Universidade de São Paulo

Instituto de Física de São Carlos

Departamento de Física e Ciência dos Materiais

Dissertação de Mestrado

Implementação Numérica do Método *Level Set* para Propagação de Curvas e Superfícies

Lia Munhoz Benati Napolitano

Orientador: *Prof. Dr. Esmerindo de Sousa Bernardes*

Dissertação apresentada ao Instituto
de Física de São Carlos para a obtenção do
título de *Mestre em Física Básica*

17 de Novembro de 2004

Agradecimentos

- Agradeço ao *Prof. Dr. Esmerindo de Sousa Bernardes*, meu orientador, pelo incontestável apoio e pelas notáveis sugestões que, certamente, foram de grande valia para a realização deste trabalho;
- Agradeço aos meus pais, *Elena* e *Vanderlei*, pelo ilimitado amor, pela amizade e por ouvirem com igual atenção tanto meus reclames como também minhas vitórias;
- Minha gratidão ao meu querido companheiro de infância e juventude, meu irmão *Davi*, pela amizade, pelo carinho, pela atenção e pelas inesquecíveis aventuras que imaginamos ter vivido quando crianças;
- Agradeço especialmente ao meu marido *Reginaldo*, pela amizade, pela paciência, pelos formidáveis diálogos a respeito de *Ciência* e por me propiciar viver o amor em plenitude;
- Agradeço às secretárias da assistência acadêmica, *Wladerez* e *Cristiane*, pela cordialidade e presteza em solucionarem as questões burocráticas;
- Meus sinceros agradecimentos à secretária do grupo, *Isabel Rosani*, pela amizade e por todos os auxílios prestados;
- Agradeço ao *Prof. Dr. José Pedro Andreetta* e ao *Prof. Dr. Antonio Carlos Hernandes* pelo interesse demonstrado por este trabalho, pelos esclarecimentos de dúvidas relacionadas à área de *crescimento de cristais* e pelas apreciáveis sugestões de trabalhos futuros;
- Agradeço aos meus companheiros de sala e de grupo *Rafael*, *César*, *Patrícia*, *Germán*, *Guilherme*, *Camila*, *Alexandre*, *Felipe*, *Yuri* e *Gilberto* pela amizade, pela atenção e pela disponibilidade em ajudarem quando me deparei com dificuldades relacionadas ao **Fortran**, **Maple**, **GNUplot** ou **L^AT_EX**;
- Agradeço ao meu grande companheiro de estudos, *Paulo Eduardo*, pela amizade, pelo apoio e pelas inúmeras tentativas de me tranqüilizar nos dias precedentes às provas;

- Meus sinceros agradecimentos ao *Márcio* e aos funcionários da Central de Material Didático, *Patrícia* e *Samuel*, por me permitirem utilizar o Scanner;
- Externo meus agradecimentos à **CAPES**, *Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior*, pelo financiamento deste projeto de Mestrado.
- Por fim, meu muito obrigada *àqueles* que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho.

Resumo

Nesta dissertação de Mestrado será apresentada uma poderosa técnica numérica, conhecida como *método Level Set*, capaz de simular e analisar movimentos de curvas em diferentes cenários físicos. Tal método - formulado por Osher e Sethian [1] - está sedimentado na seguinte idéia: ***representar uma determinada curva (ou superfície) Γ como a curva de nível zero (zero level set) de uma função Φ de maior dimensão (denominada função Level Set).***

A equação diferencial do tipo *Hamilton-Jacobi* que descreve a evolução da função Level Set é discretizada através da utilização de acurados esquemas hiperbólicos e, como resultado de tal acurácia, obtém-se uma formulação numérica capaz de tratar eficazmente *mudanças topológicas* e/ou *descontinuidades* que, eventualmente, podem surgir no decorrer da propagação da curva (ou superfície) de nível zero. Em virtude da eficácia e versatilidade do método Level Set, esta técnica numérica está sendo amplamente aplicada à diversas áreas científicas, incluindo mecânica dos fluidos, processamento de imagens e visão computacional, crescimento de cristais, geometria computacional e ciência dos materiais. Particularmente, o propósito deste trabalho equivale ao *estudo dos fundamentos do Método Level Set* e, por fim, visa-se aplicar tal modelo numérico à *problemas existentes na área de crescimento de cristais*.

Abstract

In this dissertation, we present a powerful numerical technique known as *Level Set Method* for computing and analyzing moving fronts in different physical settings. The method - formulated by Osher and Sethian [1] - is based on the following idea: **a curve (or surface) is embedded as the *zero level set* of a higher-dimensional function Φ (called *level set function*). Then, we can link the evolution of this function Φ to the propagation of the curve itself through a *time-dependent initial value problem*. At any time, the curve is given by the *zero level set* of the time-dependent *level set function* Φ .**

The evolution of the level set function Φ is described by a *Hamilton-Jacobi type partial differential equation*, which can be discretised by the use of accurate methods for hyperbolic equations. As a result, the Level Set Method is able to track complex curves that can develop large spikes, sharp corners or change its topology as they evolve. Because of its versatility and efficacy, this numerical technique has found applications in a large number of areas, including fluid mechanics, image processing and computer vision, crystal growth, computational geometry and materials science. Particularly, the aim of this dissertation has been to understand the fundamentals of Level Set Method and its final goal is compute the motion of bondaries in crystal growth using this numerical model.

Conteúdo

Agradecimentos	i
Resumo	iv
Abstract	v
Lista de Figuras	ix
1 Introdução	1
2 Conceitos Fundamentais	8
2.1 Leis de Conservação e Entropia	9
2.2 Conceitos Fundamentais sobre EDPs	12
2.3 Características e Formação de Choques	14
2.4 Diferenças Finitas	20
2.5 Convergência, Consistência e Estabilidade	25
3 O Método Level Set	29
3.1 O Algoritmo	33
4 Resultados e Discussão	39
5 Conclusão	54
Apêndices	59
A Condição de Stefan	59
B Leis de Conservação	61
C Curvas	65
C.1 Parametrização Natural	65

C.2	Curvatura	66
C.3	Torção	69
C.4	Fórmulas de Frenet	71
C.5	Curvatura e Diferenças Finitas	73

Lista de Figuras

1.1	Cristais de neve.	2
1.2	Câmara de difusão de vapor de água utilizada por Mason e Hallett.	3
1.3	Esquematisação do problema de Stefan.	5
2.1	Escoamento de um fluido por um tubo com área unitária.	9
2.2	Curvas Características e formação de Choques.	17
2.3	Estêncil referente à aproximação por diferenças finitas progressivas	23
2.4	Estêncil referente à aproximação por diferenças finitas centrais.	23
2.5	Estêncil referente à aproximação por diferenças finitas atrasadas.	23
2.6	Estêncil da equação de convecção discretizada por diferenças finitas sobreposto às curvas características.	25
2.7	Relação entre discretização e consistência.	27
3.1	Esquematisação da filosofia do método Level Set.	29
3.2	Propagação de uma curva no formato "V " utilizando diferenças finitas centrais.	32
3.3	Propagação de uma curva no formato "V " utilizando o método Level Set.	32
3.4	Perfil da função Φ calculado a partir de uma circunferência centrada em algum ponto do domínio.	38
4.1	Propagação de uma circunferência sob a ação de um campo de velocidade uniforme.	40
4.2	Perfil inicial de uma função Φ cuja curva de nível zero corresponde a uma estrela.	40
4.3	Propagação de uma curva no formato estrela sob a ação de um campo de velocidade uniforme.	42
4.4	Propagação de uma curva no formato estrela sob a ação de um campo de velocidade dependente da curvatura.	42
4.5	Propagação para a direita em um campo de velocidade externo.	44
4.6	Propagação para a esquerda em um campo de velocidade externo.	44

4.7	Perfil inicial de uma função Φ cuja curva de nível zero corresponde à uma espiral.	46
4.8	Propagação de uma curva no formato espiral sob a ação de um campo de velocidade uniforme.	47
4.9	Propagação de uma curva no formato espiral sob a ação de um campo de velocidade dependente da curvatura.	48
4.10	Perfil inicial de uma função Φ cuja curva de nível zero corresponde a uma <i>flor</i>	50
4.11	Propagação de uma curva no formato flor sob a ação de um campo de velocidade externo.	50
4.12	Evolução de uma semente cristalina com simetria pontual de sexta ordem.	52
4.13	Evolução de uma semente cristalina com simetria pontual de oitava ordem.	53
A.1	Esquematização do problema de Stefan.	59
C.1	Diagramação para o entendimento do conceito de curvatura.	67
C.2	Diagramação para o entendimento do conceito de torção.	69
C.3	Planos: Normal, Osculante e Retificante.	70
C.4	Curvatura em regiões côncavas e convexas.	73

Introdução

“ There are more things in heaven and earth,
Than are dreamt of in your philosophy . . . ”

William Shakespeare

Sabemos hoje que *simetria* é um conceito indispensável na formulação das leis fundamentais da natureza, além de sua incontestável importância para a arte. Dentre a imensa variedade de formas simétricas exibidas pela natureza, os cristais sempre fascinaram o olhar humano; assim, unindo arte e ciência, o vasto panorama cristalino, onde cada cristal aparenta ser único, estimulou o Homem a embrenhar-se em uma longa odisséia visando compreender, modelar e controlar a morfologia dos cristais. Instigado em pesquisar as variabilidades das formas cristalinas, o pesquisador japonês Ukichiro Nakaya [3] foi quem primeiro produziu cristais de neve em laboratório e os caracterizou em oito padrões como mostrados na Figura 1.1(a). É válido observar que qualquer cristal de gelo encontrado na natureza, seja na forma de cristais de neve (Figura 1.1(b)) ou não, é uma combinação simetricamente disposta dos padrões exibidos na Figura 1.1(a).

Os padrões cristalinos descritos por Nakaya estimularam os cientistas a pesquisarem a influência dos *fatores ambientais* e dos *fatores hereditários* nas formas finais dos cristais. Assim, dispondo-se a estudar tal influência, Mason [2] realizou um experimento que consistia na seguinte idéia: um filamento de náilon foi colocado em uma câmara de difusão de vapor de água como a mostrada na Figura 1.2 e, após esse feito, o pesquisador em questão observou as formas dos cristais de gelo que se formaram junto ao filamento. É de grande valia mencionar que tais cristais de gelo desenvolveram-se em diferentes temperaturas e a variação das formas cristalinas obtidas via tal experimento estão catalogadas na Tabela 1.1.

Após o estável crescimento dos cristais de gelo no interior da câmara, Mason posicionou

(a) Padrões cristalinos em cristais de gelo.

(b) Fotografia de um cristal de gelo.

Figura 1.1: (a) Padrões cristalinos encontrados por Nakaya em cristais de gelo [3]. (b) Fotografia de um cristal de neve [4].

o filamento a uma distância tal que aqueles cristais que haviam crescido entre as temperaturas T_1 e T_2 estariam submetidos a uma outra variação térmica, T_3 - T_4 , que caracterizaria outras formas cristalinas. Ele observou que os antigos cristais sofreram transformações de modo a adquirirem formas cristalinas características da nova zona de temperatura T_3 - T_4 . Desse modo, Mason constatou que as formas cristalinas estavam vinculadas à temperatura do ambiente em que os cristais cresciam e, por conseguinte, eventuais variações térmicas acarretariam em mudanças morfológicas dos cristais.

Pode-se constatar, nitidamente, que os fatores hereditários não foram relevantes no experimento realizado por Mason; todavia, em poucos casos isolados, a influência de tais fatores possui um papel crucial na morfologia do cristal.

Figura 1.2: Câmara de difusão de vapor de água utilizada por Mason e Hallett para observar o crescimento de cristais em diferentes temperaturas [2].

0 a -3°C	<i>Placas finas hexagonais</i>
-3 a -5°C	<i>Agulhas</i>
-5 a -8°C	<i>Prismas ocos</i>
-8 a -12°C	<i>Placas hexagonais</i>
-12 a -16°C	<i>Cristais dendríticos</i>
-16 a -25°C	<i>Placas</i>
-25 a -50°C	<i>Prismas ocos</i>

Tabela 1.1: Formas cristalinas em função da variação térmica [2].

Descrito o clássico experimento proposto por Mason, convém expor, nos parágrafos subsequentes, outro relevante fenômeno envolvendo crescimento de cristais: a *solidificação dendrítica*.

Considere um recipiente contendo uma substância na fase líquida como, por exemplo, água. Suponha que o recipiente em questão seja suavemente e uniformemente resfriado a uma temperatura abaixo do ponto de congelamento do mesmo; contudo, deve-se precaver

para que não ocorra o congelamento do líquido inserido em tal recipiente.

O sistema descrito no parágrafo anterior encontra-se em um estado *metaestável*, onde qualquer perturbação - tal como o gotejamento de uma minúscula semente no interior do líquido - iniciará um rápido e instável processo conhecido como **solidificação dendrítica**¹. Convém salientar que quando objetiva-se estudar o crescimento de um cristal sólido (semente) imerso em um banho líquido super-resfriado é conveniente incluir os seguintes efeitos físicos [5]:

- *Super-resfriamento* → Quando o super-resfriamento é suficiente para iniciar o processo de instabilização da interface sólido/líquido, ocorrerá a formação de uma saliência que irá se projetar a partir da interface no líquido super-resfriado até um ponto em que o super-resfriamento seja apenas necessário para manter a força motriz do crescimento.
- *Anisotropia Cristalina* → Tendência do cristal crescer ao longo de *certos eixos de simetria*. A direção cristalográfica preferencial passa a exercer um efeito impositor e o crescimento cristalino será desviado para tal direção.
- *Tensão Superficial* → Dependência entre a *curvatura* e a *temperatura no contorno* que regulariza eventuais problemas durante o crescimento do cristal via suavização de quinas e prevenção da ocorrência de um estiramento excessivo da interface sólido/líquido.
- *Cinética Molecular* → Dependência entre a *velocidade de crescimento do cristal* e a *temperatura na interface* que impõe uma “falta” de energia para a ocorrência de um movimento excessivamente rápido da interface.
- *Condições Iniciais* → O *formato*, o *tamanho*, a *localização* e a *velocidade inicial de crescimento* da semente cristalina (ou sementes cristalinas), além da *distribuição de temperatura inicial* tanto no líquido quanto no sólido.

Após relatarmos literalmente o fenômeno conhecido como solidificação dendrítica, temos como meta a exposição matemática do mesmo, ou seja, pretendemos apresentar a *equação diferencial parcial*, as *condições iniciais* e as *condições de contorno* associadas ao processo em questão. É importante ressaltarmos que problemas que envolvem *interfaces em movimento e mudança de estado*, como o processo de solidificação dendrítica, é conhecido na literatura como *problema de Stefan* [6]. Consideremos, então, um recipiente quadrado, $B = [0, 1] \times [0, 1]$, preenchido com fases líquida e sólida de alguma substância pura (vide Figura 1.3).

¹Palavra de origem grega (*déndron*-árvore) que significa *arborescente*, ou seja, que apresenta ramificações semelhantes às da árvore.

As quantidades desconhecidas equivalem à *temperatura* $u(x, t)$ para $x \in B$ e a *interface sólido/líquido*, $\Gamma(t)$. Assumindo que a temperatura em cada ponto $x \in B$ satisfaça a equação de calor [7] em cada fase e, juntamente com uma condição inicial em B e condições de contorno sobre as paredes do recipiente, pode-se expressar as seguintes identidades:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (1.1)$$

sendo α conhecido como *coeficiente de difusividade térmica*.

$$u(x, t) = u_0(x) \quad \text{em } B \text{ quando } t = 0 \quad (1.2)$$

e

$$u(x, t) = u_B(x) \quad \text{para } x \in \partial B. \quad (1.3)$$

Figura 1.3: Esquemática do problema de Stefan.

Desde que a posição da interface móvel $\Gamma(t)$ é desconhecida, duas condições de contorno sobre tal curva são requeridas para a determinação tanto da temperatura $u(x, t)$, quanto da interface $\Gamma(t)$. Assim, a primeira condição de contorno, vinculada ao balanço de energia na interface devido à mudança de fase, equivale à clássica *condição de Stefan* (vide Apêndice A):

$$\kappa \left[\frac{\partial u}{\partial n} \right] = L_s \rho V_n \quad \text{sobre } \Gamma(t); \quad (1.4)$$

onde n é o *vetor normal* direcionado do sólido para o líquido, a quantidade $[\partial u / \partial n]$ intitula o *salto da componente normal do fluxo de calor* $\partial u / \partial n$ do sólido para o líquido através de

$\Gamma(t)$, V_n corresponde à componente normal da velocidade da interface (sendo esta positiva quando o líquido está congelando) e, finalmente, L_s equivale ao *calor latente de solidificação*.

A segunda condição de contorno sobre $\Gamma(t)$ refere-se à clássica relação de *Gibbs-Thomson* [5],

$$u(x, t) = -\epsilon_C(n)C - \epsilon_V(n)V \quad \text{para } x \text{ sobre } \Gamma(t); \quad (1.5)$$

onde C intitula a *curvatura* da curva, $\epsilon_C(n)$ equivale ao *coeficiente de tensão superficial* e $\epsilon_V(n)$ nomeia o *coeficiente da cinética molecular*. É válido salientar que quando a tensão superficial e a cinética molecular são funções *anisotrópicas* (ou seja, funções que variam com a direção), as mesmas serão descritas pelas seguintes identidades:

$$\begin{aligned} \epsilon_C(n) &= \epsilon_C(1 - A \cos(\kappa_A \theta + \theta_0)) \\ \epsilon_V(n) &= \epsilon_V(1 - A \cos(\kappa_A \theta + \theta_0)), \end{aligned} \quad (1.6)$$

onde ϵ_C , ϵ_V , A , κ_A e θ_0 são constantes que dependem do material estudado e do arranjo experimental utilizado e a quantidade θ corresponde ao ângulo formado entre a normal n e o eixo x .

Nesta dissertação de Mestrado será apresentada uma poderosa técnica numérica, conhecida como *método Level Set* ([8] e [9]), capaz de simular e analisar movimentos de curvas em diferentes cenários físicos. Tal método - formulado por Osher e Sethian [1] - está sedimentado na seguinte idéia: ***representar uma determinada curva (ou superfície) Γ como a curva de nível zero (zero level set) de uma função Φ de maior dimensão (denominada função Level Set).***

A equação diferencial do tipo *Hamilton-Jacobi* que descreve a evolução da função Level Set é discretizada através da utilização de acurados esquemas hiperbólicos e, como resultado de tal acurácia, obtém-se uma formulação numérica capaz de tratar eficazmente *mudanças topológicas* e/ou *descontinuidades* que, eventualmente, podem surgir no decorrer da propagação da curva (ou superfície) de nível zero. Em virtude da eficácia e versatilidade do método Level Set, esta técnica numérica está sendo amplamente aplicada à diversas áreas científicas, incluindo mecânica dos fluidos, processamento de imagens e visão computacional, crescimento de cristais, geometria computacional e ciência dos materiais.

Particularmente, o propósito deste trabalho equivale ao *estudo dos fundamentos do Método Level Set* e, por fim, visa-se aplicar tal modelo numérico à *problemas existentes na área de crescimento de cristais*² ([10], [5] e [1]). Desse modo, o problema de Stefan abordado anteriormente servirá como uma motivação à implementação da formulação Level

²A primeira aplicação do método *Level Set* em crescimento de cristais e solidificação dendrítica foi feita por Sethian e Strain [5].

Set, além de ser considerado um *laboratório* a partir do qual iremos constatar a robustez do método numérico em questão.

É válido mencionarmos que conceitos fundamentais como *Leis de Conservação*, *Entropia*, *Curvas Características e Formação de Choques*, *Equações de Diferenças Finitas*, *Convergência*, *Consistência* e *Estabilidade* estão intimamente associados ao desenvolvimento do modelo Level Set e, por esta razão, tais conceitos serão meticulosamente discutidos no **Capítulo 2** desta dissertação. No **Capítulo 3** serão apresentados tanto os fundamentos do *método Level Set* como também o processo de validação de tal formulação numérica e no **Capítulo 4** serão mostrados e discutidos os *resultados obtidos* via utilização do método em questão. As *conclusões*, como também, as intenções de *trabalhos futuros* estarão expostas no **Capítulo 5**. Finalmente, os **Apêndices** irão detalhar alguns tópicos apresentados no texto principal.

Conceitos Fundamentais

É válido mencionarmos que conceitos fundamentais como *Leis de Conservação*, *Entropia*, *Curvas Características* e *Formação de Choques*, *Equações de Diferenças Finitas*, *Convergência*, *Consistência* e *Estabilidade*, estão intimamente associados ao desenvolvimento do modelo Level Set e, por esta razão, tais temas serão meticulosamente discutidos durante o decorrer deste Capítulo. Assim, objetivando abordar detalhadamente os temas mencionados na frase anterior, organizamos este Capítulo em cinco seções.

As *Leis de Conservação* correspondem à uma classe de Equações Diferenciais Parciais direcionadas à compreensão de fenômenos de natureza físico-matemática como, por exemplo, *dinâmica de fluidos* e *problemas de evolução*. Visto que o método Level Set está associado à *evolução* de curvas e/ou superfícies, é plausível mencionarmos que a Teoria das Leis de Conservação será um tema extremamente relevante para o entendimento da formulação numérica em questão e, por este motivo, tal classe de equações diferenciais serão discutidas na **Seção 2.1** deste Capítulo ([11], [12] e [13]). Outro conceito essencial no estudo da formulação Level Set que será abordado na **Seção 2.1** refere-se à *entropia* pois, através de tal idéia, será possível determinar quais soluções são fisicamente aceitáveis para uma lei de conservação ([13], [8] e [9]). Na **Seção 2.2** serão *apresentados* e *exemplificados* os principais *aspectos matemáticos* que categorizam as Equações Diferenciais Parciais (EDPs) ([14] e [15]), enquanto que a **Seção 2.3** tem como finalidade expor os conceitos de *Curva Característica* e *Choques*, sendo estes últimos cruciais para a resolução numérica de problemas descritos pela equação Level Set ([13], [8], [9] e [15]). Na **Seção 2.4** será discutida a *discretização* de EDPs através do chamado *Método das Diferenças Finitas* ([14], [15], [8] e [9]) e, após a realização de tal feito, visando exemplificar a utilização de tal método, iremos discretizar a *equação de convecção*. Por fim, na **Seção 2.5** serão abordados os conceitos de *convergência*, *consistência* e *estabilidade* sendo estes fundamentais no âmbito das soluções numéricas de

EDPs.

2.1 Leis de Conservação e Entropia

Figura 2.1: Escoamento de um fluido por um tubo com área unitária.

Considere um fluido *ideal* não viscoso movendo-se, na *ausência de atrito*, ao longo de um tubo cuja área A da seção transversal é *uniforme* (vide Figura 2.1). Assuma $\rho(x, t)$, $v(x, t)$, $P(x, t)$ e $\epsilon(x, t)$ como sendo, respectivamente, a *densidade*, a *velocidade*, a *pressão* e a *energia interna* do fluido por unidade de massa. É conveniente, também, introduzir variáveis adicionais tais como as densidades volumétricas de *momentum* e de *energia total* definidas, respectivamente, como:

$$\pi = \pi(x, t) = \rho v \quad (2.1)$$

e

$$e = e(x, t) = \rho \epsilon + \frac{1}{2} \rho v^2. \quad (2.2)$$

Assim, o parágrafo anterior nos permite inferir que a *massa total*, o *momentum total* e a *energia total* de uma quantidade finita do fluido compreendida entre os extremos $x = a = a(t)$ e $x = b = b(t)$ (onde $a(t) < b(t)$) equivalem, respectivamente, à:

$$m(t) = A \int_a^b \rho(x, t) dx, \quad p(t) = A \int_a^b \pi(x, t) dx, \quad E(t) = A \int_a^b e(x, t) dx. \quad (2.3)$$

De acordo com as leis fundamentais da física, $\dot{m}$ é *zero* (atentando ao fato de que não há *fontes* ou *sorvedouros* de massa), $\dot{p}$ equivale à *Segunda Lei de Newton*, $F = PA$, e $\dot{E}$ é a *potência*. Por conseguinte,

$$\frac{d}{dt}m = 0, \quad \frac{d}{dt}p = (P(a, t) - P(b, t))A, \quad \frac{d}{dt}E = (P(a, t)v(a, t) - P(b, t)v(b, t))A. \quad (2.4)$$

Cada uma das equações apresentadas em 2.4, combinadas às definições expostas em 2.3, pode ser reescrita como:

$$\frac{d}{dt} \int_{a(t)}^{b(t)} f(x, t) dx + g(x, t) \Big|_{a(t)}^{b(t)} = 0. \quad (2.5)$$

Rememorando o *teorema fundamental do cálculo*, a seguinte identidade é escrita

$$\frac{d}{dt} \int_{a(t)}^{b(t)} f(x(t), t) dx = \frac{dx}{dt} f(x, t) \Big|_a^b + \frac{\partial}{\partial t} \int_{a(t)}^{b(t)} f(x, t) dx; \quad (2.6)$$

desse modo, sendo $\dot{a} = v(a, t)$ e $\dot{b} = v(b, t)$, pode-se expressar 2.5 como

$$\int_a^b \frac{\partial f}{\partial t} dx + (vf + g) \Big|_{x=a}^{x=b} = 0. \quad (2.7)$$

Finalmente, assumindo ser a quantidade $(vf + g)$ diferenciável, a equação 2.7 é reescrita como

$$\int_a^b \left[\frac{\partial}{\partial t} f + \frac{\partial}{\partial x} (vf + g) \right] dx = 0. \quad (2.8)$$

A expressão entre colchetes equivale à *Equação Diferencial Parcial da Dinâmica dos Fluidos* e a quantidade $(vf + g)$ representa a conhecida função *fluxo*. Assumindo serem as funções f e g de classe C^1 (tal deferência implica que f e g são contínuas e pelo menos suas derivadas primeiras também são contínuas), obtém-se

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (vf + g) = 0. \quad (2.9)$$

Claramente, neste contexto, as funções f e g simbolizam a densidade de massa ρ , a densidade de momentum π , a densidade de energia e e a pressão P (onde $P = P(\rho, e)$). Assim, reescrevendo a equação 2.9 em uma notação mais condensada, obtém-se:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial F(u)}{\partial x} = 0, \quad (2.10)$$

sendo

$$u = \begin{pmatrix} \rho \\ \pi \\ e \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} \pi \\ (\pi^2/\rho) + P \\ (e + P)\pi/\rho \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

Equações diferenciais parciais semelhantes à 2.10 são chamadas ***Leis de Conservação*** e, observando a expressão 2.10, verifica-se que quando $u = \rho$ (e, por conseguinte, $F = \pi$) a *Lei de Conservação da Massa* torna-se explícita:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial F(u)}{\partial x} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial x} = 0 \Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0 \Rightarrow \quad (2.12)$$

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + v \frac{\partial \rho}{\partial x} = -\rho \frac{\partial v}{\partial x}}$$

É válido mencionar que nossa motivação em estudar meteticulosamente Leis de Conservação advém do fato de que a propagação de curvas e superfícies (propósito desta dissertação) dá-se via equações diferenciais parciais similares à equação 2.10. Outro tópico essencial no estudo da evolução de curvas e superfícies equivale ao conceito de *entropia* pois, através de tal idéia, será possível determinar quais soluções são fisicamente aceitáveis para uma lei de conservação.

Visando mostrar que a entropia também satisfaz a uma lei de conservação, é conveniente apresentar a *primeira lei da termodinâmica* na forma diferencial, ou seja,

$$d\epsilon - \frac{P}{\rho^2}d\rho = TdS \quad \text{ou} \quad T\frac{dS}{dt} = \frac{d\epsilon}{dt} - \frac{P}{\rho^2}\frac{d\rho}{dt} \quad , \quad (2.13)$$

onde $T = T(x, t)$ corresponde à *temperatura absoluta*, $S = S(x, t)$ equivale à *entropia específica* (entropia por unidade de massa) e a função ϵ refere-se à energia interna do fluido ideal em questão. Outro procedimento relevante para relacionar entropia às leis de conservação implica em expressar a densidade de energia e presente no vetor F como

$$e = \rho\epsilon + \frac{1}{2}\rho v^2. \quad (2.14)$$

A par das expressões 2.11 e 2.14 é possível e viável apresentar as leis de conservação contidas em 2.10 de forma explícita para, então, constatar que a entropia será a quarta quantidade conservada. Desse modo, após efetuarmos algumas manipulações algébricas (vide Apêndice B), as leis de conservação contidas na expressão 2.10 podem ser apresentadas explicitamente na forma do seguinte sistema acoplado:

$$\frac{d\rho}{dt} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x} \right) \rho = -\rho \frac{\partial v}{\partial x} \quad , \quad (2.15)$$

$$\frac{dv}{dt} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x} \right) v = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} \quad , \quad (2.16)$$

$$\frac{d\epsilon}{dt} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x} \right) \epsilon = -\frac{P}{\rho} \frac{\partial v}{\partial x} \quad . \quad (2.17)$$

Substituindo as expressões 2.15 e 2.17 em 2.13, pode-se inferir que a entropia específica S é uma quantidade conservada; ou seja,

$$T\frac{dS}{dt} = \frac{d\epsilon}{dt} - \frac{P}{\rho^2}\frac{d\rho}{dt} \Rightarrow T\frac{dS}{dt} = -\frac{P}{\rho}\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{P}{\rho^2}\left(-\rho\frac{\partial v}{\partial x}\right) = -\frac{P}{\rho}\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{P}{\rho}\frac{\partial v}{\partial x} = 0 \quad (2.18)$$

ou

$$\therefore \frac{dS}{dt} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x} \right) S = 0 \quad . \quad (2.19)$$

Assumindo ser $s = \rho S$ a *densidade de entropia* (entropia por unidade de volume) uma quarta lei de conservação é obtida quando se faz uso das expressões 2.15 e 2.19:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{s}{\rho} \right) = \frac{1}{\rho} \frac{\partial s}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial s}{\partial t} - \frac{s}{\rho^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial \rho}{\partial t} \right) = 0 \Rightarrow \frac{1}{\rho} \left[v \frac{\partial s}{\partial x} + \frac{\partial s}{\partial t} - \frac{s}{\rho} \overbrace{\left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + v \frac{\partial \rho}{\partial x} \right)}^{-\rho \frac{\partial v}{\partial x} : \text{de 2.15}} \right] = 0,$$

$$\therefore \frac{\partial s}{\partial t} + v \frac{\partial s}{\partial x} + s \frac{\partial v}{\partial x} = 0 \Rightarrow \frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial (vs)}{\partial x} = 0. \quad (2.20)$$

É válido salientar que as quatro leis de conservação obtidas anteriormente decorrem do fato de que o fluido estudado foi considerado *ideal*; ou seja, o movimento descrito pelo mesmo é *suave* (matematicamente, tal condição de suavidade é expressa quando as quantidades conservadas são de classe C^1). Todavia, quando se trata de fluidos reais e, conseqüentemente, movimentos *não-ideais*, singularidades (*choques*) podem se formar durante a evolução temporal do fluido. Assim, quando tal episódio ocorre, o grau de desordem do sistema real aumenta e a entropia não será mais uma constante de movimento.

Foi relatado anteriormente que o conceito de entropia é crucial no estudo da propagação de curvas e superfícies; assim, em virtude de tal menção, é importante ressaltar que as soluções fisicamente admissíveis na presença de singularidades serão determinadas através do critério exposto no parágrafo anterior, isto é, *a presença de choques acarreta em um aumento da desordem do sistema e, por conseguinte, a entropia não será mais uma quantidade conservada.*

2.2 Conceitos Fundamentais sobre EDPs

Pode-se constatar que o estudo das leis de conservação está intrinsicamente relacionado à teoria das *equações diferenciais parciais*. Entretanto, visto que o foco deste trabalho está direcionado à resolução numérica de problemas físicos, nesta presente Seção, apenas nos deteremos ao estudo dos *conceitos fundamentais que caracterizam as EDP(s)*. Assim, visando realizar o propósito desta Seção, convém apresentarmos os diversos aspectos sob os quais as equações diferenciais são categorizadas:

- ordem;
- número de variáveis;
- dimensionalidade;
- linearidade;

- formas canônicas;
- condições de contorno.

A *ordem* de uma EDP é definida pela ordem da maior derivada parcial presente na equação. Desse modo, tal definição nos permite afirmar que a **equação de difusão de calor** apresentada na **Introdução** desta dissertação,

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}, \quad (2.21)$$

é uma *equação diferencial parcial de segunda ordem*.

Um outro aspecto que define uma EDP é o *número de variáveis independentes* que estão presentes na equação a ser analisada; por exemplo, na equação 2.21 há *duas* variáveis independentes (x e t), visto que $\Phi = \Phi(x, t)$.

Um terceiro aspecto importante na caracterização de uma EDP, trata-se da *dimensionalidade* da equação; ou seja, o número de direções espaciais presentes na EDP analisada. Como exemplificação da dimensionalidade de uma EDP, é válido retornarmos à equação 2.21 e constatarmos que a mesma está escrita em uma dimensão, afinal, a única direção espacial presente na equação em questão é a *direção x* .

Consideremos, agora, a seguinte equação diferencial parcial de segunda ordem em duas variáveis x e y :

$$A \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + 2B \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x \partial y} + C \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + D \frac{\partial \Phi}{\partial x} + E \frac{\partial \Phi}{\partial y} + F \Phi = G; \quad (2.22)$$

convém ressaltar que as variáveis em questão **não** simbolizam, necessariamente, coordenadas espaciais. Quando os coeficientes dos termos de ordem mais alta **não** dependem de qualquer derivada e nem das variáveis dependentes, mas somente das variáveis independentes, a equação diferencial parcial é dita *linear*; caso tais requisitos não sejam satisfeitos, a mesma é considerada *não-linear*. Entretanto, as leis de conservação apresentadas em 2.15-2.17 e 2.20 são classificadas como *quase-lineares* pois os coeficientes das derivadas de primeira ordem (ordem mais alta presente em tais equações) são funções somente das variáveis dependentes (não contém derivadas).

Em função dos valores A , B e C presentes na equação 2.22, é possível classificar as EDPs em três categorias básicas (formas canônicas):

- **Hiperbólica**, se $B^2 - AC > 0$.
- **Parabólica**, se $B^2 - AC = 0$.
- **Elíptica**, se $B^2 - AC < 0$.

Assim, ao analisarmos a equação de difusão de calor apresentada em 2.21, podemos inferir que esta possui coeficientes

$$A = \alpha, \quad E = -1, \quad B = C = D = F = G = 0, \quad \text{com} \quad B^2 - AC = 0$$

e, portanto, a equação 2.21 é de natureza *parabólica*.

A resolução numérica de problemas modelados por EDPs está intimamente relacionada às *condições iniciais* e às *condições de contorno* associadas às EDPs que refletem o problema a ser resolvido[15]. Sendo assim, é válido mencionarmos que o termo *condição inicial* refere-se ao fato que em muitos problemas físicos uma das variáveis independentes (por exemplo, as variáveis x e y presentes na equação 2.22) equivale à variável *temporal* t . Desse modo, assumindo que a variável x em 2.22 está associada ao tempo t , tem-se que $\Phi(x = 0, y)$ corresponde à *condição inicial* do problema.

Objetivando expor as *condições de contorno* associadas a problemas regidos por EDPs, consideremos a seguinte equação:

$$\alpha(x, y)\Phi(x, y) + \beta(x, y)\Phi_n(x, y) = \gamma(x, y), \quad (2.23)$$

onde $\Phi_n(x, y)$ corresponde ao gradiente normal, ou seja, $(\nabla\Phi) \cdot \hat{n} = \Phi_n$. Assim, em função dos coeficientes α e β , as condições de contorno (ou fronteira) são categorizadas em quatro tipos:

- Condição de contorno do tipo **Dirichlet**: $\beta = 0$.
- Condição de contorno do tipo **Neumann**: $\alpha = 0$.
- Condição de contorno do tipo **Cauchy**: existência de duas EDPs similares à 2.23, sendo $\alpha = 0$ em uma das equações e $\beta = 0$ na outra.
- Condição de contorno do tipo **Robins**: $\alpha \neq 0$ e $\beta \neq 0$.

2.3 Características e Formação de Choques

Conforme mencionado anteriormente, movimentos não-ideais descritos por sistemas físicos realistas podem, comumente, apresentar singularidades (choques). Assim, iniciaremos a discussão a respeito de como surgem os choques expondo, primeiramente, o significado das chamadas *curvas características*. Portanto, visando introduzir a definição de tais curvas, considere a versão escalar da lei de conservação apresentada em 2.10:

$$v_t + (F(v))_x = v_t + F'(v)v_x = 0, \quad v = v(x, t), \quad v_t = \frac{\partial v}{\partial t}, \quad v_x = \frac{\partial v}{\partial x}, \quad F' = \frac{\partial F}{\partial v} \quad (2.24)$$

e as seguintes proposições:

Proposição 2.3.1 *A solução $v(x, t)$ da equação diferencial (2.24) é constante ao longo da curva $x(t)$ obtida de*

$$\frac{d}{dt}x(t) = F'(v), \quad (2.25)$$

denominada de curva característica da equação (2.24).

O resultado da **Proposição 2.3.1** pode ser constatado quando os seguintes cálculos são efetuados:

$$\frac{dv}{dt} = v_x \frac{dx}{dt} + v_t = v_x \overbrace{F'(v)}^{\text{de 2.25}} + v_t = v_x F'(v) - \overbrace{F'(v)v_x}^{\text{de 2.24}} = 0. \quad (2.26)$$

Proposição 2.3.2 *Considere o problema do valor inicial $v(x, 0) = v_0(x)$. Então a solução geral de 2.24 é*

$$v(x, t) = v_0(x - F'(v)t), \quad (2.27)$$

onde $x \in \mathbb{R}$ e $t > 0$.

A **Proposição 2.3.2** pode ser facilmente comprovada quando substituimos a solução 2.27 na lei de conservação 2.24:

$$v_t + F'(v)v_x = -v_0 F'(v) + F'(v)v_0 = 0 \quad (2.28)$$

Visando exemplificar as preposições expostas nos parágrafos anteriores, considere a equação de onda

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}, \quad (2.29)$$

com condições iniciais $\Phi(x, 0) = f_0(x)$ e $\frac{\partial}{\partial t}\Phi(x, 0) = g_0(x)$. Baseado na categorização das EPDs relatada na **Seção 2.2**, é possível classificar a equação (2.29) sob os seguintes aspectos:

- A equação de onda (2.29) é uma equação diferencial de *segunda ordem* (ordem da maior derivada parcial presente em tal equação);
- Em relação ao aspecto *número de variáveis*, pode-se inferir que a equação 2.29 possui *duas variáveis independentes* (x e t);
- A equação de onda apresentada em 2.29 é uma equação *unidimensional*, visto que há somente *uma direção espacial* presente na EDP em questão;

- Visualizando a equação 2.29, constata-se que a mesma é uma equação diferencial parcial *linear*, pois os coeficientes dos termos de ordem mais alta **não** dependem de *qualquer derivada e nem da variável dependente*;
- Quanto à *forma canônica*, é possível classificar a equação 2.29 como sendo de natureza *hiperbólica*, pois $B^2 - AC = 0^2 - (1)(-c^2) = + c^2 > 0$.

Após a categorização da EDP 2.29 de acordo com os relatos apresentados na **Seção 2.2** deste presente Capítulo, é válido ressaltarmos que a solução $\Phi(x, t)$ da equação em questão possui o seguinte aspecto:

$$\Phi(x, t) = F_1(x + ct) + F_2(x - ct), \quad (2.30)$$

onde as funções F representam ondas se propagando com velocidade

$$\underbrace{\frac{dx}{dt} = \pm c}_{\text{Proposição 2.3.1}} \quad (2.31)$$

ao longo das duas curvas características dadas por

$$\underbrace{x(t) = \pm ct + cte}_{\text{Proposição 2.3.1}}. \quad (2.32)$$

Uma importante constatação que advém da inspeção da equação 2.27 implica que, sendo a solução $v(x, t)$ uma constante ($v(x, t) = v_0$) ao longo da curva característica $x(t)$ (resultado exposto na **Proposição 2.3.1**), tal curva deve corresponder a uma reta descrita pela equação

$$x(t) = F'(v_0)t + x_0. \quad (2.33)$$

Porém, sendo v_0 *constante* apenas ao longo da curva característica, conclui-se que o coeficiente angular da reta definida em 2.33 é *variável*; fato este que permite que duas curvas características se encontrem em um mesmo ponto (x, t) e, por conseguinte, a solução v_0 assumirá dois (ou mais) valores no tal ponto de intersecção. Assim, quando duas características colidirem em um mesmo ponto e, conseqüentemente, informações distintas colapsarem, a solução v_0 apresentará uma descontinuidade denominada *choque*.

Visando exemplificar o conceito de choque exposto no parágrafo anterior, considere a equação diferencial não linear do tipo *convecção* conhecida como *equação de Burgues sem viscosidade*,

$$v_t + \left(\frac{1}{2} v^2 \right)_x = 0. \quad (2.34)$$

Suponha ser tal equação válida no intervalo $[0, 1]$ e possuir condição inicial $v_0(x) = \sin(2\pi x)$, onde $x \in [0, 1]$. Sendo $F(v) = \frac{1}{2}v^2$, tem-se $F'(v) = v$ e, por conseguinte, as curvas

Figura 2.2: Gráfico da condição inicial $v_0(x) = \sin(2\pi x)$ (*curva tracejada*) juntamente com as curvas características associadas às posições iniciais $x \in \{0.05, 0.1, 0.15, 0.75, 0.9, 0.95\}$. Nos pontos onde as curvas características se encontram a solução $v(x, t)$ da equação 2.34 pode assumir *dois valores*, formando, assim, os chamados *choques*.

características que provém do ponto $(x = x_0, t = 0)$ são dadas por

$$x(t) = F'(v_0)t + cte = [\sin(2\pi x_0)]t + x_0. \quad (2.35)$$

Através da Figura 2.2 objetivamos esclarecer o significado de *choque*. Para a realização de tal feito, observemos, particularmente, duas curvas características,

$$x_1(t) = F'(v_1)t + x_1 = \overbrace{\sin(18^\circ)t}^{[\sin(2\pi x_1)]t} + \overbrace{0.05}^{x_1} \quad (2.36)$$

e

$$x_2(t) = F'(v_2)t + x_2 = \overbrace{\sin(342^\circ)t}^{[\sin(2\pi x_2)]t} + \overbrace{0.95}^{x_2}. \quad (2.37)$$

que emanam dos pontos $(x = x_1 = 0.05, t = 0)$ e $(x = x_2 = 0.95, t = 0)$, respectivamente. Ao visualizarmos a Figura 2.2, é possível constatar que as curvas características $x_1(t)$ e $x_2(t)$ se encontram em um tempo t equivalente à aproximadamente 1.46. No ponto $(x = 0.5, t = 1.46)$ onde estas duas curvas características se interceptam, a solução $v(x, t)$ da equação 2.34 pode assumir, segundo a **Proposição 2.3.1**, tanto o *valor constante* v_1 (devido à curva característica $x_1(t) = F'(v_1)t + x_1$) como também o *valor constante* v_2 (devido à curva característica $x_2(t) = F'(v_2)t + x_2$). Assim, *quando a solução de uma equação possuir múltiplos valores em um mesmo ponto, surgem os chamados choques*.

A importância da inserção do conceito de características equivale ao fato de que são através de tais curvas que as *informações*, ou seja, as **condições iniciais** do problema, propagam-se. Fenômenos físicos em que mecanismos dissipativos são ausentes (ditos problemas hiperbólicos) permitem que, se existirem descontinuidades nas condições iniciais, estas serão propagadas para a solução em $t > 0$. Desse modo, a localização dessas descontinuidades podem ser observadas se as curvas características forem acompanhadas conforme se deslocam.

Visto que problemas regidos por equações hiperbólicas comumente admitem soluções descontínuas é viável inserirmos um termo corretivo na equação hiperbólica 2.24 cuja finalidade será impedir que a solução v_0 assumam mais que um valor nos pontos onde as características colidirem. Habitualmente, tal correção é inserida através de um termo dissipativo, ϵv_{xx} ,

$$v_t + F'(v)v_x = \epsilon v_{xx}, \quad \epsilon \rightarrow 0; \quad (2.38)$$

onde, no limite $\epsilon \rightarrow 0$, as soluções de 2.38 serão as soluções de 2.24.

Claramente, pode-se constatar que descontinuidades impedem que o limite $\epsilon \rightarrow 0$ das soluções 2.38 sejam diferenciáveis em qualquer ponto e, virtude desse fato, torna-se impossível que tais soluções sejam as *soluções clássicas* de 2.24. Assim, como gostaríamos de obter solução para todo tempo, o conceito de soluções clássicas cede lugar ao de *soluções fracas*. Objetivando definir o conceito de soluções fracas, considere uma função teste $\phi(x, t)$ de classe C^1 não-nula (exceto nas bordas) existente em uma região aberta do plano $x - t$. Nesse caso, $v_\epsilon(x, t)$ é uma *solução fraca* da lei de conservação 2.24 se a seguinte equação é satisfeita para qualquer função teste ϕ :

$$\int_0^\infty dt \int_{-\infty}^\infty dx [v\phi_t + F(v)\phi_x] + \int_{-\infty}^\infty dx v_0\phi_0 = 0; \quad (2.39)$$

sendo $v_0 = v(x, 0)$ e $\phi_0(x) = \phi(x, 0)$.

Através da equação 2.39, pode-se constatar que a solução fraca da lei de conservação 2.24 não satisfaz propriamente a equação diferencial parcial em questão, mas uma *formulação integral* obtida a partir da mesma. A proposição enunciada a seguir evidenciará a importância das soluções fracas [13]

Proposição 2.3.3 *Se uma solução de 2.38 existe, então ela é uma solução fraca.*

No início desta Seção foi proposto o estudo da formação dos choques; assim, neste presente momento, torna-se possível definir precisamente o significado de tais singularidades. *A descontinuidade de uma solução fraca é denominada choque quando as características de*

ambos os lados da descontinuidade se encontram na direção crescente de t . É válido ressaltar que há diversos tipos de descontinuidades; todavia, em virtude de razões físicas, iremos nos concentrar unicamente no estudo de descontinuidades do tipo **degrau** ou **salto** (como choques). Esta última descontinuidade satisfaz a chamada *condição de Rankine-Hugoniot* (RH) que será enunciada a seguir [13]:

Proposição 2.3.4 *Seja C uma curva $x_c(t)$ de classe C^1 no plano $x - t$ tal que a solução fraca $v(x, t)$ tenha uma descontinuidade do tipo salto. Seja $P \in C$ qualquer ponto da curva C , $s = \dot{x}_c$ a velocidade da descontinuidade em P e $v_{\pm}$ os valores de v à esquerda e à direita de P (cruzando a curva x_c). Então,*

$$s\{v\} = \{F(v)\}, \quad s = \frac{dx_c}{dt}, \quad \{v\} = v_+ - v_- . \quad (2.40)$$

Todas as soluções fracas satisfazem a condição RH; contudo, tais soluções não são únicas e a condição 2.40 não seleciona qual solução fraca é fisicamente aceitável dentre todas as possíveis soluções existentes. Assim, nossa próxima meta consiste em analisar sobre a *unicidade* das soluções fisicamente aceitáveis para uma lei de conservação e, objetivando realizar tal propósito, iremos utilizar o conceito de entropia. Quando há dissipação (fenômeno usual em problemas reais) a entropia deixa de ser uma grandeza física constante e, conforme as leis da termodinâmica, ela aumentará. Visando introduzir o conceito de entropia no contexto da teoria das equações diferenciais da forma de leis de conservação, assume-se $S = S(v)$ e $\Phi(v)$ como sendo, respectivamente, a entropia e o *fluxo de entropia*. As leis da termodinâmica também declaram que a entropia é uma grandeza *convexa*; ou seja, $S''(v) \geq 0$. Desse modo, para qualquer solução suave da equação 2.24, a entropia é definida segundo a seguinte lei de conservação

$$S(v)_t + \Phi(v)_x = 0 ; \quad (2.41)$$

assim, através de 2.24 pode-se inferir que a entropia e o fluxo de entropia devem satisfazer a identidade

$$\Phi'(v) = F'(v)S'(v) . \quad (2.42)$$

Exposto o modo de como a entropia e o seu fluxo são inseridos no âmbito das leis de conservação, faz-se necessário, agora, relacionar soluções fracas e entropia. Tal relação é estabelecida pela seguinte proposição [13]

Proposição 2.3.5 *Uma solução fraca v deve satisfazer fracamente a condição*

$$S(v)_t + \Phi(v)_x \leq 0, \quad S \geq 0, \quad S''(v) \geq 0 . \quad (2.43)$$

Finalmente, a proposição que se segue irá evidenciar como uma condição de entropia é utilizada para que uma solução fraca fisicamente aceitável possa ser a escolhida [13].

Proposição 2.3.6 *Uma solução fraca v para a lei de conservação 2.24 com um fluxo convectivo, $F'' \geq 0$, que satisfaça a condição 2.43 é única.*

Conhecidos os conceitos de *choques*, *solução fraca* e *entropia* iremos, agora, mencionar sucintamente os pontos essenciais que devem ser atentados no momento da resolução de uma Lei de Conservação:

- O surgimento espontâneo de descontinuidades acarreta na inserção do conceito de solução fraca.
- Quesitos fundamentais como *existência*, *unicidade* e *estabilidade* das soluções devem ser meticulosamente estudados.
- Um número maioritário de soluções fracas satisfazem às condições de *Rankine-Hugoniot*; ou seja, tais soluções são matematicamente possíveis.
- A necessidade de selecionar a solução fisicamente correta dentre todas as fracas existentes conduz à introdução de um critério de admissibilidade denominado *condição de entropia*; assim, uma solução fraca que satisfaz tal critério é dita ser uma *solução fraca entrópica*.

2.4 Diferenças Finitas

Comumente, quando se objetiva elaborar e estudar modelos acurados para um fenômeno físico, deve-se empregar técnicas numéricas. Salientamos que a maioria dos sistemas físicos somente possuem soluções analíticas se forem realizadas determinadas simplificações e, por conseguinte, torna-se impraticável explicar ou prever o comportamento acurado de tais sistemas em diferentes situações (por exemplo, o comportamento de fluidos reais não possui soluções analíticas conhecidas).

Quando um modelo é tratado numericamente, faz-se necessário expressar de modo conveniente as equações (em geral EDPs) que o descrevem e a região em que elas são válidas. O fato de uma região contínua possuir infinitos pontos implica que é necessário discretizar o *domínio*, ou seja, dividi-lo em pontos. Ao conjunto de pontos discretos dá-se o nome de *malha*.

Outra procedência necessária para tratar as EDPs é representar suas derivadas por expressões escritas em função dos pontos da malha e, após a realização de tal feito, diz-se

que a equação diferencial parcial tornou-se uma *equação algébrica* denominada *Equações de Diferenças Finitas* (EDF). Assim, a EDF é escrita para cada ponto do domínio discretizado em que se deseja obter a solução aproximada do problema.

Faz-se necessário mencionar que uma maneira usual de obter as diferenças finitas dá-se via *expansão em série de Taylor* de uma determinada função u . Assumindo que tal função u seja *contínua* no intervalo $[a, b]$ e que apresente *derivadas contínuas* até ordem N na dita região de interesse, o **Teorema de Taylor** afirma que para todo ponto $x \in [a, b]$ tem-se:

$$u(x) = u(x_o) + (\Delta x) \frac{du}{dx} \Big|_{x_o} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{d^2 u}{dx^2} \Big|_{x_o} + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{d^3 u}{dx^3} \Big|_{x_o} + \cdots + R_N; \quad (2.44)$$

sendo $\Delta x = x - x_o$ e R_N o *resto*,

$$R_N = \frac{(\Delta x)^N}{N!} \frac{d^N u}{dx^N} \Big|_{\zeta}, \quad \zeta \in [a, b]. \quad (2.45)$$

Fazendo uso da expansão em série de Taylor iremos, agora, determinar a primeira derivada da função u no ponto $x_i = i\Delta x$ (onde $i = 0, 1, 2, \dots$); desse modo, temos:

$$u(x_i + \Delta x) = u(x_i) + (\Delta x) \frac{du}{dx} \Big|_i + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{d^2 u}{dx^2} \Big|_i + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{d^3 u}{dx^3} \Big|_i + \cdots. \quad (2.46)$$

Assim, isolando a *primeira derivada* da função u presente em 2.46, obtém-se:

$$\frac{du}{dx} \Big|_i = \frac{u(x_i + \Delta x) - u(x_i)}{\Delta x} - \left\{ \frac{(\Delta x)}{2!} \frac{d^2 u}{dx^2} \Big|_i + \frac{(\Delta x)^2}{3!} \frac{d^3 u}{dx^3} \Big|_i + \cdots \right\}. \quad (2.47)$$

Objetivando simplificar a expressão 2.47, é viável utilizarmos a seguinte notação condensada:

$$u(x_i) = u_i \quad e \quad u(x_i \pm k\Delta x) = u_{i \pm k}; \quad (2.48)$$

dessa maneira, a primeira derivada de u presente em 2.47, *até a primeira ordem em Δx* , torna-se

$$\frac{du}{dx} \Big|_i = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x). \quad (2.49)$$

É válido ressaltarmos que ao conjunto de todos os termos *entre chaves* apresentado em 2.47 é dado o nome de *erro local de truncamento* (**ELT**).

Assim, ao visualizarmos a expressão 2.49, podemos inferir que a mesma faz uso de *diferenças progressivas* (pois, para o cálculo da primeira derivada da função u , foi utilizado o ponto x_{i+1} , estando este *adiante* de x_i) para descrever uma *aproximação de primeira ordem*, $\mathcal{O}(\Delta x)$, para a primeira derivada de u e, por esta razão, tal expressão é conhecida na literatura como **equação de diferenças finitas progressivas**.

É de grande valia mencionarmos que há uma segunda aproximação por diferenças finitas, denominada aproximação por *diferenças atrasadas*, obtida a partir da expansão de $u(x_i - \Delta x)$

em série Taylor ao redor do ponto x_i ; assim, efetuando tal relato, obtém-se:

$$u(x_i - \Delta x) = u(x_i) - (\Delta x) \frac{du}{dx} \Big|_i + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{d^2 u}{dx^2} \Big|_i + \mathcal{O}(\Delta x)^3. \quad (2.50)$$

Ao realizarmos manipulações matemáticas similares àsquelas realizadas para a obtenção da *equação de diferenças finitas progressivas* (2.49), encontramos a seguinte igualdade:

$$\frac{du}{dx} \Big|_i = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x). \quad (2.51)$$

No âmbito das aproximações por diferenças finitas, a expressão 2.51 é conhecida como ***equação de diferenças finitas atrasadas*** pois o cálculo da primeira derivada de u envolve o ponto localizado *atrás* de x_i , ou seja, x_{i-1} .

Quando as expansões em série de Taylor apresentadas em 2.46 e 2.50 são manipuladas de forma a eliminar a segunda derivada de u , obtém-se uma *aproximação de segunda ordem*, $\mathcal{O}(\Delta x)^2$, para a primeira derivada da função u . Desse modo, quando subtraímos as expansões 2.46 e 2.50,

$$u(x_i + \Delta x) - u(x_i - \Delta x) = 2(\Delta x) \frac{du}{dx} \Big|_i + \mathcal{O}(\Delta x)^3, \quad (2.52)$$

a segunda derivada de u é eliminada e, por conseguinte, encontra-se a seguinte identidade:

$$\frac{du}{dx} \Big|_i = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x)^2. \quad (2.53)$$

Observando a expressão 2.53, pode-se constatar que foram utilizados os pontos x_{i-1} e x_{i+1} para calcular a primeira derivada de u e, em virtude de tais pontos serem *intermediários* ao ponto x_i , a aproximação por diferenças finitas apresentada em 2.53 é intitulada aproximação por *diferenças centrais*.

Em suma, as três expressões para a primeira derivada da função u encontradas via utilização de expansões em série de Taylor resumem-se à:

$$\text{Diferenças Progressivas : } \frac{du}{dx} \Big|_i = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x),$$

$$\text{Diferenças Atrasadas : } \frac{du}{dx} \Big|_i = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x),$$

$$\text{Diferenças Centrais : } \frac{du}{dx} \Big|_i = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x)^2.$$

Prosseguindo nossos dizeres a respeito das equações de diferenças finitas é viável discorrermos, mesmo que sucintamente, acerca do chamado ***estêncil de uma aproximação***. O estêncil de uma aproximação indica, *através de uma figura*, a posição relativa dos pontos presentes em uma equação de diferenças finitas. Assim, objetivando uma melhor compreensão

do significado de tal figura, esquematizaremos abaixo os três estêncils que representam as três aproximações por diferenças finitas (2.49, 2.51 e 2.53) que foram encontradas durante o decorrer desta seção.

Na Figura 2.3 está representado o estêncil referente à *aproximação por diferenças finitas progressivas* e, em virtude do mesmo ser composto por **dois** pontos, a aproximação em questão é conhecida como "*fórmula dos dois pontos*". O estêncil apresentado na Figura 2.4 representa a *aproximação por diferenças finitas centrais* e, devido ao número de pontos que o constituem, a aproximação 2.53 é intitulada "*fórmula dos três pontos*". Por fim, a Figura 2.5 mostra o estêncil que representa a *aproximação por diferenças finitas atrasadas* e, visto que o mesmo consta de **dois** pontos, tal aproximação é também conhecida na literatura como "*fórmula dos dois pontos*".

Figura 2.3: Estêncil referente à *aproximação por diferenças finitas progressivas*.

Figura 2.4: Estêncil referente à *aproximação por diferenças finitas centrais*.

Figura 2.5: Estêncil referente à *aproximação por diferenças finitas atrasadas*.

Visando exemplificar a utilização do esquema de *aproximações por diferenças finitas* iremos abordar um problema hiperbólico regido pela *equação de convecção*. Equações hiperbólicas estão, comumente, relacionadas a fenômenos vibracionais ou convectivos. Uma menção importante a salientar equivale ao fato de que fenômenos regidos por tais equações **não** possuem mecanismos dissipativos; assim, quaisquer descontinuidades presentes nas condições iniciais serão propagadas sem dissipação para a solução em $t > 0$.

A equação típica para o problema hiperbólico é a *equação de convecção* que, em se tratando de uma dimensão espacial, é escrita como:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (2.54)$$

onde o segundo termo do lado esquerdo da equação é denominado *termo convectivo* ou *inercial*.

Visando solucionar numericamente a EDP 2.54 faz-se necessário, inicialmente, *discretizar* as derivadas presentes na mesma. Considerando que em tal equação a informação no domínio computacional se propaga da *esquerda* para *direita* ($v > 0$) é aconselhável que o termo *convectivo* seja aproximado por diferenças finitas *atrasadas*, pois tal aproximação numérica utiliza o ponto x_{i-1} localizado à *esquerda* do ponto x_i para o cálculo da primeira derivada da função u . Desse modo, em virtude de considerarmos a informação propagando-se da *esquerda* para *direita*, é apropriado discretizarmos o termo convectivo presente em 2.54 através de uma aproximação numérica que utiliza pontos conhecidos da malha,

$$\therefore v \frac{\partial u}{\partial x} \approx v \left(\frac{u_i^j - u_{i-1}^j}{\Delta x} \right) \quad (2.55)$$

e, assim, a *Equação de Convecção* é escrita como:

$$\begin{aligned} \frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\Delta t} &= -v \left(\frac{u_i^j - u_{i-1}^j}{\Delta x} \right) + \mathcal{O}[(\Delta t), (\Delta x)] \Rightarrow \\ u_i^{j+1} &= u_i^j - v \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_i^j - u_{i-1}^j) + \mathcal{O}[(\Delta t), (\Delta x)] . \end{aligned} \quad (2.56)$$

É importante ressaltar que quando os diferenciais de uma dita EDP são discretizados visando a *direção de propagação das características*; isto é, *o sinal da velocidade*, diz-se que foi aplicada uma discretização espacial *na direção de onde vem a informação*.

Após a discretização da equação de convecção por aproximações de diferenças finitas, é possível apresentarmos o estêncil da EDF (2.56) sobreposto às características com $v > 0$ (vide Figura 2.6). Assim, visualizando o estêncil mostrado na Figura 2.6, pode-se constatar que o mesmo é composto por **três** pontos e, por tal razão, diz-se que a equação de convecção 2.54 foi discretizada via *"fórmula dos três pontos"*.

Figura 2.6: Estêncil da equação de diferença finita (2.56) sobreposto às curvas características com $v > 0$.

2.5 Convergência, Consistência e Estabilidade

Nesta Seção iremos descrever os conceitos de *convergência* (*local* e *global*), *consistência* e *estabilidade* do método numérico Level Set e, para a realização de tal feito, considere a seguinte identidade:

$$u_i^j \approx \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} dx v(x_i, t_j), \quad x_i = i\Delta x, \quad t_j = j\Delta t, \quad (2.57)$$

onde $v(x, t)$ é a solução desejada e u_i^j corresponde à quantidade para a qual esquemas numéricos são desenvolvidos. Considere, também, a função constante no ponto (x, t) ,

$$\bar{u}(x) = u_i^j \quad \text{para} \quad \left(i - \frac{1}{2}\right) \Delta x < x \leq \left(i + \frac{1}{2}\right) \Delta x. \quad (2.58)$$

Desse modo, no tempo t^j , u_i^j converge *localmente* para a solução analítica $v(x, t)$ se $\|\bar{u}(x) - v(x, t)\| \rightarrow 0$ quando $\Delta x \rightarrow 0$. *Convergência global* significa que uma seqüência de soluções aproximadas converge para uma possível solução da equação diferencial, a qual pode não ser a solução desejada.

Uma outra característica importante de uma dada aproximação numérica é que ela seja *consistente* com a equação diferencial parcial que ela discretiza. Desse modo, objetivando definir o conceito de *consistência*, considere a seguinte lei de conservação escrita na sua forma

mais geral

$$v_t = \mathcal{L}(v) + \mathcal{F}, \quad (2.59)$$

onde o termo não-homogêneo representa uma *fonte* ou *não-homogeneidade* nas condições iniciais. Seja

$$L_i^j(u_i^j) = G_i^j, \quad (2.60)$$

o respectivo *esquema numérico*; assim, quando (u_i^{j+1}) é isolado, obtém-se:

$$u_i^{j+1} = Q_i^j(u_i^j) - \Delta t G_i^j. \quad (2.61)$$

Desse modo, diz-se que o esquema numérico apresentado em 2.60 é *consistente* com a lei de conservação 2.59 se o erro de truncamento

$$\tau_i^j = L_i^j(v(x_i, t^j)) - G_i^j \rightarrow 0, \quad x_i = i\Delta x, \quad t^j = j\Delta t, \quad (2.62)$$

quando $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta t \rightarrow 0$ e $(x_i, t^j) \rightarrow (x, t)$.

Visando exemplificar o conceito de consistência exposto nos dizeres precedentes, considere a *equação transiente de difusão de calor*

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \quad (2.63)$$

e sua respectiva aproximação por diferenças finitas

$$\phi_i^{j+1} = \phi_i^j + \alpha(\Delta t) \left[\frac{\phi_{i-1}^j - 2\phi_i^j + \phi_{i+1}^j}{(\Delta x)^2} \right] \quad (2.64)$$

Para averiguarmos se a discretização exposta em 2.64 é *consistente* com a equação diferencial parcial 2.63 é necessário, primeiramente, expandirmos os termos ϕ_{i+1}^j , ϕ_{i-1}^j e ϕ_i^{j+1} em torno do ponto (x_i, t^j) :

$$\phi_{i\pm 1}^j = \phi_i^j \pm (\Delta x) \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_i^j + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_i^j \pm \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \Big|_i^j + \mathcal{O}(\Delta x)^4 \quad (2.65)$$

e

$$\phi_i^{j+1} = \phi_i^j + (\Delta t) \frac{\partial \phi}{\partial t} \Big|_i^j + \frac{(\Delta t)^2}{2!} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} \Big|_i^j + \mathcal{O}(\Delta t)^3. \quad (2.66)$$

Substituindo as expressões 2.65 e 2.66 na equação de diferenças finitas apresentada em 2.64, obtém-se:

$$\underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial t} \Big|_i^j}_{EDP} = \alpha \underbrace{\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_i^j - \left[\frac{\Delta t}{2!} \right] \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} \Big|_i^j}_{\text{Erro Local de Truncamento (ELT)}} + \mathcal{O}[(\Delta t)^2, (\Delta x)^2]. \quad (2.67)$$

Quando é feito o limite $(\Delta x \rightarrow 0, \Delta t \rightarrow 0)$, o ELT presente em 2.67 tende à *zero*, proporcionando

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} \Big|_i^j = \alpha \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_i^j. \quad (2.68)$$

Assim, ao observarmos a expressão 2.68 é possível constatar que a discretização proposta em 2.64 é consistente com a *equação transiente de difusão de calor* mostrada em 2.63; afinal, quando $(\Delta x \rightarrow 0, \Delta t \rightarrow 0)$ o ELT se anula e a EDP original é recuperada.

Figura 2.7: Relação entre discretização e consistência.

Infelizmente, visto que nenhuma alusão foi feita à condição de Rankine-Hugoniot (2.40), tanto a consistência como a convergência do esquema numérico 2.60 não implicam na escolha de uma solução apropriada; ou seja, uma solução fraca que satisfaça condição pré-dita. Entretanto, impondo que os esquemas numéricos estejam na forma conservativa, o fato importuno descrito na frase anterior é minimizado; assim, tem-se

$$\int_{t_j}^{t_{j+1}} dt \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} dx [v_t + F_x(v)] = 0. \quad (2.69)$$

Desse modo, utilizando a definição 2.57, pode-se elaborar um esquema numérico para a expressão 2.69 como sendo:

$$u_i^{j+1} = u_i^j - R(h_{i+1/2}^j - h_{i-1/2}^j); \quad R = \frac{\Delta t}{\Delta x}, \quad (2.70)$$

onde

$$h_{i\pm 1/2}^j \Delta t = \int_{t_j}^{t_{j+1}} dt F(v(x_{i\pm 1/2}, t_j)) \quad (2.71)$$

é chamado *fluxo numérico*, sendo este uma função de um certo número m (*ordem do fluxo*) das quantidades u_i^j ($h_{i\pm 1/2}^j = h(u_{i_1}, u_{i_2}, u_{i_3}, \dots, u_{i_m})$). Assim, impondo que este sistema conservativo seja consistente com a lei de conservação 2.24, a seguinte proposição é enunciada:

Proposição 2.5.1 *Se o fluxo numérico $h(v, \dots, v) = F(v)$, então o esquema 2.70 será consistente com a lei de conservação 2.24.*

Finalmente, é garantido pelo teorema de *Lax-Wendroff* [13] que a utilização de esquemas consistentes e conservativos implica na obtenção de soluções fracas no processo de convergência; contudo, tais soluções podem não satisfazer a condição de viscosidade exposta em (2.38). Visando solucionar tal empecilho, é necessário dispor de uma *entropia numérica* e de

um *fluxo de entropia numérico* que sejam consistentes e conservativos. O esquema numérico *Level Set*, que será utilizado neste trabalho, apresenta tais prescrições e, objetivando melhor especificar tal método computacional, convém apresentarmos a seguinte definição:

Definição 2.5.1 *Um esquema numérico como aquele em 2.70 é denominado de entrópico quando*

$$h_{i+1/2} \begin{cases} \leq F(u), \quad \forall u \in [u_i, u_{i+1}] \text{ se } u_i < u_{i+1} , \\ \geq F(u), \quad \forall u \in [u_{i+1}, u_i] \text{ se } u_{i+1} < u_i . \end{cases} \quad (2.72)$$

Por fim, é de grande valia mencionar que a *estabilidade* do método *Level Set* é garantida quando a *condição CFL* (*Courant, Friedrichs e Lewy*, sobrenomes dos três autores que primeiro a enunciaram) é satisfeita e, para uma melhor compreensão do significado de tal condição, é aconselhável dirigir-se ao **Capítulo 3** - Seção 3.1 desta presente dissertação.

3

O Método Level Set

Neste capítulo objetivamos apresentar os fundamentos de um acurado esquema numérico, conhecido como *método Level Set*, capaz de simular e analisar movimentos de curvas e superfícies em diferentes cenários físicos ([9], [8] e [16]). Tal método - formulado por Osher e Sethian [1] - está sedimentado na seguinte idéia: **representar uma determinada curva (ou superfície) Γ como a curva de nível zero de uma função Φ de maior dimensão (denominada *função Level Set*)** (vide Figura 3.1).

Figura 3.1: Esquemática da filosofia do método Level Set. A Figura localizada à esquerda apresenta unicamente a expansão de uma circunferência; enquanto que a Figura situada à direita ilustra a tal circunferência como sendo a *curva de nível zero de uma função de maior dimensão*.

Convém salientarmos que uma das principais vantagens em utilizar o método Level Set equivale ao fato que tal modelo numérico é capaz de tratar eficazmente *mudanças topológicas* e/ou *descontinuidades* que, eventualmente, podem surgir no decorrer da propagação da curva

(ou superfície) de nível zero estudada. Devido à acurácia e versatilidade do método Level Set, esta formulação numérica está sendo amplamente aplicada à diversas áreas científicas, incluindo mecânica dos fluidos, processamento de imagens e visão computacional, crescimento de cristais, geometria computacional e ciência dos materiais.

Após um breve relato introdutório ao modelo Level Set, temos como meta apresentar detalhadamente os fundamentos nos quais o mesmo está baseado e, após tal feito, objetivamos discorrer a respeito da implementação da formulação numérica em questão (vide **Seção 3.1**). Desse modo, considere uma curva (ou superfície) Γ definida em um certo domínio. Assuma que tal curva pode se mover em uma direção normal a ela mesma ¹ de acordo com uma função velocidade ², V , que pode assumir tanto valores positivos como, também, valores negativos.

Visando expressar uma equação de evolução para a função $\Phi(x, t)$ (conhecida como *função Level Set*) e, por conseguinte, para o nível zero da mesma, requer-se que a posição de uma partícula numa frente descrita por $x(t)$ deve estar sobre a curva de nível $\Phi(x, t) = 0$:

$$\Phi(x(t), t) = 0. \quad (3.1)$$

Aplicando a *regra da cadeia* na expressão 3.1, deduz-se que

$$\Phi_t + \nabla\Phi(x(t), t) \cdot x'(t) = 0. \quad (3.2)$$

Visto que V equivale à função velocidade ao longo da direção normal, tem-se $x'(t) \cdot n = V$, onde $n = \nabla\Phi/|\nabla\Phi|$. Desse modo, após estes esclarecimentos, pode-se inferir que a equação de evolução para a função Φ é escrita como:

$$\Phi_t + V|\nabla\Phi| = 0, \quad (3.3)$$

dados $\Phi(x, t = 0)$.

Ao inspecionar a equação Level Set (3.3), proposta por Osher e Sethian [1], constata-se que tal equação está na forma de uma lei de conservação hiperbólica ³ e, em virtude desse fato, todos os dizeres relatados do **Capítulo 2** desta dissertação nos serão de grande utilidade.

¹O fato de escolhermos a velocidade de propagação *normal* implica que estamos interessados apenas na *geometria da deformação*.

²É válido mencionar que a função velocidade de propagação comumente irá depender de propriedades intrínsecas, como *curvatura*, e de determinados fatores físicos como, por exemplo, *gradientes de temperatura* e *pressão*.

³Em uma dimensão, a equação Level Set é análoga à expressão 2.24 quando se identifica $v = \Phi$ e $F'(v) = V$.

Visto que o foco deste trabalho equivale ao estudo de soluções numéricas para a evolução de curvas e superfícies é viável, em um primeiro instante, discretizarmos a equação 3.3 por uma aproximação em *diferenças finitas progressivas* no tempo. Após tal feito, obtém-se

$$\frac{\Phi_{i,j}^{n+1} - \Phi_{i,j}^n}{\Delta t} + V|\nabla_{i,j} \Phi_{i,j}^n| = 0. \quad (3.4)$$

Em princípio, o problema poderia ser solucionado calculando-se $\Phi_{i,j}^{n+1}$ para cada ponto da malha em função de aproximações em diferenças finitas para a derivada espacial de Φ . Todavia, procedendo de tal forma, constata-se que esta idéia resulta em instabilidades, de modo que o comportamento da curva torna-se *não suave* no decorrer do processo iterativo. Baseado na utilização de esquemas hiperbólicos, o método *Level Set* minimiza consideravelmente as instabilidades existentes na formulação descrita acima, além de manter o comportamento da curva estudada suave e homogêneo. Visando, em um primeiro instante, explicitarmos as vantagens do modelo Level Set perante às simples aproximações por diferenças finitas, iremos acompanhar a evolução temporal de uma função Φ que no instante inicial da iteração possuía o perfil de um "V"; ou seja,

$$\Phi(x, 0) = f(x) = \begin{cases} 1/2 - x, & \text{se } x \leq 1/2 \\ x - 1/2, & \text{se } x > 1/2 \end{cases}$$

Figura 3.2: Propagação da curva "V" utilizando *diferenças finitas centrais* e $\Delta t = 0.005$. Visualizando o gráfico exposto acima, pode-se constatar que a aproximação por diferenças finitas centrais resulta em instabilidades, de modo que o comportamento da curva torna-se *não suave* no decorrer do processo iterativo.

Figura 3.3: Propagação da curva "V" utilizando o *método Level Set* e $\Delta t = 0.005$. Observando o gráfico exposto acima, pode-se inferir que o método *Level Set* minimiza consideravelmente as instabilidades presentes no gráfico apresentado na Figura 3.2, além de manter o comportamento da curva estudada *suave e homogêneo*.

3.1 O Algoritmo

Nesta Seção iremos discorrer a respeito da implementação do *método Level Set* utilizado para solucionar numericamente equações do tipo *Hamilton-Jacobi*. Desse modo, é viável mencionarmos que as equações do tipo *Hamilton-Jacobi*, presentes naturalmente no contexto de Mecânica Clássica [17], são equações diferenciais parciais que contêm apenas *derivadas primeiras* e, por conseguinte, apresentam-se na forma

$$\Phi_t + \mathbf{H}(\nabla\Phi) = 0, \quad (3.5)$$

onde o subscrito t denota a derivada parcial temporal e H é a *Hamiltoniana* que pode depender tanto do espaço como também do tempo.

Quando $\mathbf{H}(\nabla\Phi) = \mathbf{V} \cdot \nabla\Phi$ a equação 3.5 torna-se a conhecida *equação de convecção* (mencionada na Seção 2.4 deste presente trabalho):

$$\Phi_t + \mathbf{V} \cdot \nabla\Phi = 0. \quad (3.6)$$

A *equação de convecção* é dita ser a *equação modelo do problema hiperbólico* e, em uma dimensão espacial, a mesma é escrita como:

$$\frac{\partial\Phi}{\partial t} + u \frac{\partial\Phi}{\partial x} = 0; \quad (3.7)$$

onde esta equação representa a propagação de Φ para a direita (esquerda) com velocidade $u > 0$ ($u < 0$) ao longo do eixo x .

Outro exemplo de uma equação do tipo Hamilton-Jacobi ocorre quando $\mathbf{H}(\nabla\Phi) = V_n |\nabla\Phi|$,

$$\Phi_t + V_n |\nabla\Phi| = 0; \quad (3.8)$$

onde V_n representa a componente da velocidade na direção normal (*velocidade normal*). É de grande valia salientarmos que a equação 3.8 é uma *lei de conservação* (análoga à equação 2.24) conhecida na literatura como *Equação Level Set*.

Comumente, as equações de Hamilton-Jacobi dependem somente das derivadas primeiras de Φ e, em virtude desse fato, pode-se inferir que tais equações são categorizadas como *hiperbólicas*. No entanto, quando a velocidade normal escrita na expressão 3.8 depender da curvatura κ (vide Apêndice C); ou seja, $V_n = \pm b\kappa$, a equação de Hamilton-Jacobi irá depender das *derivadas segundas espaciais* de Φ e, por conseguinte, a *equação level set* pertencerá à família das equações *parabólicas*:

$$\Phi_t \pm \underbrace{b\kappa |\nabla\Phi|}_{\text{termo parabólico}} = 0 \quad (3.9)$$

Ao atentarmos à equação (3.5) notamos que tal equação do tipo *Hamilton-Jacobi* pode ser modificada da seguinte maneira:

$$(\Phi_x)_t + (H(\Phi_x))_x = 0 \quad (3.10)$$

e, quando considera-se a identidade $u = \Phi_x$, a equação 3.10 torna-se uma *lei de conservação escalar* análoga à expressão 2.10,

$$u_t + (H(u))_x = 0. \quad (3.11)$$

Assim, conclui-se que em uma dimensão espacial há uma correspondência direta entre equações de Hamilton-Jacobi e leis de conservação. A solução u da lei de conservação corresponde à derivada da solução Φ da equação de Hamilton-Jacobi e, analogamente, a solução Φ da equação de Hamilton-Jacobi equivale à integral da solução u da lei de conservação.

Após o breve relato a respeito das equações de Hamilton-Jacobi e das leis de conservação, temos como meta descrever como foi implementado o método numérico Level Set. Inicialmente a equação de Hamilton-Jacobi 3.5 foi discretizada temporalmente através de uma diferença finita progressiva,

$$\frac{\Phi^{n+1} - \Phi^n}{\Delta t} + \hat{H}^n(\Phi_x^-, \Phi_x^+; \Phi_y^-, \Phi_y^+; \Phi_z^-, \Phi_z^+) = 0, \quad (3.12)$$

onde $\hat{H}^n(\Phi_x^-, \Phi_x^+; \Phi_y^-, \Phi_y^+; \Phi_z^-, \Phi_z^+)$ corresponde a uma *aproximação numérica* de $H(\Phi_x, \Phi_y, \Phi_z)$.

A função $\hat{H}$ presente na expressão 3.12 é conhecida como *Hamiltoniana numérica* e esta é dita ser *consistente* desde que $\hat{H}(\Phi_x, \Phi_x; \Phi_y, \Phi_y; \Phi_z, \Phi_z) = H(\Phi_x, \Phi_y, \Phi_z)$ ⁴.

O esquema que utilizamos para aproximar numericamente a função $\hat{H}$ foi o conhecido *método Roe-Fix* (RF) [9]; assim, a hamiltoniana numérica foi declarada como:

$$\hat{H} = H(\Phi_x^*, \Phi_y^*) - \alpha^x \left(\frac{\Phi_x^+ - \Phi_x^-}{2} \right) - \alpha^y \left(\frac{\Phi_y^+ - \Phi_y^-}{2} \right); \quad (3.13)$$

onde α^x e α^y correspondem aos coeficientes de dissipação que controlam a viscosidade numérica e tais termos dissipativos são calculados através das seguintes identidades:

$$\alpha^x = \max |H_1(\Phi_x, \Phi_y)| \quad (3.14)$$

e

$$\alpha^y = \max |H_2(\Phi_x, \Phi_y)|; \quad (3.15)$$

sendo H_1 e H_2 as derivadas parciais da hamiltoniana H com relação à Φ_x e Φ_y , respectivamente.

⁴Convém ressaltar que as derivadas espaciais, tais como Φ_x^- e Φ_x^+ , encontram-se acuradas até a primeira ordem em Δx .

É de grande valia mencionar que a *estabilidade* do método *Level Set* é satisfeita quando se aplica à equação 3.12 a chamada *condição CFL*⁵:

$$\max \left\{ \frac{|H_1|}{\Delta x} + \frac{|H_2|}{\Delta y} + \frac{|H_3|}{\Delta z} \right\} \Delta t < 1. \quad (3.16)$$

Atenção inicial foi dada ao cálculo dos coeficientes dissipativos presentes na equação 3.13 e é válido mencionar que tais termos foram, primeiramente, determinados com a utilização de um esquema numérico conhecido na literatura como *método Lax-Friedrichs* (LF). Na implementação tradicional do método LF, os máximos de 3.14 e 3.15 são escolhidos sobre **todo** o domínio computacional, sendo, inicialmente, necessário identificar os valores máximos e mínimos de Φ_x considerando todos os valores de Φ_x^+ e Φ_x^- da malha Cartesiana e, após tal feito, defini-se o intervalo $I_{LF}^x = [\Phi_x^{min}, \Phi_x^{max}]$. Procedendo de maneira similar à apresentada na frase anterior, determina-se o intervalo $I_{LF}^y = [\Phi_y^{min}, \Phi_y^{max}]$ e, então, diz-se que os coeficientes α^x e α^y correspondem aos *valores máximos* possíveis de $|H_1(\Phi_x, \Phi_y)|$ e $|H_2(\Phi_x, \Phi_y)|$, respectivamente, com $\Phi_x \in I_{LF}^x$ e $\Phi_y \in I_{LF}^y$.

Visando exemplificar a determinação dos coeficientes α^x e α^y via método LF, consideremos a equação de convecção apresentada em 3.6. Em tal equação hiperbólica, as derivadas parciais $H_1 = u$ e $H_2 = v$ independem de Φ_x e Φ_y , portanto, α^x e α^y correspondem, respectivamente, aos valores máximos de $|u|$ e $|v|$ sobre a malha Cartesiana:

$$\alpha^x = \max|u| \quad \text{e} \quad \alpha^y = \max|v| \quad \text{para um problema regido pela equação de convecção.}$$

Suporemos, agora, que alguma região do domínio computacional possua valores relativamente grandes de $|u|$ e $|v|$, enquanto que em outra região tais valores são relativamente pequenos. Visto que o método LF escolhe α^x como o *maior* valor de $|u|$ e α^y como o *maior* valor de $|v|$, os mesmos valores de α serão utilizados tanto na região onde as velocidades são elevadas como, também, na região de baixas velocidades. Na região de altas velocidades, os maiores valores de α são requeridos para a obtenção de uma boa solução; contudo, na região onde as velocidades são pequenas, os grandes valores de α produzem muita dissipação numérica e, por conseguinte, pequenos detalhes existentes na solução serão amortizados. Desse modo, objetivando determinar os coeficientes dissipativos com maior acurácia, implementamos o chamado *método Local Lax-Friedrichs* (LLF) proposto por Shu e Osher [18].

Para uma melhor compreensão do método LLF é viável, em um primeiro instante, mencionarmos alguns dizeres a respeito de um esquema numérico conhecido como *método Stencil Lax-Friedrichs* (SLF); assim, o esquema SLF está sedimentado na seguinte idéia: determina-se os coeficientes de dissipação α^x e α^y quando Φ_x e Φ_y são encontrados utilizando-se somente

⁵Courant, Friedrichs e Lewy, sobrenomes dos três autores que primeiro a enunciaram.

pontos vizinhos da malha ($\vec{x}_{i-3,j}$ à $\vec{x}_{i+3,j}$ na *direção x* e $\vec{x}_{i,j-3}$ à $\vec{x}_{i,j+3}$ na *direção y*). Exposta a idéia central do método SLF é possível apresentarmos os fundamentos do *método Local Lax-Friedrichs*; afinal, este último está intimamente relacionado ao método SLF. Desse modo, no método LLF α^x é determinado em **cada** ponto da malha e, para a realização de tal feito, o intervalo I^x é determinado utilizando-se unicamente os valores de Φ_x e Φ_y no ponto em questão. O intervalo I^y é, então, definido através da utilização do método SLF. Similarmente, α^y utiliza um intervalo I^y definido unicamente sobre o específico ponto da malha, enquanto que I^x é determinado via método SLF.

Após a apropriada determinação dos coeficientes de dissipação α^x e α^y , temos como meta estipular qual discretização espacial é conveniente aos parâmetros Φ_x^* e Φ_y^* (vide expressão 3.13). Quando $H_1(\Phi_x, \Phi_y)$ possui sempre o mesmo sinal (positivo ou negativo) para todo $\Phi_x \in I_{LLF}^x$ e $\Phi_y \in I_{LLF}^y$, implica que as informações estão fluindo *upwinding*; ou seja, as informações fluem na direção de propagação das características. Procedimento análogo ocorre quando os diferenciais $H_2(\Phi_x, \Phi_y)$ não alteram o sinal. Desse modo, quando $H_1 > 0$ (condição em que as informações procedem da esquerda para direita) opta-se por $\Phi_x^* = \Phi_x^-$ e quando $H_1 < 0$, assume-se $\Phi_x^* = \Phi_x^+$. Ao realizarmos um raciocínio de mesma natureza, pode-se inferir que $H_2 > 0$ implica em $\Phi_y^* = \Phi_y^-$ e $H_2 < 0$ indica que $\Phi_y^* = \Phi_y^+$. Atenção especial deve ser dada quando H_1 e/ou H_2 mudam de sinal, pois nesta situação, estaremos nas vizinhanças de um **ponto sônico**. Matematicamente, estar nas vizinhanças de um ponto sônico significa que a solução de uma equação diferencial pode assumir vários valores no dito ponto. Em tal circunstância, é necessário estipular critérios para selecionar a solução fisicamente correta e, como foi mencionado no **Capítulo 2** desta presente dissertação, conceitos como *solução fraca entrópica*, *condições de Rankine-Hugoniot* e *dissipação artificial* são fundamentais na escolha correta da solução. Desse modo, em tal localidade, é viável procedermos da seguinte maneira:

Se $H_1(\Phi_x, \Phi_y)$ **não** muda de sinal para todo $\Phi_x \in I_{LLF}^x$ e para todo $\Phi_y \in I_{LLF}^y$, considera-se Φ_x^* igual a Φ_x^- ou Φ_x^+ dependendo do sinal de H_1 e o coeficiente de dissipação na direção x , α^x , é considerado **nulo**. Como supusemos o fato de H_1 não alterar o sinal, implica que o ponto sônico ocorre em H_2 ; assim, considera-se $\Phi_y^* = \frac{(\Phi_y^- + \Phi_y^+)}{2}$ e o coeficiente de dissipação na direção y , α^y , é encontrado via identidade 3.15. Um procedimento análogo é efetuado quando $H_2(\Phi_x, \Phi_y)$ **não** muda de sinal para todo $\Phi_x \in I_{LLF}^x$ e para todo $\Phi_y \in I_{LLF}^y$; nesse caso, assume-se Φ_y^* igual a Φ_y^- ou Φ_y^+ dependendo do sinal de H_2 , α^y é **zero**, $\Phi_x^* = \frac{(\Phi_x^- + \Phi_x^+)}{2}$ e o coeficiente de dissipação α^x é determinado utilizando a expressão 3.14. Finalmente, quando H_1 e H_2 mudam de sinal, pode-se concluir que há pontos sônicos em ambas direções e, portanto, considera-se $\Phi_x^* = \frac{(\Phi_x^- + \Phi_x^+)}{2}$, $\Phi_y^* = \frac{(\Phi_y^- + \Phi_y^+)}{2}$ e os coeficientes de dissipação que

controlam a viscosidade numérica, α^x e α^y , não serão nulos.

Um outro conceito de extrema importância no estudo da evolução de interfaces corresponde à chamada *função distância*. Foi mencionado anteriormente que a idéia central do método Level Set está baseada na evolução de uma função Φ cujo nível zero corresponde à curva que desejamos observar. Todavia, suporemos que o perfil da função Φ é desconhecido e que nos é fornecida apenas uma curva inicial como, por exemplo, uma circunferência centrada em algum ponto do domínio. Quando nos deparamos com uma situação análoga à descrita na frase anterior, é viável utilizarmos a definição de *função distância* para encontrarmos o *perfil inicial* da função Φ e, assim, inicializarmos o modelo Level Set.

A função distância, $d(\vec{x})$, é definida como:

$$d(\vec{x}) = \min(|\vec{x} - \vec{x}_C|) \quad \text{para todo } \vec{x}_C \in \partial\Omega ; \quad (3.17)$$

onde $\partial\Omega$ corresponde ao contorno (ou fronteira) da curva. Através da definição 3.17, podemos constatar que quando o ponto $\vec{x}$ pertencer ao contorno da curva o valor da função distância será nulo:

$$\text{Se } \vec{x} \in \partial\Omega, \text{ então } d(\vec{x}) = 0$$

Exposto o significado e a relevância do conceito de função distância, é válido mencionarmos a respeito do dito *sinal da função distância*. Desse modo, *sinal da função distância* equivale à uma função implícita Φ com $|\Phi(\vec{x})| = d(\vec{x})$ para todo $\vec{x}$. Comumente, define-se que pontos *fora* da curva possuem distância *positiva*, pontos no *interior* da curva possuem distância *negativa* e a distância é *nula* para pontos *pertencentes* à curva:

$$\Phi(\vec{x}) = d(\vec{x}) = 0 \quad \text{para todo } \vec{x} \in \partial\Omega,$$

$$\Phi(\vec{x}) = -d(\vec{x}) \quad \text{para todo } \vec{x} \in \Omega^-,$$

$$\Phi(\vec{x}) = +d(\vec{x}) \quad \text{para todo } \vec{x} \in \Omega^+.$$

Propondo visualizarmos o funcionamento da função distância⁶, retornemos ao exemplo onde apresentamos a curva inicial como sendo uma circunferência centrada em algum ponto do domínio. Neste caso, um perfil admissível para a função Φ é exposto na ilustração abaixo:

⁶Uma importante propriedade inerente à função distância é explicitada através da seguinte identidade: $|\nabla\phi| = 1$.

Figura 3.4: Perfil da função Φ (calculado a partir de uma circunferência centrada em algum ponto do domínio) em uma malha 200×200 .

Resultados e Discussão

Este Capítulo tem como finalidade mostrar os resultados numéricos obtidos via implementação do método *Level Set*. Inicialmente, construímos um algoritmo em **Fortran 90** utilizando todos os conceitos relatados anteriormente e, objetivando averiguar a acurácia da formulação *Level Set*, resolvemos acompanhar a evolução de uma função Φ cuja curva de nível zero corresponde a uma *circunferência* centrada em um certo ponto do domínio computacional ¹. É importante ressaltar que, em um primeiro instante, foi utilizada uma velocidade normal uniforme, $V_n = a = 1.0$ na equação *Level Set* (3.8), para que a circunferência inicial pudesse expandir continuamente ao longo do tempo. Assim, através do esquema *Level Set*, foi possível acompanharmos a evolução da superfície Φ via inspeção de sua *curva de nível zero*:

¹O perfil da função Φ foi encontrado utilizando o conceito de função distância.

Figura 4.1: Propagação da circunferência sob a ação de um campo de velocidade uniforme, $V_n = a = 1.0$.

Figura 4.2: Perfil inicial de uma função Φ cuja curva de nível zero corresponde a uma *estrela*.

Confirmado o apurado comportamento do método numérico Level Set, decidimos acompanhar a evolução de uma função Φ cujo nível zero corresponde à uma *estrela de oito pontas* (vide Figura 4.2) descrita pela seguinte equação paramétrica:

$$(x(s), y(s)) = [R + P \cos(2\pi Ls)](\cos(2\pi s), \sin(2\pi s)), \quad 0 \leq s \leq 1; \quad (4.1)$$

assumindo $R = 0.15$, $P = 0.08$ e $L = 8.0$.

A Figura 4.3 mostra a propagação de tal estrela sob a ação de um campo de velocidades uniforme, $V_n = a = 1.0$; considerando uma malha quadrada de 160 pontos em cada direção ($\Delta x = \Delta y = 1/160$) e um passo no tempo equivalente à $\Delta t = 0.00025$. Após a observação da figura 4.3, constata-se que a curva evolui suavemente e homogeneamente ao longo do tempo. Verificada a evolução da interface no formato estrela, decidimos considerar efeitos de curvatura² e, assim, fizemos com que a estrela citada anteriormente expandisse de acordo com a seguinte função velocidade:

$$V_n = a - b\kappa = 1.0 - 0.025\kappa; \quad (4.2)$$

onde κ equivale à *curvatura* apresentada na equação C.50. Para tal configuração de V_n a equação Level Set (3.8) é apresentada como

$$\Phi_t + \underbrace{a|\nabla\Phi|}_{\text{termo hiperbólico}} = \overbrace{b\kappa|\nabla\Phi|}^{\text{termo parabólico}}; \quad (4.3)$$

onde o termo hiperbólico foi discretizado utilizando a técnica descrita no **Capítulo 3** (Seção 3.1) e as derivadas parciais presentes na expressão da curvatura κ (vide equação C.50) foram aproximadas pelas diferenças centrais expostas no Apêndice C - **Seção D.6**. É imprescindível mencionarmos que a *condição CFL* para equações que contêm tanto o *termo hiperbólico* como também o *termo parabólico* é dada por

$$\Delta t \left(\frac{|H_1|}{\Delta x} + \frac{|H_2|}{\Delta y} + \frac{|H_3|}{\Delta z} + \frac{2b}{(\Delta x)^2} + \frac{2b}{(\Delta y)^2} + \frac{2b}{(\Delta z)^2} \right) < 1. \quad (4.4)$$

Como esperado, quando a velocidade de propagação V_n é função da curvatura κ , a estrela evolui suavemente e, com o decorrer do tempo, tende a tornar-se um círculo (vide Figura 4.4).

²É importante mencionarmos que a discretização da curvatura κ por *diferenças finitas* está apresentada no Apêndice C - **Seção D.6** deste trabalho.

Figura 4.3: Propagação da curva no formato estrela sob a ação de um campo de velocidade uniforme, $V_n = a = 1.0$.

Figura 4.4: Propagação da curva no formato estrela sob a ação de um campo de velocidade dependente da curvatura, $V_n = a - b\kappa = 1.0 - 0.025\kappa$.

Após observarmos os efeitos da curvatura na evolução da interface no formato estrela, decidimos acompanhar a propagação de tal curva quando esta sofre a ação de um campo de velocidade externo, $\mathbf{V}$. Em tal situação física, a equação de movimento é escrita como:

$$\Phi_t + \underbrace{\mathbf{V} \cdot \nabla \Phi}_{\text{termo convectivo}} + a|\nabla \Phi| = b\kappa|\nabla \Phi| ; \quad (4.5)$$

sendo $\mathbf{V} = u \hat{\mathbf{i}}$.

Ao observarmos a equação 4.5 podemos verificar a presença de uma parte *hiperbólica* (**Hamilton-Jacobi**) caracterizada pelos termos $\mathbf{V} \cdot \nabla \Phi$ e $a|\nabla \Phi|$ e uma parte *parabólica* representada pelo termo $b\kappa|\nabla \Phi|$. É importante ressaltar que para discretizarmos a parte de Hamilton-Jacobi presente em 4.5, primeiramente identificamos as derivadas parciais de H ; isto é,

$$H_1 = u + a\Phi_x|\nabla \Phi|^{-1} \quad (4.6)$$

$$H_2 = a\Phi_y|\nabla \Phi|^{-1} ; \quad (4.7)$$

onde o primeiro termo de H_1 representa o *transporte* da interface por um campo de velocidade externo, enquanto que o segundo termo de H_1 representa a velocidade intrínseca da curva (neste caso, a interface propaga-se em uma *direção normal* a ela mesma). Novamente, é válido mencionarmos que a parte hiperbólica da equação 4.5 foi discretizada utilizando a técnica descrita no **Capítulo 3** (Seção 3.1) e as derivadas parciais presentes na expressão da curvatura κ foram aproximadas pelas diferenças finitas centrais apresentadas no Apêndice C - Seção D.6.

As Figuras 4.5 e 4.6, respectivamente, mostram a propagação da interface no formato estrela sob a ação de um campo de velocidade externo, $\mathbf{V} = u \hat{\mathbf{i}}$ e $\mathbf{V} = -u \hat{\mathbf{i}}$, respectivamente; considerando uma malha quadrada de 160 pontos em cada direção ($\Delta x = \Delta y = 1/160$) e um passo no tempo equivalente à $\Delta t = 0.00025$. É válido mencionar que utilizamos os seguintes valores para os parâmetros presentes na equação 4.5: $\mathbf{V} = \pm 1.0 \hat{\mathbf{i}}$, $a = 0.5$ e $b = 0.01$.

Observando a Figura 4.5 nota-se que à medida que o tempo transcorre, a interface propaga-se de acordo com uma função velocidade constante (dependente da curvatura) e, simultaneamente, é transportada para *direita* ao longo do eixo x . Procedimento similar ocorre na Figura 4.6; contudo, em tal situação a curva é transportada para *esquerda* ao longo do eixo das abscissas.

Figura 4.5: Propagação da curva no formato estrela sob a ação de um campo de velocidade externo (sendo, $V_n = a - b\kappa = 0.5 - 0.01\kappa$ e $\mathbf{V} = +1.0\hat{\mathbf{i}}$).

Figura 4.6: Propagação da curva no formato estrela sob a ação de um campo de velocidade externo (sendo, $V_n = a - b\kappa = 0.5 - 0.01\kappa$ e $\mathbf{V} = -1.0\hat{\mathbf{i}}$).

Demos continuidade aos nossos estudos a respeito da evolução de curvas e superfícies inspecionando a propagação de uma função Φ cuja curva de nível zero corresponde à uma *espiral* (vide Figura 4.7) parametrizada do seguinte modo:

$$\gamma(s) = \left[\frac{1}{6} \exp(-10y(s)) - \frac{1}{17} \left(\frac{1}{6} - x(s) \right) \right] (\cos(a(s)), \sin(a(s))), \quad (4.8)$$

onde

$$a(s) = 25 \tan^{-1}(2y(s)), \quad x(s) = \frac{1}{6} \cos(2\pi s) + \frac{1}{6}, \quad y(s) = \frac{1}{5} \sin(2\pi s) + \frac{1}{6}. \quad (4.9)$$

Primeiramente, fizemos a curva espiral em questão propagar com uma velocidade normal uniforme, $V_n = 1.0$, de maneira que a equação *Level Set* (3.8) é escrita como:

$$\Phi_t + 1.0|\nabla\Phi| = 0, \quad (4.10)$$

neste caso, a curva move-se na *direção normal*.

A Figura 4.8 mostra a evolução da curva espiral considerando uma malha quadrada de 200 pontos em cada direção ($\Delta x = \Delta y = 0.005$) e um passo no tempo equivalente à 0.0001. Ao observarmos a Figura 4.8 verificamos que a curva inicial “desembrulha-se” suavemente³ ao longo do tempo e, como consequência deste resultado, podemos novamente constatar a robustez do modelo Level Set. Após analisarmos a propagação da curva espiral sob a ação de um campo de velocidades uniforme, nos sentimos instigados em fazer com que tal curva inicial propagasse de acordo com a seguinte velocidade:

$$V_n = a - b\kappa = 1.0 - 0.02\kappa; \quad (4.11)$$

onde κ corresponde à curvatura apresentada em C.50.

A Figura 4.9 expõe a técnica Level Set aplicada à curva espiral que se propaga conforme a velocidade apresentada na equação 4.11. Neste caso, novamente, verifica-se que a espiral desdobra-se suavemente; todavia, com o decorrer do tempo, tal curva tem por fim transformar-se em um círculo.

³No decorrer da evolução não há o surgimento de descontinuidades (*shocks*), fato este que implica na *estabilidade numérica*.

Figura 4.7: Perfil inicial de uma função Φ cuja curva de nível zero corresponde a uma *espiral*.

Figura 4.8: Propagação da curva no formato espiral sob a ação de um campo de velocidade uniforme, $V_n = 1.0$.

Figura 4.9: Propagação da curva no formato espiral sob a ação de um campo de velocidade dependente da curvatura, $V_n = 1.0 - 0.02\kappa$.

Seguimos nosso estudo a respeito da evolução de curvas via abordagem Level Set, considerando uma função Φ cuja curva de nível zero corresponde a uma *flor* com L pétalas (vide Figura 4.10) descrita pela seguinte equação paramétrica:

$$\begin{aligned} x(s) &= P \cos(Ls) \cos(s) \\ y(s) &= P \cos(Ls) \sin(s); \end{aligned} \quad (4.12)$$

onde $s \in [0, 2\pi]$, $P = 0.4$ e $L = 4$.

Nesta etapa do projeto, optamos por observar a evolução da interface no formato flor quando esta propaga-se com uma velocidade uniforme (dependente da curvatura) e, simultaneamente, é transportada por um campo de velocidade externo da forma $\mathbf{V} = u\hat{\mathbf{i}} + v\hat{\mathbf{j}}$. Tal circunstância é descrita pela seguinte equação diferencial:

$$\Phi_t + \underbrace{\mathbf{V} \cdot \nabla \Phi}_{\text{termo convectivo}} + a|\nabla \Phi| = \overbrace{b\kappa|\nabla \Phi|}^{\text{termo difusivo}}, \quad (4.13)$$

sendo esta equação conhecida na literatura como *equação convecção-difusão*; afinal ambos efeitos - *campo de velocidade externo* e *termo difusivo* - estão inclusos em 4.13. Assim, fizemos com que a curva em questão propagasse conforme a função velocidade

$$V_n = a - b\kappa = 0.5 - 0.01\kappa \quad (4.14)$$

e fosse transportada por um campo de velocidade externo uniforme configurado como

$$\mathbf{V} = u\hat{\mathbf{i}} + v\hat{\mathbf{j}} = 1.0\hat{\mathbf{i}} + 1.0\hat{\mathbf{j}}. \quad (4.15)$$

A formulação Level Set nos instrui em discretizar a parte hiperbólica da equação 4.13 através do método exposto no **Capítulo 3** (Seção 3.1), sendo

$$H_1 = u + a\Phi_x|\nabla \Phi|^{-1} \quad (4.16)$$

$$H_2 = v + a\Phi_y|\nabla \Phi|^{-1}, \quad (4.17)$$

as derivadas parciais de H com relação à Φ_x e Φ_y , respectivamente; enquanto que as derivadas parciais presentes na expressão da curvatura κ (equação C.50) devem ser aproximadas pelas diferenças finitas centrais apresentadas no Apêndice C - **Seção D.6**. Por conseguinte, após a utilização da abordagem Level Set, foi possível verificarmos a suave evolução da curva no formato flor (vide Figura 4.11). Ao analisarmos os gráficos existentes na Figura 4.11 constatamos que a curva propaga-se de acordo com uma função velocidade intrínseca V_n (dependente da curvatura) e, simultaneamente, é transportada, pela ação de um campo de velocidade externo, ao longo da diagonal.

Figura 4.10: Perfil inicial de uma função Φ cuja curva de nível zero corresponde a uma *flor*.

Figura 4.11: Propagação da curva no formato flor sob a ação de um campo de velocidade externo (sendo, $V_n = a - b\kappa = 0.5 - 0.01\kappa$ e $\mathbf{V} = 1.0\hat{\mathbf{i}} + 1.0\hat{\mathbf{j}}$).

Após apresentarmos as evoluções de diversas curvas e, por conseguinte, explicitarmos a acurácia da formulação Level Set, temos como foco aplicar tal técnica numérica em problemas existentes na área de crescimento de cristais. Desse modo, inicialmente fizemos com que uma semente cristalina crescesse de acordo com a seguinte velocidade *anisotrópica*:

$$V = a - \epsilon_C(n)\kappa = 1.0 - \underbrace{\epsilon_C[1.0 - A \cos(k\theta + \theta_o)]}_{\epsilon_C(n)=\text{coeficiente de tensão superficial}} \kappa; \quad (4.18)$$

onde ϵ_C , A , k e θ_o são constantes que dependem do material e do arranjo experimental utilizados e θ corresponde ao ângulo formado entre o vetor normal e o eixo x . Para uma melhor compreensão dos significados das quantidades presentes na expressão 4.18 é importante ressaltarmos as seguintes informações:

- Quando ϵ_C é nulo os efeitos de tensão superficial⁴ são *ausentes*;
- Quando $A = 0$ o sistema é *isotrópico*; enquanto que para $A > 0$ o cristal possui simetria pontual de k -ésima ordem⁵;
- O parâmetro θ_o equivale ao *ângulo preferencial de crescimento* do cristal; ou seja, quando $\theta_o = \pi/8$ significa que o cristal irá preferir crescer ao longo das *diagonais* e quando $\theta_o = 0$ o cristal demonstrará preferência em crescer ao longo dos *eixos x e y* .

Assim, estimulados em estudar a influência dos efeitos anisotrópicos no crescimento da semente cristalina, fixamos os seguintes valores para os parâmetros existentes na função velocidade 4.18: $A = 1$, $\theta_o = \pi/8$ e $\epsilon_C = 0.01$. Em seguida, escolhemos $k = 6.0$,

$$V = 1.0 - 0.01[1.0 - 1.0 \cos(6.0\theta + \pi/8)]\kappa, \quad (4.19)$$

correspondendo a uma simetria pontual de *sexta ordem*, e $k = 8.0$,

$$V = 1.0 - 0.01[1.0 - 1.0 \cos(8.0\theta + \pi/8)]\kappa, \quad (4.20)$$

correspondendo a uma simetria pontual de *oitava ordem*.

As Figuras 4.12 e 4.13 mostram os resultados obtidos via implementação da formulação Level Set quando a semente cristalina evolui segundo uma função velocidade anisotrópica com $k = 6.0$ e $k = 8.0$, respectivamente. Em ambos os casos, pode-se verificar a *suave* propagação da semente cristalina; contudo, quando $k = 6.0$ é possível notarmos a formação de um *hexágono* (polígono de seis lados) e quando $k = 8.0$ observamos o surgimento de um *octógono* (polígono de oito lados).

⁴Os coeficientes de tensão superficial $\epsilon_C(n)$ e cinética molecular $\epsilon_V(n)$ estão expostos na **Introdução** desta dissertação.

⁵Em inglês, diz-se que o cristal é *k-fold symmetric*.

Figura 4.12: Evolução da semente cristalina segundo uma função velocidade anisotrópica 4.19 com simetria pontual de *sexta ordem*. Note a formação de um hexágono após um certo intervalo de tempo.

Figura 4.13: Evolução da semente cristalina segundo uma função velocidade anisotrópica 4.20 com simetria pontual de oitava ordem. Note a formação de um octógono após um certo intervalo de tempo.

Conclusão

“ Our thoughts are ours, their ends none of our own . . . ”

William Shakespeare

A realização deste projeto de Mestrado nos permitiu ingressar no âmbito das técnicas numéricas desenvolvidas para simular e analisar evoluções de curvas e superfícies. Particularmente, nesta dissertação focamos o estudo dos fundamentos da formulação *Level Set* e, após compreendermos os conceitos básicos de tal esquema numérico, investigamos a evolução de diversas curvas planas.

Inicialmente, visando verificar a acurácia do método *Level Set*, consideramos uma *circunferência* como sendo a *curva de nível zero* de uma função tri-dimensional Φ , calculada através da função distância. Permitimos, então, que tal circunferência propagasse de acordo com uma velocidade normal uniforme e, ao observarmos a suave e contínua propagação da curva em questão, constatamos a eficácia do modelo numérico estudado.

Confirmado o apurado comportamento da formulação *Level Set*, decidimos acompanhar a evolução de uma função Φ cujo *nível zero* correspondia à uma *estrela de oito pontas*. Primeiramente, fizemos com que tal estrela evoluísse sob a ação de um campo de velocidade uniforme, $V_n = 1.0$, e, seguidamente, permitimos que a mesma curva expandisse de acordo com uma função velocidade dependente da curvatura, $V_n = 1.0 - 0.025\kappa$. Em ambos os casos, a estrela evoluiu *suavemente e homogeneamente* ao longo do tempo; todavia, quando a propagação ocorreu sob a ação de uma função velocidade *dependente da curvatura*, a estrela aspirou a tornar-se um círculo.

Demos continuidade aos nossos estudos a respeito da evolução de curvas inspecionando a propagação de uma função Φ cujo nível zero correspondia à uma complexa curva *espiral*. Em um primeiro instante, fizemos a curva espiral propagar com uma velocidade normal uniforme,

$V_n = 1.0$, e, posteriormente, nos sentimos instigados em fazer com que tal curva propagasse de acordo com uma função velocidade dependente da curvatura, $V_n = 1.0 - 0.02\kappa$. Ao observarmos os resultados numéricos obtidos, verificamos que a curva espiral “desembrulhou-se” *suavemente* à medida que o tempo transcorria e, analogamente ao resultado anterior, verificamos que quando a evolução ocorreu sob a ação de uma função velocidade dependente da curvatura, a espiral tendeu a tornar-se um círculo.

Prosseguimos nossos estudos a respeito da evolução de curvas via abordagem Level Set, considerando uma função Φ cuja *curva de nível zero* correspondia à uma *flor*. Fizemos, então, com que tal interface no formato flor propagasse com uma velocidade intrínseca V_n (dependente da curvatura) e, simultaneamente, fosse transportada por um campo de velocidade externo da forma $\mathbf{V} = u\hat{\mathbf{i}} + v\hat{\mathbf{j}}$. Novamente, os resultados numéricos mostraram que a curva evoluiu suavemente e, ao mesmo tempo, foi transportada ao longo da direção diagonal pela ação do campo de velocidade externo.

Por fim, após analisarmos as evoluções de diversas curvas e, por conseguinte, explicitarmos a acurácia da formulação Level Set, nos sentimos estimulados em aplicar tal abordagem numérica em problemas existentes na área de crescimento de cristais. Assim, optamos por estudar a influência dos *efeitos anisotrópicos no crescimento de uma semente cristalina* e, para a realização de tal feito, decidimos fazer com que tal semente evoluísse segundo velocidades anisotrópicas com simetria pontual de sexta ordem ($k = 6.0$) e simetria pontual de oitava ordem ($k = 8.0$), respectivamente. Através dos resultados obtidos verificamos que a semente cristalina evoluiu *suavemente* ao longo do tempo; todavia, quando $k = 6.0$ tal semente propendeu a transformar-se em um *hexágono* e quando $k = 8.0$ observamos o surgimento de um *octógono*.

Após analisarmos as evoluções das diversas curvas planas apresentadas nesta dissertação, pudemos constatar que o método Level Set é *eficiente, reproduz corretamente os resultados esperados e não apresenta instabilidades numéricas*. Convém salientar que para inspecionarmos as propagações das tais curvas planas, a formulação Level Set em *duas dimensões* foi implementada em linguagem **Fortran 90** e as *rotinas*, desenvolvidas por nós, que compõem o esquema numérico em questão encontram-se devidamente otimizadas e testadas. A realização deste trabalho de Mestrado foi de extrema importância para aprofundarmos nossos conhecimentos a respeito de cálculo numérico e, após efetuarmos este projeto, acreditamos ser capazes de tratar numericamente equações diferenciais do tipo *Hamilton-Jacobi* e suas *leis de conservação*.

Posteriormente ao estudo e à compreensão dos fundamentos da formulação Level Set, temos como propósito aplicar tal técnica numérica à problemas existentes na área de *Cres-*

cimento de Cristais [10]. É importante salientarmos que o particular interesse em aplicar o método Level Set à área mencionada na frase precedente, deve-se ao fato de existir um grupo de experimentalistas no *Instituto de Física de São Carlos* (IFSC) capacitado de *controlar*, *modelar* e *compreender* a morfologia dos cristais. Assim, via utilização do modelo Level Set, intencionamos desenvolver *modelos teóricos* em *duas e três dimensões* capazes de tratar problemas envolvendo crescimento de cristais e, em virtude da existência do grupo experimental previamente dito, será possível verificarmos da validade de nossos modelos teóricos. *Processamento de Imagens* [19, 16] corresponde à outra área que nos desperta grande interesse, pois temos como meta aplicar a formulação Level Set ao estudo de *imagens médicas* em geral. No entanto, temos também o interesse de incluir efeitos de *curvatura* nas medidas morfométricas realizadas recentemente em imagens neuronais bidimensionais [20, 21], bem como em imagens tri-dimensionais. Acreditamos que os futuros trabalhos relacionados às áreas de *Crescimento de Cristais* e *Processamento de Imagens* serão de grande valia para aprimorarmos a implementação numérica do esquema Level Set, além de propiciarem uma excelente oportunidade para nos inteirarmos dos problemas físicos existentes nas áreas de pesquisa em questão.

Após aprimorarmos o esquema numérico Level Set, temos como perspectiva desenvolver modelos computacionais focados aos setores tecnológicos e empresariais, ou seja, almejamos implementar o método Level Set para tratar problemas existentes em metalurgia, aeronáutica e mercado financeiro.

Vale enfatizarmos que estes estudos sobre diferenças finitas efetuados nesta dissertação também serão úteis numa outra linha de pesquisa em desenvolvimento no nosso grupo. Nesta outra linha, o interesse está na construção de sistemas dinâmicos hamiltonianos com simetria pré-definida [22, 23]. Em geral, estes hamiltonianos (ou lagrangeanos) são construídos através dos invariantes diferenciais de algum grupo de Lie [24]. Estes invariantes diferenciais funcionam como uma base para as equações diferenciais parciais possuindo algum grupo de simetria. Acontece que estudos numéricos desses sistemas hamiltonianos deverão ser realizados [23]. Certamente estes estudos serão beneficiados com a presente dissertação. Além disto, estes mesmos invariantes diferenciais também serão utilizados nas aplicações futuras envolvendo processamento de imagens [16].

Bibliografia

- [1] S. Osher and J. A. Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *J. Comp. Phys.*, 79:12, 1988. [iv](#), [v](#), [6](#), [29](#), [30](#)
- [2] W. A. Tiller. *The Science of Crystallization: Microscopic Interfacial Phenomena*. Cambridge University, 1991. [1](#), [3](#)
- [3] U. Nakaya. *Snow Crystal: Natural and Artificial*. Harvard, 1954. [1](#), [2](#)
- [4] K. Libbrecht and P. Rasmussen. *The Snowflake: Winters Secret Beauty*. Voyageur, 2003. [2](#)
- [5] J. A. Sethian and J. Strain. Crystal growth and dendritic solidification. *J. Comp. Phys.*, 98:231, 1992. [4](#), [6](#)
- [6] C. Vuik. Some historical notes on the Stefan problem. *Nieuw Archief voor Wiskunde*, 11:157, 1993. [4](#)
- [7] S. Chandrasekhar. *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability*. The International Series of Monographs on Physics. Oxford, 1961. [5](#)
- [8] J. A. Sethian. *Level Set Methods and Fast Marching Methods*, volume 3 of *Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics*. Cambridge, 1999. [6](#), [8](#), [29](#)
- [9] S. J. Osher and R. P. Fedkiw. *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*. Number 153 in Applied Mathematical Sciences. Springer, 2003. [6](#), [8](#), [29](#), [34](#), [73](#)
- [10] J. P. Andreeta. *Cristalização: Teoria e Prática*. Universidade de São Paulo, 1998. [6](#), [56](#)
- [11] R. D. Richtmyer. *Principles of Advanced Mathematical Physics*, volume 1. Springer, 1978. [8](#), [64](#)

- [12] R. J. Le VequeCrandall. *Numerical Methods for Conservation Laws*. Birkhäuser Verlag, 1992. 8
- [13] J. W. Thomas. *Numerical Partial Differential Equations. Conservation Laws and Elliptic Equations*, volume 2 of *Texts in Applied Mathematics*. Springer, 1999. 8, 18, 19, 20, 27
- [14] A. O. Fortuna. *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações*. Universidade de São Paulo, 2000. 8
- [15] L. Lapidus and G. F. Finder. *Numerical Solution of Partial Differential Equations in Science and Engineering*. Wiley-Interscience, 1982. 8, 14
- [16] G. Sapiro. *Geometric Partial Differential Equations and Image Analysis*. Cambridge, 2001. 29, 56
- [17] H. Goldstein. *Classical Mechanics*. Addison-Wesley, 1980. 33
- [18] C. W. Shu and S. Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock capturing schemes ii (two). *J. Comp. Phys.*, 83:32, 1989. 35
- [19] L. F. Costa and R. M. César Jr. *Shape Analysis and Classification: Theory and Practice*. CRC Press, 2001. 56
- [20] M. S. Barbosa, L. da F. Costa, and E. de S. Bernardes. Neuromorphometric characterization with shape functionals. *Phys. Rev. E*, 67(6):061910, 2003. 56
- [21] M. S. Barbosa, L. da F. Costa, and E. de S. Bernardes. Additive shape functionals as neuromorphometric descriptors. *Eur. Phys. J. B*, 37:109, 2004. 56
- [22] Marconi Soares Barbosa and Esmerindo Bernardes. *Invariantes Diferenciais do Grupo Simplético*. PhD thesis, Instituto de Física de São Carlos – USP, www.teses.usp.br, 2002. 56
- [23] M. S. Barbosa and E. S. Bernardes. Differential invariants for symplectic Lie algebras realized by boson operators. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 37:4797, 2004. 56
- [24] P. J. Olver. *Equivalence, Invariants, and Symmetry*. Cambridge, 1995. 56
- [25] A. Pogorelov. *Geometry*. Mir, 1987. 65, 71
- [26] D. J. Struik. *Lectures on Classical Differential Geometry*. Addison-Wesley, 1961. 65, 71

A

Condição de Stefan

Este Apêndice tem como meta deduzir a conhecida *condição de Stefan* mencionada na *Introdução* desta dissertação de Mestrado. Para a realização de tal propósito, serão aludidos conceitos comumente presentes na Termodinâmica, além da constante inspeção da Figura A.1.

Figura A.1: Esquemática do *problema de Stefan*.

Assuma que em um pequeno instante de tempo Δt a interface $\Gamma(t)$ evoluiu para $\Gamma(t + \Delta t)$ conforme mostrado na Figura A.1. Desse modo, visto que se trata de um problema envolvendo mudança de estado (**solidificação**), a pequena *quantidade de calor* ΔQ cedida pela amostra decorre da definição de *calor latente de solidificação* (L_s):

$$L_s = \frac{\Delta Q}{\Delta m} \Rightarrow \Delta Q = L_s \Delta m = L_s \underbrace{\rho}_{\Delta m} \Delta V ; \quad (\text{A.1})$$

onde Δm representa uma pequena quantidade de massa, ΔV corresponde ao volume do pequeno segmento mostrado na Figura A.1 e ρ nomeia a densidade. Sendo $\Delta V = V_n \Delta t \Delta A$, onde V_n corresponde à componente normal da velocidade e ΔA simboliza o pequeno elemento de área da seção reta ilustrada na Figura A.1, a pequena quantidade de calor cedida pela amostra será escrita como:

$$\Delta Q = L_s \underbrace{\rho \Delta V}_{\Delta m} = L_s \rho \overbrace{V_n \Delta t \Delta A}^{\Delta V} \Rightarrow \frac{1}{\Delta A} \frac{\Delta Q}{\Delta t} = L_s \rho V_n. \quad (\text{A.2})$$

Para prosseguirmos os cálculos que culminarão na *condição de Stefan*, será necessária a inclusão do conceito de *corrente térmica*. Desse modo, convém salientar que a corrente térmica I corresponde à uma grandeza física que mede a taxa de condução de calor, $\Delta Q/\Delta t$, e, experimentalmente, constata-se que tal grandeza é proporcional ao gradiente de temperatura e à área ΔA da seção reta (*Lei de Fourier*):

$$I = \frac{\Delta Q}{\Delta t} = \kappa \Delta A \frac{\Delta u}{\Delta x}; \quad (\text{A.3})$$

sendo a constante de proporcionalidade κ denominada **condutividade térmica**. Tendo conhecimento do significado de corrente térmica, é conveniente substituímos a identidade apresentada em A.3 na expressão A.2 de modo a obter-se a seguinte igualdade:

$$\frac{1}{\Delta A} \frac{\Delta Q}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta A} \overbrace{\left(\kappa \Delta A \frac{\Delta u}{\Delta x} \right)}^I = \kappa \frac{\Delta u}{\Delta x} = \kappa (\nabla u) \cdot \hat{\mathbf{n}}; \quad (\text{A.4})$$

onde

$$\nabla u \cdot \hat{\mathbf{n}} \Big|_a^b = \left[\frac{\partial u}{\partial n} \right]. \quad (\text{A.5})$$

Finalmente, após substituímos o resultado encontrado em A.4 na expressão A.2, encontra-se a *condição de Stefan*:

$$\frac{1}{\Delta A} \frac{\Delta Q}{\Delta t} = \kappa (\nabla u) \cdot \hat{\mathbf{n}} = L_s \rho V_n \Rightarrow \kappa \left[\frac{\partial u}{\partial n} \right] = L_s \rho V_n. \quad (\text{A.6})$$

É válido mencionarmos que o *calor latente de mudança de estado* é a quantidade de calor, por unidade de massa, que é necessário **fornecer** ou **retirar** de um dado corpo, a uma certa pressão, para que ocorra a mudança de estado, sem variação de temperatura. Assim, visto que o problema em questão envolve um processo de **solidificação**, o sinal do calor latente será *negativo*.

B

Leis de Conservação

Este Apêndice tem como meta detalhar todos os cálculos necessários para reescrever as leis de conservação contidas na expressão

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial F(u)}{\partial x} = 0, \quad (\text{B.1})$$

sendo

$$u = \begin{pmatrix} \rho \\ \pi \\ e \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} \pi \\ (\pi^2/\rho) + P \\ (e + P)\pi/\rho \end{pmatrix}. \quad (\text{B.2})$$

na forma do seguinte sistema acoplado:

$$\frac{d\rho}{dt} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x} \right) \rho = -\rho \frac{\partial v}{\partial x}, \quad (\text{B.3})$$

$$\frac{dv}{dt} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x} \right) v = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x}, \quad (\text{B.4})$$

$$\frac{d\epsilon}{dt} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x} \right) \epsilon = -\frac{P}{\rho} \frac{\partial v}{\partial x}. \quad (\text{B.5})$$

Objetivando realizar o propósito citado no parágrafo anterior vamos, inicialmente, considerar $u = \rho$ na expressão [B.1](#) de modo a obtermos a *Lei de Conservação da Massa*:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial F(u)}{\partial x} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial x} = 0 \Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0 \Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} + v \frac{\partial \rho}{\partial x} = -\rho \frac{\partial v}{\partial x}. \quad (\text{B.6})$$

Sendo $u = \pi$ e, por conseguinte, $F(u) = P + \pi^2/\rho$ obtém-se em B.1:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial F(u)}{\partial x} &= \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(P + \frac{\rho^2 v^2}{\rho} \right) = 0 \Rightarrow \rho \frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial x} + 2\rho v \frac{\partial v}{\partial x} + v^2 \frac{\partial \rho}{\partial x} = \\ &\quad \underbrace{-\rho \frac{\partial v}{\partial x}}_{\text{de B.6}} : \text{de B.6} \\ \rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \rho v \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial P}{\partial x} + v \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + v \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) &= \rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial P}{\partial x} + v \rho \left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) = \\ \rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial P}{\partial x} &= 0 \Rightarrow \frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} . \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Considerando $u = e = \rho\epsilon + \frac{1}{2}\rho v^2$, tem-se $F(u) = (e + P)\pi/\rho = \rho\epsilon v + \rho v^3/2 + Pv$ e, portanto, substituindo tais identidades em B.1, obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial F(u)}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho\epsilon + \frac{1}{2}\rho v^2 \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho\epsilon v + \rho \frac{v^3}{2} + Pv \right) = 0 \Rightarrow \rho \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \epsilon \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho v \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{v^2}{2} \frac{\partial \rho}{\partial t} \\ &+ \rho \epsilon \frac{\partial v}{\partial x} + v \left(\rho \frac{\partial \epsilon}{\partial x} + \epsilon \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) + \frac{3}{2}\rho v^2 \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{v^3}{2} \frac{\partial \rho}{\partial x} + P \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial P}{\partial x} = 0 \Rightarrow \rho \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + v \frac{\partial \epsilon}{\partial x} \right) + P \frac{\partial v}{\partial x} \\ &+ \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} \left(\epsilon + \frac{v^2}{2} \right) + \frac{\partial \rho}{\partial x} \left(v\epsilon + \frac{v^3}{2} \right) + \rho v \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial v}{\partial x} \left(\rho\epsilon + \frac{3}{2}\rho v^2 \right) + v \frac{\partial P}{\partial x} \right] = 0 . \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Analisaremos, agora, a expressão entre colchetes existente em B.8 e, via substituição $\epsilon = e/\rho - v^2/2$, pode-se constatar que:

$$\begin{aligned} &\left[\frac{\partial \rho}{\partial t} \left(\epsilon + \frac{v^2}{2} \right) + \frac{\partial \rho}{\partial x} \left(v\epsilon + \frac{v^3}{2} \right) + \rho v \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial v}{\partial x} \left(\rho\epsilon + \frac{3}{2}\rho v^2 \right) + v \frac{\partial P}{\partial x} \right] = \\ &= \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} \left(\frac{e}{\rho} - \frac{v^2}{2} + \frac{v^2}{2} \right) + \frac{\partial \rho}{\partial x} \left(v \frac{e}{\rho} - \frac{v^3}{2} + \frac{v^3}{2} \right) + \rho v \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial v}{\partial x} (e + \rho v^2) + v \frac{\partial P}{\partial x} \right] = \\ &= \left[\underbrace{\frac{e}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + v \frac{\partial \rho}{\partial x} \right)}_{-\rho \frac{\partial v}{\partial x} : \text{de B.6}} + v \underbrace{\left(\rho \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial x} \right)}_{-\rho v \frac{\partial v}{\partial x} : \text{de B.7}} + \frac{\partial v}{\partial x} (e + \rho v^2) \right] = \\ &= \left[-e \frac{\partial v}{\partial x} - \rho v^2 \frac{\partial v}{\partial x} + e \frac{\partial v}{\partial x} + \rho v^2 \frac{\partial v}{\partial x} \right] = 0 . \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Após a verificação de que a expressão entre colchetes resulta em um valor *nulo*, é possível expressar B.8 como:

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + v \frac{\partial \epsilon}{\partial x} = -\frac{P}{\rho} \frac{\partial v}{\partial x} . \quad (\text{B.10})$$

Por fim, decorrente das manipulações algébricas efetuadas neste Apêndice, as leis de conservação contidas na expressão B.1 podem ser apresentadas explicitamente na forma do seguinte sistema acoplado:

$$\frac{d\rho}{dt} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x} \right) \rho = -\rho \frac{\partial v}{\partial x} , \quad (\text{B.11})$$

$$\frac{dv}{dt} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x} \right) v = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} , \quad (\text{B.12})$$

$$\frac{d\epsilon}{dt} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x} \right) \epsilon = -\frac{P}{\rho} \frac{\partial v}{\partial x} . \quad (\text{B.13})$$

O sistema acoplado exposto acima pode, por conseguinte, ser reescrito na forma matricial

$$u_t + M u_x = 0 ; \quad \text{onde} \quad M_{ik} = \frac{\partial F_i}{\partial u_k} , \quad (\text{B.14})$$

de maneira que

$$\begin{pmatrix} \rho_t \\ \pi_t \\ e_t \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_x \\ \pi_x \\ e_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.15})$$

Visualizando a expressão B.1 (ou B.2) é possível determinar explicitamente os elementos que compõem a matriz M em questão. Assim, objetivando a realização de tal propósito, faz-se:

$$\rho_t + M_{11}\rho_x + M_{12}\pi_x + M_{13}e_x = 0 \quad (\text{B.16})$$

$$\pi_t + M_{21}\rho_x + M_{22}\pi_x + M_{23}e_x = 0 \quad (\text{B.17})$$

$$e_t + M_{31}\rho_x + M_{32}\pi_x + M_{33}e_x = 0 \quad (\text{B.18})$$

Desse modo, quando $u = \rho$ a expressão B.1 resulta na seguinte equação diferencial parcial:

$$\rho_t + \pi_x = 0 \quad \Rightarrow \quad \therefore M_{11} = M_{13} = 0 \quad \text{e} \quad M_{12} = 1 .$$

Quando $u = \pi$ a expressão B.1 converte-se na seguinte equação:

$$\frac{\partial \pi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(P + \frac{\pi^2}{\rho} \right) = 0 \Rightarrow \frac{\partial \pi}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{\partial P}{\partial e} \frac{\partial e}{\partial x} + 2\rho^{-1}\pi \frac{\partial \pi}{\partial x} - \frac{\pi^2}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0 \Rightarrow$$

$$\pi_t + \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} - \frac{\pi^2}{\rho^2} \right) \rho_x + 2\rho^{-1}\pi\pi_x + \frac{\partial P}{\partial e} e_x = 0 \Rightarrow \therefore M_{21} = P_\rho - v^2, \quad M_{22} = 2v \quad \text{e} \quad M_{23} = P_e .$$

Finalmente, $u = e$ implica na seguinte equação diferencial parcial:

$$\begin{aligned} \frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{e\pi}{\rho} + \frac{P\pi}{\rho} \right) &= 0 \Rightarrow \frac{\partial e}{\partial t} - \frac{e\pi}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \left(e \frac{\partial \pi}{\partial x} + \pi \frac{\partial e}{\partial x} \right) - \frac{P\pi}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \\ \frac{1}{\rho} \left(P \frac{\partial \pi}{\partial x} + \pi \frac{\partial P}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \pi \frac{\partial P}{\partial e} \frac{\partial e}{\partial x} \right) &= 0 \Rightarrow e_t + \rho_x \left(\frac{e\pi}{\rho^2} - \frac{P\pi}{\rho^2} + \frac{\pi P_\rho}{\rho} \right) + \pi_x \left(\frac{e}{\rho} + \frac{P}{\rho} \right) \\ + e_x \left(\frac{\pi}{\rho} + \frac{\pi P_e}{\rho} \right) &= 0 \Rightarrow \therefore M_{31} = v[P_\rho - \rho^{-1}(e + P)], M_{32} = \rho^{-1}(e + P) \text{ e } M_{33} = v(1 + P_e) . \end{aligned}$$

Assim, após encontrarmos todos elementos que compõem a matriz M , intitulada *matriz de Fréchet* [11], esta pode ser escrita na forma:

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ P_\rho - v^2 & 2v & P_e \\ v[P_\rho - \rho^{-1}(e + P)] & \rho^{-1}(e + P) & v(1 + P_e) \end{pmatrix} \quad (\text{B.19})$$

Antes de encerrarmos este Apêndice, convém ressaltarmos que sistemas análogos àquele exibido em B.14 são nomeados *sistemas hiperbólicos* quando apresentam uma matriz de Fréchet (B.19) com autovalores *reais* e *distintos* [11].

C

Curvas

Visto que o método Level Set é capaz de simular e analisar o movimento de curvas, acreditamos ser válida a construção deste Apêndice; cujo propósito será o estudo detalhado de *propriedades geométricas intrínsecas às curvas*, como *curvatura* e *torção* ([25] e [26]).

C.1 Parametrização Natural

Assuma que uma determinada curva γ é representada na forma paramétrica como

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(t); \quad (\text{C.1})$$

então, o *comprimento de um segmento* $[0, t]$ de γ é definido através da seguinte identidade:

$$s = \int_0^t |\mathbf{r}'(t)| dt, \quad \mathbf{r}'(t) = \frac{d\mathbf{r}}{dt}. \quad (\text{C.2})$$

Após definirmos o comprimento de um segmento $[0, t]$ da curva γ , convém mencionarmos que tal quantidade é dita estritamente monotônica desde que

$$s' = \frac{ds}{dt} = |\mathbf{r}'(t)| > 0, \quad (\text{C.3})$$

e, portanto, s pode ser considerado como um parâmetro da curva γ e tal parametrização é conhecida na literatura como *parametrização natural*. No caso da parametrização natural de uma curva, o *vetor tangente* à mesma,

$$\mathbf{t} = \frac{d}{ds}\mathbf{r}(s) = \dot{\mathbf{r}}(s) \quad (\text{C.4})$$

é *unitário*; ou seja,

$$|\mathbf{t}| = \mathbf{t} \cdot \mathbf{t} = 1. \quad (\text{C.5})$$

Objetivando constatar a afirmação exposta na frase anterior, o seguinte cálculo será desenvolvido:

$$\frac{d\mathbf{r}}{ds} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot \frac{dt}{ds} = \frac{\mathbf{r}'}{s'} ; \quad (\text{C.6})$$

sendo, $s' = |\mathbf{r}'|$ (vide expressão C.3), obtém-se:

$$|\mathbf{t}| = \left| \frac{d\mathbf{r}}{ds} \right| = 1 . \quad (\text{C.7})$$

Após a certificação de que o vetor tangente $\mathbf{t}$ é unitário, convém derivarmos ambos os lados da equação C.7 para, então, verificarmos que a perpendicularidade entre os vetores $\dot{\mathbf{t}}$ e $\mathbf{t}$; assim, tem-se

$$\dot{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{t} + \mathbf{t} \cdot \dot{\mathbf{t}} = 0 \Rightarrow \dot{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{t} = 0 \quad (\text{C.8})$$

e

$$\therefore \quad \ddot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} = 0 . \quad (\text{C.9})$$

A seguir, visando exemplificar o conceito da quantidade s (vide equação C.2), serão expostas expressões para o cálculo do comprimentos de segmentos de algumas particulares curvas:

(i) em uma curva descrita pela equação

$$x = x(t), \quad y = y(t), \quad z = z(t), \quad (\text{C.10})$$

$$s(t_1, t_2) = \int_{t_1}^{t_2} \sqrt{x'^2 + y'^2 + z'^2} dt , \quad (\text{C.11})$$

(ii) em uma curva descrita pela equação

$$y = y(x), \quad z = z(x), \quad (\text{C.12})$$

$$s(x_1, x_2) = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{1 + y'^2 + z'^2} dx . \quad (\text{C.13})$$

C.2 Curvatura

Nesta Seção será abordado o conceito de *curvatura* e, para a realização de tal feito, consideremos, inicialmente, um ponto arbitrário P pertencente a uma curva γ regular ¹ e, próximo a esse ponto, encontra-se um outro ponto Q (vide Figura C.1). Denotando por $\Delta\theta$ o ângulo entre as tangentes de P e Q e sendo $|\Delta s|$ o comprimento do arco PQ , pode-se enunciar:

- O limite da razão $\Delta\theta/|\Delta s|$ quando $Q \rightarrow P$ é chamado **curvatura** de γ em P .

¹Uma curva γ é dita regular quando $\gamma'(t) \neq 0$ para todo $t \in I$, onde o intervalo $I \subset \mathbb{R}$.

- Uma curva regular possui uma determinada curvatura κ em cada ponto. Se

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(s) \quad (\text{C.14})$$

é a parametrização natural da curva, então

$$\kappa = \left| \frac{d\mathbf{t}}{ds} \right| = |\ddot{\mathbf{r}}(s)|. \quad (\text{C.15})$$

Visto que os vetores $\mathbf{t}$ e $\dot{\mathbf{t}}$ são perpendiculares (vide equação C.7), é possível definirmos agora um outro vetor unitário,

$$\mathbf{n} = \frac{1}{\kappa} \frac{d\mathbf{t}}{ds}, \quad (\text{C.16})$$

conhecido na literatura como *vetor normal* ou *normal principal*.

Figura C.1: Diagramação para o entendimento do conceito de curvatura.

Nosso objetivo consiste, agora, em demonstrar a veracidade da identidade C.15 e, em virtude de tal finalidade, consideremos, inicialmente, os pontos P e Q associados aos valores s e $(s + \Delta s)$ dos parâmetros. Através da Figura C.1 pode-se inferir que $\Delta\theta$ corresponde ao ângulo formado entre os dois vetores tangentes unitários $\mathbf{t}(s) = \dot{\mathbf{r}}(s)$ e $\mathbf{t}(s + \Delta s) = \dot{\mathbf{r}}(s + \Delta s)$; assim,

$$|\mathbf{t}(s + \Delta s) - \mathbf{t}(s)| = 2 \sin\left(\frac{\Delta\theta}{2}\right) \quad (\text{Figura C.1}). \quad (\text{C.17})$$

Por conseguinte,

$$\frac{|\mathbf{t}(s + \Delta s) - \mathbf{t}(s)|}{|\Delta s|} = \frac{2 \sin\left(\frac{\Delta\theta}{2}\right)}{|\Delta s|} = \frac{\sin\left(\frac{\Delta\theta}{2}\right)}{\frac{\Delta\theta}{2}} \cdot \frac{\Delta\theta}{|\Delta s|}. \quad (\text{C.18})$$

Observando que $\Delta\theta \rightarrow 0$ quando $|\Delta s| \rightarrow 0$, através do *limite fundamental do cálculo* pode-se inferir que:

$$\lim_{\frac{\Delta\theta}{2} \rightarrow 0} \frac{\sin\left(\frac{\Delta\theta}{2}\right)}{\frac{\Delta\theta}{2}} = 1; \quad (\text{C.19})$$

desse modo, após a execução do limite anterior, conclui-se que

$$\frac{|\mathbf{t}(s + \Delta s) - \mathbf{t}(s)|}{|\Delta s|} = \frac{|\dot{\mathbf{r}}(s + \Delta s) - \dot{\mathbf{r}}(s)|}{|\Delta s|} = |\ddot{\mathbf{r}}(s)| = \frac{\Delta \theta}{|\Delta s|} \Rightarrow |\ddot{\mathbf{r}}(s)| = \kappa. \quad (\text{C.20})$$

Iremos apresentar, seguidamente, uma outra forma relevante de expressar a curvatura e, visando realizar tal meta, considere, novamente, a curva γ parametrizada na forma:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(t). \quad (\text{C.21})$$

Assim, derivando a equação C.21 com relação ao comprimento de arco s , encontra-se:

$$\frac{d\mathbf{r}}{ds} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} \frac{dt}{ds} = \frac{\mathbf{r}'}{s'} \Rightarrow \mathbf{r}' = \dot{\mathbf{r}} s'; \quad (\text{C.22})$$

contudo, sendo

$$\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}' = \overbrace{(\dot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}})}^{|\dot{\mathbf{r}}|=1} s'^2 \quad (\text{C.23})$$

a equação C.21 resultará na seguinte identidade:

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}'}{s'} = \frac{\mathbf{r}'}{|\mathbf{r}'|} = \frac{\mathbf{r}'}{\sqrt{\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}'}}. \quad (\text{C.24})$$

Derivando a expressão apresentada em C.24 com relação à t , obtém-se:

$$\begin{aligned} \ddot{\mathbf{r}} s' &= \frac{\mathbf{r}'' \sqrt{\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}'} - [(\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}')^{-1/2} (\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}'')] \mathbf{r}'}{(\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}')} = \frac{\mathbf{r}''}{\sqrt{\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}'}} - \frac{(\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}'') \mathbf{r}'}{(\sqrt{\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}'})^3} \Rightarrow \\ \ddot{\mathbf{r}} s' &= \frac{\mathbf{r}'' (\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}')}{(\sqrt{\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}'})^3} - \frac{(\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}'') \mathbf{r}'}{(\sqrt{\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}'})^3}. \end{aligned} \quad (\text{C.25})$$

Elevando ao quadrado a igualdade anterior e atentando ao fato de que $s'^2 = (\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}')$, verifica-se que a curvatura κ pode ser encontrada via manuseio da seguinte expressão:

$$\kappa^2 = \frac{(\mathbf{r}'' \cdot \mathbf{r}'')(\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}') - (\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}'')^2}{(\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}')^3} \Rightarrow \kappa^2 = \frac{(\mathbf{r}' \wedge \mathbf{r}'')^2}{(\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}')^3}. \quad (\text{C.26})$$

Por fim, após o entendimento dos dizeres e dos cálculos apresentados ao longo desta Seção, pode-se inferir que uma curva representada na forma paramétrica

$$x = x(t), \quad y = y(t), \quad z = z(t) \quad (\text{C.27})$$

possuirá a seguinte curvatura:

$$\kappa_1^2 = \frac{\begin{vmatrix} x'' & y'' \\ x' & y' \end{vmatrix}^2 + \begin{vmatrix} y'' & z'' \\ y' & z' \end{vmatrix}^2 + \begin{vmatrix} z'' & x'' \\ z' & x' \end{vmatrix}^2}{(x'^2 + y'^2 + z'^2)^3}. \quad (\text{C.28})$$

e, no caso particular de uma *curva plana* localizada no plano xy , constata-se que a curvatura κ será encontrada através da igualdade que segue:

$$\kappa_1^2 = \frac{(x''y' - y''x')^2}{(x'^2 + y'^2)^3}. \quad (\text{C.29})$$

O objetivo de apresentarmos a expressão C.29 advém do fato de que a curvatura κ presente no termo da velocidade normal V_n da equação Level Set,

$$\Phi_t + V_n |\nabla \Phi| = 0; \quad V_n = \pm b\kappa, \quad (\text{C.30})$$

será encontrada através de C.29.

C.3 Torção

Figura C.2: Diagramação para o entendimento do conceito de torção.

Outro conceito essencial no estudo da teoria das curvas refere-se à *torção* e, objetivando compreender o significado de tal quantidade, suporemos P como sendo um ponto arbitrário da curva γ e Q um outro ponto próximo a P (vide Figura C.2). Denominando $\Delta\theta$ o ângulo formado entre os *planos osculantes* (é conveniente salientarmos que o *plano osculante* corresponde ao plano que contém os vetores tangente e normal - Figura C.3) e sendo $|\Delta s|$ o comprimento do segmento PQ da curva, pode-se expressar que:

- O limite da razão $\Delta\theta/|\Delta s|$ quando $Q \rightarrow P$ fornecerá o **valor absoluto da torção**, $|\tau|$, de γ em P .
- Uma curva regular possui, certamente, torção absoluta $|\tau|$ em cada ponto onde a curvatura difere de zero. Se

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(s) \quad (\text{C.31})$$

é a parametrização natural da curva, por conseguinte,

$$|\tau| = \left| \frac{d\mathbf{b}}{ds} \right| = \frac{|-\mathbf{r}' \cdot (\mathbf{r}'' \wedge \mathbf{r}''')|}{\kappa^2}, \quad \mathbf{b} = \mathbf{t} \wedge \mathbf{n} \quad (\text{vide Figura C.3}), \quad (\text{C.32})$$

sendo $\mathbf{t}$, $\mathbf{n}$ e $\mathbf{b}$ os vetores tangente, normal e binormal, respectivamente.

As asserções e os cálculos que serão expostos a seguir, objetivam provar a identidade apresentada em C.32; desse modo, é viável a enunciação do seguinte parágrafo:

Se a curvatura de uma curva γ no ponto P é diferente de zero, então, por continuidade, ela também irá diferir de zero nos pontos próximos a P . Os vetores $\dot{\mathbf{r}}(s)$ e $\ddot{\mathbf{r}}(s)$ são não-nulos e não-paralelos em cada ponto com curvatura não nula; conseqüentemente, existe um determinado plano osculante em cada ponto Q próximo a P .

Precedentemente à exposição dos cálculos que culminarão na expressão C.32, é válido observarmos a disposição dos planos *normal*, *osculante* e *retificante* esquematizados na Figura C.3:

Figura C.3: O plano de $\mathbb{R}^3$ que contém $\gamma(s)$ e é normal ao vetor $\mathbf{t}$ é chamado *plano normal* à curva γ em s . O plano que contém $\gamma(s)$ e é normal a $\mathbf{b}$ é denominado *plano osculante* e o plano que contém $\gamma(s)$ e é normal a $\mathbf{n}$ é o *plano retificante* da curva γ em s .

Assumindo que $\mathbf{b}(s)$ e $\mathbf{b}(s + \Delta s)$ são vetores **unitários binormais** aos pontos P e Q pertencentes à curva γ e que $\Delta\theta$ corresponde ao ângulo formado entre $\mathbf{b}(s)$ e $\mathbf{b}(s + \Delta s)$, a seguinte identidade pode ser escrita:

$$\frac{|\mathbf{b}(s + \Delta s) - \mathbf{b}(s)|}{|\Delta s|} = \frac{2 \sin\left(\frac{\Delta\theta}{2}\right)}{|\Delta s|} = \frac{\sin\left(\frac{\Delta\theta}{2}\right)}{\frac{\Delta\theta}{2}} \cdot \frac{\Delta\theta}{|\Delta s|}. \quad (\text{C.33})$$

Por conseguinte, após a efetuação do limite quando $|\Delta\theta| \rightarrow 0$ (e, por conseguinte, $|\Delta s| \rightarrow 0$), obtém-se:

$$|\tau| = |\dot{\mathbf{b}}| . \quad (\text{C.34})$$

É válido salientarmos que o vetor $\dot{\mathbf{b}}$ é *perpendicular* à $\mathbf{b}$ e o cálculo realizado a seguir evidenciará que $\dot{\mathbf{b}}$ também será *perpendicular* ao vetor tangente $\mathbf{t}$:

$$\dot{\mathbf{b}} = \overbrace{\frac{d}{ds}(\mathbf{t} \wedge \mathbf{n})}^{\text{Vide Figura C.3}} = \dot{\mathbf{t}} \wedge \mathbf{n} + \mathbf{t} \wedge \dot{\mathbf{n}} \Rightarrow \dot{\mathbf{b}} = \mathbf{t} \wedge \dot{\mathbf{n}}, \quad (\text{C.35})$$

pois $\dot{\mathbf{t}} \parallel \mathbf{n}$. Dessa forma, a última igualdade existente em C.35 explicita a perpendicularidade entre os vetores $\dot{\mathbf{b}}$ e $\mathbf{t}$ e, sendo $\dot{\mathbf{b}}$ *paralelo* ao vetor normal $\mathbf{n}$, pode-se expressar

$$\dot{\mathbf{b}} = \tau \mathbf{n} , \quad (\text{C.36})$$

e, por conseguinte, o *valor absoluto da torção* será apresentado como:

$$|\tau| = |\dot{\mathbf{b}} \cdot \mathbf{n}| . \quad (\text{C.37})$$

Por fim, substituindo os valores

$$\mathbf{n} = \overbrace{\frac{1}{\kappa} \ddot{\mathbf{r}}}^{\text{De C.16}} \quad (\text{C.38})$$

e

$$\dot{\mathbf{b}} = \overbrace{\frac{\dot{\mathbf{r}} \wedge \ddot{\mathbf{r}}}{\kappa}}^{\text{De C.35}} \quad (\text{C.39})$$

na identidade C.39, encontra-se a *definição do valor absoluto da torção da curva*,

$$|\tau| = |\dot{\mathbf{b}} \cdot \mathbf{n}| = \frac{|(\dot{\mathbf{r}} \wedge \ddot{\mathbf{r}}) \cdot \ddot{\mathbf{r}}|}{\kappa^2} = \frac{|\dot{\mathbf{r}} \cdot (\ddot{\mathbf{r}} \wedge \ddot{\mathbf{r}})|}{\kappa^2} \Rightarrow |\tau| = \frac{|-\dot{\mathbf{r}} \cdot (\ddot{\mathbf{r}} \wedge \ddot{\mathbf{r}})|}{\kappa^2} . \quad (\text{C.40})$$

C.4 Fórmulas de Frenet

Nesta Seção objetivamos mostrar que a teoria local das curvas planas está contida essencialmente nas ditas *Fórmulas de Frenet* ou *Serret-Frenet* ([25] e [26]). Será constatado que em tais fórmulas as *derivadas* dos vetores *tangente*, *normal* e *binormal* serão escritas como uma combinação linear dos mesmos três vetores $\mathbf{t}$, $\mathbf{n}$ e $\mathbf{b}$. Desse modo, visando encontrar as *Fórmulas de Frenet*, é necessário recorrermos à algumas identidades já vistas neste presente Apêndice. Assim, rememorando a definição da normal principal (equação C.16), é possível expressarmos a taxa de variação do vetor tangente em função do vetor normal,

$$\dot{\mathbf{t}} = \kappa \mathbf{n}, \quad (\text{C.41})$$

enquanto que a taxa de variação do vetor binormal, $\dot{\mathbf{b}}$, advém das seguintes manipulações:

$$\mathbf{b} \cdot \mathbf{t} = 0 \Rightarrow \dot{\mathbf{b}} \cdot \mathbf{t} + \mathbf{b} \cdot \dot{\mathbf{t}} = 0 \Rightarrow \dot{\mathbf{b}} \cdot \mathbf{t} = -\mathbf{b} \cdot \dot{\mathbf{t}} = -\mathbf{b} \cdot \underbrace{(\kappa \mathbf{n})}_{\text{De C.41}} = 0; \quad (\text{C.42})$$

assim, devido ao fato de $\mathbf{b}$ ser *unitário* e, portanto $\dot{\mathbf{b}} \cdot \mathbf{b} = 0$, tem-se

$$\dot{\mathbf{b}} = \tau \mathbf{n}, \quad (\text{C.43})$$

onde o fator de proporcionalidade equivale à *torção*.

A expressão para a derivada do vetor normal, $\dot{\mathbf{n}}$, é obtida quando o seguinte produto vetorial é efetuado:

$$\mathbf{n} = \overbrace{\mathbf{b} \wedge \mathbf{t}}^{\text{Vide Figura C.3}} \Rightarrow \dot{\mathbf{n}} = \dot{\mathbf{b}} \wedge \mathbf{t} + \mathbf{b} \wedge \dot{\mathbf{t}} = \tau \underbrace{\mathbf{n} \wedge \mathbf{t}}_{-\mathbf{b}} + \kappa \underbrace{\mathbf{b} \wedge \mathbf{n}}_{-\mathbf{t}} = -\tau \mathbf{b} - \kappa \mathbf{t}. \quad (\text{C.44})$$

Em síntese, para uma curva regular parametrizada pelo comprimento de arco, as *fórmulas de Frenet* são definidas como:

$$\frac{d\mathbf{t}}{ds} = \kappa \mathbf{n},$$

$$\frac{d\mathbf{n}}{ds} = -\kappa \mathbf{t} - \tau \mathbf{b},$$

$$\frac{d\mathbf{b}}{ds} = \tau \mathbf{n}. \quad (\text{C.45})$$

O sistema de equações diferenciais ordinárias exposto em C.45 é caracterizado como sendo um sistema *linear acoplado* que, quando fornecida uma condição inicial (valores de κ e de τ), possui uma única solução; ou seja, uma *única curva*. Como uma exemplificação dos dizeres expostos na frase anterior, construímos a tabela abaixo que relaciona os valores da curvatura κ e da torção τ com as correspondentes curvas planas:

κ	τ	Curva
zero	zero	Reta
$\neq \text{zero}$	zero	Plana
cte > zero	zero	Circular

C.5 Curvatura e Diferenças Finitas

Nesta Seção iremos mostrar como tratar numericamente a *curvatura*, κ , presente no termo parabólico da seguinte *equação Level Set*:

$$\Phi_t + \underbrace{a|\nabla\Phi|}_{\text{termo hiperbólico}} = \overbrace{b\kappa|\nabla\Phi|}^{\text{termo parabólico}}. \quad (\text{C.46})$$

Para a realização de tal feito, devemos salientar que a curvatura na interface (ou contorno) é definida como sendo o divergente da normal [9],

$$\kappa = \nabla \cdot \mathbf{n} = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla\Phi}{|\nabla\Phi|} \right); \quad (\text{C.47})$$

sendo $\kappa > 0$ em regiões convexas, $\kappa < 0$ em regiões côncavas e $\kappa = 0$ em um plano (vide Figura C.4).

Figura C.4: Regiões **convexas** possuem $\kappa > 0$ e para regiões **côncavas** $\kappa < 0$.

Observando a expressão C.47, pode-se concluir que, em duas dimensões, a curvatura é escrita como:

$$\kappa = (\partial_x \hat{\mathbf{i}} + \partial_y \hat{\mathbf{j}}) \cdot \left[\frac{\Phi_x \hat{\mathbf{i}} + \Phi_y \hat{\mathbf{j}}}{(\Phi_x^2 + \Phi_y^2)^{1/2}} \right]; \quad (\text{C.48})$$

sendo válido mencionar que estamos utilizando uma notação estenográfica; ou seja, Φ_x significa $\frac{\partial\Phi}{\partial x}$ e Φ_y corresponde à $\frac{\partial\Phi}{\partial y}$.

$$\begin{aligned} \therefore \kappa = \partial_x \left[\frac{\Phi_x}{(\Phi_x^2 + \Phi_y^2)^{1/2}} \right] + \partial_y \left[\frac{\Phi_y}{(\Phi_x^2 + \Phi_y^2)^{1/2}} \right] &= \frac{\Phi_{xx}}{(\Phi_x^2 + \Phi_y^2)^{1/2}} - \frac{\Phi_x}{2} \left[\frac{2\Phi_x\Phi_{xx} + 2\Phi_y\Phi_{xy}}{(\Phi_x^2 + \Phi_y^2)^{3/2}} \right] + \\ &\quad \frac{\Phi_{yy}}{(\Phi_x^2 + \Phi_y^2)^{1/2}} - \frac{\Phi_y}{2} \left[\frac{2\Phi_x\Phi_{yx} + 2\Phi_y\Phi_{yy}}{(\Phi_x^2 + \Phi_y^2)^{3/2}} \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.49})$$

Multiplicando e dividindo por $(\Phi_x^2 + \Phi_y^2)$ o primeiro e o terceiro termos da expressão C.49, obtém-se:

$$\begin{aligned} \kappa &= \frac{\Phi_{xx}}{(\Phi_x^2 + \Phi_y^2)^{1/2}} \left[\frac{(\Phi_x^2 + \Phi_y^2)}{(\Phi_x^2 + \Phi_y^2)} \right] - \left(\frac{\Phi_x^2 \Phi_{xx} + \Phi_x \Phi_y \Phi_{xy}}{(\Phi_x^2 + \Phi_y^2)^{3/2}} \right) + \frac{\Phi_{yy}}{(\Phi_x^2 + \Phi_y^2)^{1/2}} \left[\frac{(\Phi_x^2 + \Phi_y^2)}{(\Phi_x^2 + \Phi_y^2)} \right] \\ &\quad - \left(\frac{\Phi_y \Phi_x \Phi_{yx} + \Phi_y^2 \Phi_{yy}}{(\Phi_x^2 + \Phi_y^2)^{3/2}} \right) = \frac{\Phi_x^2 \Phi_{yy} - 2\Phi_x \Phi_y \Phi_{xy} + \Phi_y^2 \Phi_{xx}}{(\Phi_x^2 + \Phi_y^2)^{3/2}} \Rightarrow \\ &\quad \therefore \kappa = \frac{\Phi_x^2 \Phi_{yy} - 2\Phi_x \Phi_y \Phi_{xy} + \Phi_y^2 \Phi_{xx}}{|\nabla \Phi|^3}. \end{aligned} \quad (C.50)$$

É válido ressaltar que as derivadas segundas Φ_{xx} e Φ_{yy} presentes na expressão da curvatura (equação C.50) serão aproximadas numericamente pelas diferenças finitas:

$$\Phi_{xx} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = \frac{\Phi_{i+1,j} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i-1,j}}{\Delta x^2} = D_x^+ D_x^- \Phi \text{ (ou } D_x^- D_x^+ \Phi) \quad \text{e} \quad (C.51)$$

$$\Phi_{yy} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = \frac{\Phi_{i,j+1} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i,j-1}}{\Delta y^2} = D_y^+ D_y^- \Phi \text{ (ou } D_y^- D_y^+ \Phi); \quad (C.52)$$

onde as abreviações D^+ , D^- e D^o ² são definidas como:

$$D_x^+ = \frac{\partial \Phi}{\partial x} \approx \frac{\Phi_{i+1,j} - \Phi_{i,j}}{\Delta x} \quad \text{e} \quad D_y^+ = \frac{\partial \Phi}{\partial y} \approx \frac{\Phi_{i,j+1} - \Phi_{i,j}}{\Delta y} : \text{Diferença Finita Progressiva},$$

$$D_x^- = \frac{\partial \Phi}{\partial x} \approx \frac{\Phi_{i,j} - \Phi_{i-1,j}}{\Delta x} \quad \text{e} \quad D_y^- = \frac{\partial \Phi}{\partial y} \approx \frac{\Phi_{i,j} - \Phi_{i,j-1}}{\Delta y} : \text{Diferença Finita Atrasada e},$$

$$D_x^o = \frac{\partial \Phi}{\partial x} \approx \frac{\Phi_{i+1,j} - \Phi_{i-1,j}}{2\Delta x} \quad \text{e} \quad D_y^o = \frac{\partial \Phi}{\partial y} \approx \frac{\Phi_{i,j+1} - \Phi_{i,j-1}}{2\Delta y} : \text{Diferença Finita Central}.$$

Realizando um raciocínio análogo ao exposto ao longo desta Seção, podemos concluir que a expressão tri-dimensional para a curvatura será:

$$\kappa = \frac{\Phi_x^2 \Phi_{yy} - 2\Phi_x \Phi_y \Phi_{xy} + \Phi_y^2 \Phi_{xx} + \Phi_x^2 \Phi_{zz} - 2\Phi_x \Phi_z \Phi_{xz} + \Phi_z^2 \Phi_{xx} + \Phi_y^2 \Phi_{zz} - 2\Phi_y \Phi_z \Phi_{yz} + \Phi_z^2 \Phi_{yy}}{|\nabla \Phi|^3},$$

sendo as derivadas $\Phi_{zz} = (D_z^+ D_z^- \Phi \text{ ou } D_z^- D_z^+ \Phi)$, $\Phi_{xz} = (D_x^o D_z^o \Phi \text{ ou } D_z^o D_x^o \Phi)$ e $\Phi_{yz} = (D_y^o D_z^o \Phi \text{ ou } D_z^o D_y^o \Phi)$.

²As abreviações D_x^o e D_y^o serão definidas pois o termo Φ_{xy} presente na expressão da curvatura será aproximado pelas diferenças finitas $D_x^o D_y^o \Phi$ ou, equivalentemente, $D_y^o D_x^o \Phi$.