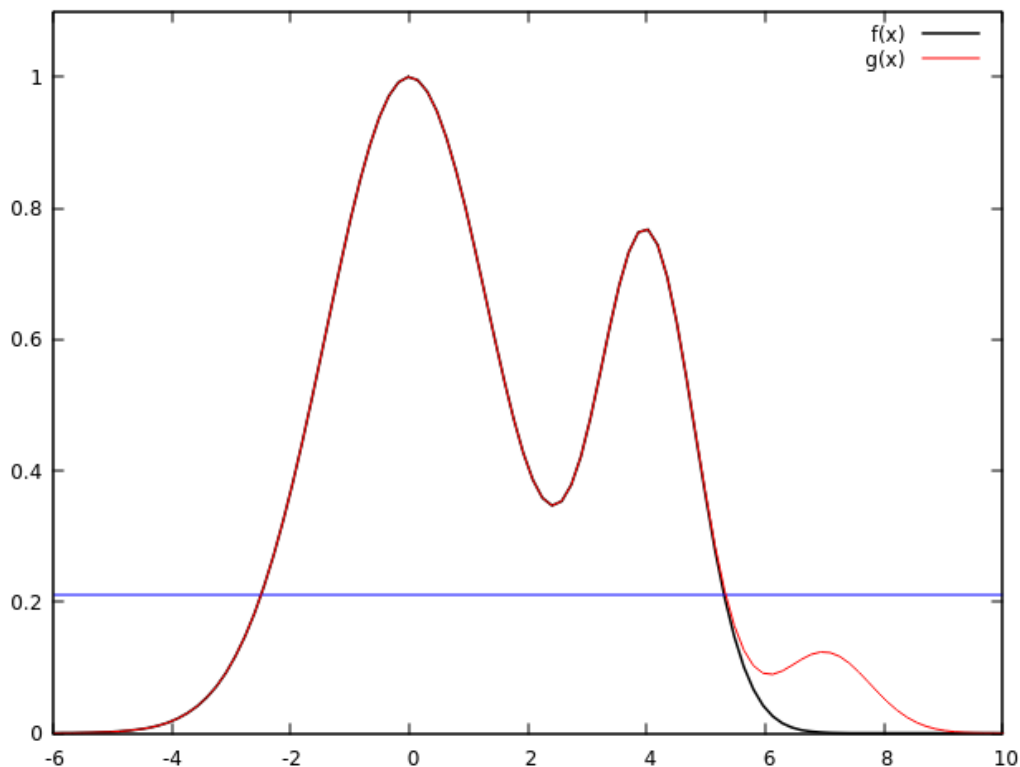


Figura A.2: Funções idênticas em quase todo domínio.

domínio. De acordo com a ilustração, existe algum $t_c > 0$ tal que ambas as funções f (em preto) e g (em vermelho) são idênticas em termos de medida de Lebesgue, isto é, $\mu(f(x) > t_c) = \mu(g(x) > t_c)$, onde a linha de corte, $y = t_c$ é representada em azul. Por outro lado, para $t \leq t_c$, f e g são diferentes, inclusive suas medidas.

Por último, é fácil verificar que, se f e g são Lebesgue idênticas, e f é Lebesgue integrável, então g também é uma função Lebesgue integrável. Assim, o valor de uma função mensurável em um determinado ponto não é, em certo sentido, o seu aspecto mais relevante, mas sim nas regiões onde esta função dê contribuições não nulas à integral de Lebesgue.