

UNIVERSIDADE ABERTA



Distribuição de pontos fonte para o método das soluções
fundamentais

Aplicação a problemas de ondas acústicas em domínios exteriores em \mathbb{R}^3

José Manuel Hipólito Firmino da Costa

Mestrado em Estatística, Matemática e Computação

2019

UNIVERSIDADE ABERTA



Distribuição de pontos fonte para o método das soluções
fundamentais

Aplicação a problemas de ondas acústicas em domínios exteriores em \mathbb{R}^3

José Manuel Hipólito Firmino da Costa

Mestrado em Estatística, Matemática e Computação

Dissertação orientada pelo Professor Doutor
Pedro Miguel Picado de Carvalho Serranho

2019

RESUMO

Neste trabalho pretende-se gerar uma distribuição de pontos fonte adequada para o método das soluções fundamentais (MFS - *method of fundamental solutions*) que otimize o condicionamento do sistema linear associado à resolução numérica do problema exterior de difração de um campo acústico incidente por um obstáculo tridimensional impenetrável conhecido (D). Considera-se que o obstáculo é um domínio estrela diferente da esfera unitária S^2 .

Neste trabalho, consideramos a equação de Helmholtz exterior que modela a propagação e difração de ondas acústicas harmónicas no tempo. A aplicação do MFS a este problema gera um sistema linear que depende dos pontos fonte e de colocação considerados. O que se pretende é explorar a distribuição de pontos fonte de forma a que o condicionamento do sistema seja controlado, à medida que o número de pontos aumenta. As metodologias desenvolvidas para encontrar uma boa distribuição de pontos são a generalização para qualquer superfície estrela regular de trabalho anterior desenvolvido para a esfera unitária [1] e baseiam-se numa aplicação da interação de *Coulomb*, sendo exploradas e comparadas várias variantes. São ilustrados os resultados do método, tanto graficamente como através de métricas apropriadas, tanto na vertente da distribuição dos pontos fonte, como na sua influência para o condicionamento do sistema.

Palavras-Chave: Distribuição de pontos, superfície estrela, método das soluções fundamentais, equação de Helmholtz, problema externo, interação de *Coulomb*.

ABSTRACT

In this paper we want to generate an appropriate set of source points for the method of fundamental solutions (MFS). The point set is intended to optimize the condition number of the linear system associated with the numerical resolution of the exterior scattering problem of an incident acoustic field by a known impenetrable three-dimensional obstacle (D).

The obstacles considered are star domains different from the unitary ball S^2 .

In this work we consider the exterior Helmholtz equation, which models the propagation and scattering of harmonic acoustic waves in time. Application of MFS to this problem generates a linear system that depends on the source and colocation points considered. What is intended is to explore the distribution of source points so that the condition number of the system is controlled as the number of points increases. The methodologies developed to find a good distribution of points are the generalization to any regular star surface of previous work developed for the unitary sphere [1] and are based on an application of *Coulomb*'s interaction. Several variants are explored and compared. The results of the method are illustrated, both graphically and through appropriate metrics, both in the distribution of source points and in their influence for the conditioning of the system.

Key words: Point distribution, star surface, method of fundamental solutions, Helmholtz equation, external problem, *Coulomb* interaction.

AGRADECIMENTOS

Esta dissertação é, pela sua natureza, um trabalho individual. No entanto há contributos sem os quais não teria sido possível e que não podem nem devem deixar de ser realçados. Assim, desejo expressar os meus sinceros agradecimentos:

À Universidade Aberta, em particular ao Conselho Científico, por ter aceite a minha candidatura ao Mestrado em Estatística, Matemática e Computação e por ter aprovado o Projeto de Dissertação de que este documento é a realização.

Também, aos Exm.^{os} Professores Doutores, Amílcar Oliveira, Catarina Nunes, Maria do Rosário Ramos, Pedro Serranho e Teresa Oliveira, docentes do meu percurso curricular a quem devo um aprofundamento e desenvolvimento dos meus conhecimentos teóricos e técnicos.

Um grande e especial agradecimento ao meu orientador, Professor Doutor Pedro Miguel Picado de Carvalho Serranho, pelo rigor, profissionalismo, disponibilidade e amizade com que me guiou ao longo deste trabalho, bem como, pelas críticas e sugestões relevantes feitas durante a orientação.

Um grande abraço para a Emília e para o João que me motivaram e apoiaram nesta aventura e pelas inúmeras trocas de impressões, correções e comentários esclarecidos que me guiaram na sua travessia.

ÍNDICE

Resumo	i
Abstract.....	iii
Agradecimentos	v
Índice	vii
Índice de Figuras	ix
Índice de Tabelas.....	xi
1. Introdução	1
2. Enquadramento Teórico	5
2.1. O Problema exterior direto.....	7
2.2. O Método das Soluções Fundamentais	8
2.3. Distribuição quási-equidistante de pontos numa superfície tridimensional. 10	
3. Revisão da Literatura.....	11
3.1. Distribuição de pontos numa superfície por interação de <i>Coulomb</i>	13
3.2. O Método das Soluções Fundamentais	15
4. Opções metodológicas.....	17
4.1. Parametrização das superfícies estrela.....	20
4.2. Interação de <i>Coulomb</i>	21
4.3. Força proporcional à distância sobre a superfície.....	22
4.3.1. Cálculo do vetor tangente em B	22
4.3.2. Cálculo da distância sobre a superfície entre A e B.....	23
4.4. Força ponderada pela curvatura	26
4.4.1. Cálculo da curvatura	27
4.5. Avaliação do condicionamento e da precisão da solução	28
5. Apresentação dos resultados.....	31
5.1. Considerações prévias.....	33
5.1.1. Software e hardware utilizados	33
5.1.2. Escolha de pontos iniciais	33
5.1.3. Força aplicada sobre o ponto.....	34
5.1.4. Fator de convergência e critério de paragem.....	35
5.1.5. Cálculo da norma L_2 da solução sobre a fronteira	36

5.2.	Modelo da força proporcional à distância sobre a superfície.....	37
5.2.1.	Validação do modelo na superfície esférica	37
5.2.2.	Cálculo da distância entre pontos sobre a superfície estrela	39
5.2.3.	Cálculo da área dos triângulos de Delaunay	40
5.2.4.	Fator de convergência e critério de paragem	41
5.2.5.	Resultados numéricos.....	46
5.2.6.	Utilização dos conjuntos de pontos obtidos para o MFS	55
5.3.	Modelo da força ponderada pela curvatura.....	61
5.3.1.	Fator de ponderação da curvatura.....	61
5.3.2.	Fator de convergência	62
5.3.3.	Fator de paragem.....	62
5.3.4.	Resultados numéricos.....	63
5.3.5.	Utilização dos conjuntos de pontos obtidos para o MFS	65
6..	Conclusões	71
6.1.	Súmula do trabalho desenvolvido	73
6.2.	Aperfeiçoamentos e desenvolvimentos.....	74
	Bibliografia	75
	Anexos.....	77

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1 - O problema exterior direto	7
Figura 2 - Parametrização da esfera.....	20
Figura 3 - Ilustração de que a parametrização ζ mapeia pontos da superfície esférica em pontos de uma superfície estrela.....	20
Figura 4 - Ilustração das superfícies estrela Almofada (14) e Cabaça (15).....	20
Figura 5 - Nós de integração entre dois pontos (A e B).....	25
Figura 6 - Exemplo de conjunto de 800 pontos iniciais sobre a esfera unitária.	34
Figura 7 - Nós de quadratura na "Almofada". À esquerda na superfície estrela, à direita nas faces dos triângulos Delaunay. Nesta solução os pontos de quadratura são visualizados na posição adequada ao cálculo.....	36
Figura 8 - Gráfico em escala semi logarítmica do máximo da força tangente em 100000 iterações para 50 pontos.....	42
Figura 9 - Gráfico em escala semi logarítmica do máximo da força tangente em 100000 iterações para 100 pontos.....	42
Figura 10 - PQE, Áreas Delaunay e comprimento de arestas na "Almofada" para 50, 100, 200, 400 e 800 pontos.	46
Figura 11 - Diagrama de extremos e quartis de comprimentos de arestas na triangulação sobre a "Almofada".....	48
Figura 12 -Histogramas de comprimentos de arestas na triangulação sobre a "Almofada" e diagrama de extremos e quartis dos mesmos dados. A linha vertical vermelha indica o valor de (d)	49
Figura 13 - Histogramas de áreas de cada triângulo na triangulação sobre a "Almofada". A linha vertical azul indica o valor médio da área dos triângulos de Delaunay.....	49
Figura 14 - Distribuição de 800 pontos sobre a superfície estrela "Almofada".....	50
Figura 15 - PQE, Áreas Delaunay e comprimento de arestas na "Bolota", para 50, 100, 200, 400 e 800 pontos. Cores mais claras representam maior dimensão.....	51
Figura 16 - Histogramas de comprimentos de arestas na triangulação sobre a "Bolota". A linha vertical vermelha indica o valor de d	53
Figura 17 - Histogramas de áreas de cada triângulo na triangulação sobre a "Bolota". A linha vertical azul indica o valor médio da área dos triângulos de Delaunay.....	53
Figura 18 - Distribuição de 800 pontos sobre a superfície estrela "Bolota".....	54
Figura 19 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a "Almofada", para $p_s = 50$ e $p_c = 100$	56
Figura 20 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a "Almofada", para $p_s = 100$ e $p_c = 200$	56
Figura 21 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a "Almofada", para $p_s = 200$ e $p_c = 400$	57
Figura 22 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a "Almofada", para $p_s = 400$ e $p_c = 800$	57

Figura 23 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a “Bolota”, para $p_s = 50$ e $p_c = 100$	59
Figura 24 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a “Bolota”, para $p_s = 100$ e $p_c = 200$	59
Figura 25 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a “Bolota”, para $p_s = 200$ e $p_c = 400$	60
Figura 26 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a “Bolota”, para $p_s = 400$ e $p_c = 800$	60
Figura 27 - Conjuntos de 50, 100, 200, 400 e 800 pontos na "Almofada" pelo método da força ponderada pela curvatura.	63
Figura 28 - Conjuntos de 50, 100, 200, 400 e 800 pontos na "Bolota" pelo método da força ponderada pela curvatura.	64
Figura 29 - Comparação entre o modelo da força proporcional à curvatura e a interação de Coulomb.....	64
Figura 30 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a “Almofada”, para $p_s = 50$ e $p_c = 100$	66
Figura 31 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a “Almofada”, para $p_s = 100$ e $p_c = 200$	66
Figura 32 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a “Almofada”, para $p_s = 200$ e $p_c = 400$	67
Figura 33 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a “Almofada”, para $p_s = 400$ e $p_c = 800$	67
Figura 34 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a “Bolota”, para $p_s = 50$ e $p_c = 100$	69
Figura 35 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a “Bolota”, para $p_s = 100$ e $p_c = 200$	69
Figura 36 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a “Bolota”, para $p_s = 200$ e $p_c = 400$	70
Figura 37 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a “Bolota”, para $p_s = 400$ e $p_c = 800$	70

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1 - Resultados do cálculo de $maxFB$ sobre pontos QEP no “modelo 4”	35
Tabela 2 - Resultados do cálculo de $maxFBL$ no “modelo 3”	36
Tabela 3 - Resultados da norma $L2$ da aproximação ao campo total $u = u_i + u_s$ sobre a fronteira (para condição de Dirichlet homogénea, isto é $u = 0$) calculada numericamente pela regra de quadratura de Gauss-Legendre sobre pontos interiores	37
Tabela 4 - Energia potencial de conjuntos de pontos na esfera unitária	38
Tabela 5 - Comparação de distância média $d\Delta$ das arestas e área média Am para a triangulação de Delaunay obtida.....	39
Tabela 6 - Resultados da diferença absoluta e diferença relativa para distâncias entre dois pontos sobre a superfície e para o máximo da força tangente, para integração por trapézio composto com diferentes intervalos de integração. Considera-se que com 30 intervalos de integração se obtém um valor quase exato.	40
Tabela 7 - Resultados de n.º de condição e norma L^2 da solução sobre a fronteira obtida para pares de pontos fonte p_s e pontos de colocação p_c referidos nas legendas das figuras 5 e 6. Ver 5.1.5, (p36).	42
Tabela 8 - Parametrização dos pontos de mudança de fator de convergência λ	44
Tabela 9 - Resultados de n.º de condição e norma L^2 da solução sobre a fronteira obtida para pares de pontos fonte p_s e pontos de colocação p_c referidos. Ver 5.1.5, (p.36).	44
Tabela 10 - Valores do fator de paragem ψ na "Almofada" e na "Bolota".....	45
Tabela 11 -Número de iterações para as simulações de "Almofada" e "Bolota" para os vários conjuntos de pontos.....	45
Tabela 12 – Várias métricas de distâncias entre pontos na "Almofada".	47
Tabela 13 - Distribuição do número de ligações por ponto após triangulação de Delaunay, para 800 pontos, em três métodos de criação de conjuntos de pontos sobre a superfície estrela "Almofada".....	50
Tabela 14 – Várias métricas de distâncias entre pontos na "Bolota".....	52
Tabela 15 - Distribuição do número de ligações por ponto, para 800 pontos, em três métodos de criação de um sistema de pontos sobre a superfície estrela "Bolota".....	54
Tabela 16 - Número de condição para vários valores de número de onda k pelo MFS sobre a “Almofada”, para vários pares de conjuntos de pontos de colocação (p_c) e de pontos fonte (p_s).....	55
Tabela 17 – Norma $L2$ da aproximação ao campo total $u = u_i + u_s$ sobre a fronteira (para condição de Dirichlet homogénea, isto é $u = 0$) calculada numericamente pela regra de quadratura de Gauss-Legendre sobre pontos interiores.....	55
Tabela 18 - Número de condição para vários valores de número de onda k pelo MFS sobre a “Bolota”, para vários pares de conjuntos de pontos de colocação (p_c) e de pontos fonte (p_s).....	58

Tabela 19 – Norma $L2$ da aproximação ao campo total $u = u_i + u_s$ sobre a fronteira (para condição de Dirichlet homogénea, isto é $u = 0$) calculada numericamente pela regra de quadratura de Gauss-Legendre sobre pontos interiores.	58
Tabela 20 - Distribuição de 100 pontos na "Almofada" pelo método da força ponderada pela curvatura para vários valores de γ	61
Tabela 21 - Valores do fator de paragem ψ na "Almofada" e na "Bolota".....	62
Tabela 22 -Número de iterações para as simulações de "Almofada" e "Bolota" para os vários conjuntos de pontos.	62
Tabela 23 - Número de condição para vários valores de número de onda k pelo MFS sobre a “Almofada”, para vários pares de conjuntos de pontos de colocação (p_c) e de pontos fonte (p_s).....	65
Tabela 24 – Norma $L2$ da aproximação ao campo total $u = u_i + u_s$ sobre a fronteira (para condição de Dirichlet homogénea, isto é $u = 0$) calculada numericamente pela regra de quadratura de Gauss-Legendre sobre pontos interiores.	65
Tabela 25 – Número de condição para vários valores de número de onda k pelo MFS sobre a “Bolota”, para vários pares de conjuntos de pontos de colocação (p_c) e de pontos fonte (p_s).....	68
Tabela 26 – Norma $L2$ da aproximação ao campo total $u = u_i + u_s$ sobre a fronteira (para condição de Dirichlet homogénea, isto é $u = 0$) calculada numericamente pela regra de quadratura de Gauss-Legendre sobre pontos interiores.	68

1. INTRODUÇÃO

Apresenta-se neste trabalho uma metodologia para gerar uma distribuição de pontos fonte adequada à solução pelo método das soluções fundamentais (MFS) do problema exterior direto para a propagação e difração de ondas acústicas harmónicas no tempo por um obstáculo definido por um domínio estrela, generalizando o princípio utilizado em [1] para a esfera.

Para ondas harmónicas no tempo¹, o problema consiste em determinar o campo difratado² u^s , dada a posição e forma do obstáculo e o campo incidente¹. Para um obstáculo impenetrável e *sound-soft*, definido por um domínio limitado e fechado D com fronteira duas vezes diferenciável, o problema exterior de difração formula-se para o campo difratado u^s (desconhecido), o campo incidente u^i (conhecido) e o campo total $u = u^i + u^s$ como

$$\begin{cases} \Delta u^s + k^2 u^s = 0 & \text{em } \mathbb{R}^3 \setminus D & (1) \\ u = 0 & \text{em } \partial D & (2) \\ \lim_{r \rightarrow \infty} \left(\frac{\partial u}{\partial r} - iku \right) = 0 & r = |x| & (3) \end{cases}$$

em que (1) é a equação de Helmholtz que modela adequadamente a difração do campo gerado por ondas acústicas harmónicas no tempo, onde Δ é o operador Laplaciano e k é o número de onda, a equação (2) é a condição de Dirichlet, uma condição de fronteira que modela um obstáculo “*sound-soft*”, na fronteira do obstáculo [2, 3] e a equação (3) é a condição de radiação de Sommerfeld [4]. A condição de radiação de Sommerfeld assegura do ponto de vista físico que não existem fontes de energia no infinito e do ponto de vista matemático a unicidade da solução do problema [2].

O MFS é um método numérico “*meshfree*” (sem malha) adequado à solução de problemas de fronteira (como é o caso do problema considerado) que pode ser aplicado a equações diferenciais parciais com solução fundamental conhecida [1, 5, 6]. Este método aproxima a

¹ A onda acústica U , harmónica no tempo e de frequência ω , relaciona-se com o campo acústico u segundo a seguinte expressão, $U(x, t) = u(x) e^{i\omega t}$. Em geral, se a onda U satisfaz a equação das ondas, então o campo u satisfaz a equação de Helmholtz, com a definição apropriada de número de onda k [2].

² O campo difratado designa-se u^s , o s designando “scattered”.

solução do problema de fronteira por uma combinação linear de soluções fundamentais para os pontos fonte que estão localizados numa superfície auxiliar não contida no domínio da solução. No caso do problema exterior, a superfície auxiliar (e logo os pontos fontes) deve estar no interior do domínio D .

Os obstáculos considerados neste trabalho são domínios estrela em \mathbb{R}^3 , portanto, conjuntos D nos quais existe pelo menos um x_0 tal que para todo o x em D o segmento de reta entre x_0 e x pertence a D .

Conforme verificado em [1], espera-se que exista bom condicionamento do sistema linear associado ao MFS se o conjunto de pontos sobre a superfície estiver quási-equidistante, isto é, se a distância de um ponto para os seus vizinhos for semelhante para todos os pontos. Desta forma, os pontos (que mais tarde poderão ser utilizados como base para pontos fonte e de colocação para o MFS) são criados na fronteira do domínio D e movidos utilizando a repulsão electrostática entre pontos com a mesma carga, através da expressão de força de *Coulomb* $F \propto 1/d^2$ em que d representa a distância entre dois pontos (ver como exemplo [1]). Desta forma será necessário determinar a distância entre dois pontos sobre uma superfície estrela geral, por forma a poder aplicar o algoritmo em [1]. É definido um critério de paragem e o algoritmo é interrompido quando este é atingido, obtendo como resultado a distribuição pretendida e próxima do estado de equilíbrio.

Uma vez encontrada a distribuição pretendida, os pontos fonte são obtidos movendo radialmente os pontos sobre a superfície para a posição final, dentro do domínio D e logo fora do domínio de definição da solução.

São exploradas várias abordagens segundo este princípio de distribuição segundo repulsão de cargas de *Coulomb* que detalharemos ao longo do trabalho, sendo estas comparadas e ilustradas de forma gráfica e através de métricas apropriadas. A distribuição é utilizada para a aplicação do MFS e os resultados obtidos são apresentados e comentados, ilustrando que o objetivo de controlar o número de condição é alcançado com a distribuição de pontos proposta.

Este trabalho está organizado da seguinte forma. Nos capítulos 2 e 3 é apresentada uma sinopse dos conceitos científicos envolvidos, incluindo a descrição detalhada do método das soluções fundamentais e do problema a resolver numericamente e uma revisão da literatura sumarizando as várias abordagens seguidas pela comunidade científica. No capítulo 4, é apresentada a metodologia de base ao trabalho, incluindo as expressões e os conceitos ma-

temáticos utilizados no trabalho desenvolvido e a sua aplicação concreta aos casos estudados. No capítulo 5 são apresentados o algoritmo desenvolvido e os resultados obtidos. No capítulo 6 são enunciadas as conclusões a retirar do trabalho desenvolvido e formuladas sugestões para o seu desenvolvimento futuro.

2. ENQUADRAMENTO TEÓRICO

2.1. O Problema exterior direto

O problema exterior de difração em estudo é definido num domínio ilimitado $\mathbb{R}^3 \setminus D$. Estuda o problema da difração de uma onda acústica harmónica por um objeto impenetrável, em \mathbb{R}^3 . No problema exterior direto são conhecidos a onda plana incidente (U^i), o campo incidente (u^i) e o obstáculo (D), pretendemos calcular o campo difratado (u^s) [1, 2, 7].

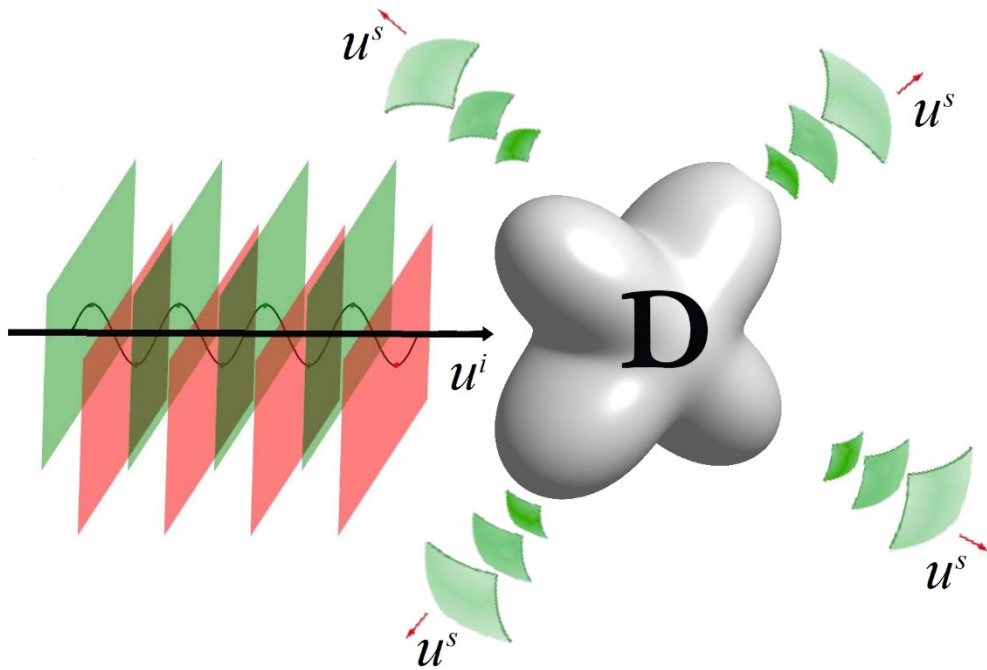


Figura 1 - O problema exterior direto

A propagação de ondas num meio isotrópico homogéneo é descrita pela equação das ondas,

$$\Delta U(x, t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} U(x, t) = 0 \quad (4)$$

em que c representa a velocidade de propagação da onda. Caso a onda seja harmónica no tempo, ou seja, da forma

$$U(x, t) = u(x)e^{i\omega t}$$

então a equação das ondas reduz-se à equação de Helmholtz

$$\Delta u^s + k^2 u^s = 0 \quad \text{em } \mathbb{R}^3 \setminus D$$

também denominada de equação das ondas reduzida.

Assumimos agora uma onda incidente da forma [2]

$$U^i(x, t) = u^i(x)e^{-i\omega t} \quad (5)$$

em que o campo u^i (conhecido) satisfaz a equação de Helmholtz no domínio exterior. Assim, considerando o campo total

$$u = u^i + u^s \quad \text{em } \mathbb{R}^3 \setminus D \quad (6)$$

pretendemos determinar a onda difratada, tal que u^s satisfaz a condição de Helmholtz. Para garantir unicidade de solução são precisas duas condições adicionais, uma na fronteira do obstáculo e outra para infinito (uma vez que o domínio é ilimitado). Para obstáculos sound-soft, impomos

$$u = 0 \quad \text{em } \partial D$$

isto é, que o campo total se anula na fronteira do obstáculo. Em particular, isto implica que

$$u^s = -u^i \quad \text{em } \partial D.$$

Para infinito e uma vez que a solução da equação de Helmholtz admite dois comportamentos assintóticos para infinito, dados por

$$\frac{e^{ik|x|}}{|x|} \quad \text{e} \quad \frac{e^{-ik|x|}}{|x|} \quad |x| \rightarrow \infty$$

impomos a condição de radiação de Sommerfeld [4] que assegura um comportamento outgoing, isto é, que não existem fontes de energia em infinito.

Assim, o problema é definido pelas equações

$$\begin{cases} \Delta u^s + k^2 u^s = 0 & \text{em } \mathbb{R}^3 \setminus D \\ u = 0 & \text{em } \partial D \\ \lim_{r \rightarrow \infty} \left(\frac{\partial u}{\partial r} - iku \right) = 0 & r = |x|. \end{cases} \quad \begin{matrix} (1) \\ (2) \\ (3) \end{matrix}$$

É conhecida a solução fundamental para a equação de Helmholtz,

$$\Phi(x, y) = \frac{e^{ik|x-y|}}{4\pi|x-y|}, \quad x \neq y, \quad \text{em } \mathbb{R}^3 \quad (7)$$

pelo que podemos resolver o problema exterior direto utilizando o método das soluções fundamentais.

2.2. O Método das Soluções Fundamentais

O método das soluções fundamentais (MFS) parte de uma representação da solução de forma adequada a satisfazer a equação de Helmholtz e a condição de radiação de Sommerfeld que permite a resolução do problema em estudo, neste caso o problema exterior direto definido por (1), (2) e (3) pela resolução do correspondente sistema linear obtido por colocação em pontos fronteira, por forma a satisfazer a condição de fronteira de Dirichlet.

Uma vantagem do MFS é a simplicidade da sua implementação [8], mesmo em problemas com geometrias complicadas e a precisão da solução pode ser ampliada tanto quanto se desejar fazendo aumentar o número de pontos (fonte e colocação) considerados. No entanto, à medida que o número de pontos aumenta, o sistema linear tende a ficar mal condicionado, pelo que a distribuição de pontos fonte e colocação deve ser cuidada para evitar este problema.

Sendo conhecida uma solução fundamental [9, 10] para o problema, ao colocar o ponto fonte da solução fundamental fora do domínio da solução, esta satisfaz automaticamente a equação de Helmholtz e a condição de radiação de Sommerfeld. Desta forma, considerando para o problema exterior em estudo uma representação da solução do problema dada por uma combinação linear de soluções fundamentais da forma

$$u^s(x) \approx \tilde{u}^s(x) \equiv \sum_{j=1}^{n_s} \omega_j \Phi(x, s_j) \quad s_j \in D, j = 1, 2, \dots, n_s \quad (8)$$

com pontos fonte $s_j \in D, j = 1, 2, \dots, n_s$ esta representação satisfaz as expressões (1) e (3), independentemente dos coeficientes ω_j da combinação linear. A solução do problema exterior direto pode ser aproximada por MFS, utilizando pontos de colocação $x_k \in \partial D, k = 1, 2, \dots, n_c$ sobre a fronteira de D e pontos fonte $s_j \in D, j = 1, 2, \dots, n_s$ sobre uma fronteira virtual interior a D . Assim, por forma a satisfazer a condição de fronteira (2), resolvemos as n_c equações de fronteira

$$\sum_{j=1}^{n_s} \omega_j \Phi(x_k, s_j) = -u^i(x_k) \quad x_k \in \partial D, k = 1, 2, \dots, n_c$$

em ordem aos coeficientes $\omega_j, j = 1, 2, \dots, n_s$, no sentido dos mínimos quadrados.

Sabe-se que o problema exterior direto é bem posto [2] pelo que a obtenção de uma solução precisa e bem condicionada requer uma boa distribuição de pontos fonte e de colocação equidistribuídos e quási-equidistantes. Uma vez que o problema é bem posto que qualquer solução do problema pode ser aproximada por uma representação desta forma, esta questão é abordada mais à frente em 3.2.

2.3. Distribuição quási-equidistante de pontos numa superfície tridimensional

A distribuição quási-equidistante de pontos numa superfície em \mathbb{R}^3 é um problema que já foi estudado em relação à esfera unitária S^2 [1, 11, 12].

Ao contrário do que acontece na circunferência, na superfície esférica só é possível gerar um número limitado de conjuntos de pontos uniformemente distribuídos, ou equidistantes, conjuntos esses que correspondem aos vértices dos cinco sólidos platónicos. Assim e como este problema tem aplicações em variadas áreas do conhecimento foram desenvolvidos métodos capazes de gerar distribuições de pontos, na superfície da esfera, adequadas aos estudos em questão e que gerassem distribuições de pontos quási-equidistantes. Os métodos utilizados são inúmeros, veja-se por exemplo [13, 14], mas importa referir os três principais: o método de **packing** ou *Problema de Fejes Toth* que procura maximizar a distância mais curta entre pontos; o método de **covering** em que se procura minimizar a distância entre qualquer ponto e um ponto vizinho; e o método da **repulsão electrostática** ou *Problema de Thomson* ou *interação de Coulomb* em que se consideram os pontos como partículas com carga electrostática e se procura minimizar a energia do sistema.

Neste trabalho utilizou-se o método da repulsão electrostática pelo que no capítulo seguinte só este será referido.

3. REVISÃO DA LITERATURA

3.1. Distribuição de pontos numa superfície por interação de *Coulomb*

Este estudo começa por se debruçar sobre o trabalho de *Araújo e Serranho* [1] que é, aliás, a motivação do presente trabalho. *Araújo e Serranho*, definem pontos quási-equidistantes sobre uma superfície esférica como

o conjunto de n pontos $\hat{x}_1, \hat{x}_2, \dots, \hat{x}_n$, isto é, $\{\hat{x}_i: \|\hat{x}_i\|_2 = 1, \forall i = 1, 2, \dots, n\}$ é constituído por pontos uniformemente distribuídos e quási-equidistantes se e só se existirem um d e um ε maiores que 0, tais que

$$\|\hat{x}_k - \hat{x}_i\| \geq d \quad \forall i, k \in \{1, 2, \dots, n\}, \quad i \neq k$$

e para $\forall m \in \mathbb{N}$ e $\forall x \in S^2$ existe um $q \in \mathbb{N}$ e $q \in \{1, 2, \dots, m-1\} \cup \{m+1, \dots, n\}$ tal que

$$\|x - \hat{x}_q\| \leq d + \varepsilon.$$

A primeira condição define a distância mínima aceitável entre dois pontos vizinhos, a segunda condição define a distância máxima admissível entre pontos vizinhos. O valor teórico de d é estimado como o comprimento da aresta de um triângulo equilátero sobre a esfera considerando que para n pontos existem $2n - 4$ triângulos e $3n - 6$ arestas. Estando estes critérios definidos, a força electrostática que um ponto exerce sobre outro é calculada utilizando a equação de *Coulomb* simplificada para cargas e constante unitárias, portanto

$$F \propto \frac{1}{d^2}.$$

A força total sobre um ponto é calculada pelo somatório das forças exercidas sobre ele,

$$F_j = \sum_{k \neq j} \frac{r_j - r_k}{\|r_j - r_k\|^2}, \quad j = 1, 2, \dots, n$$

seguidamente é calculada a componente tangencial de F_j e esta é utilizada para calcular o deslocamento do ponto j nessa iteração, de r_j para r'_j , pela expressão

$$r'_j = \frac{r_j + CF_j}{\|r_j + CF_j\|} \quad j = 1, 2, \dots, n_s$$

em que C é uma constante de deslocamento (geralmente menor que 1 e logo reduzindo a amplitude de F_j) e é criado um critério de paragem dado pela componente tangente remanescente, da força F_j de interação entre “ n ” pontos tal que

$$\max \|F_{j,t}\| \leq n \times 50^{-4}.$$

As distribuições de pontos geradas são utilizadas para efeito de comparação de resultados com outros métodos de geração de pontos, (*pontos de quadratura Gauss-Legendre, pontos de parametrização com ângulos equidistantes e pontos de tesselação icosaédrica*).

O trabalho de *Bondarenko et al*, [11] é interessante por detalhar um algoritmo de aplicação da interação de *Coulomb* à distribuição de pontos sobre a esfera unitária. A aplicação do método não se destina ao MFS e sim à definição de soluções para nanotubos de carbono, pelo que existe a preocupação de soluções com geometria adequada a aplicações moleculares.

Bondarenko [11] começa por definir o critério de apreciação da solução que é o da minimização da energia total do sistema de pontos, o que para $r_i \in S^2$ é dado por

$$U_{(r_1, \dots, r_n)} = \sum_{i=1}^n \frac{1}{|r_i - r_j|} \quad i < j, i = 1, 2, \dots, n.$$

A força de *Coulomb* entre dois quaisquer pontos (i, j) é dada pela equação de força,

$$F_{ij} = \frac{r_j - r_i}{|r_j - r_i|^3}, \quad \forall i, j: i \neq j$$

e a resultante para qualquer ponto r_i é

$$F_i \equiv F(r_i) = \sum_{j, j \neq i} F_{ij}, \quad \forall i.$$

As forças calculadas são aplicadas aos pontos do sistema pela expressão

$$r'_i = \gamma(r_i + \alpha F_i)$$

em que γ é um fator que garante $|r'_i| = 1$, isto é, que o raio se mantém e α é o fator de redução que assegura a convergência do processo. O critério de paragem é dado por

$$\left| U_{(r_1, \dots, r_n)} - U_{(r'_1, \dots, r'_n)} \right| < \varepsilon$$

sendo ε o coeficiente de eficiência energética.

Como se pode ver, os métodos de *Araújo e Serranho* [1] e *Bondarenko* [11], são similares, sendo bastante mais simples o método de resolver a restrição ao raio, no primeiro. Os critérios de paragem são muito diferentes, o critério de *Bondarenko* é clássico podendo ser revisitado em [12, 15], enquanto que em [1] o critério de paragem é o máximo da magnitude das forças tangentes, ser menor que a tolerância previamente fixada. De notar que *Cohn* em [12] propõe como método “*gradient descent*” sobre forças de *Coulomb*, o que é um método iterativo diferente do utilizado tanto por *Araújo e Serranho* [1] como por *Bondarenko* [11]. Para esta abordagem ver também *Altschuler* [16].

Referem-se ainda os dois trabalhos de *Pérez-Garrido* e outros [17, 18] em que os pontos são colocados sobre a esfera em clusters, do que resulta uma forma diferente de calcular a energia do sistema, os artigos [14] de *Staff* que apresenta um bom resumo dos principais métodos criados para este problema e [19] de *Serfaty* que visita as mais recentes questões relativas à interação de *Coulomb* em pontos sobre a esfera unitária.

3.2. O Método das Soluções Fundamentais

De acordo com vários autores o MFS terá sido inicialmente proposto por *Kupradze* e *Aleksidze* [20] em 1964, desenvolvido por *Oliveira* na mesma década e ocasionalmente revisitado em vários trabalhos nas décadas seguintes.

Alves, [8] lembra tê-lo “redescoberto” em 98 ao investigar dados de densidade com soluções fundamentais e só mais tarde, por informação de *Chen* [21] ter-se apercebido ser um método bem estabelecido embora bastante menosprezado.

As vantagens do método, para a resolução de problemas de fronteira envolvendo equações diferenciais com derivadas parciais (EDP), conduziram a uma vasta obra envolvendo a escolha de pontos fonte [8], o estudo das características e propriedades do MFS para EDP não lineares [22], a reconstrução de cavidades no obstáculo [5], o estudo de problemas de fronteira na superfície da esfera [23], fazendo sempre notar a facilidade de implementação do método, a sua convergência e precisão.

Fairweather, em [9] faz notar que no MFS, “*although the method can be highly ill-conditioned, this often does not affect the quality of the numerical solution*”, por seu lado, *Alves* em [8] refere “*the ill conditioning vs. accuracy paradigm*”, e “*we cannot get both accurate results and good conditioning—one of the two is lost*”.

No entanto, *Alves*, em [24] refere “*It is well known that the location of the point-sources is very important to obtain an accurate approximation*” e também com *Martins*, em [5] indica que o MFS apresenta uma “*ill-conditioned feature that can be dealt with a Tikhonov regularization technique*”.

A convergência (exponencial) do método é outra característica importante, isso é referido por vários autores, nomeadamente, [5, 22, 23] entre outros. *Alves* em [5] faz notar que a convergência do método “*strongly depends on the number and location of source and collocation points*”.

A análise dos resultados de densidade referida em [8, 23, 25] é a análise pela qual se certifica que o conjunto de soluções fundamentais é denso no espaço das soluções da equação de Helmholtz e logo que se consegue aproximar qualquer solução do problema por uma soma de soluções fundamentais com erro tão pequeno quanto se queira.

Em [23], *Alves e Antunes*, além dos resultados de densidade já referidos, apresenta resultados numéricos para uma simulação sobre um domínio estrela similar à “*Bolota*” considerada neste trabalho.

Em [26], *Karageorghis e Lesnic* investigam o problema exterior inverso e é para este que apresentam simulações numéricas e resultados, no entanto, neste trabalho [26], a secção 2 que trata o problema exterior direto e a secção 5 que trata da regularização das matrizes são interessantes no âmbito deste trabalho.

4. OPÇÕES METODOLÓGICAS

Neste trabalho, pretendemos encontrar uma boa distribuição de pontos sobre as superfícies estrela em estudo que permitam ao mesmo tempo, um bom condicionamento do sistema linear associado ao MFS e uma solução precisa, concentrando igual quantidade de pontos em igual área de superfície.

Em geral uma distribuição de pontos uniforme e equidistante não é possível sobre superfícies fechadas em \mathbb{R}^3 para a maioria dos casos, como já referido anteriormente. Neste trabalho, vamos considerar superfícies que sejam fronteiras de domínios estrela que passamos a definir de seguida.

Definição 1. (Domínio estrela) *Num espaço linear, o conjunto D é um domínio estrela se e só se a interseção de todos os subconjuntos convexos máximos de D não é um conjunto vazio.*

A definição anterior pode ser verificada em [27] e é equivalente à definição seguinte, enunciada no seguinte lema.

Lema 1. *Um subconjunto fechado D no espaço n -dimensional \mathbb{R}^n é designado por domínio estrela se contiver a origem local x_0 enquanto ponto interior e no qual, todo o raio*

$$\mathcal{L}_{(x-x_0)} = \{\lambda(x - x_0) | \lambda \geq 0\} \quad (x \neq x_0)$$

não intersekte a fronteira de D mais de uma vez.

Prova: Remetemos para [28].

Como em geral nas superfícies estrela não existe uma distribuição de pontos uniforme e equidistante, adaptamos a definição dada em [1] e procuramos obter pontos bem distribuídos (PBD).

Definição 2. (Pontos bem distribuídos (PBD)). *Seja um conjunto de n pontos x_1, x_2, \dots, x_n na superfície estrela γ tal que \check{d}_{x_k, x_i} é a distância entre os pontos x_k e x_i sobre a superfície.*

Então este conjunto de pontos diz-se bem distribuído se e só se existirem uma distância \check{d}^3 e um $\varepsilon > 0$, tais que, para

$$\forall i, k \in \{1, 2, \dots, n\}, \check{d}_{x_k, x_i} \geq \check{d} \tag{9}$$

e para qualquer m natural e qualquer $x \in \gamma$ exista um q natural

$$q \in \{1, 2, \dots, m-1\} \cup \{m+1, \dots, n\} \tag{10}$$

tal que

$$\check{d}_{x, x_q} \leq \check{d} + \varepsilon. \tag{11}$$

³ O símbolo \check{d} representa uma distância sobre a superfície.

4.1. Parametrização das superfícies estrela

No desenvolvimento deste trabalho, a parametrização da superfície da esfera unitária é dada num sistema de coordenadas esférico como

$$\mathbf{r}(\theta, \varphi) = (\sin\theta \cos\varphi, \sin\theta \sin\varphi, \cos\theta), \quad (\theta, \varphi) \in [0, \pi] \times [0, 2\pi]. \quad (12)$$

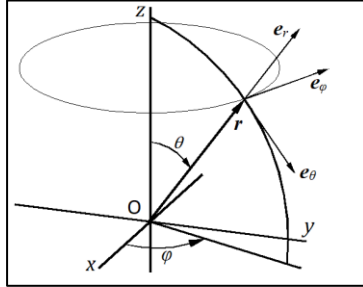


Figura 2 - Parametrização da esfera.

Uma superfície estrela é uma superfície fechada que corresponde à fronteira de um domínio estrela e pode ser parametrizável pela função

$$\zeta_\rho = \rho(\theta, \varphi) \mathbf{r}(\theta, \varphi), \quad (\theta, \varphi) \in [0, \pi] \times [0, 2\pi] \quad (13)$$

em que $\rho: [0, \pi] \times [0, 2\pi] \rightarrow [0, +\infty]$ é duas vezes diferenciável e 2π periódica em φ .

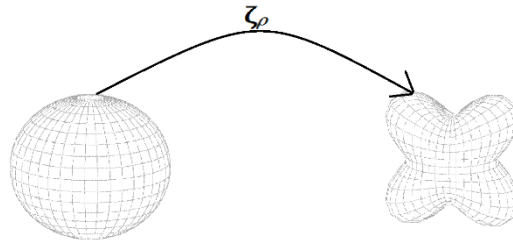


Figura 3 - Ilustração de que a parametrização ζ mapeia pontos da superfície esférica em pontos de uma superfície estrela.

As superfícies estrela consideradas neste trabalho são obtidas pelas transformações sobre a esfera dadas pelas expressões seguintes que originam superfícies que designaremos ao longo do trabalho, respetivamente, por almofada e cabaça.

$$\rho(\theta, \varphi) = \sqrt{0.8 + 0.5(\cos 4\theta - 1)(\cos 2\varphi - 1)} \quad (14)$$

$$\rho(\theta) = 0.5 \times (0.6 + \sqrt{4.25 + 2\cos 3\theta}) \quad (15)$$

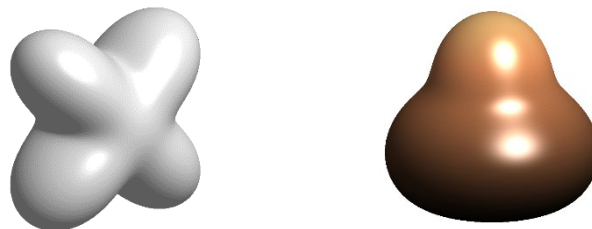


Figura 4 - Ilustração das superfícies estrela Almofada (14) e Cabaça (15).

4.2. Interação de Coulomb

Como já referido, a opção metodológica central deste trabalho nasce da inspiração gerada pelo trabalho de *Araújo e Serranho* [1] e é motivada por uma aproximação à Lei da Interação Eletrostática que pode ser formulada como

$$\vec{F} = k \frac{q_1 q_2}{d^2} \vec{d} \quad (16)$$

Esta aproximação desenvolve-se segundo duas conjeturas.

Conjetura 1. *Considera-se que a interação de Coulomb pode ser adaptada a um domínio estrela sendo a interação entre dois pontos proporcional ao quadrado da distância entre eles sobre a superfície estrela. O movimento dos pontos, gerado por esta interação, originará pontos bem distribuídos (PBD) na superfície (ver a definição 2).*

Conjetura 2. *Considera-se que a interação de Coulomb pode ser adaptada a um domínio estrela sendo a interação entre dois pontos proporcional ao quadrado da distância linear entre eles ponderada pela curvatura da superfície no ponto, sendo que um ponto em zona com maior curvatura exercerá menor força repulsora sobre os restantes do que um ponto em zona com menor curvatura. O movimento dos pontos, gerado por esta interação, dará origem a uma distribuição de pontos na superfície com maior densidade de pontos nas zonas de maior curvatura.*

Estas duas conjeturas originam dois métodos, “*Força proporcional à distância*” e “*Ponderação da Força pela Curvatura*”.

No primeiro, “*Força proporcional à distância*”, a superfície é como que uma gaiola de Faraday, pelo que a força eletrostática se transmite ao longo da superfície entre os pontos *A* e *B* e não em linha reta. A equação de força resultante de *A* sobre *B* nesta abordagem é definida por

$$\vec{F}_{AB} = \frac{1}{ds_{AB}^2} \vec{t}_{AB} \quad (17)$$

em que ds_{AB}^2 representa a distância entre *A* e *B* sobre a superfície e \vec{t}_{AB} é o vetor tangente à superfície em *B*. De notar que as constantes elétricas associadas à interação de Coulomb são normalizadas à unidade, uma vez que para a nossa abordagem essas constantes não têm efeito relevante.

Neste método espera-se que \vec{F}_{AB} e \vec{F}_{BA} tenham a mesma magnitude. Utiliza-se uma integração numérica para aproximar as distâncias ds_{AB} entre pontos na superfície.

No segundo método que denominamos por “*Ponderação da Força pela Curvatura*”, a força eletrostática transmite-se em linha reta mas a curvatura da superfície provoca uma interação que condiciona também o deslocamento dos pontos, uma vez que estes apenas se podem deslocar sobre esta. A equação de força resultante de A em B nesta abordagem é definida por

$$\vec{F}_{AB} = \frac{1}{\kappa_A \|A - B\|^2} \vec{\tau}_{AB}. \quad (18)$$

em que κ_A é a curvatura da superfície no ponto A. Neste método não se espera que \vec{F}_{AB} e \vec{F}_{BA} tenham a mesma magnitude, mas espera-se que no geral a distribuição de pontos concentre mais pontos em zonas de maior curvatura.

Vamos agora fazer a notação para os capítulos que se seguem, onde cada uma destas abordagens é detalhada. Notamos que a cada par de ângulos (θ, φ) corresponde apenas um ponto A sobre a superfície esférica e um único ponto \tilde{A} sobre a superfície estrela. Assim, denotamos por A e B pontos sobre a superfície esférica e \tilde{A} e \tilde{B} os pontos, sobre a superfície estrela, definidos pelos mesmos ângulos (θ, φ) .

4.3. Força proporcional à distância sobre a superfície

Como referido anteriormente o método baseia-se na interação de *Coulomb* que é uma lei de proporcionalidade quadrática inversa entre força para a distância. A força que o ponto \tilde{A} exerce sobre o ponto \tilde{B} na superfície estrela é dada por

$$\vec{F}_{\tilde{A}\tilde{B}} = \frac{1}{ds_{\tilde{A}\tilde{B}}^2} \vec{\tau}_{\tilde{A}\tilde{B}} \quad (17)$$

em que $\vec{F}_{\tilde{A}\tilde{B}}$ representa a força que o ponto \tilde{A} exerce sobre \tilde{B} , $\vec{\tau}_{\tilde{A}\tilde{B}}$ é o vetor unitário direcional \overline{AB} tangente à superfície estrela no ponto \tilde{B} e $ds_{\tilde{A}\tilde{B}}$ é a distância sobre a curva entre os pontos \tilde{A} e \tilde{B} na superfície estrela em estudo.

4.3.1. Cálculo do vetor tangente em B

O vetor unitário $\vec{\tau}_{\tilde{A}\tilde{B}}$ é o versor direcional \overline{AB} tangente à superfície do domínio estrela em estudo no ponto de aplicação da força, isto é, em \tilde{B} . Na superfície estrela o vetor normal não é dado geralmente pela direção do raio. Podemos obtê-lo normalizando o produto externo

dos vetores tangente dados pelas derivadas em θ e φ da parametrização ζ na expressão (13), portanto teremos o vetor normal

$$\mathbf{n} = \frac{\frac{\partial \zeta_\rho}{\partial \theta} \times \frac{\partial \zeta_\rho}{\partial \varphi}}{\left\| \frac{\partial \zeta_\rho}{\partial \theta} \times \frac{\partial \zeta_\rho}{\partial \varphi} \right\|} \quad (19)$$

e obteremos o vetor tangente $\vec{\tau}_{\tilde{A}\tilde{B}}$ em \tilde{B} por

$$\vec{\tau}_{\tilde{A}\tilde{B}} = \frac{(\tilde{B} - \tilde{A}) - \{(\tilde{B} - \tilde{A}) \cdot \mathbf{n}_{\tilde{B}}\} \mathbf{n}_{\tilde{B}}}{\|(\tilde{B} - \tilde{A}) - \{(\tilde{B} - \tilde{A}) \cdot \mathbf{n}_{\tilde{B}}\} \mathbf{n}_{\tilde{B}}\|} \quad (20)$$

em que $\mathbf{n}_{\tilde{B}}$ é o vetor normal no ponto \tilde{B} , obtido por substituição em (19) dos ângulos (θ, φ) que definem \tilde{B} .

4.3.2. Cálculo da distância sobre a superfície entre A e B

Na superfície da esfera a distância mais curta entre dois pontos A e B é dada pelo comprimento do arco de grande círculo entre esses dois pontos. Como é do conhecimento comum, um grande círculo é um corte da calote esférica por um plano que inclua os dois pontos A , B e o centro da esfera. Podemos obter com facilidade o comprimento do arco (\check{d}_{AB}) a partir dos pontos A e B utilizando transformações apropriadas baseadas na função arco tangente, como veremos mais adiante na expressão (23).

Mas, se o domínio estrela pode ser definido como uma transformação ρ da esfera, essa transformação não é aplicável diretamente ao problema de determinar o comprimento da curva na superfície do domínio estrela.

De facto, na superfície estrela não é possível à partida, determinar o caminho mais curto sobre a superfície entre dois pontos. Assim, assumimos o caminho definido pelo vetor tangente \overrightarrow{AB} sobre a superfície. Por outro lado, o comprimento desse caminho define a distância entre \tilde{A} e \tilde{B} sobre a superfície do domínio estrela, podendo este ser definido pela expressão

$$\check{d}_{\tilde{A},\tilde{B}} = \int_A^B \sqrt{1 + (\boldsymbol{\rho}'_{AB})^2} dt \quad (21)$$

em que $\boldsymbol{\rho}'_{AB}$ é a derivada direcional da função ρ dada pelas expressões (14) e (15) ao longo do caminho definido pelo grande círculo entre os pontos A e B .

Uma vez que o cálculo exato do integral é no caso geral moroso ou mesmo desconhecido, optou-se por uma solução de integração numérica pela regra dos trapézios composta. O cál-

culo da derivada direcional ρ'_{AB} pode ser dado através do gradiente de ρ nas direções definidas localmente pelos vetores tangentes \vec{t}_θ e \vec{t}_φ nas direções de θ e ρ , respetivamente, pelo que a expressão anterior (21) pode ser reescrita para domínios estrela por,

$$\check{d}_{\tilde{A}\tilde{B}} = \int_A^B \sqrt{1 + \left[\left(\frac{\partial \rho}{\partial \theta} \vec{t}_{\theta Z(t)} + \frac{\partial \rho}{\partial \varphi} \vec{t}_{\varphi Z(t)} \right) \cdot \vec{t}_{Z(t)B} \right]^2} dt \quad (22)$$

em que $z(t)$ é a parametrização de comprimento de arco, ou seja, velocidade constante entre A e B sobre o grande círculo.

Para a integração numérica são necessários vários passos que detalhamos de seguida.

- i. Determinação das expressões das derivadas parciais $\frac{\partial \rho}{\partial \theta}$ e $\frac{\partial \rho}{\partial \varphi}$ para qualquer par de ângulos (θ, φ) .
- ii. Definição dos n nós de integração x_i entre A e B (e entre \tilde{A} e \tilde{B}), necessários ao método de integração, sendo $x_0 = A$ e $x_n = B$, i e n estão definidos em (24). Para isso, desenvolvem-se os seguintes passos.
 1. Com a expressão de parametrização da esfera anteriormente indicada em (12) determinam-se os pontos A e B na superfície da esfera unitária com os mesmos ângulos (θ, φ) dos pontos \tilde{A} e \tilde{B} na superfície estrela.
 2. Calcula-se a distância na superfície da esfera entre os pontos A e B, utilizando a função arco tangente de dois componentes e quatro quadrantes⁴ que fornece uma solução única. A expressão é

$$ds_{AB} = \text{atan2}(\|\mathbf{r}_A \times \mathbf{r}_B\|, \mathbf{r}_A \cdot \mathbf{r}_B) \quad (23)$$

3. Divide-se o comprimento do arco AB na esfera em $(n - 1)$ partes iguais, obtendo o espaçamento h de integração, $h = ds_{AB}/n$. Obtêm-se n segmentos de círculo de igual dimensão correspondendo a n ângulos iguais.
4. Criam-se os n nós de integração incluindo os extremos dos segmentos de círculo.
5. Calculam-se as coordenadas cartesianas dos nós de integração na esfera, utilizando as expressões seguintes:

⁴ A função **atan2** é uma função trigonométrica computacional criada como uma expansão da função arco tangente para fornecer resultados nos quatro quadrantes do círculo. pode consultar-se em <https://en.wikipedia.org/wiki/Atan2>

$$\begin{aligned}
\alpha_i &= \frac{\sin((1-h_i)d_s(x_i, x_{i+1}))}{\sin(d_s(x_i, x_{i+1}))} \\
\beta_i &= \frac{\sin(h_i d_s(x_i, x_{i+1}))}{\sin(d_s(x_i, x_{i+1}))} \\
x_i &= \alpha_i \sin(\theta_{x_i}) \cos(\varphi_{x_i}) + \beta_i \sin(\theta_{x_{i+1}}) \cos(\varphi_{x_{i+1}}) \\
y_i &= \alpha_i \sin(\theta_{x_i}) \sin(\varphi_{x_i}) + \beta_i \sin(\theta_{x_{i+1}}) \sin(\varphi_{x_{i+1}}) \\
z_i &= \alpha_i \cos(\theta_{x_i}) + \beta_i \cos(\theta_{x_{i+1}})
\end{aligned} \quad i = 0, 1, \dots, n-1 \quad (24)$$

6. Determinam-se as coordenadas correspondentes dos nós intermédios (\tilde{x}_i) na superfície estrela, com recurso ao arco tangente de dois componentes anteriormente referido.

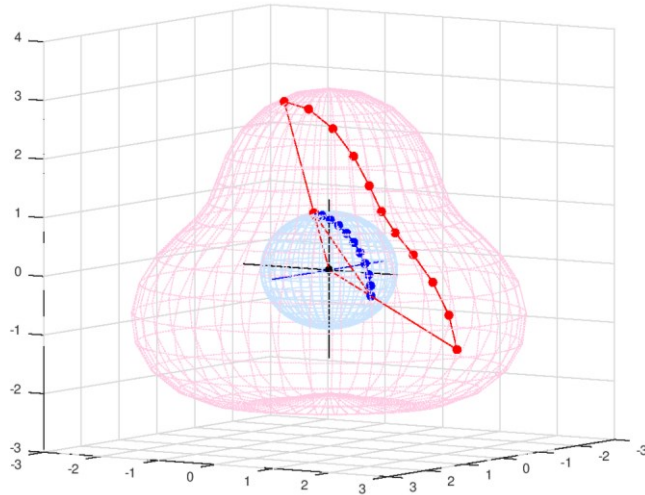


Figura 5 - Nós de integração entre dois pontos (\tilde{A} e \tilde{B}).

Na esfera os nós estão a azul, na bolota a vermelho. Os raios a vermelho mostram que os pontos extremos estão alinhados, portanto têm as mesmas coordenadas esféricas e estão no plano de um grande círculo.

- iii. Determinação das tangentes nas direções de φ e θ . Como o integral (22) é calculado numericamente, o intervalo AB é discretizado em n intervalos como indicado anteriormente (ii.3.), sendo necessário calcular as tangentes φ e θ em cada ponto inicial de cada subsegmento $A_{(i)} = (x_i, y_i, z_i)$ de AB . As tangentes φ e θ são determinadas por,

$$\vec{t}_{\varphi_{A(i)}} = \frac{[-y_{A(i)}, x_{A(i)}, 0]}{\sqrt{x_{A(i)}^2 + y_{A(i)}^2}} \quad (25)$$

e

$$\vec{\tau}_\theta = \frac{\left[\frac{-x_{A(i)}z_{A(i)}}{\sqrt{x_{A(i)}^2 + y_{A(i)}^2}}, \frac{-y_{A(i)}z_{A(i)}}{\sqrt{x_{A(i)}^2 + y_{A(i)}^2}}, \sqrt{x_{A(i)}^2 + y_{A(i)}^2} \right]}{\left\| \frac{-x_{A(i)}z_{A(i)}}{\sqrt{x_{A(i)}^2 + y_{A(i)}^2}}, \frac{-y_{A(i)}z_{A(i)}}{\sqrt{x_{A(i)}^2 + y_{A(i)}^2}}, \sqrt{x_{A(i)}^2 + y_{A(i)}^2} \right\|} \quad (26)$$

- iv. Determinação da tangente $\vec{\tau}_{AB}$. O vetor $\vec{\tau}_{AB}$ é o versor direcional \overline{AB} tangente à superfície da esfera unitária. Calcula-se por,

$$\vec{\tau}_{AB} = \frac{(B - A) - \{A \cdot (B - A)\}A}{\|(B - A) - \{A \cdot (B - A)\}A\|}. \quad (27)$$

Este pode ser obtido como normalização do vetor $\vec{\tau}_1$,

$$\vec{\tau}_{AB} = \frac{\vec{\tau}_1}{\|\vec{\tau}_1\|}$$

que por sua vez é a subtração ao vetor $\vec{\tau}_0 = B - A$, do vetor normal a A ($(\vec{\tau}_0 \cdot A)A$), ou seja

$$\vec{\tau}_1 = \vec{\tau}_0 - (\vec{\tau}_0 \cdot A)A.$$

Efetuada o cálculo para todos os pares de pontos \tilde{A} e \tilde{B} , calcula-se uma aproximação (devido à aproximação do integral) da força total aplicada sobre cada ponto \tilde{B} por

$$\vec{F}_{\tilde{B}} = \sum_{\tilde{A}=1}^N \vec{F}_{\tilde{A}\tilde{B}}, \quad \tilde{A} \neq \tilde{B} \quad (28)$$

em que $\vec{F}_{\tilde{A}\tilde{B}}$ é dada por (17).

A força $\vec{F}_{\tilde{B}}$ é aplicada ao ponto \tilde{B} , movendo-o para uma nova posição \tilde{B}' , pela expressão

$$\tilde{B}' = \tilde{B} + \lambda \vec{F}_{\tilde{B}} \quad (29)$$

em que λ é um fator que regula a estabilidade do método.

O algoritmo interrompe-se quando for atingido o critério de paragem definido mais à frente. Para finalizar o algoritmo apresentado, o cálculo final na forma discretizada do integral (22) implica a igualdade de forças de acordo com a *Lei de Coulomb*, isto é,

$$\|\vec{F}_{\tilde{A}\tilde{B}}\| = \|\vec{F}_{\tilde{B}\tilde{A}}\|.$$

4.4. Força ponderada pela curvatura

Na segunda abordagem considera-se que a força sobre o ponto depende do quadrado da distância e também da curvatura da superfície. Este método pretende concentrar mais pontos

em zonas de maior curvatura com o objetivo de aumentar localmente a precisão do cálculo. Considera-se assim que a força que \tilde{A} exerce sobre \tilde{B} é dada por

$$\vec{F}_{\tilde{A}\tilde{B}} = \frac{\vec{t}_{\tilde{A}\tilde{B}}}{\kappa_{\tilde{A}} \|\tilde{A} - \tilde{B}\|^2} \quad (30)$$

onde $\vec{t}_{\tilde{A}\tilde{B}}$ é o vetor tangente unitário em \tilde{B} com sentido de \tilde{A} para \tilde{B} anteriormente definido e $\kappa_{\tilde{A}}$ é a curvatura da superfície no ponto \tilde{A} . Desta forma, pretende-se que um ponto sobre uma zona de curvatura mais elevada exerça menos força nos restantes, permitindo que outros se aproximem. Espera-se assim que zonas de maior curvatura tenham maior concentração de pontos. De notar que nesta abordagem, em geral $\|\vec{F}_{\tilde{A}\tilde{B}}\| \neq \|\vec{F}_{\tilde{B}\tilde{A}}\|$.

4.4.1. Cálculo da curvatura

Calculamos a curvatura média no ponto \tilde{A} , $\kappa_{m(\tilde{A})}$ dada em [29] por

$$\kappa_{m(\tilde{A})} = - \frac{\tilde{v} \cdot \left(\left(\frac{\partial \tilde{v}}{\partial \theta} \times \zeta_\varphi \right) + \left(\zeta_\theta \times \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \varphi} \right) \right)}{2 \|\tilde{v}\|^3} \quad (31)$$

em que, $\zeta_\theta = \frac{\partial \zeta}{\partial \theta}$ e $\zeta_\varphi = \frac{\partial \zeta}{\partial \varphi}$ são definidos por,

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \zeta}{\partial \theta} \\ \frac{\partial \zeta}{\partial \varphi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \zeta_x}{\partial \theta} (\rho \sin \theta \cos \varphi), \frac{\partial \zeta_y}{\partial \theta} (\rho \sin \theta \sin \varphi), \frac{\partial \zeta_z}{\partial \theta} (\rho \cos \theta) \\ \frac{\partial \zeta_x}{\partial \varphi} (\rho \sin \theta \cos \varphi), \frac{\partial \zeta_y}{\partial \varphi} (\rho \sin \theta \sin \varphi), \frac{\partial \zeta_z}{\partial \varphi} (\rho \cos \theta) \end{bmatrix} \quad (32)$$

A normal exterior é denotada por \tilde{v} e dada por

$$\tilde{v} = \zeta_\theta \times \zeta_\varphi$$

sendo a normal exterior unitária v dada por

$$v = \frac{\zeta_\theta \times \zeta_\varphi}{\|\zeta_\theta \times \zeta_\varphi\|}$$

Sabendo que,

$$\zeta_\theta = \begin{bmatrix} \zeta_{x\theta} \\ \zeta_{y\theta} \\ \zeta_{z\theta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} \text{ e } \zeta_\varphi = \begin{bmatrix} \zeta_{x\varphi} \\ \zeta_{y\varphi} \\ \zeta_{z\varphi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix}$$

então,

$$\tilde{v} = \zeta_\theta \times \zeta_\varphi = [u_2 v_3 - u_3 v_2, -u_3 v_1 - u_1 v_3, u_1 v_2 - u_2 v_1]$$

em notação convencional, ou neste caso,

$$\tilde{v} = \zeta_\theta \times \zeta_\varphi = [\zeta_{y\theta} \zeta_{z\varphi} - \zeta_{z\theta} \zeta_{y\varphi}, -\zeta_{z\theta} \zeta_{x\varphi} - \zeta_{x\theta} \zeta_{z\varphi}, \zeta_{x\theta} \zeta_{y\varphi} - \zeta_{y\theta} \zeta_{x\varphi}]$$

Poderemos calcular a derivada de um produto externo de duas formas, ou calculando primeiro o produto externo e derivando o resultado ou derivando as componentes e calculando em seguida o produto externo utilizando a regra do produto. Dada a dimensão das expressões em u e v , o segundo método parece preferível. Como as segundas derivadas são derivadas parciais será necessário calcular explicitamente as derivadas das expressões em u e v em ordem a θ e φ e calcular os produtos externos $\frac{\partial \tilde{v}}{\partial \theta}$ e $\frac{\partial \tilde{v}}{\partial \varphi}$ pela regra do produto, isto é,

$$\frac{\partial \tilde{v}}{\partial \theta} = \frac{\partial}{\partial \theta} (\zeta_\theta \times \zeta_\varphi) = \zeta_{\theta\theta} \times \zeta_\varphi + \zeta_\theta \times \zeta_{\theta\varphi}$$

e

$$\frac{\partial \tilde{v}}{\partial \varphi} = \frac{\partial}{\partial \varphi} (\zeta_\theta \times \zeta_\varphi) = \zeta_{\varphi\theta} \times \zeta_\varphi + \zeta_\theta \times \zeta_{\varphi\varphi}.$$

Obtemos assim a expressão para a curvatura média dada por

$$\kappa_{m(\tilde{A})} = - \frac{\tilde{v} \cdot \left(\left((\zeta_{\theta\theta} \times \zeta_\varphi + \zeta_\theta \times \zeta_{\theta\varphi}) \times \zeta_\varphi \right) + \left(\zeta_\theta \times (\zeta_{\varphi\theta} \times \zeta_\varphi + \zeta_\theta \times \zeta_{\varphi\varphi}) \right) \right)}{2 \|\tilde{v}\|^3}. \quad (33)$$

Uma vez calculadas todas as forças $\vec{F}_{\tilde{A}\tilde{B}}$, o procedimento utilizado é idêntico ao descrito no método força proporcional à distância apresentado na secção 4.3 na página 22.

4.5. Avaliação do condicionamento e da precisão da solução

O objetivo deste trabalho é obter conjuntos de pontos nas superfícies estrela que permitam obter uma solução do problema exterior direto pelo MFS bem condicionada e com boa precisão. Para avaliar a qualidade dos conjuntos de pontos obtidos e a sua adequação a este objetivo são calculados dois valores para cada par de conjuntos de pontos (fonte e de colocação) e para cada número de onda considerado.

O primeiro valor é o número de condição da matriz do sistema linear de resultados da expressão (7) para pares de pontos fonte e de colocação.

O segundo é o cálculo da norma L^2 da aproximação ao campo total $\tilde{u} = u^i + \tilde{u}^s$ sobre a fronteira, aproximada numericamente pela regra de quadratura de Gauss-Legendre sobre uma triangulação de Delaunay, definida pela distribuição de pontos obtida. Para este cálculo a regra de quadratura utilizada é a quadratura de grau 2 para o triângulo de referência T_{st} definido pelos vértices $(0,0)$, $(0,1)$, $(1,0)$ dada por

$$\iint_{T_{st}} g(\xi, \eta) d\xi d\eta = \frac{1}{6} \left[g\left(\frac{1}{6}, \frac{1}{6}\right) + g\left(\frac{2}{3}, \frac{1}{6}\right) + g\left(\frac{1}{6}, \frac{2}{3}\right) \right]. \quad (34)$$

Para a utilização desta quadratura, deveríamos conhecer para cada triângulo da triangulação sobre a superfície estrela, a área do triângulo sobre a superfície estrela e a localização dos pontos de quadratura na superfície estrela. Na esfera unitária é possível calcular a área dos triângulos esféricos e é possível calcular a localização dos nós de quadratura, mas não dispomos de método que permita calcular a área do triângulo sobre uma superfície curva geral, como a superfície estrela.

Assim, consideramos o triângulo plano T definido pelos vértices da triangulação de Delaunay que podemos mapear T_{st} em T utilizando uma transformação linear ψ como descrito em [30], obtendo

$$\iint_T F(x, y) dx dy = 2A_T \iint_{T_{st}} F(\psi(\xi, \eta)) d\xi d\eta.$$

Daqui resulta que o cálculo da norma L^2 da aproximação ao campo total $\tilde{u} = u^i + \tilde{u}^s$ inclui, além do erro intrínseco à aproximação da solução por MFS do problema de difração, de um outro erro que resulta do facto dos triângulos utilizados (apesar de terem os vértices sobre a superfície) não estarem sobre a superfície, pelo que os pontos interiores para a integração numérica onde é avaliado o campo total para a integração não estão sobre a superfície. Assim, o campo total não é avaliado sobre a superfície, provocando um erro adicional que não pode ser dissociado. No entanto, à medida que o número de pontos aumenta, espera-se que a influência desta segunda componente do erro tenda para zero, uma vez que os triângulos da triangulação tenderão para a superfície.

5. APRESENTAÇÃO DOS RESULTADOS

5.1. Considerações prévias

Para obter os resultados nesta secção foi necessário fazer algumas escolhas em relação ao hardware e software utilizados, o método de geração dos conjuntos de pontos iniciais e a forma de aplicação da força calculada sobre os pontos. Começamos por resumidamente mostrar as opções tomadas quanto a estes aspetos, para que fique claro como foram obtidos os resultados numéricos e para que a metodologia possa ser replicável.

5.1.1. Software e hardware utilizados

Os algoritmos de simulação e gráficos foram codificados em GNU Octave versão 4.4.1 que é um software livre sob licença GNU GPL, correndo sob Windows 10 Home em Lenovo Yoga 700141SK com processador Intel(R) Core (TM) i7-6500U e memória física (RAM) instalada de 8.00 GB, Toshiba Satellite R840-132 com processador Intel(R) Core (TM) i5-2520M e memória física (RAM) instalada de 8.00 GB.

5.1.2. Escolha de pontos iniciais

A escolha de pontos iniciais pode condicionar o resultado obtido em qualquer dos métodos propostos, partindo do princípio que o modelo pode parar num estado que não corresponda à energia mínima global, mas apenas local. Considerou-se que pontos dispostos de uma forma pré-organizada poderiam condicionar o resultado obtido, pelo que se optou por criar aleatoriamente conjuntos de pontos iniciais.

Os conjuntos de pontos iniciais são definidos em coordenadas esféricas (θ, φ) segundo o sistema de coordenadas definido anteriormente na secção 4.1 denominada *Parametrização das superfícies*.

Consideraram-se conjuntos de N pontos com $N = 50, 100, 200, 400, 800$. Foram considerados dois métodos para gerar aleatoriamente os pontos iniciais.

Método 1. Gerar um conjunto de N pontos obtendo uma amostra aleatória de pares (θ, φ) dos domínios $[0, \pi] \times [0, 2\pi]$ e obter as coordenadas cartesianas utilizando (13).

Método 2. Gerar um conjunto de N pontos obtendo uma amostra aleatória de pares (z, φ) dos domínios $[-1, 1] \times [0, 2\pi]$ e obter as coordenadas cartesianas utilizando as expressões seguintes

$$\begin{cases} z = z \\ x = \sqrt{1 - z^2} \cos \varphi \\ y = \sqrt{1 - z^2} \sin \varphi \end{cases} .$$

Seguidamente converter as coordenadas cartesianas em coordenadas esféricas o que pode ser feito utilizando a função arco tangente de dois componentes tendo em atenção o domínio de coordenadas utilizado.

O primeiro método tende a concentrar pontos nas regiões polares, pelo que à partida dará origem a piores conjuntos de pontos iniciais. Na figura 6 é feita uma ilustração deste efeito. Assim, optou-se pelo método 2 para geração dos conjuntos iniciais de pontos.

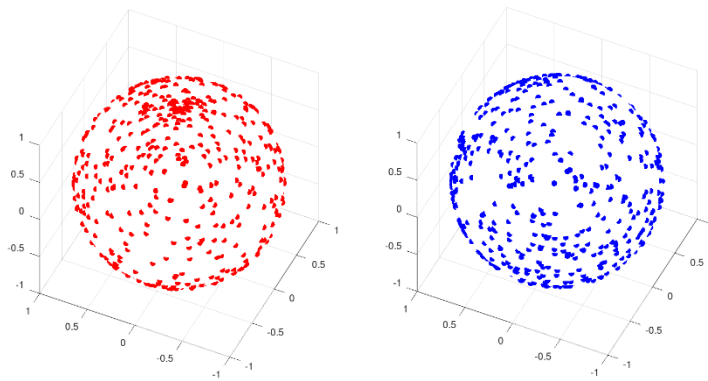


Figura 6 - Exemplo de conjunto de 800 pontos iniciais sobre a esfera unitária. No lado direito a azul distribuição pelo método 2. Do lado esquerdo a vermelho distribuição pelo método 1, nesta figura vê-se distintamente a concentração de pontos vermelhos em torno do polo.

5.1.3. Força aplicada sobre o ponto

O modelo utilizado neste trabalho ignora explicitamente a força que segura o ponto \tilde{B} à superfície. De facto, a força resultante da soma das forças de ação das restantes partículas aponta numa direção que em geral não é tangente à superfície. Neste trabalho, essa força é aplicada pela utilização da parametrização da estrela sobre os ângulos (θ, φ) calculados, forçando, portanto, o ponto a mover-se sobre a superfície numa direção tangencial.

Assim, neste trabalho aplicamos sobre \tilde{B} a componente tangencial de $\vec{F}_{\tilde{B}}$ calculada por,

$$\vec{F}_{T\tilde{B}} = \vec{F}_{\tilde{B}} - (\vec{F}_{\tilde{B}} \cdot \mathbf{n}_{\tilde{B}}) \mathbf{n}_{\tilde{B}} .$$

Noutros trabalhos, sobre a esfera unitária, a força é aplicada pela normalização [1, 11] do vetor resultante da aplicação de $\vec{F}_{\tilde{B}}$ sobre \tilde{B} .

5.1.4. Fator de convergência e critério de paragem

Os restantes critérios e definições de fatores, nomeadamente, os fatores de convergência, o fator de paragem e o número de iterações podem diferir segundo o modelo em que se aplicam e serão definidos para cada modelo.

Quando na Conjetura 1 na p.21 se diz “*Considera-se que a interação de Coulomb pode ser adaptada a um domínio estrela...*” está-se a assumir que o movimento dos pontos gerado por esta interação resultará numa organização suave dos pontos na superfície que conduza a uma situação de estabilidade e que o máximo da norma da força tangente tenderá para valores muito próximos de zero. No entanto os resultados numéricos ilustraram que esse não é necessariamente o caso.

Para compreender melhor a influência da geometria e do método de calcular $\vec{F}_{\vec{A}\vec{B}}$ criaram-se dois modelos adicionais dos quais não se apresentam resultados exaustivos que no entanto estão disponíveis em [31].

No primeiro destes modelos, na pasta “Modelo 4” em [31], utilizaram-se conjuntos de *quasi-equidistant points (QEP)*, disponibilizados por Araújo e Serranho em [1], para os quais se conhece a ordem de grandeza do máximo da força tangente, $\max\|\vec{F}_{\vec{B}}\|$. Estes pontos foram em seguida mapeados para a superfície estrela, calculadas as forças de interação e determinado o máximo. Este cálculo foi efetuado para dois casos, força proporcional à distância sobre a superfície $\|\vec{F}_{\vec{B}}\|_S$ e força proporcional à distância linear $\|\vec{F}_{\vec{B}}\|_L$. Os resultados resumidos são apresentados na tabela 1.

Tabela 1 - Resultados do cálculo de $\max\|\vec{F}_{\vec{B}}\|$ sobre pontos QEP no “modelo 4”

<i>N.º Pontos</i>	<i>Esfera</i>	<i>Almofada</i>		<i>Bolota</i>	
	$\max\ \vec{F}_{\vec{B}}\ $	$\max\ \vec{F}_{\vec{B}}\ _L$	$\max\ \vec{F}_{\vec{B}}\ _S$	$\max\ \vec{F}_{\vec{B}}\ _L$	$\max\ \vec{F}_{\vec{B}}\ _S$
50	≤ 0.001	16.458	14.615	7.6475	8.7913
100	≤ 0.002	36.937	30.331	16.922	19.454
200	≤ 0.004	76.350	64.180	35.580	40.638
400	≤ 0.008	161.65	140.68	73.775	84.609
800	≤ 0.016	338.26	291.13	152.04	175.16

No segundo modelo, na pasta “Modelo 3” em [31], correu-se uma simulação da interação de Coulomb clássica, mas sobre as superfícies estrela em estudo até às 25000 iterações. Os resultados resumidos são apresentados na tabela 2.

Tabela 2 - Resultados do cálculo de $\max\|\vec{F}_B\|_L$ no “modelo 3”

	Almofada	Bolota
$N.^\circ$ Pontos	$\max\ \vec{F}_B\ _L$	$\max\ \vec{F}_B\ _L$
50	0.4142	0.2638
100	1.1473	0.9385
200	1.6549	1.6392
400	4.4757	4.4524
800	13.185	7.5306

Constatou-se que os valores mínimos para $\max\|\vec{F}_B\|_L$ são muito superiores ao que se verifica na esfera unitária. Confirmou-se que os modelos de interação de *Coulomb* sobre as superfícies estrela estudadas não atingem um estado de estabilidade. Assim, neste trabalho procuraremos um estado de equilíbrio (não necessariamente a tender para zero) e arbitraremos um valor para o número de iterações máximo.

5.1.5. Cálculo da norma L^2 da solução sobre a fronteira

Como referido em 4.5, são possíveis duas abordagens para estimar o erro da condição de fronteira, na norma L^2 , sob a superfície. Utilizar pontos localizados na superfície estrela e área do triângulo plano ou utilizar localização de pontos na face do triângulo plano e área do triângulo plano, sendo a segunda opção a que incorpora maior erro.

Simulando na “Almofada” para 200 pontos de colocação e 100 pontos fonte obtém-se o resultado apresentado na imagem e tabela seguintes. O erro de cálculo da norma L^2 é menor na primeira opção, mas na segunda opção é possível verificar o posicionamento dos pontos de quadratura na superfície dos triângulos.

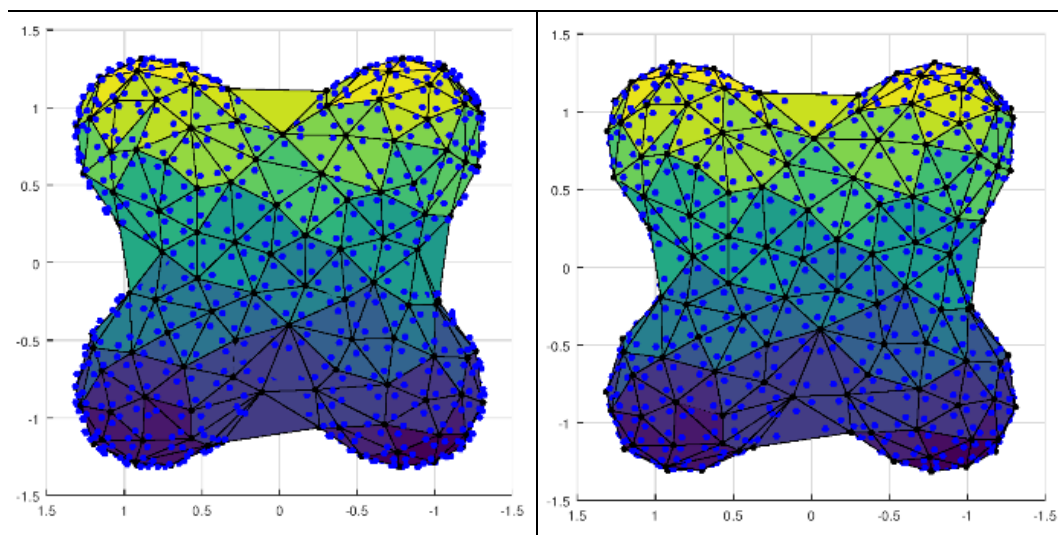


Figura 7 - Nós de quadratura na “Almofada”. À esquerda na superfície estrela, à direita nas faces dos triângulos Delaunay. Nesta solução os pontos de quadratura são visualizados na posição adequada ao cálculo.

Tabela 3 - Resultados da norma L^2 da aproximação ao campo total $\tilde{u} = u^i + \tilde{u}^s$ sobre a fronteira (para condição de Dirichlet homogênea, isto é $u = 0$) calculada numericamente pela regra de quadratura de Gauss-Legendre sobre pontos interiores

<i>Nº Onda</i>	<i>k = 0.5</i>	<i>k = 1</i>	<i>k = 2</i>
<i>Pontos de quadratura na superfície estrela</i>	<i>0.11609</i>	<i>0.17457</i>	<i>0.32999</i>
<i>Pontos de quadratura na face do triângulo</i>	<i>0.19303</i>	<i>0.27941</i>	<i>0.48731</i>

Optou-se pelo segundo método neste trabalho apesar de ser o que incorpora mais fatores de erro, por ser mais adequado para verificar se a posição dos pontos de quadratura é adequada. Deve notar-se que do aumento do número de pontos resultará que o erro tenderá a desaparecer. Deverá ter-se em conta este fator ao apreciar os resultados obtidos e apresentados no capítulo seguinte.

5.2. Modelo da força proporcional à distância sobre a superfície

Este modelo resulta da *conjetura 1* (/p.21) que considera a força de *Coulomb* como resultante da “*interação entre dois pontos, proporcional ao quadrado da distância mais curta entre eles, sobre a superfície estrela*”.

Para este modelo de simulação foi criado um algoritmo, cujo script principal se encontra no Anexo III e a totalidade dos script e dados estão disponíveis no repositório indicado em [31]. Para este algoritmo é necessário definir um conjunto de parâmetros operacionais, bem como aferir a sua eficiência. Os parâmetros operacionais a definir são, o fator de convergência λ introduzido anteriormente na expressão (29), o fator ψ para o critério de paragem (como indicado anteriormente é definido para cada modelo) e o número máximo de iterações admissível. A aferição da eficiência do algoritmo foi feita aplicando-o à parametrização da esfera unitária, para a qual se pode comparar com resultados publicados [1, 11, 16, 17, 18].

5.2.1. Validação do modelo na superfície esférica

Do nosso conhecimento, não se encontraram resultados publicados relativos à aplicação da interação de *Coulomb* sobre pontos na superfície de um domínio estrela. Assim, para avaliar a eficiência do algoritmo construído e validá-lo contra resultados publicados, aplicámos o mesmo à esfera. Isto requereu alguns ajustes ao algoritmo de acordo com a origem dos resultados utilizados para comparação.

Em [11, 16, 17, 18] são apresentados resultados de simulações que calculam a energia potencial de um sistema de pontos sobre uma superfície esférica unitária quando atingida uma configuração metaestável⁵, como forma de resolução do chamado “*problema de Thomson*”. A energia potencial do sistema de n pontos com interação de *Coulomb* é dada por

$$U_{(r_1, \dots, r_n)} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|r_i - r_j|} \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (35)$$

As distâncias entre pontos são calculadas linearmente segundo a corda (\overline{AB}) e a força da interação é calculada com base no quadrado destas distâncias.

Isto obriga a alterações no algoritmo definido em 4.3. (p.20) incluído no Anexo I;

1. Alterar a definição do raio ρ e respectivas derivadas da parametrização.
2. Converter a distância sobre a superfície em distância linear. (utilizou-se a expressão trigonométrica que relaciona a corda com o arco de círculo).
3. Calcular a energia potencial do sistema de pontos utilizando a expressão apresentada em (35).

A comparação foi feita com conjuntos iniciais de pontos criados segundo o Método 2 referido na página 33 e com números de pontos utilizados pelos trabalhos citados.

Os resultados desta comparação são apresentados na Tabela 4, as pequenas discrepâncias terão origem sobretudo no número máximo de iterações N , também no fator de convergência λ e no critério de paragem.

Tabela 4 - Energia potencial de conjuntos de pontos na esfera unitária. PBD são pontos do algoritmo deste trabalho comparados com resultados retirados da bibliografia.

Número de pontos	16	32	46	72	116	128	162
<i>PBD</i>	92.912 78	412.322 29	886.181 37	2255.008 48	6038.850 27	7393.282 96	11984.685 38
<i>Altschuler [16]</i>		412.261 27		2255.001 19			11984.551 43
<i>Pérez-Garrido [17]</i>					6038.815 59	7393.007 44	
<i>Bondarenko [11]</i>	92.912 50	412.261 30	886.168 70				

Em [1], *Araújo e Serranho* apresentam resultados do comprimento de aresta e área, sobre a superfície da esfera de triângulos *Delaunay* criados a partir da distribuição de pontos *quasi-equidistant points* (QEP) criados pelo método por eles proposto. Para obter as distribuições de pontos QEP, *Araújo e Serranho* utilizam a interação de *Coulomb* calculando a distância entre dois pontos pela corda (\overline{AB}).

⁵ Estado metastável é um estado de equilíbrio de um sistema dinâmico diferente do estado de mínima energia.

Para este caso o único ajuste introduzido no algoritmo, deste trabalho, foi a alteração do raio como referido no exemplo anterior, optando por manter o cálculo da força utilizando a distância à superfície. Assim as eventuais diferenças de resultados terão sobretudo origem na forma de calcular a força de interação. Em [1], a força é inversamente proporcional ao quadrado do comprimento da corda entre dois pontos, enquanto neste trabalho a força é inversamente proporcional ao quadrado do comprimento do arco entre dois pontos.

Os resultados da comparação são apresentados nas tabelas seguintes, os algoritmos e os resultados do cálculo encontram-se no repositório indicado em [31], na pasta “Modelo 0”.

As simulações neste caso foram efetuadas sobre conjuntos de pontos iniciais, gerados aleatoriamente pelo método 2 referido em 5.1.b.

Tabela 5 - Comparação de distância média $\bar{d}\Delta$ das arestas e área média A_m para a triangulação de Delaunay obtida. Os valores de QEP são retirados de [1]. Os valores PBD são deste trabalho. O método de cálculo das áreas é diferente.

	n = 50	n = 100	n = 200	n = 400	n = 800
$\bar{d}\Delta$					
QEP	0.5430	0.3843	0.2711	0.1914	0.1352
PBD	0.5430	0.3835	0.2716	0.1915	0.1372
σ QEP	0.0363	0.0281	0.0175	0.0110	0.0073
σ PBD	0.0363	0.0248	0.0204	0.0117	0.0156
A_m					
QEP	0.1309	0.0641	0.0317	0.0157	0.0078
PBD	0.1260	0.0629	0.0314	0.0157	0.0078
σ QEP	0.0038	0.0019	0.0010	0.0004	0.0002
σ PBD	0.0034	0.0018	0.0011	0.0005	0.0005

Tendo em conta a semelhança entre os resultados obtidos e os resultados publicados, para os mesmos números de pontos, considera-se ter ficado validado o algoritmo criado para o modelo da força proporcional à distância sobre a superfície, no caso da esfera.

5.2.2. Cálculo da distância entre pontos sobre a superfície estrela

Em geral os cálculos efetuados pelo algoritmo criado têm precisão de máquina. No entanto o cálculo da distância entre dois pontos na superfície estrela resulta de um processo de integração numérica (por, em geral, não ser possível obter o valor exato da distância sobre a superfície) pelo que o resultado obtido é uma aproximação. A distância entre dois pontos é medida sobre a superfície (do domínio estrela), ou seja, às arestas definidas pelo processo de triangulação *Delaunay* é atribuído o comprimento sobre a superfície calculado pela expressão (22).

O método de integração numérica utilizado é a regra dos trapézios composta que é sensível ao número de intervalos de integração considerados. Por outro lado, um número muito

grande de intervalos de integração cria um peso computacional indesejável. Assim correram-se simulações considerando o domínio estrela “*Almofada*” com 100 pontos considerando 10, 20 e 30 intervalos de integração para avaliar a precisão alcançada.

Foram extraídas listagens de valores do comprimento das arestas da triangulação de *Delaunay* sobre a superfície e do máximo da força tangente. Sobre estes dados, utilizando os valores para $n = 30$ como valores de referência v_r foi calculada a diferença absoluta média e a diferença relativa máxima.

As listagens encontram-se no repositório digital referenciado em [31] e podem resumir-se na tabela seguinte.

Tabela 6 - Resultados da diferença absoluta e diferença relativa para distâncias entre dois pontos sobre a superfície e para o máximo da força tangente, para integração por trapézio composto com diferentes intervalos de integração. Considera-se que com 30 intervalos de integração se obtém um valor quase exato.

	$\check{\Delta}$		$\max\ \vec{F}_{\vec{B}}\ $	
	$\bar{\epsilon} = v_r - v_{aprox} $	$\eta_{max} = \left \frac{v_r - v_{aprox}}{v_r}\right $	$\bar{\epsilon} = v_r - v_{aprox} $	$\eta_{max} = \left \frac{v_r - v_{aprox}}{v_r}\right $
$v_{r=30}, v_{aprox=10}$	0.1361 %	1.0550 %	1.3103 %	0.3899 %
$v_{r=20}, v_{aprox=10}$	0.1191 %	0.8658 %	1.1031 %	0.3239 %

Face aos resultados obtidos, com diferença relativa de 1.0% no comprimento médio das arestas e 0.4% no valor da força tangente máxima, considerou-se adequado efetuar as simulações com 10 intervalos de integração numérica, para limitar o custo computacional.

Deve, no entanto, notar-se que se assume ser a distância mais curta entre dois pontos na superfície estrela definida pelo mapeamento sobre esta, do arco de grande círculo entre pontos correspondentes na esfera, como indicado na Figura 5, (p. 25) o que em geral não pode ser verificado.

5.2.3. Cálculo da área dos triângulos de Delaunay

A área dos triângulos de *Delaunay* sobre a superfície estrela é outro valor cujo cálculo exato não é possível. Na esfera conhecendo o comprimento dos arcos que são arestas de um triângulo esférico é possível utilizando a lei esférica dos cossenos calcular as áreas exatas dos triângulos esféricos.

Para as superfícies estrela não existe, em geral e tanto quanto sabemos, geometria aplicável. Assim optou-se por calcular a área de triângulos planos considerando os comprimentos aproximados de arestas, medidos sobre a superfície pelo algoritmo e utilizando a fórmula de

Héron. Com o aumento do número de triângulos, a soma das suas áreas aproxima assintoticamente a área real da superfície estrela.

5.2.4. Fator de convergência e critério de paragem

Não tendo conhecimento de quaisquer trabalhos publicados com referências a interação de *Coulomb* sobre a superfície de domínios estrela, adotou-se como hipótese de trabalho o conceito de que a interação se processaria de forma similar ao que acontece na esfera unitária.

Este trabalho foi desenvolvido inicialmente sobre a superfície estrela “*Almofada*”, em relação à qual se verificou numericamente que a hipótese não se verificava.

Na esfera estão identificadas diversas configurações de pontos em que se alcança um estado fundamental metaestável como referido em [11, 16, 17] e [1] ilustra que em configurações com outros números e de pontos, o sistema de interação de *Coulomb* sobre a esfera aproxima a estabilidade com valores tendencialmente nulos para a força tangente. Nas configurações estudadas na “*Almofada*” verificou-se o seguinte comportamento do ponto de vista numérico:

- Os métodos apresentam grande sensibilidade à definição dos parâmetros λ e ψ bem como aos seus limiares de aplicação.
- Os valores dos parâmetros λ e ψ condicionam a distribuição final de pontos.
- Não existe um estado fundamental estático, mantendo-se o modelo perpetuamente em movimento.
- O valor do máximo da força tangente, $\max\|\vec{F}_B\|$, não tende para 0, mantendo-se a variar dentro de um intervalo de valores dependente do número de pontos.

Admitindo que um valor menor do máximo da força tangente corresponde a uma melhor distribuição de pontos, realizaram-se simulações para conjuntos de 50 e 100 pontos até às 100000 iterações salvaguardando os dados dos conjuntos relativos ao mínimo de $\max\|\vec{F}_B\|$ até às 25000, 50000 e 100000 iterações, as figuras evidenciam os resultados obtidos.

Os conjuntos de pontos obtidos foram utilizados respetivamente como pontos fonte e pontos de colocação para a aproximação do número de condição e da norma L^2 para o campo total $\tilde{u} = u^l + \tilde{u}^s$ como forma de avaliar a qualidade relativa das soluções.

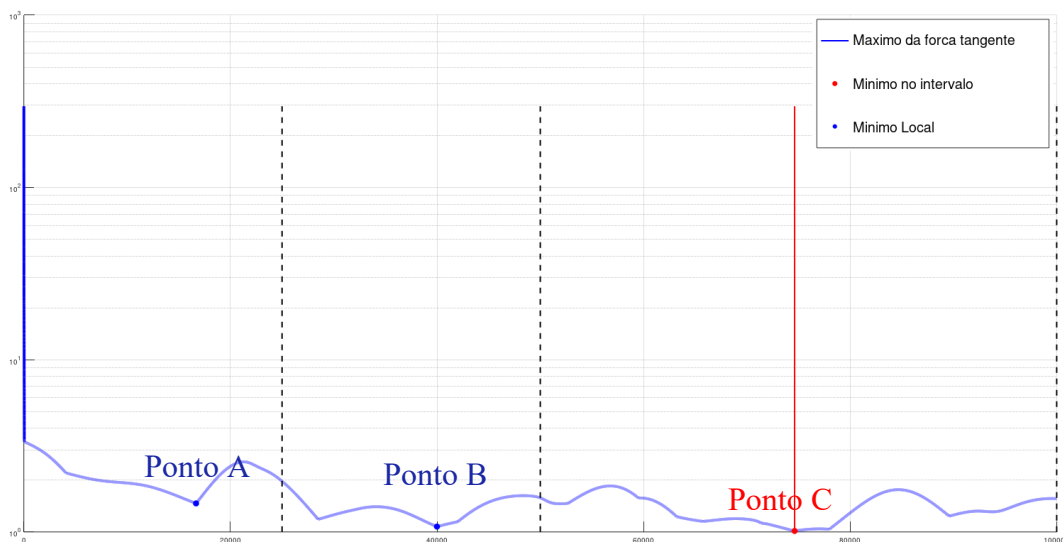


Figura 8 - Gráfico em escala semi logarítmica do máximo da força tangente em 100000 iterações para 50 pontos. O mínimo no intervalo (Ponto C a vermelho) 1.013 é atingido às 74624 iterações. O primeiro mínimo local (Ponto A, a azul) é 1.464 e é atingido às 16674 iterações. O segundo mínimo local (Ponto B, a azul) é 1.074 e é atingido às 40000 iterações. As linhas verticais a tracejado negro marcam 25000, 50000 e 100000 iterações.



Figura 9 - Gráfico em escala semi logarítmica do máximo da força tangente em 100000 iterações para 100 pontos. O mínimo no intervalo (a vermelho) 3.419 é atingido às 23366 iterações. As linhas verticais a tracejado negro marcam 25000, 50000 e 100000 iterações.

Tabela 7 - Resultados de n.º de condição e norma L^2 da solução sobre a fronteira obtida para pares de pontos fonte p_s e pontos de colocação p_c referidos nas legendas das figuras 5 e 6. Ver 5.1.5, (p36).

n.º onda	$k = 0.5$		$k = 1$		$k = 2$	
	n.º condição	norma L^2	n.º condição	norma L^2	n.º condição	norma L^2
pares de pontos fonte e de colocação						
$p_s = A, p_c = D$	28.274	0.40016	23.206	0.57058	12.218	0.96545
$p_s = B, p_c = D$	37.104	0.42824	30.355	0.61165	15.498	1.02770
$p_s = C, p_c = D$	29.689	0.38445	24.080	0.55584	12.000	0.98427

Os resultados obtidos indicam não existir diferença relevante na qualidade dos resultados obtidos com um número de iterações muito superior.

5.2.4.1. Fator de convergência

O fator de convergência λ destina-se a possibilitar uma convergência suave do modelo que produza uma boa distribuição de pontos. Genericamente existem quatro fatores que condicionam a organização do sistema de pontos: o formato da superfície, a posição inicial, o número de pontos e o valor da interação (força) entre pontos. No entanto só neste último podemos atuar, pelo que o fator λ é sobre ele aplicado, como indicado na expressão (29).

O fator escolhido deve garantir um compromisso entre possibilitar uma solução de pontos bem distribuídos e minorar o tempo de cálculo. Um valor fixo ao longo de todas as iterações dificilmente alcança estes dois critérios pelo que é adequado criar um fator que evolua ao longo de estas. Em [1], *Araújo e Serranho* utilizam um fator de dois níveis baseado na distância nominal entre dois pontos o que é adequado pois esta é uma resultante do número de pontos, criando assim uma constante que age sobre a força considerando o número de pontos. Nas superfícies em apreciação essa abordagem não é possível pelo que se tomou a opção de considerar um *fator de convergência* λ em três níveis. O primeiro provoca uma redução rápida das forças, aproximando o sistema da zona de “estabilidade”, o segundo origina uma aproximação mais suave trazendo a simulação até ao limiar da zona de estabilidade, o terceiro origina um movimento muito reduzido com o objetivo de otimizar o sistema de pontos e minorar os conflitos entre pontos que provoquem divergência no sistema. Os fatores são os indicados na tabela 5, N é o número de pontos do sistema e os valores de $V1$ e $V2$ estão também indicados na Tabela 8.

$$\lambda = \begin{cases} \frac{\lambda_A}{\sqrt{N} \cdot \max\|\vec{F}_{\vec{B}}\|} & \max\|\vec{F}_{\vec{B}}\| > V1 \\ \frac{\lambda_B}{N^{1.5}} & V1 \geq \max\|\vec{F}_{\vec{B}}\| > V2 \\ \frac{\lambda_C}{N^{1.5}} & V2 \geq \max\|\vec{F}_{\vec{B}}\| \end{cases} \quad (36)$$

A tabela com os valores λ para os diferentes conjuntos de pontos e diferentes superfícies estrela e com os valores para $V1$ e $V2$ foi obtida experimentalmente pelo método de tentativa e erro e é a seguinte,

Tabela 8 - Parametrização dos pontos de mudança de fator de convergência λ .

N	50	100	200	400	800
<i>Almofada</i>					
λ_A	0.19	0.19	0.19	0.19	0.19
λ_B	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
λ_C	0.005	0.005	0.0025	0.025	0.05
V1	3.75	7.5	13.9	40	80
V2	3.375	5.25	10.5	35	70
<i>Bolota</i>					
λ_A	0.19	0.19	0.19	0.19	0.19
λ_B	0.175	0.175	0.175	0.175	0.175
λ_C	0.005	0.005	0.005	0.005	0.005
V1	3.75	7.5	15	30	80
V2	3.375	6.75	13.5	27	72

A escolha dos pontos em que se muda de valor do fator pode condicionar a evolução do modelo, especialmente em configurações com grande instabilidade. Como exemplo, no sistema de 200 pontos na “Almofada”, uma pequena mudança do valor de V1 (de 13.9 para 15), resulta em conjuntos finais de pontos distintos. O primeiro cenário (V1 = 13.9) alcança o fator de paragem com mínimo de 9.515 para o máximo da norma da força tangente e o segundo (V1 = 15.0) com mínimo de 11.287 para o máximo da norma da força tangente. A eficiência relativa destes diferentes conjuntos de 200 pontos pode comparar-se utilizando o mesmo sistema de 100 pontos obtido anteriormente como pontos fonte.

Tabela 9 - Resultados de n.º de condição e norma L^2 da solução sobre a fronteira obtida para pares de pontos fonte p_s e pontos de colocação p_c referidos. Ver 5.1.5, (p.36).

n.º onda	$k = 0.5$		$k = 1$		$k = 2$	
	n.º condição	norma L^2	n.º condição	norma L^2	n.º condição	norma L^2
$p_s = 100, p_c = 200$						
Primeiro cenário	59.662	0.19303	50.014	0.27940	26.972	0.48731
Segundo cenário	75.837	0.18972	63.551	0.27334	34.052	0.46958

Como se pode verificar o sistema de 200 pontos com menor valor para a norma do máximo da força tangente remanescente produz resultados com número de condição mais baixo embora da mesma ordem de grandeza. No entanto os resultados do erro dado pela norma L^2 da solução sobre a fronteira são similares.

5.2.4.2. Fator de paragem

No modelo existem variáveis relacionadas com a distância entre pontos que podem servir de suporte ao critério de paragem, resultantes da distância entre pontos.

Uma variável é a da força máxima aplicada aos ponto em cada iteração. *Araújo e Serranho* utilizam o valor do máximo da magnitude da força tangente aplicada que origina a paragem do modelo quando inferior a um limiar ϵ .

Outra possível variável é a energia potencial total do sistema, $U = \frac{1}{d}$ utilizada em trabalhos sobre o Problema de Thomson, como, [11, 16, 17, 18].

Optou-se por considerar o valor de $\max\|\vec{F}_B\|$ como fator de paragem ψ , segundo a Tabela 10 abaixo.

Tabela 10 - Valores do fator de paragem ψ na "Almofada" e na "Bolota".

N	50	100	200	400	800
<i>Almofada</i>					
ψ	< 1.50	< 3.50	< 10.00	< 25.00	< 62.50
<i>Bolota</i>					
ψ	< 0.75	< 1.75	< 5.00	< 12.50	< 31.25

Quando $\max\|\vec{F}_B\| > \min(\max\|\vec{F}_B\|)$ e $\min(\max\|\vec{F}_B\|) < \psi$, isto é, quando o valor da norma da força tangente máxima é superior ao mínimo já registado e este é inferior a ψ , o algoritmo inicializa um contador de iterações em divergência, isto é, um contador de iterações sucessivas em que a norma da força máxima é superior ao mínimo já alcançado. Quando alcançado o valor definido para o máximo deste contador ocorre a paragem da iteração. Neste trabalho, o valor para este contador foi definido como 2500.

5.2.4.3. Número de iterações

No decurso do trabalho correram-se simulações para 2500, 25000, 100000 e 250000 iterações. Os resultados que se apresentam no ponto 5.2.5 resultam de simulações programadas até à iteração 25000, podendo ter-se interrompido mais cedo por ação do contador referido em 5.2.4.2. Nestas simulações a paragem deu-se conforme indicado na tabela abaixo.

Tabela 11 - Número de iterações para as simulações de "Almofada" e "Bolota" para os vários conjuntos de pontos.

Nº de Pontos	n = 50	n = 100	n = 200	n = 400	n = 800
<i>Almofada</i>					
$\max\ \vec{F}_B\ $	1.464	3.419	9.515	24.767	59.947
Iterações	16674	23366	16025	4032	13094
Tempo (s)	834.3	4355.8	22526.9	23507.5	396537.1
<i>Bolota</i>					
$\max\ \vec{F}_B\ $	0.482	1.575	3.593	10.886	23.199
Iterações	20313	24999	21843	24999	22280
Tempo (s)	860.3	3412.3	19280.6	73923.9	291079.2

Como referido em 5.1.4, (p.35) neste modelo de interação de *Coulomb* a força tangente restante é muito superior ao que acontece na esfera unitária. Das dez simulações referenciadas, duas alcançaram o mínimo com um número baixo de iterações e duas outras terminaram estando ainda em convergência, mas com $\max\|\vec{F}_B\|$ inferior a ψ .

5.2.5. Resultados numéricos

5.2.5.1. Domínio estrela “Almofada”

Começamos por apresentar imagens com a distribuição de pontos sobre a superfície da “Almofada”, imagens com triângulos de *Delaunay* e imagens com as arestas da triangulação.

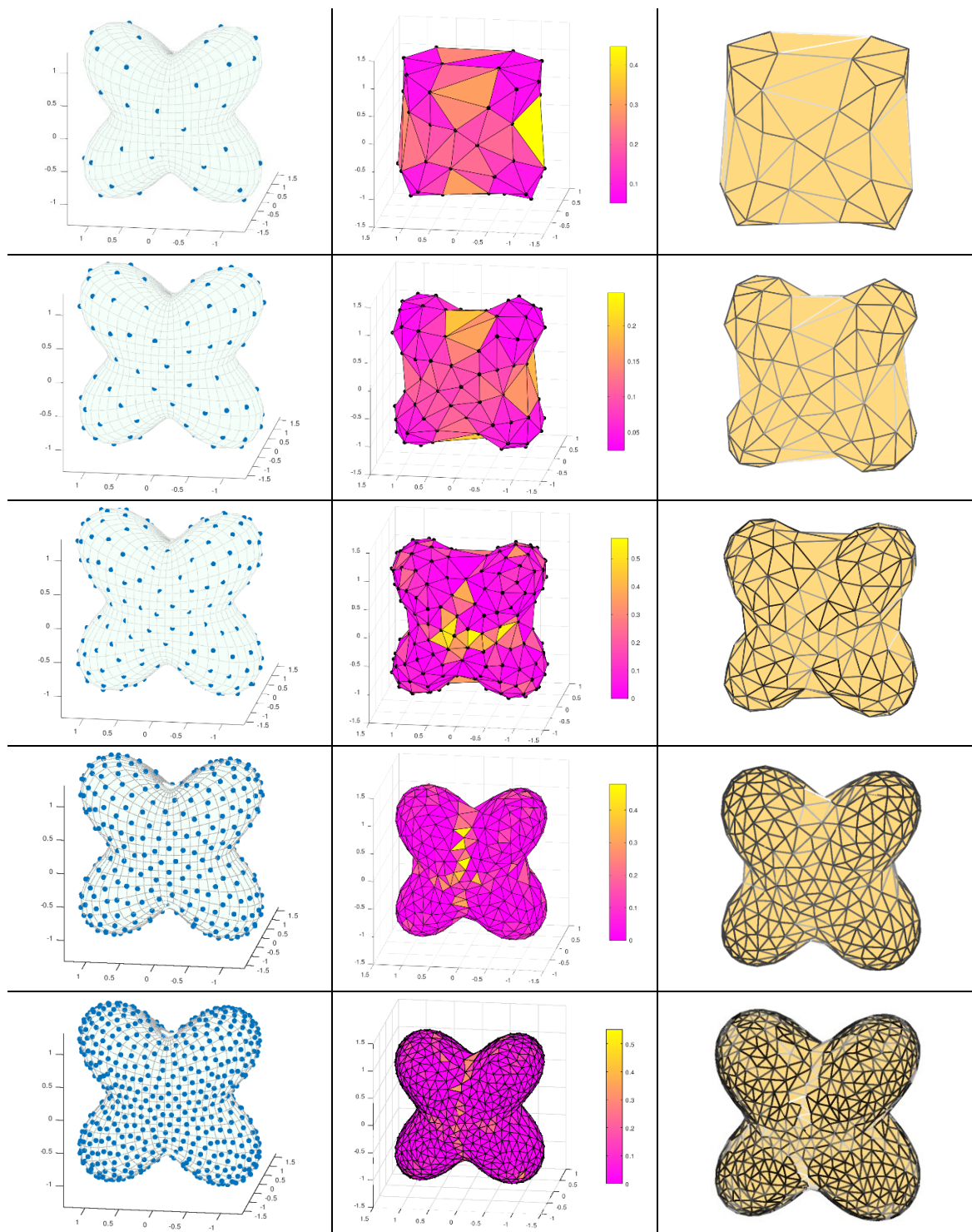


Figura 10 - PQE, Áreas Delaunay e comprimento de arestas na "Almofada" para 50, 100, 200, 400 e 800 pontos. Cores mais claras representam valores maiores em ambos os casos.

É notório que à medida que o número de pontos aumenta, os pontos cobrem melhor a superfície do obstáculo, tendendo para o que é esperado: menor variância das distâncias entre pontos adjacentes, maior concentração em torno da distância média e concentração mais uniforme de pontos sobre a superfície como pode ser verificado nas figuras 11, 12 e 13. Pode verificar-se que tanto os triângulos de maior área, como as arestas de maior comprimento se situam nas partes concavas da superfície onde o método de reconstrução por triangulação é menos eficaz, com exceção do exemplo de 800 pontos onde o fenómeno se altera. Espera-se que com um número de pontos maior o fenómeno possa ser ainda mais minorado, mas não tivemos capacidade computacional para obter os resultados em tempo útil para este trabalho. Deve notar-se que o comprimento desenhado das arestas é nessas localizações menor que o comprimento à superfície o que pode ser deduzido comparando a imagem da triangulação na coluna central com a imagem do sistema de pontos na coluna esquerda. Na tabela 12 são sumarizadas várias métricas sobre a distância entre pontos para a distribuição de pontos obtida após o critério de paragem.

Tabela 12 – Várias métricas de distâncias entre pontos na "Almofada".

Na tabela, \bar{d} representa a distância sobre a superfície entre dois pontos que são vértices da triangulação de Delaunay, apresentando-se resultados para o mínimo, a média, o máximo, o desvio padrão e o coeficiente de variação. A_{Δ} é a área do triângulo de Delaunay. Apresentam-se resultados para o mínimo, a média, o máximo, o desvio padrão e o coeficiente de variação. A_T é o total das áreas dos triângulos de Delaunay e é uma aproximação à área total da superfície estrela.

Nº de Pontos	n = 50	n = 100	n = 200	n = 400	n = 800
min \bar{d}	0.30985	0.19990	0.15016	0.10572	0.07779
$\bar{\bar{d}}$	0.60914	0.42617	0.30342	0.21965	0.15070
max \bar{d}	1.27130	0.90980	0.76291	0.69732	0.42487
$\sigma_{\bar{d}}$	0.21297	0.13911	0.10435	0.07997	0.04669
$\sigma_{\bar{d}}/\bar{\bar{d}}$	0.34962	0.32642	0.34391	0.36408	0.30982
min A_{Δ}	0.05093	0.02289	0.01210	0.00643	0.00339
$\bar{\bar{A}}_{\Delta}$	0.14678	0.07457	0.03693	0.01845	0.00923
max A_{Δ}	0.42647	0.24139	0.16611	0.08174	0.05021
$\sigma_{A_{\Delta}}$	0.07623	0.04246	0.02108	0.01009	0.00475
$\sigma_{A_{\Delta}}/\bar{\bar{A}}_{\Delta}$	0.51936	0.56937	0.57083	0.54715	0.51523
A_T	14.083	14.626	14.627	14.722	14.731

A distribuição dos valores da distância entre pontos tem grande amplitude. O coeficiente de variação é elevado e sempre superior a 0.3. O afastamento entre o valor da média e o valor do mínimo situa-se na vizinhança de $1,5\sigma$, o que define uma distribuição com cauda direita comprida, como se pode verificar no diagrama de extremos e quartis na figura 11 no qual amplitude interquartil (AIQ) apresenta uma excentricidade para a direita que tende a desaparecer com o aumento do número de pontos. A cauda esquerda é sempre de amplitude in-

ferior a 1,5 AIQ e a cauda direita é sempre superior a 1,5 AIQ, com o número de elementos discrepantes a aumentar significativamente com o aumento do número de pontos.

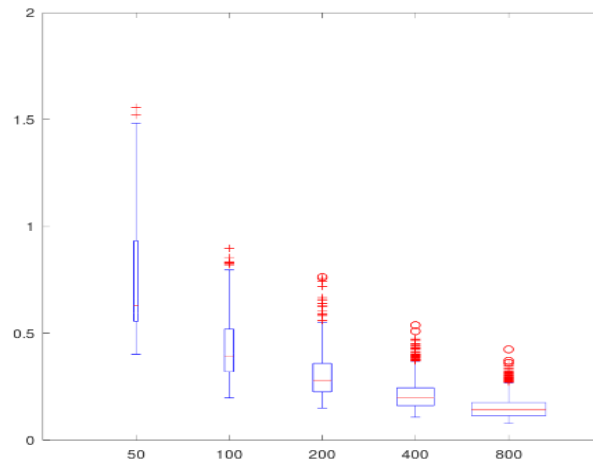


Figura 11 - Diagrama de extremos e quartis de comprimentos de arestas na triangulação sobre a "Almofada".

Devemos aqui recordar que a distância entre pontos vizinhos \check{d} é determinada sobre a superfície como indicado na secção 5.2.2, p.39 e a área dos triângulos de Delaunay A_{Δ} é calculada com base nos valores de \check{d} como indicado na secção 5.2.3, p. 40.

Esta distribuição resulta de a interação não colocar necessariamente pontos nas depressões e a triangulação criar ligações mais curtas, mas que na realidade correspondem a maiores distâncias sobre a superfície.

É um erro de reconstrução inerente ao método utilizado que tende a esbater-se com o aumento do número de pontos como ilustram as imagens apresentadas na Figura 10, em que podemos verificar que para 800 pontos as arestas da triangulação de Delaunay com maiores comprimentos sobre a superfície já não estão unicamente concentradas nas zonas concavas, existindo também em zonas convexas. Apresenta-se em seguida, na Figura 11 e Figura 12, histogramas da dimensão das arestas da triangulação de *Delaunay* e histogramas das áreas dos triângulos de *Delaunay*. Verifica-se que a maioria das arestas tem comprimento igual ou menor que a média.

A distribuição dos comprimentos de arestas da triangulação de *Delaunay* (comprimento da distância entre pontos próximos sobre a superfície) no histograma organiza-se por forma a que a maioria das arestas se encontra à esquerda da média, existindo uma cauda comprida à direita, resultante das anomalias da reconstrução da superfície, anteriormente referidas.

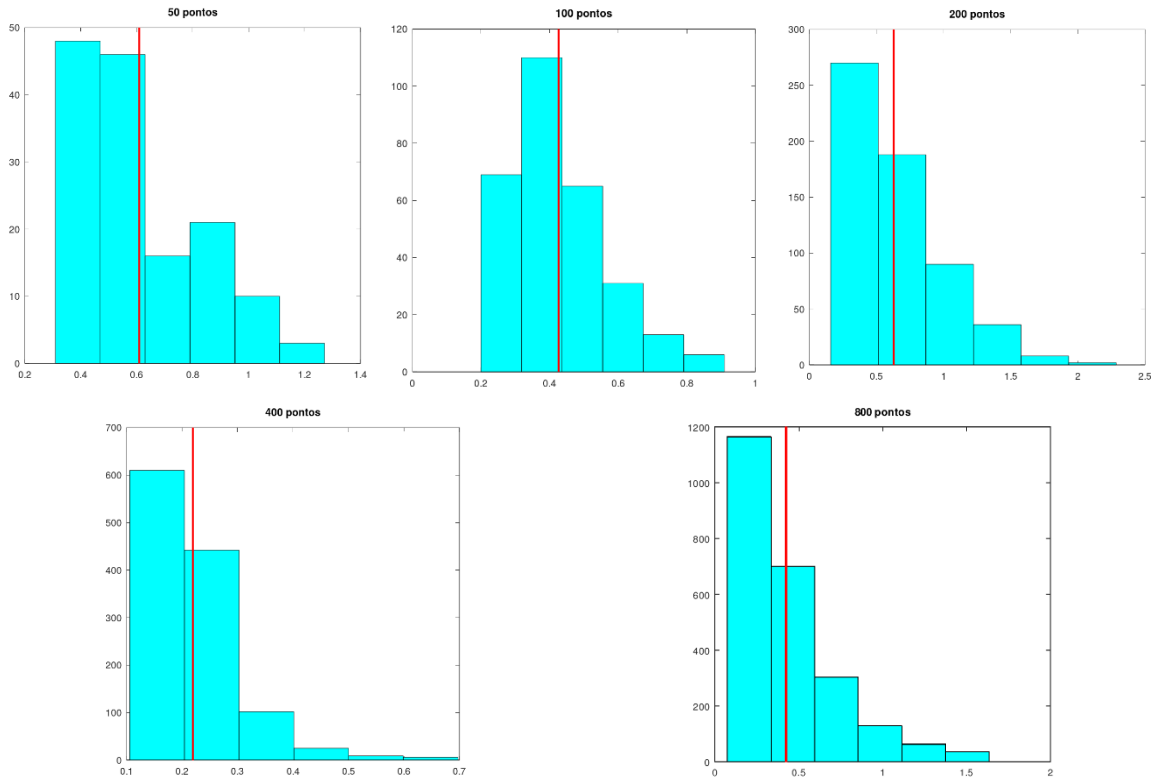


Figura 12 -Histogramas de comprimentos de arestas na triangulação sobre a "Almofada" e diagrama de extremos e quartis dos mesmos dados. A linha vertical vermelha indica o valor de \bar{d} .

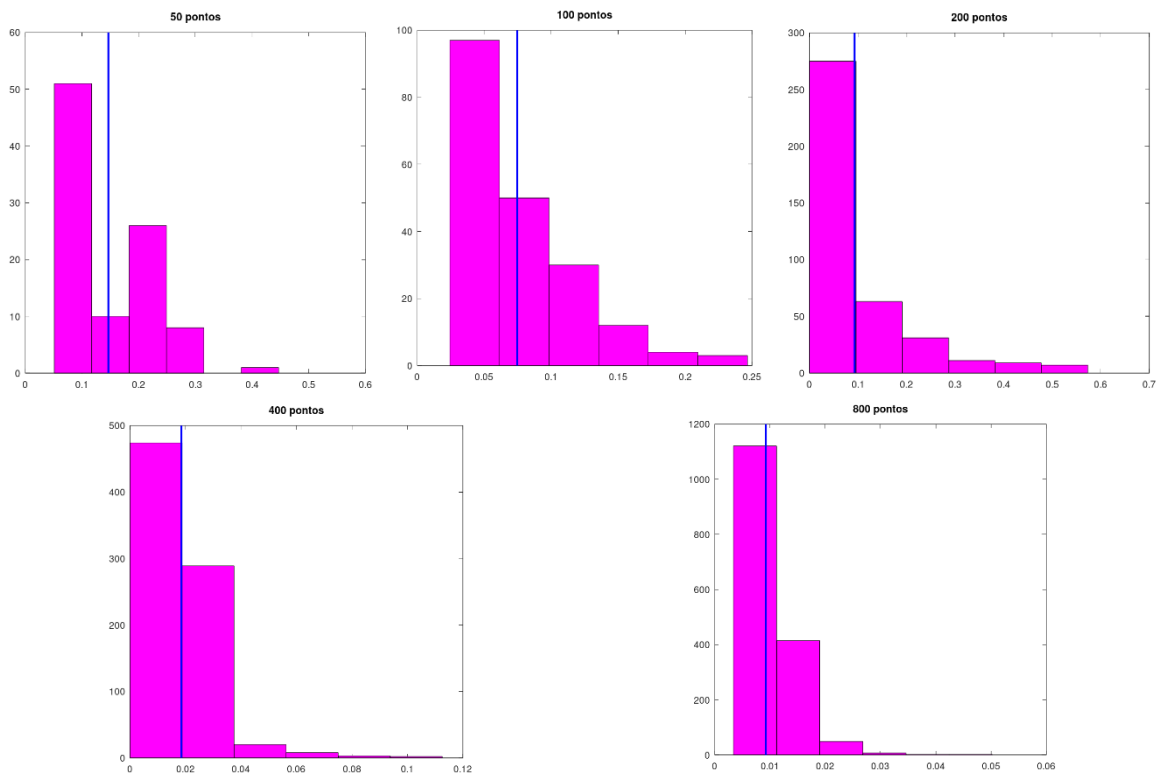


Figura 13 -Histogramas de áreas de cada triângulo na triangulação sobre a "Almofada". A linha vertical azul indica o valor médio da área dos triângulos de Delaunay.

Também na métrica da área dos triângulos a maioria dos valores é igual ou menor que a média, aumentando a proporção com o aumento do número de pontos, sendo que para 800 pontos a média já se encontra no intervalo de menor dimensão do histograma.

O método da força proporcional à distância sobre a superfície consegue a melhor uniformidade de distribuição de pontos, sobre a superfície estrela “*Almofada*”, dos vários métodos que abordamos, como se pode verificar nas imagens abaixo, para 800 pontos.

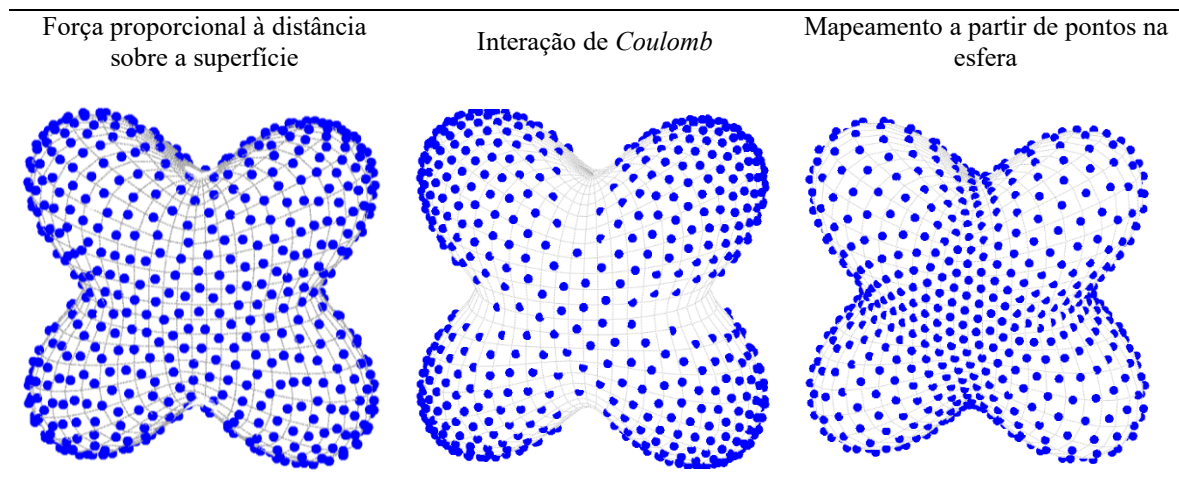


Figura 14 - Distribuição de 800 pontos sobre a superfície estrela “*Almofada*”.

À esquerda pelo método da força proporcional à distância, mostra a melhor uniformidade de cobertura da superfície. Ao centro pelo método da interação de *Coulomb*, os pontos mostram maior densidade nas áreas de maior raio e rarefação nas áreas concavas. À direita pelo método do mapeamento a partir de pontos na esfera, os pontos mostram menor concentração nas áreas de maior raio e maior concentração nas áreas de menor raio.

De vários trabalhos sobre a interação de *Coulomb* sobre pontos na superfície da esfera sabemos que as configurações de menor energia para qualquer número de pontos são as que resultam de pentágonos, hexágonos e heptágonos [13, 14].

Tabela 13 - Distribuição do número de ligações por ponto após triangulação de Delaunay, para 800 pontos, em três métodos de criação de conjuntos de pontos sobre a superfície estrela “*Almofada*”.

Número de ligações de cada ponto	4	5	6	7	8	≥ 9
Força proporcional à distância sobre a superfície	7	197	408	177	11	
Interação de <i>Coulomb</i>	3	160	501	120	15	1
Mapeamento de pontos a partir da esfera ⁶		43	726	31		

Os métodos de distribuição de pontos sobre a superfície estrela não dão origem a configurações exclusivamente com pentágonos, hexágonos e heptágonos, sendo que o terceiro transfere o que é obtido na esfera para o domínio estrela. Para reconstruir este domínio estrela são possivelmente necessários outros tipos de polígonos.

⁶ Como resulta da esfera é de esperar que a distribuição esteja mais concentrada.

5.2.5.2. Domínio estrela “Bolota”

Começamos por apresentar imagens com a distribuição de pontos sobre a superfície da “Bolota”, imagens com triângulos de *Delaunay* e imagens com as arestas da triangulação.

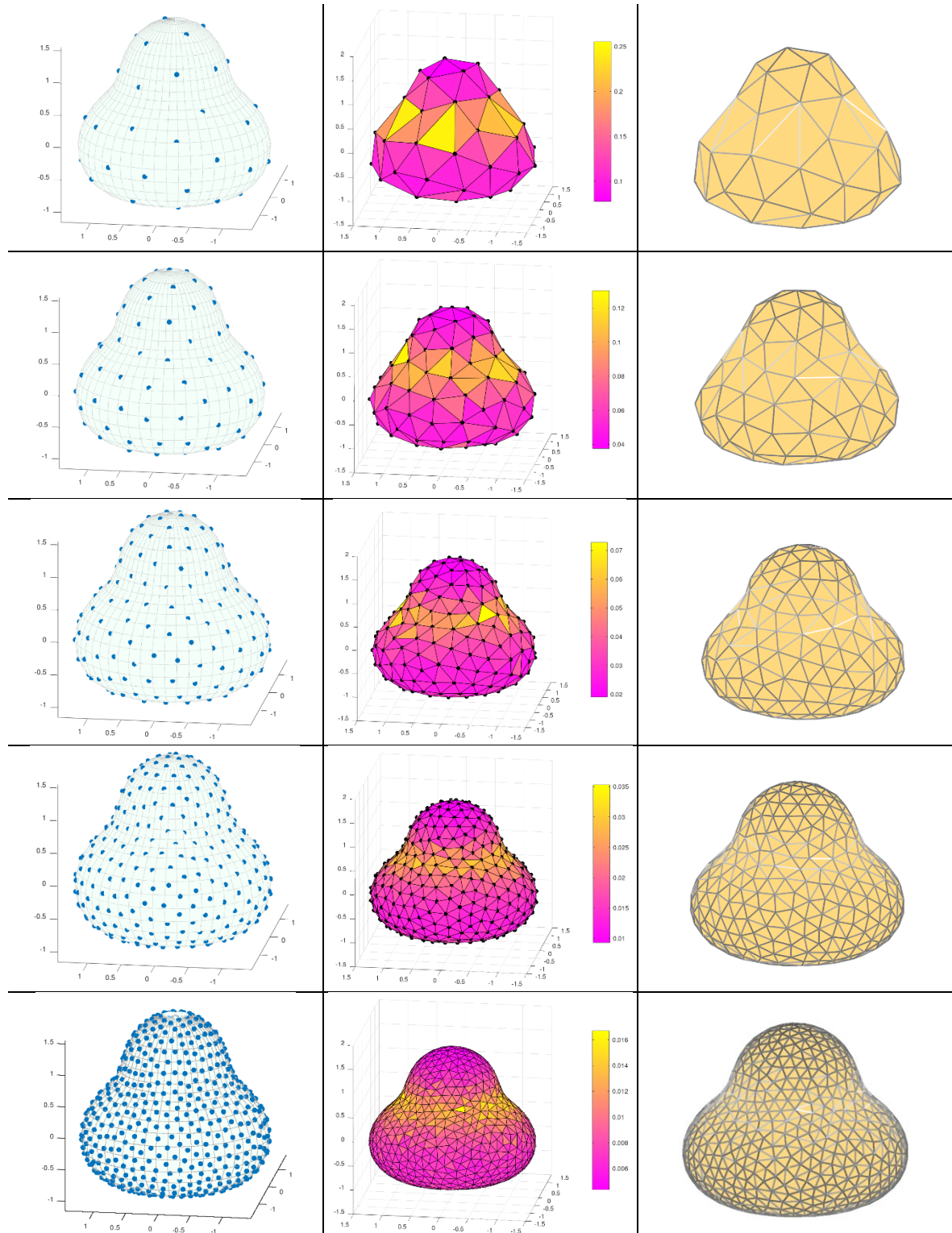


Figura 15 - PQE, Áreas Delaunay e comprimento de arestas na "Bolota", para 50, 100, 200, 400 e 800 pontos. Cores mais claras representam maior dimensão.

É notório que à medida que o número de pontos aumenta os pontos cobrem melhor a superfície do obstáculo, tendendo para o que é esperado: menor variância das distâncias entre pontos adjacentes, maior concentração em torno da distância média e concentração mais uniforme de pontos sobre a superfície.

Seguidamente, na tabela 14 são sumarizadas várias métricas sobre a distância entre pontos.

Tabela 14 – Várias métricas de distâncias entre pontos na "Bolota".

Na tabela, \check{d} representa a distância entre dois pontos que são vértices da triangulação sobre a superfície, apresentando-se resultados para o mínimo, a média, o máximo, o desvio padrão e o coeficiente de variação. A_{Δ} é a área do triângulo de Delaunay. Apresentam-se resultados para o mínimo, a média, o máximo, o desvio padrão e o coeficiente de variação.

A_T é o somatório das áreas dos triângulos de Delaunay e é uma aproximação à área total da superfície estrela.

Nº de Pontos	n = 50	n = 100	n = 200	n = 400	n = 800
min \check{d}	0.40610	0.27125	0.19069	0.12862	0.08849
$\bar{\check{d}}$	0.57056	0.40569	0.28692	0.20220	0.14331
max \check{d}	0.94929	0.70899	0.50594	0.37378	0.26515
$\sigma_{\check{d}}$	0.11843	0.08493	0.05782	0.03812	0.02705
$\sigma_{\check{d}}/\bar{\check{d}}$	0.20757	0.20935	0.20155	0.18855	0.18878
min A_{Δ}	0.07726	0.03749	0.01923	0.00931	0.00435
\bar{A}_{Δ}	0.13607	0.06828	0.03416	0.01707	0.00853
max A_{Δ}	0.25419	0.13019	0.07239	0.03530	0.01669
$\sigma_{A_{\Delta}}$	0.04396	0.02066	0.01018	0.00473	0.00226
$\sigma_{A_{\Delta}}/\bar{A}_{\Delta}$	0.32311	0.30266	0.29815	0.27698	0.26503
A_T	13.063	13.384	13.529	13.594	13.627

Também neste domínio estrela existe uma grande amplitude tanto na dimensão das distâncias entre dois pontos como na área dos triângulos de *Delaunay*. O desvio padrão e o coeficiente de variação são elevados.

Nos histogramas de comprimento de arestas, pode verificar-se que, com o aumento do número de pontos, a distribuição se centra na média, embora se mantenha uma cauda direita comprida. Esse efeito resulta das mesmas causas referidas na secção 5.2.5.1, p.46.

Isso é bem visível nas figuras da triangulação ou do comprimento de arestas, colunas 2 e 3 da p. 51 onde as anomalias surgem na "cintura" da "Bolota" que é uma zona concava e também na zona inferior concava que não é visível nas imagens.

Nas duas páginas seguintes, encontram-se histogramas da dimensão das arestas da triangulação de *Delaunay* e histogramas das áreas dos triângulos de *Delaunay*.

Também nesta superfície estrela se verifica uma distribuição de comprimentos das arestas semelhante à existente na "Almofada" (p.47).

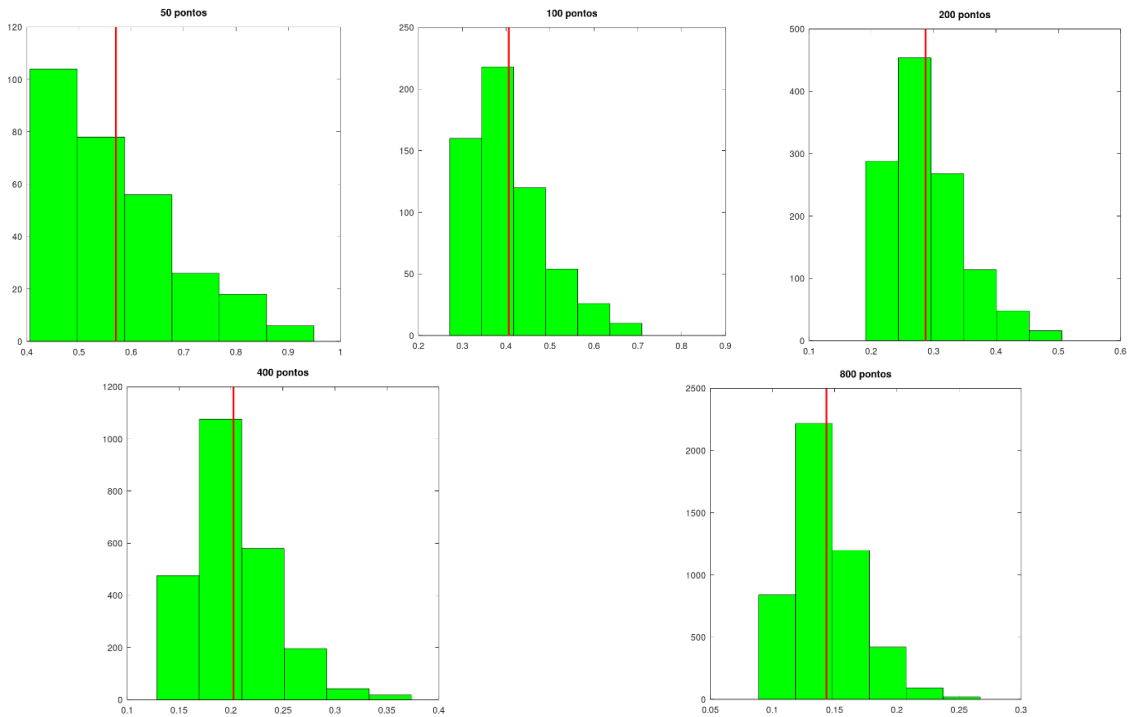


Figura 16 - Histogramas de comprimentos de arestas na triangulação sobre a "Bolota". A linha vertical vermelha indica o valor de \bar{d} .

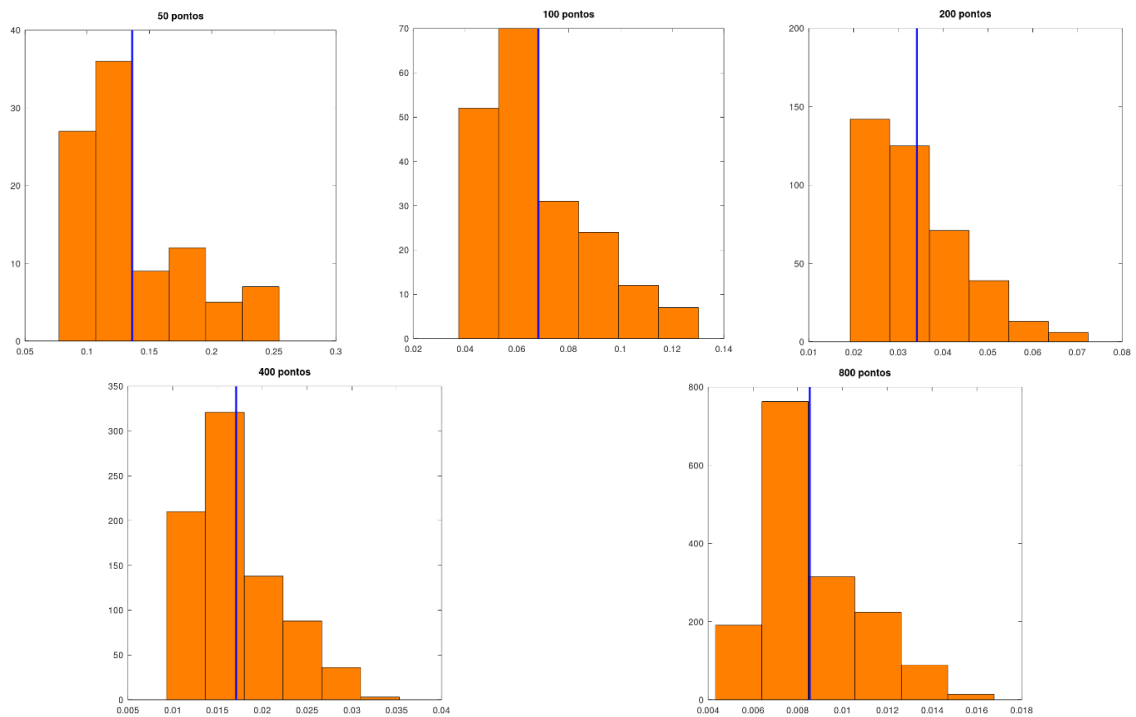


Figura 17 - Histogramas de áreas de cada triângulo na triangulação sobre a "Bolota". A linha vertical azul indica o valor médio da área dos triângulos de Delaunay.

Note-se que neste domínio o histograma de áreas de triângulos para 800 pontos não revela valores discrepantes de dimensão elevada como acontece na "Almofada". Isto pode dever-se ao facto de o volume ser mais regular com o raio ρ a variar apenas em função de θ .

O método da força proporcional à distância sobre a superfície também consegue a melhor uniformidade de distribuição de pontos, sobre a superfície estrela “*Bolota*”, como se pode verificar nas imagens abaixo, para 800 pontos.

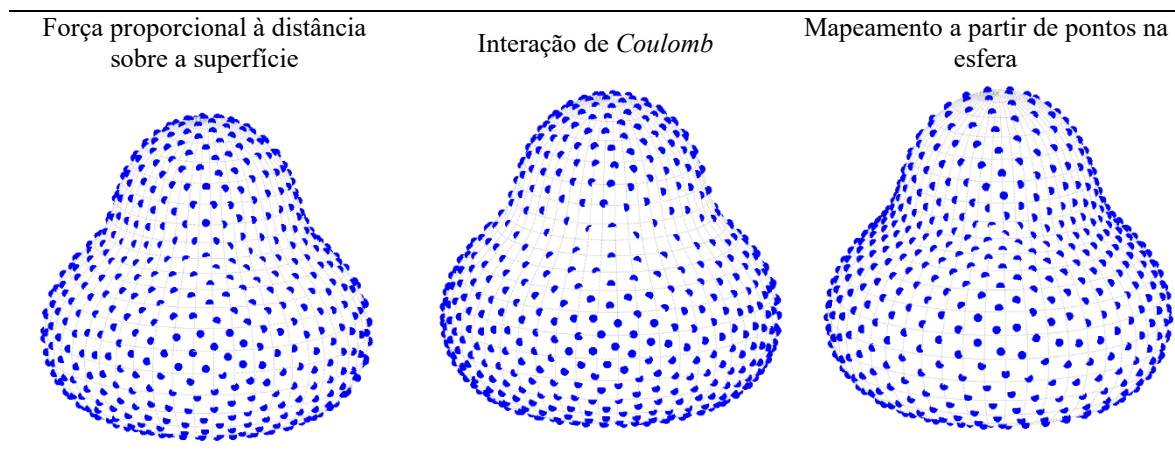


Figura 18 - Distribuição de 800 pontos sobre a superfície estrela “*Bolota*”.

À esquerda pelo método da força proporcional à distância, mostra a melhor uniformidade de cobertura da superfície. Ao centro pelo método da interação de *Coulomb*, os pontos mostram maior densidade nas áreas convexas e rarefação nas áreas concavas. À direita pelo método do mapeamento a partir de pontos na esfera, os pontos mostram menor concentração nas áreas convexas e maior concentração nas áreas concavas.

Da mesma forma que na secção anterior, verificamos que também neste caso a triangulação de Delaunay não consegue gerar apenas pentágonos, hexágonos e heptágonos [13, 14]. O resultado dos vários métodos é apresentado na Tabela 15.

Tabela 15 - Distribuição do número de ligações por ponto, para 800 pontos, em três métodos de criação de um sistema de pontos sobre a superfície estrela “*Bolota*”.

Número de ligações de cada ponto	4	5	6	7	8	≥ 9
Força proporcional à distância sobre a superfície	2	174	459	164	1	
Interação linear de <i>Coulomb</i>		163	494	135	8	
Mapeamento de pontos a partir da esfera ⁷		36	740	24		

Os dois métodos de distribuição de pontos sobre a superfície estrela não conseguem dar origem a configurações com exclusivamente pentágonos, hexágonos e heptágonos. Possivelmente também nesta superfície estrela isso não é possível, dando a reconstrução origem a outros tipos de polígonos, 3 no método da força proporcional à distância sobre a superfície e 8 na interação linear de *Coulomb*.

⁷ Ver nota 6, p.45

5.2.6. Utilização dos conjuntos de pontos obtidos para o MFS

Nesta parte do trabalho utilizam-se os conjuntos de PBD obtidos anteriormente para resolver o problema exterior direto pelo MFS, para três valores de k (0.5, 1, 2) e para uma onda incidente vertical que gera o campo incidente u^i . Os resultados apresentados são o valor do número de condição, a norma L^2 da aproximação ao campo total $\tilde{u} = u^i + \tilde{u}^s$ sobre a fronteira (ver em 4.5, p.28) e gráficos ilustrando os planos de corte da aproximação ao campo difratado u^s , em vista tridimensional e nos três planos $z = 0$, $y = 0$ e $x = 0$.

5.2.6.1. Resultados do MFS na “Almofada”

Os únicos resultados publicados que se encontraram para o número de condição de matrizes da solução para o MFS a partir de pontos na superfície do domínio estrela “Almofada”, são os constantes na tabela 6 de [1].

Tabela 16 - Número de condição para vários valores de número de onda k pelo MFS sobre a “Almofada”, para vários pares de conjuntos de pontos de colocação (p_c) e de pontos fonte (p_s).

Nº Onda	$k = 0.5$	$k = 1$	$k = 2$
$p_s = 50$ e $p_c = 100$	28.274	23.206	12.217
$p_s = 100$ e $p_c = 200$	59.662	50.013	26.972
$p_s = 200$ e $p_c = 400$	116.96	98.860	53.754
$p_s = 400$ e $p_c = 800$	357.23	303.73	166.51

Nesse caso os números de pontos não são exatamente os mesmos. Os resultados agora alcançados estão na mesma ordem de grandeza.

Tabela 17 – Norma L^2 da aproximação ao campo total $\tilde{u} = u^i + \tilde{u}^s$ sobre a fronteira (para condição de Dirichlet homogênea, isto é $u = 0$) calculada numericamente pela regra de quadratura de Gauss-Legendre sobre pontos interiores.

Nº Onda	$k = 0.5$	$k = 1$	$k = 2$
$p_s = 50$ e $p_c = 100$	0.40016	0.57058	0.96544
$p_s = 100$ e $p_c = 200$	0.19303	0.27940	0.48730
$p_s = 200$ e $p_c = 400$	0.08068	0.11450	0.19227
$p_s = 400$ e $p_c = 800$	0.03493	0.04853	0.07851

Como se referiu em 4.5 e 5.1.5, (p.28 e p.36), a norma L^2 nesta situação incorpora erros resultantes da impossibilidade de calcular corretamente a área dos triângulos, destes não serem triângulos sobre a superfície estrela, mas sim triângulos planos unindo três pontos sobre a superfície estrela e, conseqüentemente, os pontos de quadratura utilizados também não estarem sobre a superfície estrela. Não foi possível estimar a totalidade do erro gerado mas este tenderá a dissipar-se com o aumento do número de triângulos.

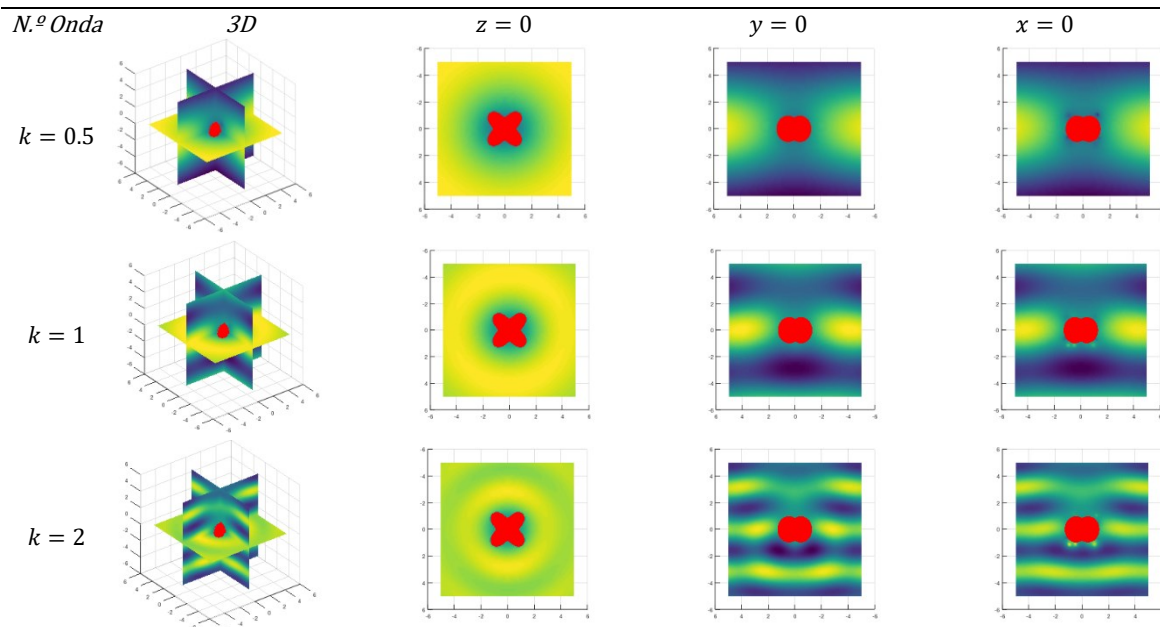


Figura 19 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a "Almofada", para $p_s = 50$ e $p_c = 100$.

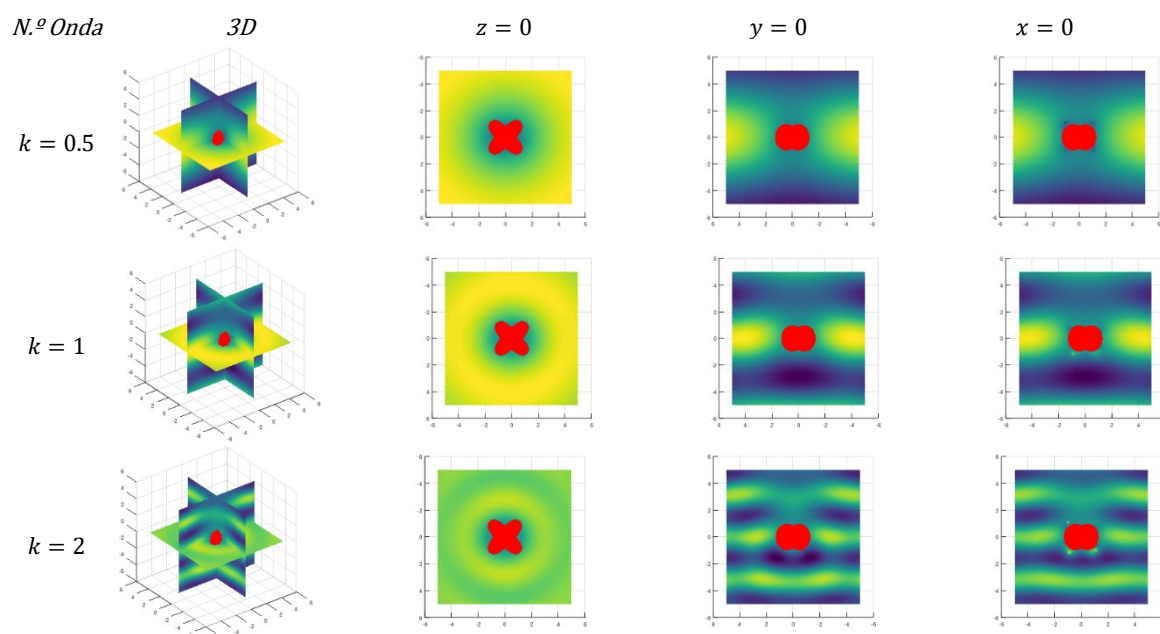


Figura 20 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a "Almofada", para $p_s = 100$ e $p_c = 200$.

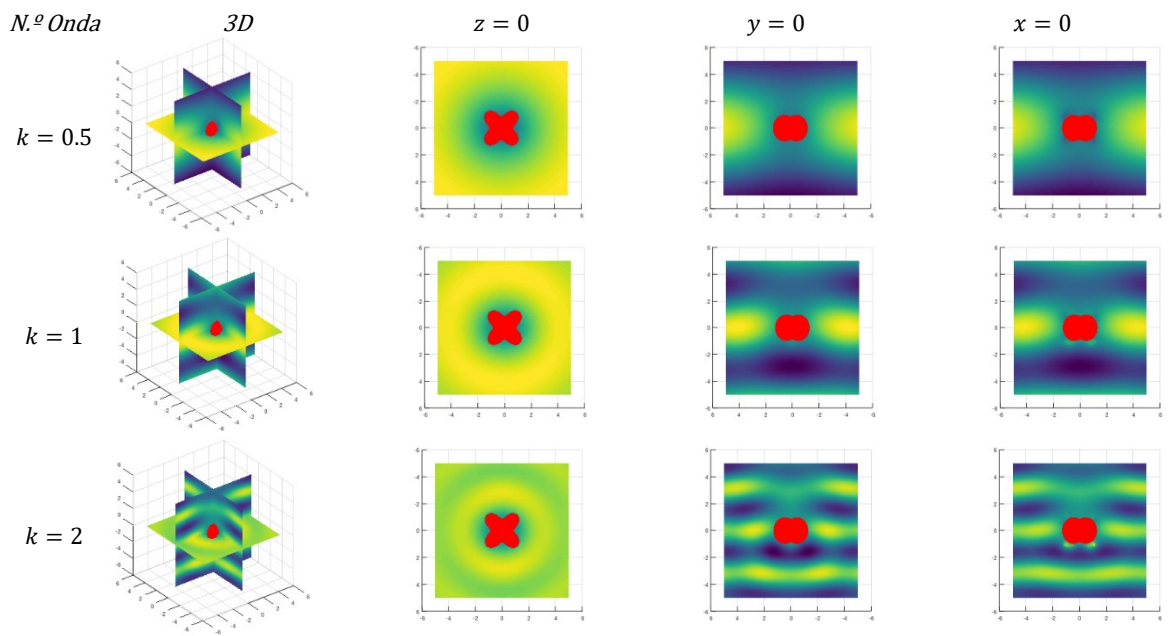


Figura 21 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a “Almofada”, para $p_s = 200$ e $p_c = 400$.

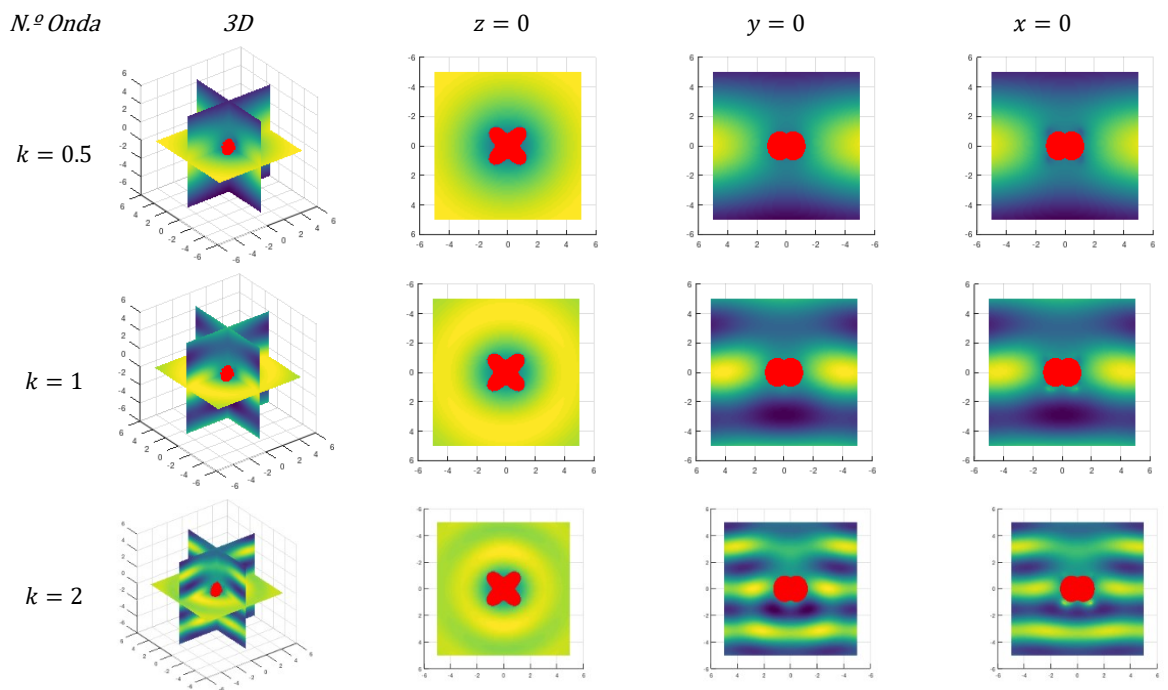


Figura 22 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a “Almofada”, para $p_s = 400$ e $p_c = 800$.

5.2.6.2. Resultados do MFS na “Bolota”

Não se conhecem e não se encontraram resultados publicados para o número de condição de matrizes da solução para o MFS a partir de pontos na superfície do domínio estrela “Bolota”.

Tabela 18 - Número de condição para vários valores de número de onda k pelo MFS sobre a “Bolota”, para vários pares de conjuntos de pontos de colocação (p_c) e de pontos fonte (p_s).

Nº Onda	$k = 0.5$	$k = 1$	$k = 2$
$p_s = 50$ e $p_c = 100$	25.045	19.875	11.112
$p_s = 100$ e $p_c = 200$	47.048	38.077	22.420
$p_s = 200$ e $p_c = 400$	109.288	89.206	53.676
$p_s = 400$ e $p_c = 800$	325.615	267.039	163.143

A única referência conhecida são os resultados deste trabalho para a superfície estrela “Almofada”.

Os resultados alcançados na “Bolota” são da mesma ordem de grandeza.

Tabela 19 – Norma L^2 da aproximação ao campo total $\tilde{u} = u^i + \tilde{u}^s$ sobre a fronteira (para condição de Dirichlet homogênea, isto é $u = 0$) calculada numericamente pela regra de quadratura de Gauss-Legendre sobre pontos interiores.

Nº Onda	$k = 0.5$	$k = 1$	$k = 2$
$p_s = 50$ e $p_c = 100$	0.3602	0.5490	0.9684
$p_s = 100$ e $p_c = 200$	0.1481	0.2242	0.3982
$p_s = 200$ e $p_c = 400$	0.0594	0.0878	0.1502
$p_s = 400$ e $p_c = 800$	0.0251	0.0362	0.0594

Também neste caso, os resultados alcançados são superiores ao que se esperaria obter, mas também aqui se deve ter em conta o referido em 4.5 e 5.1.5, (p.28 e p.36), relativamente a causas de erro incorporadas no modelo. O resultado deve ser avaliado com uma ponderação que pode utilizar os resultados da Tabela 3 na p.37.

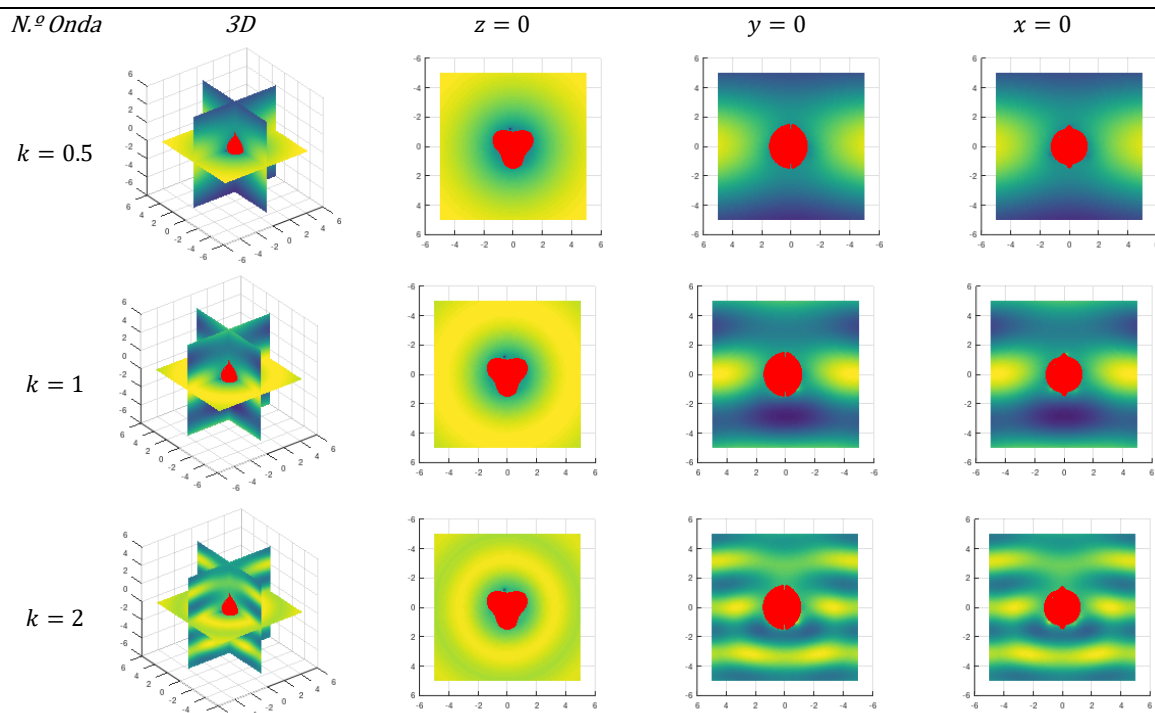


Figura 23 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a “Bolota”, para $p_s = 50$ e $p_c = 100$.

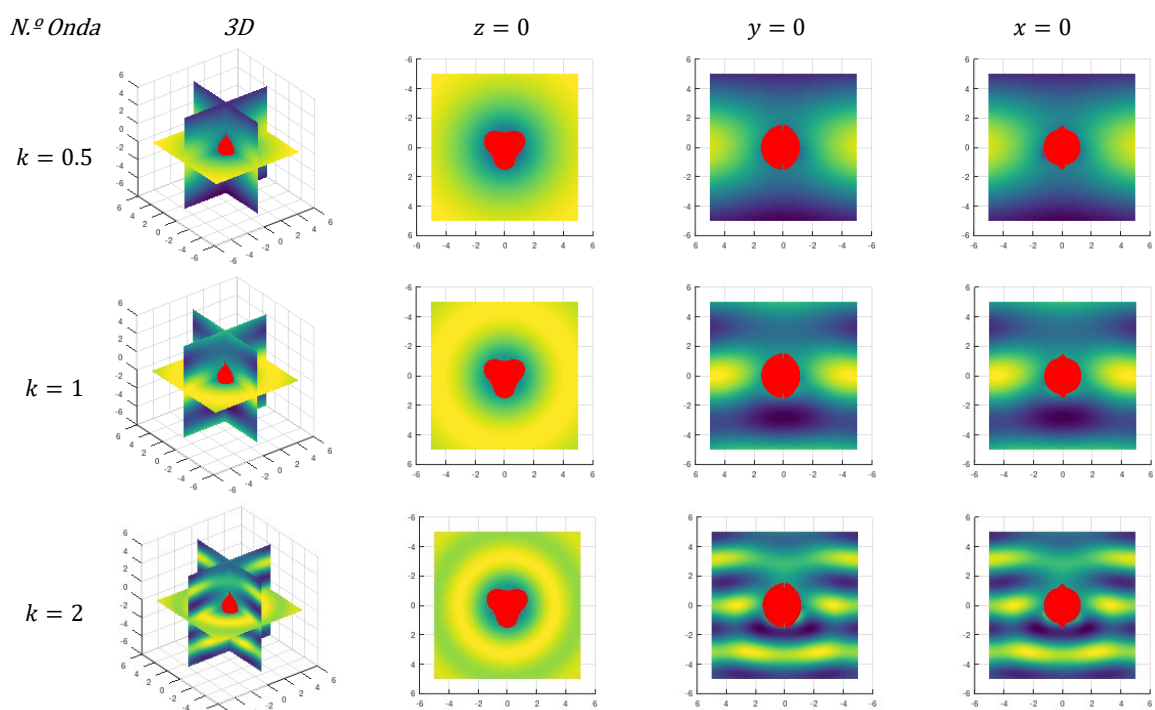


Figura 24 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a “Bolota”, para $p_s = 100$ e $p_c = 200$.

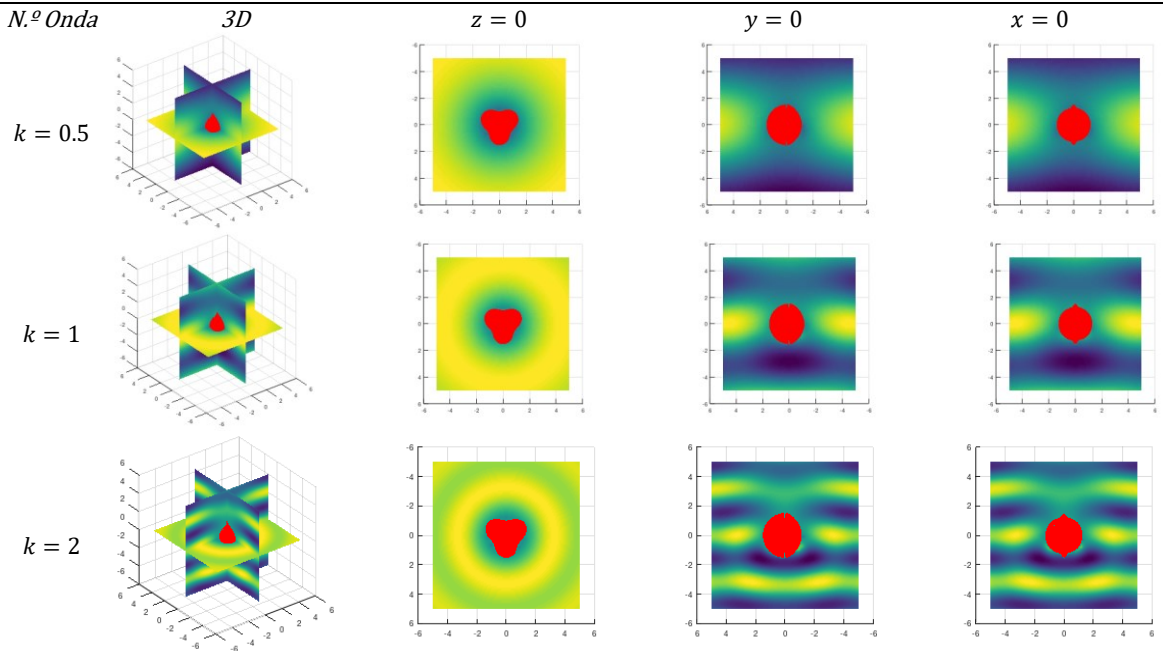


Figura 25 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a "Bolota", para $p_s = 200$ e $p_c = 400$.

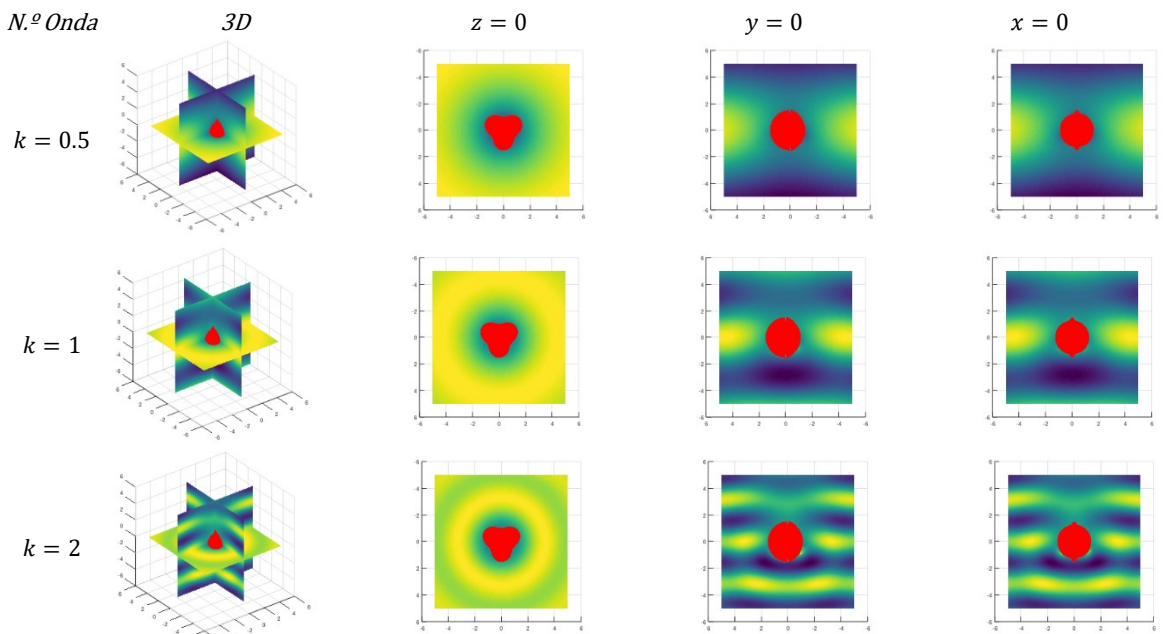


Figura 26 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a "Bolota", para $p_s = 400$ e $p_c = 800$.

5.3. Modelo da força ponderada pela curvatura

Este modelo resulta da *conjetura 2*, p.21. Para este modelo de simulação foi criado um algoritmo, cujo script principal referente ao domínio estrela “*Almofada*” se encontra no Anexo I e a totalidade dos script e dados encontram-se no repositório referenciado em [31].

Como se indicou na secção 4.4 (p.26), este método pretende concentrar mais pontos em zonas de maior curvatura, para aumentar a precisão da aproximação nessas zonas em que a concentração de pontos deve aumentar (ou a malha triangular ser mais fina), em vez de procurar conseguir pontos equidistantes e uniformemente distribuídos (o que procura melhorar o condicionamento do sistema linear).

Para este modelo as distâncias entre pontos ou as áreas de triângulos na superfície não são de interesse, é importante que o modelo gere conjuntos de pontos que originem soluções com precisão e bom condicionamento tendo especial atenção às zonas de maior curvatura.

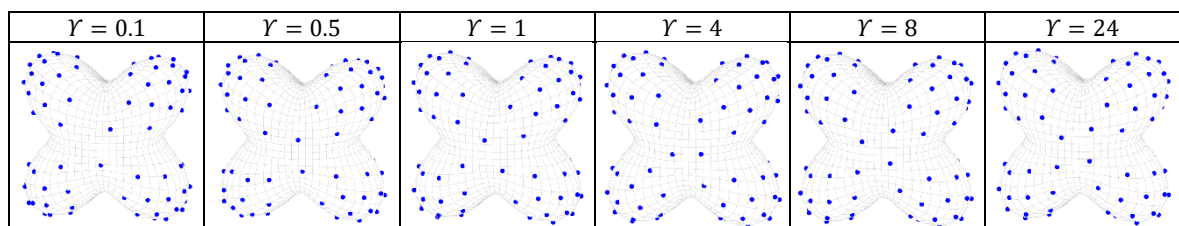
Para este algoritmo é necessário definir um conjunto de parâmetros. Os parâmetros a definir são o fator de convergência λ introduzido na expressão (29), o fator ψ para o critério de paragem e o fator γ de ponderação da curvatura. A expressão (30) passa então a ser formulada como

$$\vec{F}_B = \frac{\vec{\tau}_{AB}}{\left(1 + \frac{|\kappa_B|}{\gamma}\right) \|A - B\|^2}.$$

5.3.1. Fator de ponderação da curvatura

Ensaiou-se para vários valores, tendo obtido o seguinte resultado que confirma que quanto maior γ , menor o efeito da curvatura.

Tabela 20 - Distribuição de 100 pontos na “*Almofada*” pelo método da força ponderada pela curvatura para vários valores de γ .



Optou-se por $\gamma = 0.1$, para se ter um maior efeito da curvatura na ilustração do método.

5.3.2. Fator de convergência

Neste modelo o fator de convergência λ destina-se a dar origem a uma evolução suave do modelo que produza uma boa distribuição de pontos. Este fator é aplicado como indicado na expressão (29). Para obter uma organização suave e controlada do modelo também neste caso se optou por um fator em três níveis, sendo para um dado número N de pontos definido por

$$\lambda = \begin{cases} \frac{0.25}{\sqrt{N} \cdot \max\|\vec{F}_{\vec{B}}\|}, & \max\|\vec{F}_{\vec{B}}\| > 0.1 \cdot N, \\ \frac{0.5}{N^{1.5}}, & 0.1 \cdot N \geq \max\|\vec{F}_{\vec{B}}\| > 0.02 \cdot N, \\ \frac{0.05}{N^{1.5}}, & 0.02 \cdot N \geq \max\|\vec{F}_{\vec{B}}\|. \end{cases} \quad (37)$$

5.3.3. Fator de paragem

Para este modelo o valor para o fator de paragem ψ é definido na Tabela 21.

Tabela 21 - Valores do fator de paragem ψ na "Almofada" e na "Bolota".

N	50	100	200	400	800
<i>Almofada</i>					
ψ	< 0.095	< 0.35	< 1.25	< 3.5	< 9
<i>Bolota</i>					
ψ	< 0.075	< 0.25	< 0.75	< 1.5	< 2.5

Também neste modelo, com as parametrizações dadas, a convergência do valor de $\max\|\vec{F}_{\vec{B}}\|$ não é assegurada. O fator de paragem é um limiar associado a um número máximo de iterações em que o modelo se desorganiza. O algoritmo regista a configuração do sistema de pontos quando o valor de $\max\|\vec{F}_{\vec{B}}\|$ é inferior a ψ , mas só interrompe a interação após 2500 iterações com valores superiores. Se ψ não for alcançado o algoritmo interrompe-se ao atingir as 25000 iterações. Os resultados das simulações encontram-se na Tabela 22.

Tabela 22 -Número de iterações para as simulações de "Almofada" e "Bolota" para os vários conjuntos de pontos.

Nº de Pontos	n = 50	n = 100	n = 200	n = 400	n = 800
<i>Almofada</i>					
$\max\ \vec{F}_{\vec{B}}\ $	0.07574	0.24659	1.2438	3.0688	5.4712
Iterações	24999	24999	15507	12887	9712
Tempo (s)	473.03	559.88	1632.8	4086.2	12010.0
<i>Bolota</i>					
$\max\ \vec{F}_{\vec{B}}\ $	0.07957	0.19652	0.41309	1.8206	9.8907
Iterações	18144	24999	19188	22782	23930
Tempo (s)	422.99	352.68	1373.9	6075.6	24205.2

5.3.4. Resultados numéricos

Este método não procura a uniformidade das distâncias entre pontos. Também neste método não se calculam ou utilizam as distâncias entre pontos sobre a superfície estrela pelo que não existem métricas comparáveis com o método anterior. Mesmo assim o algoritmo criado para este método inclui a criação de uma malha de triângulos planos entre vértices pelo método *Delaunay* e os resultados desta triangulação estão disponíveis no anexo digital referido em [31]. Não são, no entanto, importantes para a finalidade que este método pretende alcançar.

5.3.4.1. Domínio estrela “Almofada”

Apresentam-se figuras da distribuição dos conjuntos de pontos na superfície estrela “Almofada”. O valor da curvatura em cada ponto é dado pela escala cromática na figura 27.

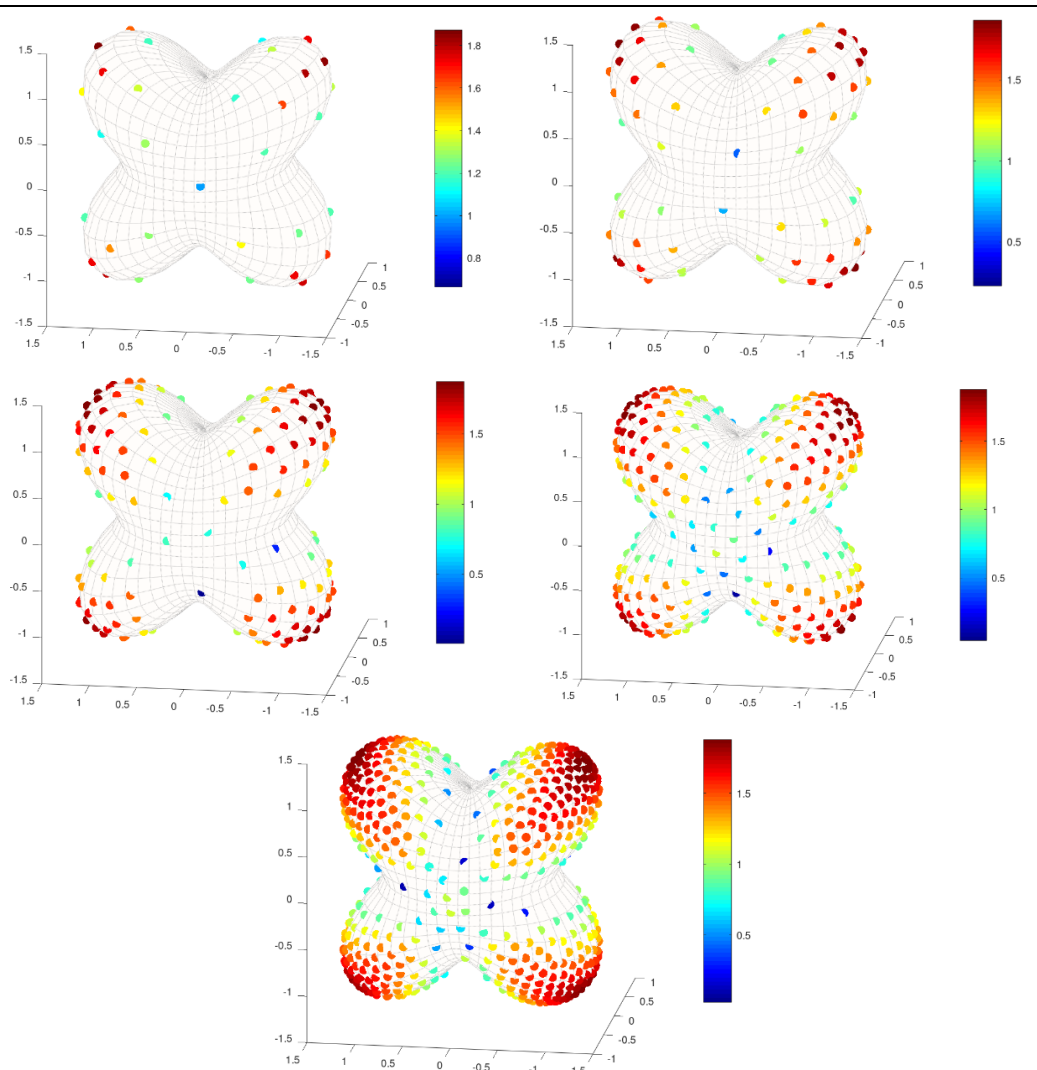


Figura 27 - Conjuntos de 50, 100, 200, 400 e 800 pontos na "Almofada" pelo método da força ponderada pela curvatura.

Como se pode verificar a densidade de pontos é maior nas zonas de maior curvatura como pretendido.

5.3.4.2. Domínio estrela “Bolota”

Apresentam-se figuras da distribuição dos conjuntos de pontos na superfície estrela “Bolota”. O valor da curvatura na localização de cada ponto é dado pela escala cromática na figura 27.

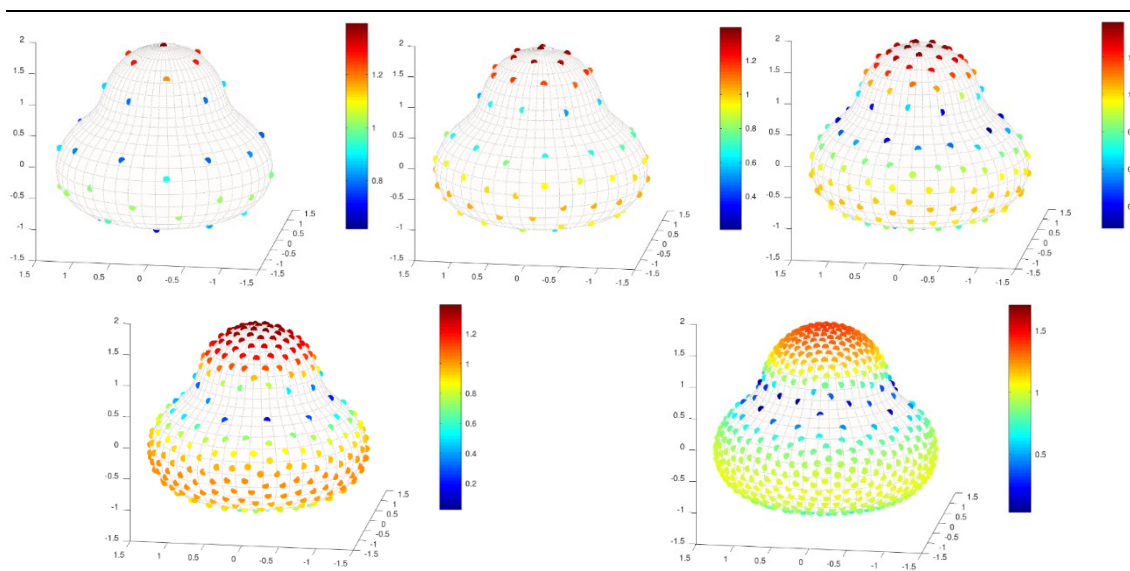


Figura 28 - Conjuntos de 50, 100, 200, 400 e 800 pontos na "Bolota" pelo método da força ponderada pela curvatura.

Como se pode verificar a densidade de pontos é maior nas zonas de maior curvatura como pretendido.

As imagens seguintes apresentam a comparação, para 800 pontos da distribuição de pontos obtida pela interação de *Coulomb* (força proporcional à distância linear) e o método da força proporcional à curvatura para a superfície estrela “Almofada”.

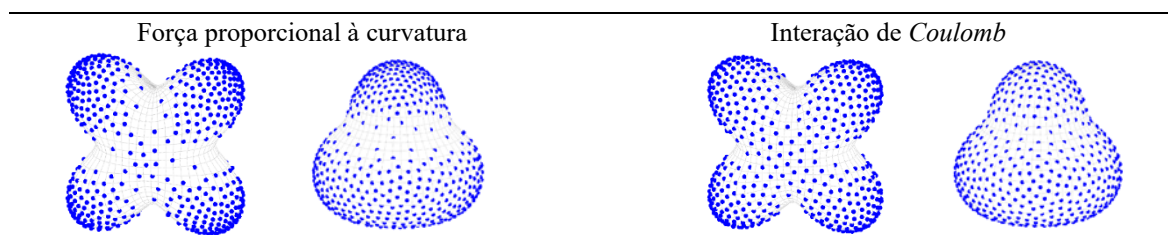


Figura 29 - Comparação entre o modelo da força proporcional à curvatura e a interação de *Coulomb*.

Como se pretendia o modelo concentra maior número de pontos nas zonas de maior curvatura do que o que resulta da interação de *Coulomb*. Este efeito pode ser intensificado ou reduzido pela manipulação do fator γ de ponderação da curvatura.

5.3.5. Utilização dos conjuntos de pontos obtidos para o MFS

Tal como no método da força proporcional à distância, nesta parte do trabalho utilizam-se os conjuntos de pontos obtidos para resolver o problema exterior direto pelo MFS, para três valores de k (0.5, 1, 2) e para uma onda incidente vertical que gera o campo incidente u^i . Os resultados apresentados são o valor do número de condição, a norma L^2 da aproximação ao campo total $\tilde{u} = u^i + \tilde{u}^s$ sobre a fronteira (ver em 4.5, p.28) e gráficos ilustrando os planos de corte da aproximação ao campo difratado u^s .

5.3.5.1. Domínio estrela “Almofada”

Tabela 23 - Número de condição para vários valores de número de onda k pelo MFS sobre a “Almofada”, para vários pares de conjuntos de pontos de colocação (p_c) e de pontos fonte (p_s).

Nº Onda	$k = 0.5$	$k = 1$	$k = 2$
$p_s = 50$ e $p_c = 100$	29.8736	22.8993	17.5863
$p_s = 100$ e $p_c = 200$	86.6005	65.9413	51.4906
$p_s = 200$ e $p_c = 400$	302.2254	234.3360	189.477
$p_s = 400$ e $p_c = 800$	688.1862	542.9103	447.953

Tabela 24 – Norma L^2 da aproximação ao campo total $\tilde{u} = u^i + \tilde{u}^s$ sobre a fronteira (para condição de Dirichlet homogênea, isto é $u = 0$) calculada numericamente pela regra de quadratura de Gauss-Legendre sobre pontos interiores.

Nº Onda	$k = 0.5$	$k = 1$	$k = 2$
$p_s = 50$ e $p_c = 100$	0.39162	0.56763	1.02962
$p_s = 100$ e $p_c = 200$	0.21129	0.30327	0.54209
$p_s = 200$ e $p_c = 400$	0.12217	0.17887	0.33125
$p_s = 400$ e $p_c = 800$	0.05673	0.08455	0.15898

Os resultados de condicionamento obtidos para os conjuntos de pontos criados pelo método da força ponderada pela curvatura são piores que os obtidos pelo método da força proporcional à distância sobre a superfície, como esperado.

Os resultados da qualidade da aproximação (norma L^2) não são melhores, que os obtidos anteriormente (5.2.6.1, p.55), sendo algo inferiores, mas da mesma ordem de grandeza.

Possivelmente uma otimização do valor de γ poderá ajudar neste pressuposto.

Deve ainda salientar-se que este método tem um custo computacional muito inferior como se pode verificar comparando os resultados de tempo para os dois modelos. Ver Tabela 11, p.45 e Tabela 22 p.62.

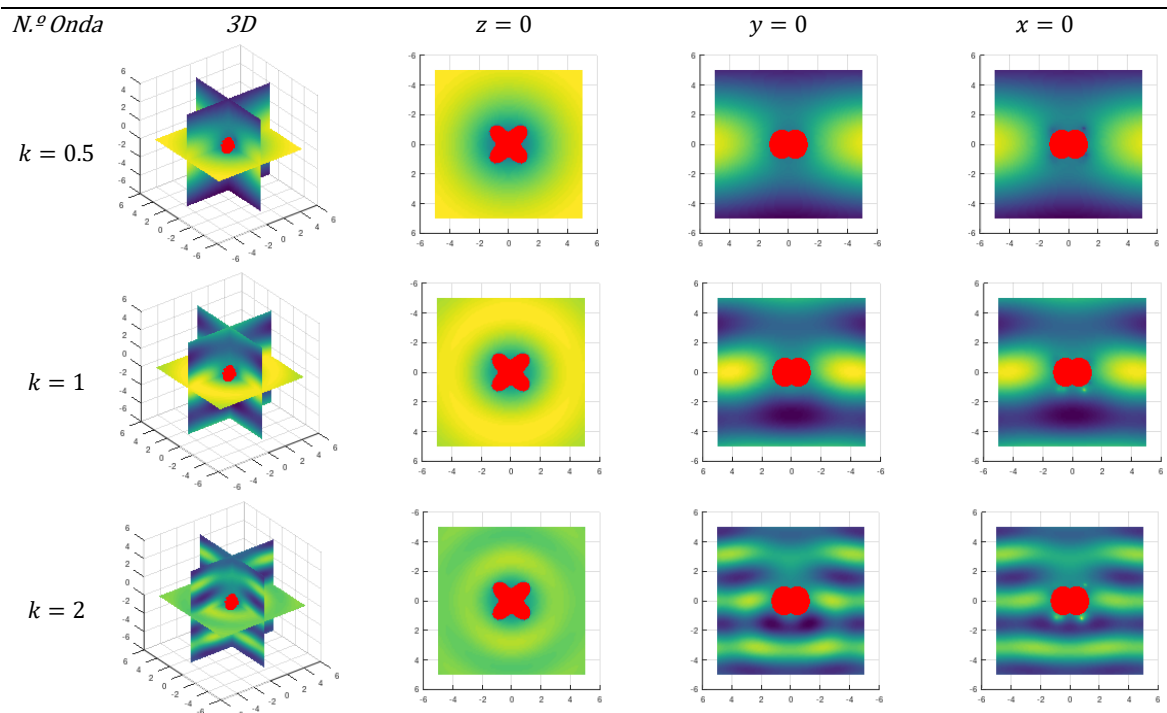


Figura 30 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a “Almofada”, para $p_s = 50$ e $p_c = 100$.

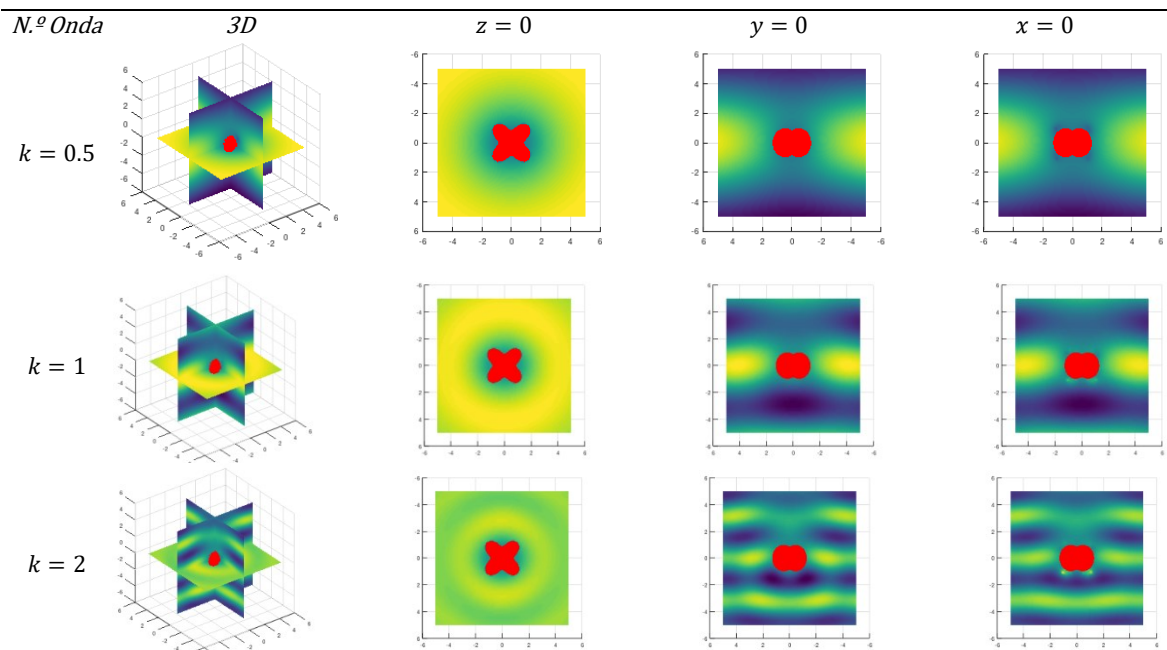


Figura 31 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a “Almofada”, para $p_s = 100$ e $p_c = 200$.

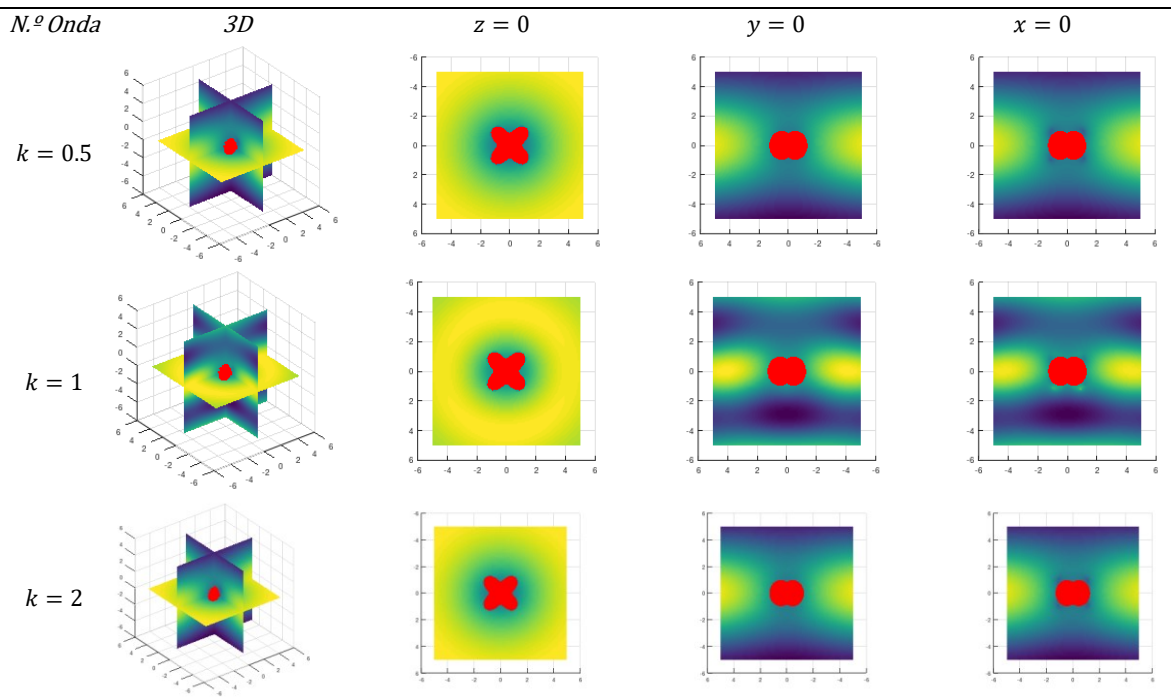


Figura 32 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a "Almofada", para $p_s = 200$ e $p_c = 400$.

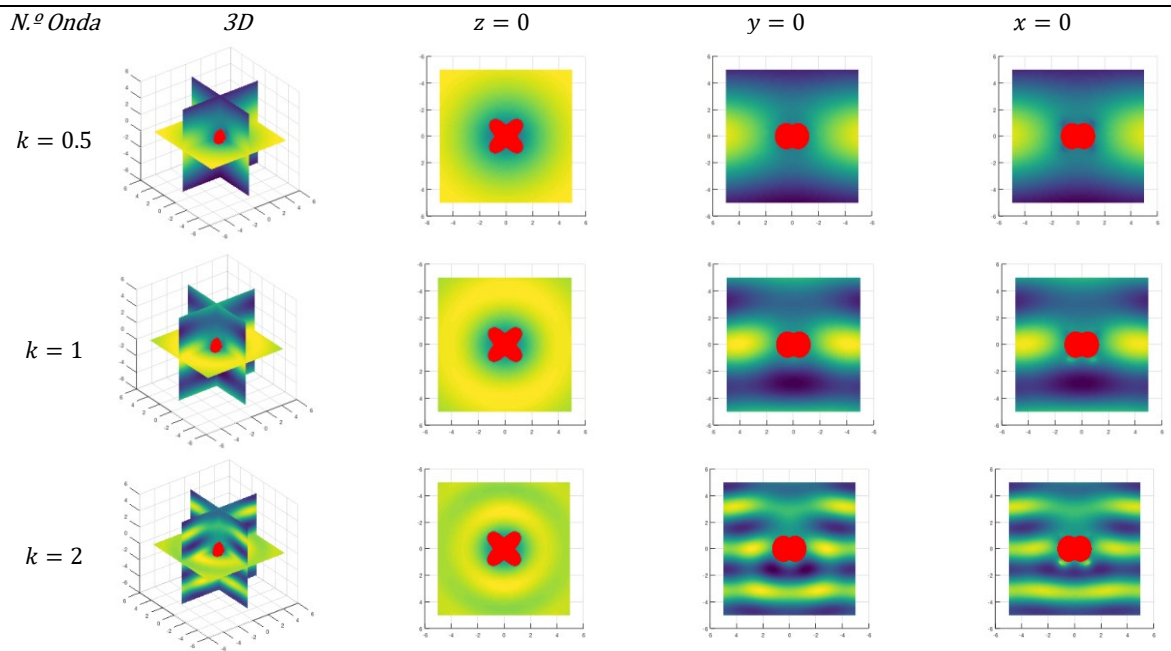


Figura 33 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a "Almofada", para $p_s = 400$ e $p_c = 800$.

5.3.5.2. Domínio estrela “Bolota”

Tabela 25 – Número de condição para vários valores de número de onda k pelo MFS sobre a “Bolota”, para vários pares de conjuntos de pontos de colocação (p_c) e de pontos fonte (p_s).

<i>Nº Onda</i>	$k = 0.5$	$k = 1$	$k = 2$
$p_s = 50$ e $p_c = 100$	25.248	19.272	12.175
$p_s = 100$ e $p_c = 200$	43.636	34.245	22.995
$p_s = 200$ e $p_c = 400$	243.44	189.57	131.17
$p_s = 400$ e $p_c = 800$	507.28	402.09	323.02

Tabela 26 – Norma L^2 da aproximação ao campo total $\tilde{u} = u^i + \tilde{u}^s$ sobre a fronteira (para condição de Dirichlet homogênea, isto é $u = 0$) calculada numericamente pela regra de quadratura de Gauss-Legendre sobre pontos interiores.

<i>Nº Onda</i>	$k = 0.5$	$k = 1$	$k = 2$
$p_s = 50$ e $p_c = 100$	0.30464	0.47519	0.89421
$p_s = 100$ e $p_c = 200$	0.13896	0.21787	0.39964
$p_s = 200$ e $p_c = 400$	0.06121	0.09528	0.16699
$p_s = 400$ e $p_c = 800$	0.03478	0.05722	0.10183

Também neste caso os resultados obtidos são piores que os obtidos pelo método da força proporcional à distância sobre a superfície, mas melhores que os obtidos para a “Almofada”. Tal como na “Almofada”, o número de condição é da mesma ordem de grandeza do obtido pelo método do mapeamento com pontos QEP⁸ e para a maioria das situações melhor que os resultados obtidos, pelo método do mapeamento, com pontos GLP e EAP⁹, [1, p. 13].

⁸ QEP - quasi equidistant points.

⁹ GLP - Gauss-Legendre quadrature rule points, EAP – equidistant angle points.

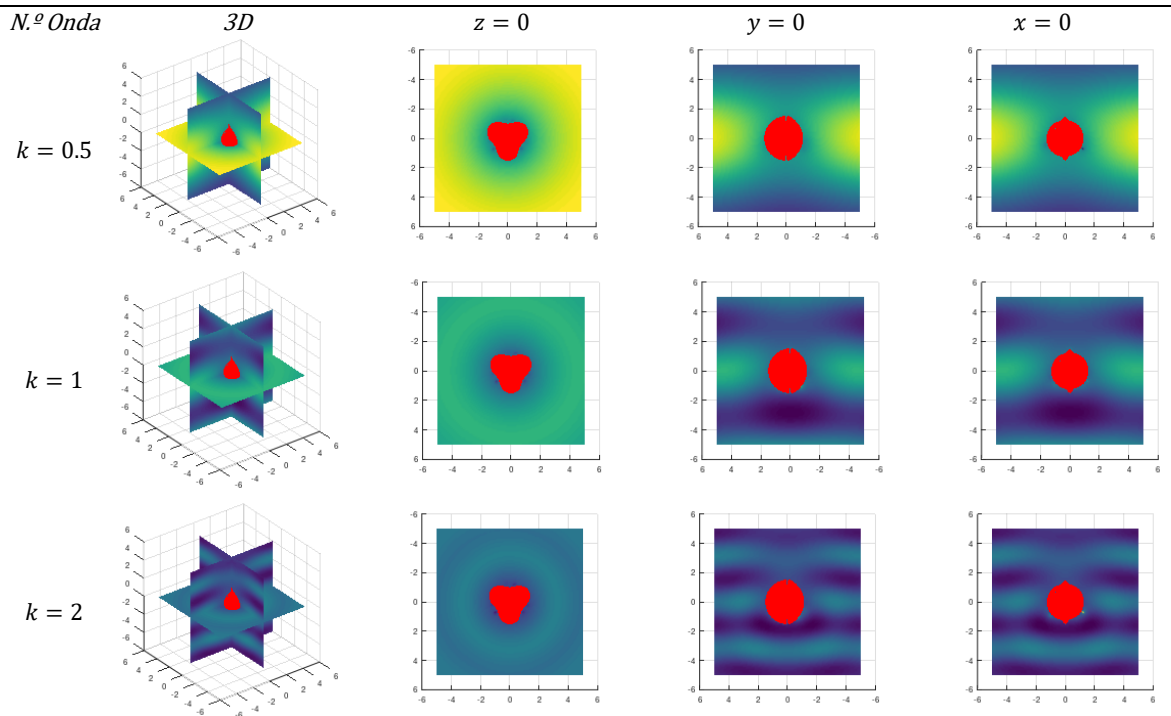


Figura 34 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a "Bolota", para $p_s = 50$ e $p_c = 100$.

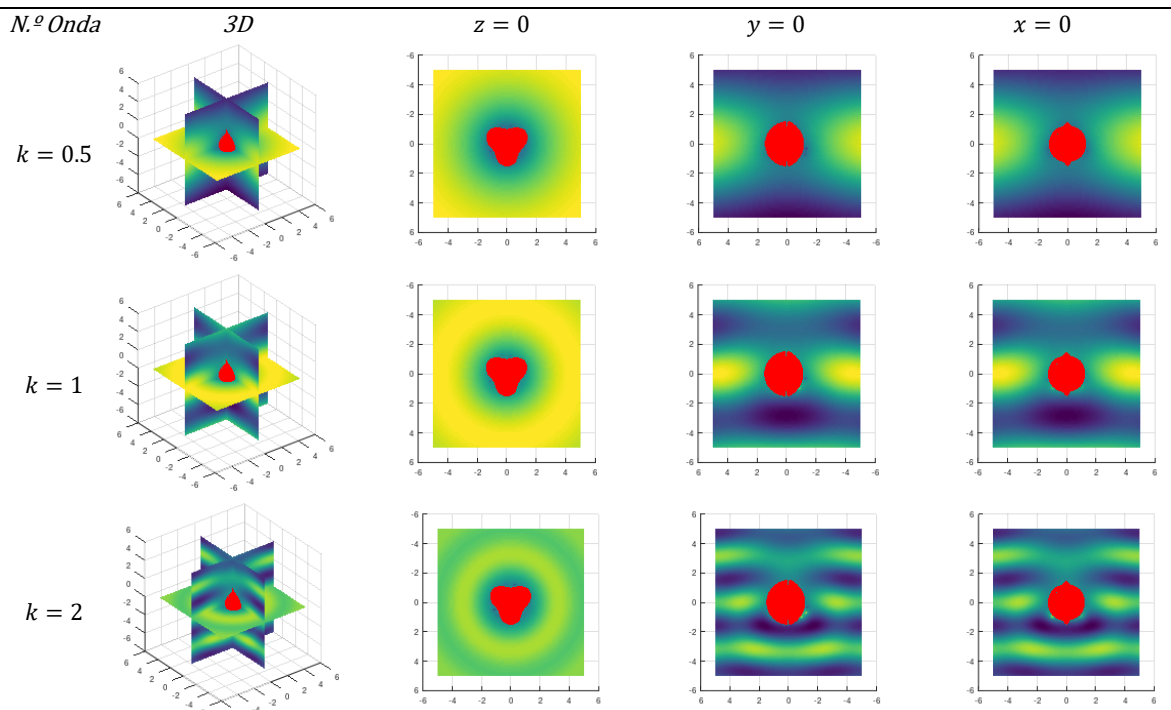


Figura 35 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a "Bolota", para $p_s = 100$ e $p_c = 200$.

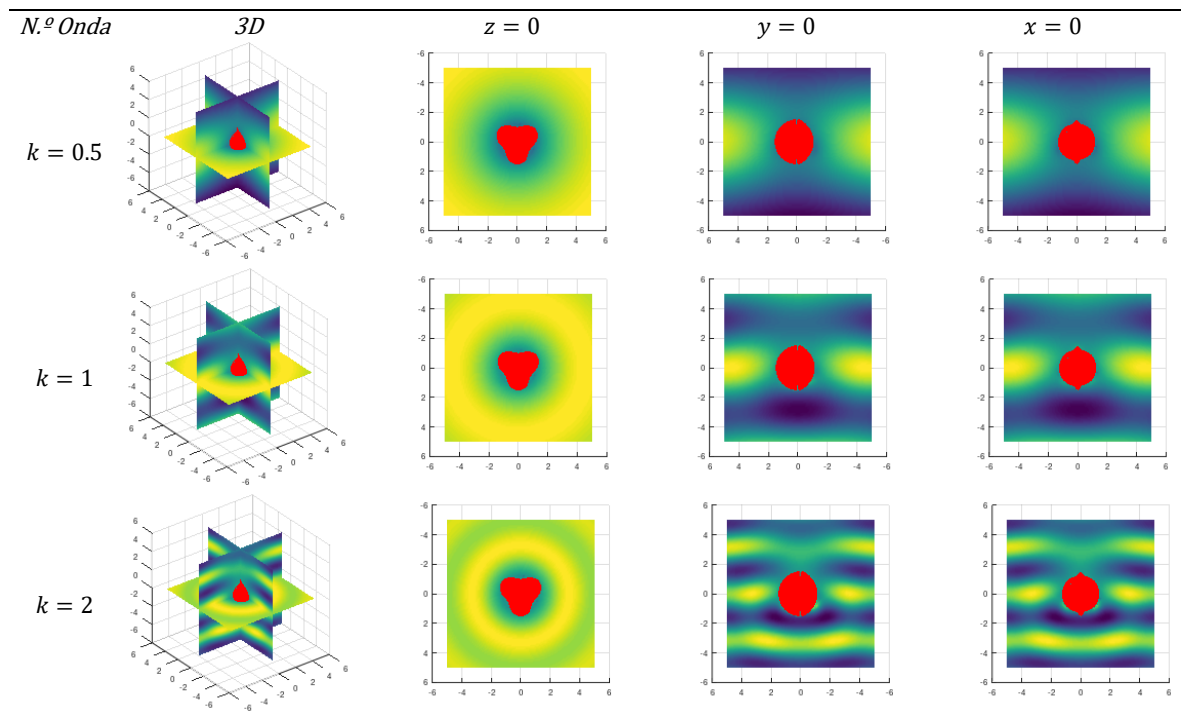


Figura 36 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a “Bolota”, para $p_s = 200$ e $p_c = 400$.

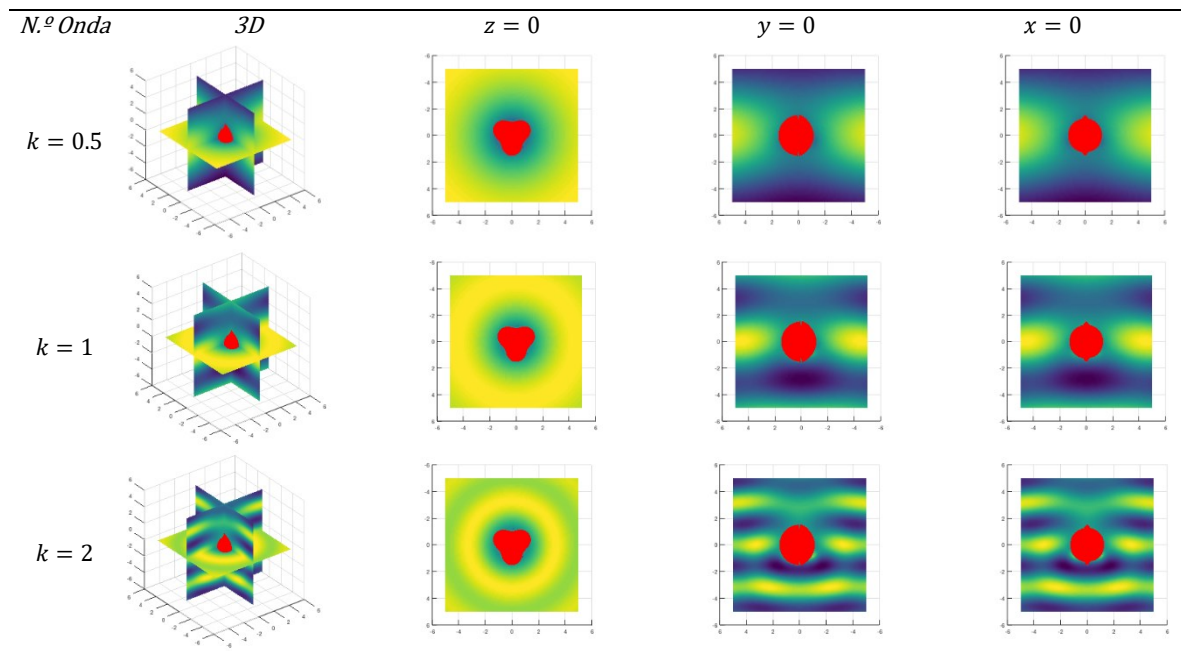


Figura 37 - Aproximação ao campo total para vários valores do número de onda k pelo MFS sobre a “Bolota”, para $p_s = 400$ e $p_c = 800$.

6. CONCLUSÕES

6.1. Smula do trabalho desenvolvido

Neste trabalho procurou-se criar distribuies de pontos, na superfcie de domnios estrela, aptas a serem utilizadas como pontos fonte e pontos de colocao, para a resoluo do problema exterior direto de difrao de ondas acsticas, pelo mtodo das solues fundamentais. Estes podem tambm ser utilizados para o problema interior, embora esta aplicao no tenha sido explorada neste trabalho.

As distribuies de pontos propostas foram criadas por duas adaptaes da interao de *Coulomb*, habitualmente utilizada sobre a esfera unitria, sobre duas superfcies estrela usualmente designadas por “*Cushion*” (Almofada) e “*Acorn*” (Bolota). No se conhecem e no se encontraram estudos sobre a distribuio de pontos em superfcies estrela pelo que nessa vertente este trabalho considera-se inovador.

As distribuies de pontos criadas, na superfcie de domnios estrela, procuraram atingir dois objetivos:

1. Distribuir uniformemente pontos sobre a superfcie modelada garantindo uma soluo precisa e bem condicionada para o mtodo das solues fundamentais.
2. Aumentar o detalhe e resoluo de partes especficas da superfcie estrela possibilitando um estudo mais preciso desses locais.

O primeiro objetivo foi atingido com a utilizao do mtodo da fora proporcional ¢ distncia sobre a superfcie que produziu bons resultados em preciso e condicionamento para o MFS, como apresentado no captulo 5.2, p.37 e seguintes apesar das limitaes no clculo do erro (nomeadamente dos pontos no estarem sobre a superfcie). O elemento central deste mtodo ¢ o clculo das distncias entre pontos na superfcie do domnio estrela o que ¢ efetuado pelo algoritmo baseado no descrito em 4.3, p.22.

Quanto ao segundo objetivo conseguiu-se concentrar mais pontos em zonas de maior curvatura, mas no se disps de mtodos capazes de avaliar a preciso e condicionamento apenas nessas zonas. Os resultados obtidos, relativos ¢ totalidade da fronteira de D so como esperados piores que os obtidos para o mtodo da fora proporcional ¢ distncia, mas apesar de tudo da mesma ordem de grandeza. O elemento central deste mtodo ¢ o clculo da curvatura mdia, em cada ponto, na superfcie do domnio estrela o que ¢ efetuado pelo algoritmo baseado no descrito em 4.4.1, p.27.

Em ambos os casos os resultados obtidos atingem o pretendido e estão ao nível de resultados existentes em trabalhos publicados como indicado. Assim considera-se que o estudo desenvolvido atingiu os seus objetivos.

Comparando os dois métodos, o método Força proporcional à distância sobre a superfície alcançou melhores resultados de condicionamento e qualidade. O método da Força ponderada pela curvatura é menos óbvio de afinar e como já referido, possivelmente uma melhor afinação do parâmetro γ poderá melhorar a qualidade dos resultados. Este método é muito mais económico e rápido, como se pode constatar com os dados de número de iterações e tempo de processamento da Tabela 11, p. 45 e da Tabela 22, p.62.

6.2. Aperfeiçoamentos e desenvolvimentos

O trabalho desenvolvido utilizou apenas um conjunto de pontos iniciais pelo que nada concluiu sobre a influência do sistema de pontos inicial nos resultados. Como os conjuntos de pontos não atingem a estabilidade, não é de prever que diferentes conjuntos iniciais produzam o mesmo resultado, mas poderá ser útil averiguar quais as diferenças e suas consequências nos resultados.

No algoritmo construído para este método a componente tangente da força de interação é calculada como ortogonal à normal local como indicado em 4.3.1. No entanto, cada ponto é após o movimento levado de volta à superfície utilizando a expressão do raio ρ da superfície estrela. Será útil estudar uma melhoria do algoritmo em que cada ponto seja devolvido à superfície utilizando o raio do círculo osculador local. Deverá ser possível adaptar o cálculo da curvatura desenvolvido para o método da força ponderada pela curvatura para este efeito. Como indicado em 5.2.2, o cálculo da distância sobre a superfície é efetuado por integração numérica utilizando a regra dos trapézios composta, por ser este o único método interno ao software utilizado apto a calcular numericamente um integral a partir de um conjunto de pontos. O algoritmo pode ser melhorado desenvolvendo rotinas que permitam a integração numérica por outras regras de quadratura a partir de séries de pontos.

Os algoritmos podem ainda ser aplicados sobre outras superfícies estrela e possivelmente a domínios mais gerais (não estrela).

BIBLIOGRAFIA

- [1] A. Araújo e P. Serranho, “On the use of quasi-equidistant source points over the sphere surface for the method of fundamental solutions,” *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. Volume 359, n° <https://doi.org/10.1016/j.cam.2019.03.019>, pp. 55-68, 2019.
- [2] D. Colton e R. Kress, *Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory*, 3ª Edição ed., Berlin: Springer, 2013.
- [3] O. Ivanyshyn, R. Kress e P. Serranho, “Huygens’ principle and iterative methods in inverse obstacle scattering,” *Adv Comput Math*, n° 33, pp. 413-429, 2010.
- [4] S. H. Schot, “Eighty Years of Sommerfeld’s Radiation Condition,” *Historia Mathematica*, n° 19, pp. 385-401, 1992.
- [5] C. J. Alves e N. F. Martins, “The direct Method of Fundamental Solutions and the inverse Kirsch-Kress Method for the reconstruction of elastic inclusions or cavities,” *J. of Integral Equations and Applications*, vol. 21, n° 2, pp. 153-178, 2009.
- [6] A. K. P. M. G. Fairweather, “The method of fundamental solutions for scattering and radiation problems,” *Engineering Analysis with Boundary Elements*, vol. 27, p. 759-769, 2003.
- [7] O. Runborg, “Helmholtz Equation and High Frequency Approximations,” em *Numerical Solutions of Differential Equations*, KTH, 2012, pp. 1-21.
- [8] C. J. Alves, “On the choice of source points in the method of fundamental solutions,” *Engineering Analysis with Boundary Elements*, n° 33, p. 1348-1361, 2009.
- [9] G. Fairweather e A. Karageorghis, “The method of fundamental solutions for elliptic boundary value problems,” *Advances in Computational Mathematics*, n° 9, pp. 69-95, 1998.
- [10] R. P. Antunes, “A numerical algorithm to reduce ill-conditioning in meshless methods for the Helmholtz equation,” *Numerical Algorithms*, vol. 79, p. 879-897, 2018.
- [11] A. Bondarenko, M. Karchevskiy e L. Kozinkin, “The Structure of Metastable States in The Thomson Problem,” *Journal of Physics: Conference Series*, n° 643, 2015.
- [12] H. Cohn, “Stability configurations of electrons on a sphere,” *Mathematics of Computation*, n° 10, pp. 117-120, 1956.
- [13] R. Womersley, “Distributing points on the sphere,” School of Mathematics and Statistics, UNSW, 16 04 2014. [Online]. Available: <https://www.maths.unsw.edu.au/about/distributing-points-sphere>. [Acedido em 16 12 2018].
- [14] E. B. Saff e A. B. Kuijlaars, “Distributing Many Points on a Sphere,” *The Mathematical Intelligencer*, n° 19, pp. 5-11, 1997.
- [15] T. W. Melnyk, K. Osvald e R. W. Smith, “Extremal arrangements of points and unit charges on a sphere: equilibrium configurations revisited,” *Canadian Journal of Chemistry*, vol. 55, pp. 1745-1761, 1977.
- [16] E. L. Altschuler e A. Pérez Garrido, “New global minima for Thomson’s problem of charges on a sphere,” *Physical Review*, n° 71, pp. 1-12, 2005.
- [17] A. Perez-Garrido, M. Ortuno, E. Cuevas e J. Ruiz, “Many-particle jumps algorithm and Thomson’s problem,” *J. Phys. A: Math. Gen*, n° 29, p. 1973-1978, 1996.
- [18] A. Perez-Garrido, M. J. W. Dodgson e M. A. Mooreb, “Influence of Dislocations in Thomson’s Problem,” *Phys. Rev. B*, vol. 56, n° 7, pp. 3640-3643, 1997.

- [19] S. Serfaty, “Systems of Points with Coulomb Interactions,” *Newsletter of the European Mathematical Society*, n° 110, pp. 16-21, 2018.
- [20] V. D. Kupradze e M. Aleksidze, “The method of functional equations for the approximate solution of certain boundary value problems,” *Zh. vych. mat.* 4, n° 4, pp. 683-715, 1964.
- [21] C. S. Chen, A. Karageorghis e Y. Li, “On choosing the location of the sources in the MFS,” *Numerical Algorithms*, 2015.
- [22] C. J. S. Alves e A. L. Silvestre, “On the application of the method of fundamental solutions to nonlinear partial differential equations,” *Engineering Analysis with Boundary Elements*, vol. 92, pp. 267-274, 2018.
- [23] C. J. Alves e P. R. Antunes, “The method of fundamental solutions applied to boundary value problems on the surface of a sphere,” *Computers and Mathematics with Applications*, n° <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2017.12.015>, 2018.
- [24] C. J. S. Alves e P. R. S. Antunes, “Numerical calculation of eigenfrequencies and eigenmodes of 3D simply connected domains using the Method of Fundamental Solutions,” em *Proceeding of ICCES*, Lisboa, 2005.
- [25] C. Alves e A. Silvestre, “Density results using Stokeslets and a method of fundamental solutions for the Stokes equations,” *Engineering Analysis with Boundary Elements*, vol. 28, p. 1245–1252, 2004.
- [26] A. Karageorghis e D. Lesnic, “Application of the MFS to inverse obstacle scattering problems,” *Engineering Analysis with Boundary Elements*, n° 35, p. 631–638, 2011.
- [27] C. R. Smith, “A Charecterization of Star-shaped Sets,” *American Mathematical Monthly*, vol. 75, n° 4, p. 386, 1968.
- [28] A. M. Rubinov e A. A. Yagubov, “The Space of Star-Shapped Sets and its applications in nonsmooth optimization,” em *Quasidifferential Calculus*, Berlin, Springer, 2009, pp. 176-202.
- [29] P. Serranho, “A Hybrid Method for Inverse Obstacle Scattering Problems,” PhD Dissertation, Gottingen, <https://ediss.uni-goettingen.de/bitstream/handle/11858/00-1735-0000-0006-B38F-0/serranho.pdf>.
- [30] S. Deng, *Quadrature Formulas in Two Dimensions*, Charlotte: Dept. of Mathematics and Statistics, 2010.
- [31] J. F. d. Costa, “Algoritmos e arquivos para descarregar,” [Online]. Available: <https://1drv.ms/f/s!Ag-4N7MWrBJZin8vq-GCnoC21Arz>.

ANEXOS

ANEXO I

Os arquivos informáticos relevantes para este documento encontram-se no repositório informático acessível pela ligação indicada em [31]

<https://1drv.ms/f/s!Ag-4N7MWrBJZin8vq-GCnoC21Arz>

A organização deste repositório é a seguinte:

Os arquivos de dados estão em formato “Octave” de extensão “.mat”.

Os arquivos de algoritmos estão em formato “Octave” de extensão “.m”.

Os arquivos de imagens estão em formato “.png”.

No geral os arquivos de pontos iniciais para as simulações estão na pasta “Pontos Iniciais”.

Os arquivos de conjuntos finais de pontos estão na pasta “Pontos Finais”.

Os algoritmos relativos ao método da “Força proporcional à distância sobre a superfície” estão na pasta “Algoritmos modelo 1”.

Os algoritmos relativos ao método da “Força ponderada pela curvatura” estão na pasta “Algoritmos modelo 2”.

Nestas pastas os algoritmos de simulação tem o nome incluindo “SIMU”.

Nestas pastas os arquivos de nome contendo “REFRESH” destinam-se a refazer os dados finais da simulação após carregar os arquivos de dados com nome incluindo “DATA”.

Os arquivos “DATA” estão na pasta “DATA_M1_M2”.

Nestas pastas os restantes arquivos destinam-se a obter gráficos ou dados secundários.

Os algoritmos e dados dos modelos auxiliares estão nas pastas de nome “MODELO_(0,3,4)”.

Para qualquer dúvida ou esclarecimento adicional pode contactar-se o autor em ze-fir@live.com.pt

ANEXO II

ALGORITMO DE SIMULAÇÃO DA FORÇA PROPORCIONAL À DISTÂNCIA SOBRE A SUPERFÍCIE.

```

clear%
clc%
history -c
close all
tic;
##### 0 - LOAD DATA THETA PHI ###
load('INI_POINTS_100.mat');
##### 1 - INITIAL PARAMETERS Polar Coordinates
CA = CA+eps;
V = 25000; # MAX NUMBER OF ITERATIONS
n = 10; #TRAPZ INTERMEDIATE POINTS # AB
h = [0:1/n:1]; #TRAPZ SPACING
##### 2 - START VALUES
counter = 0;
O = length(CA); #NUMBER OF POINTS
Q = (1:1:O)'; #ARRAY OF POINTS
FV1b = [1,100000];
FV1c = [1,100000];
stop_global = 100000;
tRi_A = 1;
tRi_dists = 1;
FACTOR = (1/max(FV1c(:,2)));
# Counters
[i] = 1;
[l] = 0;
[ii] = 0;
##### 3 - ITERATION
while (i)<V;
    if (max(FV1c(:,2))) > (0.075*O);
        FACTOR = ((0.19/sqrt(O))*(1/max(FV1c(:,2))));
    elseif (max(FV1c(:,2))) > (0.0525*O);
        FACTOR = (0.5/(O^1.5));
    else
        FACTOR = (0.005/(O^1.5)); # (0.05/(O^1.5));
    endif
    printf("In iteration step %d :\n",i);
    [i] = i+1;
    [l] = l+1;
##### 4 - EQUATIONS/MATRICES (Zeta(Theta,Phi))
##### 4.1 - Star surface #Eq.(13) CUSHION
[CB] = [(sqrt(0.8+(0.5*(cos(4.*CA(:,1))-1)*(cos(2.*CA(:,2))-1)))*sin(CA(...
: ,1)).*cos(CA(:,2))), (sqrt(0.8+(0.5*(cos(4.*CA(:,1))-1)*(cos(2.*CA(...
: ,2))-1)))*sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2))), (sqrt(0.8+(0.5*(cos(4.*CA(...
: ,1))-1)*(cos(2.*CA(:,2))-1)))*cos(CA(:,1))];
lpts = CB;
##### 4.2 - Star partial derivatives zeta(THETA,PHI) ###
[DZt] = [(-sin(CA(:,1)).*sin(4.*CA(:,1)).*cos(CA(:,2)).*(cos(2.*CA(:,2))-
1)./sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1)*(cos(4.*CA(:,1))-
1)./2+0.8)+cos(CA(:,1)).*cos(CA(:,2)).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1)*(cos(4.*CA(:,1))-
1)./2+0.8)),...
-sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2)).*sin(4.*CA(:,1)).*(cos(2.*CA(:,2))-
1)./sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1)*(cos(4.*CA(:,1))-
1)./2+0.8)+sin(CA(:,2)).*cos(CA(:,1)).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1)*(cos(4.*CA(:,1))-
1)./2+0.8)),...
-sin(4.*CA(:,1)).*cos(CA(:,1)).*(cos(2.*CA(:,2))-1)./sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1)*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8)-sin(CA(:,1)).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1)*(cos(4.*CA(:,1))-
1)./2+0.8))];
[DZp] = [(-sin(CA(:,1)).*sin(2.*CA(:,2)).*cos(CA(:,2)).*(cos(4.*CA(:,1))-
1)/(2.*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1)*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8))-
sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2)).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1)*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8)),...
-sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2)).*sin(2.*CA(:,2)).*(cos(4.*CA(:,1))-
1)/(2.*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1)*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8))+sin(CA(:,1)).*cos(CA(:,2)).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1)*(cos(4.*CA(:,1))-
1)./2+0.8)),...

```

```

        -sin(2.*CA(:,2)).*cos(CA(:,1)).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./(2.*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8));
##### 4.1 - Star surface #Eq.(13) ACORN
## [CB] = [(0.5.*(0.6.+sqrt(4.25.+2.*cos(3.*CA(:,1))))).*sin(CA(:,1)).*cos(CA(:,2)),...
##
## (0.5.*(0.6.+sqrt(4.25.+2.*cos(3.*CA(:,1))))).*sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2)),...
## (0.5.*(0.6.+sqrt(4.25.+2.*cos(3.*CA(:,1))))).*cos(CA(:,1))];
## lpts = CB;
##### 4.2 - Star partial derivatives zeta(THETA,PHI) ###
## [DZt] = [(-
3.*sin(CA(:,1)).*sin(3.*CA(:,1)).*cos(CA(:,2))./(2.*sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25)...
## )+(sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25).+0.6).*cos(CA(:,1)).*cos(CA(:,2))./2),...
## (-
3.*sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2)).*sin(3.*CA(:,1))./(2.*sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25)...
## )+(sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25).+0.6).*sin(CA(:,2)).*cos(CA(:,1))./2),...
## (-3.*sin(3.*CA(:,1)).*cos(CA(:,1))./(2.*sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25)...
## )-(sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25).+0.6).*sin(CA(:,1))./2)];
## [DZp] = [(sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25).+0.6).*sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2))./2),...
## ((sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25).+0.6).*sin(CA(:,1)).*cos(CA(:,2))./2),...
## (zeros(length(CA),1))];
##### 4.3 - Unit Sphere surface #Eq.(12)
[cb] = [(sin(CA(:,1)).*cos(CA(:,2))), (sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2))), (cos(CA(:,1)))];
##### 5 - n-Vector at Star partial derivatives points matrix #Eq.(16)
[DB] = cross(DZt(:, :), DZp(:, :), 2) ./ norm((cross(DZt(:, :), DZp(:, :), 2)), 'rows');
##### 6 - MATRIX EXPANSION
##### 6.1 - (A,B) Pairs Polar coordinates
##### LINE = (A-1)*(0-1)+(B):(B<A), (A-1)*(0-1)+(B-1):(B>A)
C2 = [Q,CA];
C3 = repmat(C2,0,1); # (B) 0 ARRAYS (1,2,...,0;1,2...,0...)
C4 = sortrows(C3,1); # (A) 0 ARRAYS (1,1,...,0;2,2...,0...)
C5 = [C4(:,1),C3(:,1),C4(:,2:3),C3(:,2:3)]; # C4=A, C3=B
C6 = a11((C5(:,2)-C5(:,1))==0,2);
C3(C6,:) = [];
C4(C6,:) = [];
C5(C6,:) = [];
##### 6.2 - (A,B) Pars cartesian coordinates star surface
##### LINE = (A-1)*(0-1)+(B):(B<A), (A-1)*(0-1)+(B-1):(B>A)
D2 = [Q,CB];
D3 = repmat(D2,0,1); # (B) 0 ARRAYS (1,2,...,0;1,2...,0...)
D4 = sortrows(D3,1); # (A) 0 ARRAYS (1,1,...,0;2,2...,0...)
D5 = [D4(:,1),D3(:,1),D4(:,2:4),D3(:,2:4)]; # D4=A, D3=B
D6 = a11((D5(:,2)-D5(:,1))==0,2);
D3(D6,:) = [];
D4(D6,:) = [];
D5(D6,:) = [];
##### 6.3 - (A,B) Pars cartesian coordinates DERIVATIVES
##### LINE = (A-1)*(0-1)+(B):(B<A), (A-1)*(0-1)+(B-1):(B>A)
DB2 = [Q,DB];
DB3 = repmat(DB2,0,1); # (B) 0 ARRAYS (1,2,...,0;1,2...,0...)
DB4 = sortrows(DB3,1); # (A) 0 ARRAYS (1,1,...,0;2,2...,0...)
DB5 = [DB4(:,1),DB3(:,1),DB4(:,2:4),DB3(:,2:4)]; # D4=A, D3=B
DB6 = a11((DB5(:,2)-DB5(:,1))==0,2);
DB3(DB6,:) = [];
DB4(DB6,:) = [];
DB5(DB6,:) = [];
##### 6.4 - (A,B) Pars cartesian coordinates Unit Sphere
##### LINE = (A-1)*(0-1)+(B):(B<A), (A-1)*(0-1)+(B-1):(B>A)
d2 = [Q,cb];
d3 = repmat(d2,0,1); # (B) 0 COLECOES DE VETORES CADA SEQUENCIAL (1,2,...,0;1,2...,0...)
d4 = sortrows(d3,1); # (A) 0 COLECOES DE VETORES ORDENADAS (1,1,...,0;2,2...,0...)
d5 = [d4(:,1),d3(:,1),d4(:,2:4),d3(:,2:4)]; # d4=A, d3=B
d6 = a11((d5(:,2)-d5(:,1))==0,2);
d3(d6,:) = [];
d4(d6,:) = [];
d5(d6,:) = [];
##### 7 - F(AB) CALCULATIONS
##### 7.1 - T(AB) Star surface for ds(AB) #Eq.(17)
TAB = [(((D5(:,6:8))-D5(:,3:5))-dot((D5(:,6:8))-D5(:,3:5)),DB5(:,6:8),2).*DB5(:,6:8)...
)./norm(((D5(:,6:8))-D5(:,3:5))-dot((D5(:,6:8))-D5(:,3:5)),...
DB5(:,6:8),2).*DB5(:,6:8)), 'rows')];
##### 7.2 - dS(AB) Calculation Star surface

```

```

##### 7.2.a - ds(AB) Calculation unit sphere #Eq.(20)
dse = atan2(norm(cross(d5(:,3:5),d5(:,6:8),2), 'rows'),dot(d5(:,3:5),d5(:,6:8),2)));
dse_part = h.*dse; #ds(AB) partials for trapz
##### 7.2.b - Intermediate points unit sphere (x,y,z) #Eq. (21)
xi = ((sin((1.-h).*dse)./sin(dse)).*sin(C5(:,3)).*cos(C5(:,4))).+((sin(h.*dse)/...
sin(dse)).*sin(C5(:,5)).*cos(C5(:,6)));
yi = ((sin((1.-h).*dse)./sin(dse)).*sin(C5(:,3)).*sin(C5(:,4))).+((sin(h.*dse)/...
sin(dse)).*sin(C5(:,5)).*sin(C5(:,6)));
zi = ((sin((1.-
h).*dse)./sin(dse)).*cos(C5(:,3)).+((sin(h.*dse)/sin(dse)).*cos(C5(:,5)));
xyz_nb=sqrt(xi.^2+yi.^2+zi.^2);
xi = xi./xyz_nb;
yi = yi./xyz_nb;
zi = zi./xyz_nb;
xyzi = xi(:,:);
xyzi(:,2) = yi(:,:);
xyzi(:,3) = zi(:,:);
##### 7.2.c - Intermediate points Polar Coordinates
[lat] = (pi/2)-atan2(zi,sqrt(xi.^2+yi.^2));
[lon] = atan2(yi,xi);
CDlon = lon < 0;
CDlon = CDlon.*(2*pi);
lon = lon+CDlon;
##### 7.2.d - RHO partial derivatives for trapz #Eq.(19) CUSHION
[dRT] = [-sin(4.*lat(:,:)).*(cos(2.*lon(:,:))-1)./sqrt(((cos(2.*lon(:,:))-1)...
.*(cos(4.*lat(:,:))-1)./2)+0.8)];
[dRP] = [-sin(2.*lon(:,:)).*(cos(4.*lat(:,:))-1)/(2.*sqrt(((cos(2.*lon(:,:))-1)...
.*(cos(4.*lat(:,:))-1)./2)+0.8)];
##### 7.2.d - RHO partial derivatives for trapz #Eq.(19) ACORN
## [dRT] = [-3*sin(3.*lon(:,:))./(2.*sqrt(2.*cos(3.*lon(:,:)).+4.25))];
## [dRP] = [zeros(length(xyzi),n+1)];
##### 7.2.e - intermediate t(AB) Unit Sphere #Eq. (24)
tAB_i = [(((xyzi(:,end,1:3))-xyzi(:,1:3))-dot((xyzi(:,end,1:3))-xyzi(:,1:3)),...
xyzi(:,1:3),3).*xyzi(:,1:3))];
tAB_i(:,end,:)=[(((xyzi(:,end-1,1:3))-xyzi(:,end,1:3))-dot((xyzi(:,end-1,1:3))-
xyzi(:,end,1:3)),...
xyzi(:,end,1:3),3).*xyzi(:,end,1:3))];
tAB_nb = sqrt(tAB_i(:,1).^2+tAB_i(:,2).^2+tAB_i(:,3).^2);
tAB = tAB_i(:,:,:)./tAB_nb(:,:);
##### 7.2.f - TPhi #Eq. (22)
TPHI_x = [-xyzi(:,2).+eps];
TPHI_y = [xyzi(:,1).+eps];
TPHI_z = [zeros(length(xyzi),n+1)];
TPHI_i = TPhi_x(:,:);
TPHI_i(:,2) = TPhi_y;
TPHI_i(:,3) = TPhi_z;
TPHI_nb = sqrt(TPHI_i(:,1).^2+TPHI_i(:,2).^2+TPHI_i(:,3).^2);
TPHI = TPhi_i(:,:,:)./TPHI_nb(:,:);
##### 7.2.g - Ttheta #Eq. (23)
TTETA_i(:,3) = sqrt((xyzi(:,1).^2.+eps)+(xyzi(:,2).^2.+eps));
TTETA_i(:,1) = (-xyzi(:,1).*xyzi(:,3)+eps)./(TTETA_i(:,3)+eps);
TTETA_i(:,2) = (-xyzi(:,2).*xyzi(:,3)+eps)./(TTETA_i(:,3).*eps);
TTETA_nb = sqrt(TTETA_i(:,1).^2+TTETA_i(:,2).^2+TTETA_i(:,3).^2);
TTETA = TTETA_i(:,:,:)./TTETA_nb(:,:);
##### 7.2.h - Zeta' Calculation #Eq. (19)
Zeta_1 = dRT.*TTETA(:,:,:);
Zeta_2 = dRP.*TPHI(:,:,:);
Zeta_3 = Zeta_1+Zeta_2;
Zeta = dot(Zeta_3,tAB,3);
Zetaa = sqrt(1+Zeta.^2);
##### 7.2.g - ds(AB) Star Surface Aproximation trapz #####
ds = trapz(dse_part,Zetaa,2);
dists = [D5(:,1), D5(:,2), ds(:,:)];
##### 7.3 - TOTAL ENERGY (distance inter points)
TE = sum(1./ds)/2;
##### 7.3 - F(AB) Star surface aproximation Coulomb Interaction
FABV1 = TAB./ds.^2; ##### F from A over B
##### 7.3.1 - Forces over each B point
FABV1ACUx = accumarray(D5(:,2),FABV1(:,1)); ##### F accumulation x
FABV1ACUy = accumarray(D5(:,2),FABV1(:,2)); ##### F accumulation y
FABV1ACUz = accumarray(D5(:,2),FABV1(:,3)); ##### F accumulation z

```

```

    FABV1b = [FABV1ACUx, FABV1ACUy, FABV1ACUz]; ##### F's on each B
##### END F(AB) CALCULATION #####
##### START ITERATION CALCULATION #####
##### 8 - n VECTOR At B
    nCB = DB(:,:)./(norm(DB(:,:),'rows'));
##### 9 - f(B) Tangent at B
    FABTAN = FABV1b-(dot(FABV1b,nCB,2).*nCB);
##### 10 - f(B) MAGNITUDE
    FV1b = [Q,(norm(FABV1b,'rows'))]; # f(B) Acu all As
    FV1c = [Q,(norm(FABTAN,'rows'))]; # f(B) Acu tangent all As
##### 11 - ITERATION PLOT
    ##if ((floor(i/100))*100) == i;
    # run('Cush_Iter');
    ##endif
##### 12 - APPLY FORCES f(AB)
    QST = FABTAN.*FACTOR; #(FACTOR./max(FV1c(:,2)));
    [zD7] = CB + QST;
##### 13 - POLAR COORDINATES NEW POSITION
    CA1 = (pi/2)-atan2(zD7(:,3),sqrt(zD7(:,1).^2+zD7(:,2).^2));
    CA2 = atan2(zD7(:,2),zD7(:,1));
    CDCA2 = all((CA2)<0,2);
    CDCA2 = CDCA2.*(2*pi);
    CA2 = CA2+CDCA2;
    CA = [CA1 CA2];
##### 14 - Stop Variable + Accumulations
    stop = max(FV1c(:,2));
    FV1C(i) = max(FV1c(:,2));
    LAMBDA(i) = FACTOR;
    CONTA(i) = counter;
    FV1B(i) = max(FV1b(:,2));
    FVTOT(i) = sum(FV1c(:,2));
    TEI(i) = TE;
##### 15 - Stopping condition and save minima
    printf('stop : %d %d \n',FACTOR,stop);
    if stop < stop_global;
        stop_global = stop;
        ii = i;
        counter = 0;
        F1 = CA;
        F2 = zD7;
        F3 = FV1c;
        F4 = FABTAN;
        F5 = tRi_A;
        F5 = real(F5);
        F6 = tRi_dists;
    else
        counter = counter+1;
        printf("counter : %d \n",counter);
        if counter > 2499 && stop_global < 3.5;
            printf("Break condition \n");
            break;
        endif
    endif
endwhile
##### 16 - Triangles Distance
    lpts = F2;
    npts=size(lpts,1);
    caux=0.6;
    lptsaux=[lpts;caux*lpts];
    tetra=de1aunay(lptsaux(:,1),lptsaux(:,2),lptsaux(:,3));
    pos=(tetra<=npts);
    pos=((sum(pos,2)==3));
    tetra_surf=tetra(pos,:);
    tetraaux=sort(tetra_surf,2);
    tri=tetraaux(:,1:3);
    DISTS = [(norm((lpts(tri(:,1),:)-lpts(tri(:,2),:)),'rows'))...
              (norm((lpts(tri(:,2),:)-lpts(tri(:,3),:)),'rows'))...
              (norm((lpts(tri(:,3),:)-lpts(tri(:,1),:)),'rows'))];

```

```

##### 16.b - Surface Triangles Distance
tRi_pairs = [sort([tri(:,1),tri(:,2)],2), sort([tri(:,2),tri(:,3)],2), sort(...
[tri(:,3),tri(:,1)],2)];
tRi_lines = [((tRi_pairs(:,1)-1)*(0-1)+(tRi_pairs(:,2)-1)), ((tRi_pairs(:,3)-1)*...
0-1)+(tRi_pairs(:,4)-1)), ((tRi_pairs(:,5)-1)*(0-1)+(tRi_pairs(...
:,6)-1)); # (A-1)*(0-1)+(B-1):(B>A)
tRi_dists = [(ds(tRi_lines(:,1))), (ds(tRi_lines(:,2))), (ds(tRi_lines(:,3)))];
tRi_S = ((tRi_dists(:,1)+tRi_dists(:,2)+tRi_dists(:,3))./2);
tRi_A = sqrt(tRi_S.*(tRi_S-tRi_dists(:,1)).*(tRi_S-tRi_dists(:,2)).*(...
tRi_S-tRi_dists(:,3)));
tRi_C = tRi_dists./max(tRi_dists(:));
##### 16.c - tRi_dists std
tRi_area = sum(tRi_A(:))/length(tRi_A(:));
F5 = real(tRi_A);
##### 17.a - Definitions
d = min(tRi_dists(:));
epsilon = max(tRi_dists(:))-d;
##### 18 - RESULTS
Z1 = ii; ## N_ITERACOES
Z2 = CONTA(2:(end))';
Z3 = LAMBDA(2:(end))';
Z4 = FV1C(2:(end))'; # CONVERGENCIA FORCA TANGENTE
Z5 = FVTOT(2:(end))';
Z6 = TEI(2:(end))';
R1 = mean(tRi_dists(:));
R2 = std(tRi_dists(:));
R3 = mean(tRi_A(:));
R4 = std(tRi_A(:));
F5 = real(tRi_A);
F6 = tRi_dists;
TIME = toc;
TIME

```

ANEXO III

ALGORITMO DE SIMULAÇÃO DA FORÇA PONDERADA PELA CURVATURA.

```

clear%
clc%
history -c
close all
tic;
##### 0 - LOAD DATA THETA PHI ###
load('INI_POINTS_800.mat');

##### 1 - INITIAL PARAMETERS Polar Coordinates
CA = CA+eps;
V = 25000;                                # MAX NUMBER OF ITERATIONS
n = 10;                                    #TRAPZ INTERMEDIATE POINTS # AB
h = [0:1/n:1];                             #TRAPZ SPACING
##### 2 - START VALUES
counter = 0;
O = length(CA);                            #NUMBER OF POINTS
Q = (1:1:O)';                               #ARRAY OF POINTS
FV1b = [1,100000];
FV1c = [1,100000];
stop_global = 100000;
tRi_A = 1;
tRi_dists = 1;
FACTOR = (1/max(FV1c(:,2)));
# Counters
[i] = 1;
[l] = 0;
[ii] = 0;
##### 3 - ITERATION
while (i)<V;
    if (max(FV1c(:,2))) > (0.1*O);
        FACTOR = ((0.25/sqrt(O))*(1/max(FV1c(:,2))));
    elseif (max(FV1c(:,2))) > (0.02*O);
        FACTOR = (0.5/(O^1.5));
    else
        FACTOR = (0.05/(O^1.5));
    endif
    printf("In iteration step %d :\n",i);
    [i] = i+1;
    [l] = l+1;
##### 4 - EQUATIONS/MATRICES (Zeta(Theta,Phi))
##### 4.1 - Star surface #Eq.(13) CUSHION
[CB] = [(sqrt(0.8+(0.5*(cos(4.*CA(:,1))-1)*(cos(2.*CA(:,2))-1)))*sin(CA(...
: ,1))*cos(CA(:,2))), (sqrt(0.8+(0.5*(cos(4.*CA(:,1))-1)*(cos(2.*CA(...
: ,2))-1)))*sin(CA(:,1))*sin(CA(:,2))), (sqrt(0.8+(0.5*(cos(4.*CA(...
: ,1))-1)*(cos(2.*CA(:,2))-1)))*cos(CA(:,1))];
lpts = CB;
##### 4.2 - Star partial derivatives zeta(THETA,PHI)
[DZt] = [(-sin(CA(:,1))*sin(4.*CA(:,1))*cos(CA(:,2)))*(cos(2.*CA(:,2))-
1)/sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1)*(cos(4.*CA(:,1))-1)-
1)/2+0.8)+cos(CA(:,1))*cos(CA(:,2))*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1)*(cos(4.*CA(:,1))-
1)/2+0.8)),...
-sin(CA(:,1))*sin(CA(:,2))*sin(4.*CA(:,1))*(cos(2.*CA(:,2))-
1)/sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1)*(cos(4.*CA(:,1))-1)-
1)/2+0.8)+sin(CA(:,2))*cos(CA(:,1))*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1)*(cos(4.*CA(:,1))-
1)/2+0.8)),...
-sin(4.*CA(:,1))*cos(CA(:,1))*(cos(2.*CA(:,2))-1)/sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1)*(cos(4.*CA(:,1))-1)-
1)/2+0.8)-sin(CA(:,1))*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1)*(cos(4.*CA(:,1))-
1)/2+0.8)];
[DZp] = [(-sin(CA(:,1))*sin(2.*CA(:,2))*cos(CA(:,2)))*(cos(4.*CA(:,1))-
1)/(2.*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1)*(cos(4.*CA(:,1))-1)/2+0.8))-
sin(CA(:,1))*sin(CA(:,2))*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1)*(cos(4.*CA(:,1))-1)/2+0.8)),...
-sin(CA(:,1))*sin(CA(:,2))*sin(2.*CA(:,2))*cos(4.*CA(:,1))-
1)/(2.*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1)*(cos(4.*CA(:,1))-1)-
1)/2+0.8)+sin(CA(:,1))*cos(CA(:,2))*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1)*(cos(4.*CA(:,1))-
1)/2+0.8)),...

```

```

-sin(2.*CA(:,2)).*cos(CA(:,1)).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./(2.*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8));
##### 4.3 - Star second derivatives partial zeta(THETA,PHI)
[DZtT] = [(-sin(CA(:,1))).*cos(CA(:,2)).*(sin(4.*CA(:,1))).^2.*(cos(2.*CA(:,2))-
1).^2./((cos(2.*CA(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8))-
2.*sin(4.*CA(:,1)).*cos(CA(:,1)).*cos(CA(:,2)).*(cos(2.*CA(:,2))-1)./sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8))-
4.*sin(CA(:,1)).*cos(CA(:,2)).*cos(4.*CA(:,1)).*(cos(2.*CA(:,2))-1)./sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8))-sin(CA(:,1)).*cos(CA(:,2)).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8)),...
-sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2)).*((sin(4.*CA(:,1))).^2).*((cos(2.*CA(:,2))-
1).^2)./((cos(2.*CA(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8))-
2.*sin(CA(:,2)).*sin(4.*CA(:,1)).*cos(CA(:,1)).*(cos(2.*CA(:,2))-1)./sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8))-
4.*sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2)).*cos(4.*CA(:,1)).*(cos(2.*CA(:,2))-1)./sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8))-sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2)).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8)),...
-cos(CA(:,1)).*((sin(4.*CA(:,1))).^2).*((cos(2.*CA(:,2))-1).^2)./((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-
1)./2+0.8))+2.*sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2)).*sin(4.*CA(:,1)).*(cos(2.*CA(:,2))-1)./sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8))-4.*cos(CA(:,1)).*cos(4.*CA(:,1)).*(cos(2.*CA(:,2))-
1)./sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8))-
cos(CA(:,1)).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8));
[DZpT] = [-sin(CA(:,1)).*sin(2.*CA(:,2)).*sin(4.*CA(:,1)).*cos(CA(:,2)).*(cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8)-sin(CA(:,1)).*(cos(2.*CA(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-
1)./2+0.8).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-
1)./2+0.8))+sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2)).*sin(4.*CA(:,1)).*(cos(2.*CA(:,2))-
1)./sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8))-
sin(2.*CA(:,2)).*cos(CA(:,1)).*cos(CA(:,2)).*(cos(4.*CA(:,1))-
1)./2+0.8))+2.*sin(CA(:,1)).*sin(2.*CA(:,2)).*sin(4.*CA(:,1)).*cos(CA(:,2))./sqrt((cos(2.*C
A(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8))-sin(CA(:,2)).*cos(CA(:,1)).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8)),...
-sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2)).*sin(2.*CA(:,2)).*sin(4.*CA(:,1)).*(cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8)).*(cos(2.*CA(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-
1)./2+0.8).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8))-
sin(CA(:,1)).*sin(4.*CA(:,1)).*cos(CA(:,2)).*(cos(2.*CA(:,2))-1)./sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8))-
sin(CA(:,2)).*sin(2.*CA(:,2)).*cos(CA(:,1)).*(cos(4.*CA(:,1))-
1)./2+0.8))+2.*sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2)).*sin(2.*CA(:,2)).*sin(4.*CA(:,1))./sqrt((cos(2.*C
A(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8))+cos(CA(:,1)).*cos(CA(:,2)).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8)),...
-sin(2.*CA(:,2)).*sin(4.*CA(:,1)).*cos(CA(:,1)).*(cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8)).*(cos(2.*CA(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-
1)./2+0.8).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8))+sin(CA(:,1)).*sin(2.*CA(:,2)).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8)).*(cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8))+2.*sin(2.*CA(:,2)).*sin(4.*CA(:,1)).*cos(CA(:,1))./sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)/2+0.8)];
[DZtP] = [(-sin(CA(:,1)).*sin(2.*CA(:,2)).*sin(4.*CA(:,1)).*cos(CA(:,2)).*(cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8)).*(cos(2.*CA(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-
1)./2+0.8).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-
1)./2+0.8))+sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2)).*sin(4.*CA(:,1)).*(cos(2.*CA(:,2))-
1)./sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8))-
sin(2.*CA(:,2)).*cos(CA(:,1)).*cos(CA(:,2)).*(cos(4.*CA(:,1))-
1)./2+0.8))+2.*sin(CA(:,1)).*sin(2.*CA(:,2)).*sin(4.*CA(:,1)).*cos(CA(:,2))./sqrt((cos(2.*C
A(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8))-sin(CA(:,2)).*cos(CA(:,1)).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8)),...
-sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2)).*sin(2.*CA(:,2)).*sin(4.*CA(:,1)).*(cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8)).*(cos(2.*CA(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-
1)./2+0.8).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8))-
sin(CA(:,1)).*sin(4.*CA(:,1)).*cos(CA(:,2)).*(cos(2.*CA(:,2))-1)./sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8))-
sin(CA(:,2)).*sin(2.*CA(:,2)).*cos(CA(:,1)).*(cos(4.*CA(:,1))-
1)./2+0.8))+2.*sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2)).*sin(2.*CA(:,2)).*sin(4.*CA(:,1))./sqrt((cos(2.*C

```

```

A(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8)+cos(CA(:,1)).*cos(CA(:,2)).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8)),...
    -sin(2.*CA(:,2)).*sin(4.*CA(:,1)).*cos(CA(:,1)).*(cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./(2.*((cos(2.*CA(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-
1)./2+0.8)).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-
1)./2+0.8))+sin(CA(:,1)).*sin(2.*CA(:,2)).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./(2.*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-
1)./2+0.8))+2.*sin(2.*CA(:,2)).*sin(4.*CA(:,1)).*cos(CA(:,1))./sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8));
[DZpP] = [-sin(CA(:,1)).*cos(CA(:,2)).*(sin(2.*CA(:,2))).^2.*(cos(4.*CA(:,1))-
1).^2./(4.*((cos(2.*CA(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8)).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-
1)./2+0.8))+sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2)).*sin(2.*CA(:,2)).*(cos(4.*CA(:,1))-
1)./sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8)-
sin(CA(:,1)).*cos(CA(:,2)).*cos(2.*CA(:,2)).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8))-sin(CA(:,1)).*cos(CA(:,2)).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8)),...
    -sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2)).*((sin(2.*CA(:,2))).^2).*((cos(4.*CA(:,1))-
1).^2)./(4.*((cos(2.*CA(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8)).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8))-
sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2)).*cos(2.*CA(:,2)).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8)-
sin(CA(:,1)).*sin(2.*CA(:,2)).*cos(CA(:,2)).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8))-sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2)).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8)),...
    -cos(CA(:,1)).*((sin(2.*CA(:,2))).^2).*((cos(4.*CA(:,1))-
1).^2)./(4.*((cos(2.*CA(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8)).*sqrt((cos(2.*CA(:,2))-
1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8))-cos(CA(:,1)).*cos(2.*CA(:,2)).*(cos(4.*CA(:,1))-
1)./sqrt((cos(2.*CA(:,2))-1).*(cos(4.*CA(:,1))-1)./2+0.8)];
##### 4.1 - Star surface #Eq.(13) ACORN
## [CB] = [(0.5.*(0.6.+sqrt(4.25.+2.*cos(3.*CA(:,1))))).*sin(CA(:,1)).*cos(CA(:,2)),...
##
## (0.5.*(0.6.+sqrt(4.25.+2.*cos(3.*CA(:,1))))).*sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2)),...
## (0.5.*(0.6.+sqrt(4.25.+2.*cos(3.*CA(:,1))))).*cos(CA(:,1))];
## lpts = CB;
##### 4.2 - Star partial derivatives zeta((CA(:,1)),PHI)
## [DZt] = [(-
3.*sin(CA(:,1)).*sin(3.*CA(:,1)).*cos(CA(:,2))./(2.*sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25)...
## )+(sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25).+0.6).*cos(CA(:,1)).*cos(CA(:,2))./2),...
## (-
3.*sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2)).*sin(3.*CA(:,1))./(2.*sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25)...
## )+(sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25).+0.6).*sin(CA(:,2)).*cos(CA(:,1))./2),...
## (-3.*sin(3.*CA(:,1)).*cos(CA(:,1))./(2.*sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25)...
## )-(sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25).+0.6).*sin(CA(:,1))./2)];
## [DZp] = [(-sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25).+0.6).*sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2))./2),...
## ((sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25).+0.6).*sin(CA(:,1)).*cos(CA(:,2))./2),...
## (zeros(length(CA),1))];
##### 4.3 - Star second derivatives partial zeta((CA(:,1)),PHI)
## [DZtT] = [((-
9.*sin((CA(:,1))).*cos((CA(:,2))).*(sin(3.*CA(:,1))).^2)./(2.*(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25
).*sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25))-
(3.*sin(3.*CA(:,1)).*cos((CA(:,1))).*cos((CA(:,2)))./sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25))-
(9.*sin((CA(:,1))).*cos((CA(:,2))).*cos(3.*CA(:,1))./(2.*sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25
))-((sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25).+0.6).*sin((CA(:,1))).*cos((CA(:,2))./2)),... ##
d/(CA(:,1))'-d/(CA(:,1))'
## ((-
9.*sin((CA(:,1))).*sin((CA(:,2))).*(sin(3.*CA(:,1))).^2)./(2.*(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25
).*sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25))-
(3.*sin((CA(:,2))).*sin(3.*CA(:,1))).*cos((CA(:,1)))./sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25))-
(9.*sin((CA(:,1))).*sin((CA(:,2))).*cos(3.*CA(:,1))./(2.*sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25
))-((sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25).+0.6).*sin((CA(:,1))).*sin((CA(:,2))./2)),...
## ((-
((9.*cos((CA(:,1))).*(sin(3.*CA(:,1))).^2)./(2.*(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25)).*sqrt((2.*c
os(3.*CA(:,1)).+4.25))))+(3.*sin((CA(:,1))).*sin(3.*CA(:,1))./sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1))
).+4.25))-9.*cos((CA(:,1)).*cos(3.*CA(:,1))./(2.*sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25)))-
((sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25).+0.6).*cos((CA(:,1))./2))];
## [DZpT] =
[3.*sin((CA(:,1))).*sin((CA(:,2))).*sin(3.*CA(:,1))./(2.*sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25
))-sqrt(2.*cos(3.*CA(:,1)).+4.25).+0.6).*sin((CA(:,2))).*cos((CA(:,1))./2),...
##d/(CA(:,2))'-d/(CA(:,1))'

```

```

##      (-
(3.*sin((CA(:,1))).*sin(3.*(CA(:,1))).*cos((CA(:,2))))./((2.*sqrt(2.*cos(3.*(CA(:,1))).+4.25)
))+((sqrt(2.*cos(3.*(CA(:,1))).+4.25).+0.6).*cos((CA(:,1))).*cos((CA(:,2)))./2)),...
##      (zeros(length(CA),1));
##[DZtP] =
[(3.*sin((CA(:,1))).*sin((CA(:,2))).*sin(3.*(CA(:,1)))./((2.*sqrt(2.*cos(3.*(CA(:,1))).+4.25)
))-sqrt(2.*cos(3.*(CA(:,1))).+4.25).+0.6).*sin((CA(:,2))).*cos((CA(:,1)))./2)),...
##      (-
(3.*sin((CA(:,1))).*sin(3.*(CA(:,1))).*cos((CA(:,2))))./((2.*sqrt(2.*cos(3.*(CA(:,1))).+4.25)
))+((sqrt(2.*cos(3.*(CA(:,1))).+4.25).+0.6).*cos((CA(:,1))).*cos((CA(:,2)))./2)),...
##      (zeros(length(CA),1));
##[DZpP] = [(-
(sqrt(2.*cos(3.*(CA(:,1))).+4.25).+0.6).*sin((CA(:,1))).*cos((CA(:,2)))./2)),...
##      (-sqrt(2.*cos(3.*(CA(:,1))).+4.25).+0.6).*sin((CA(:,1))).*sin((CA(:,2)))./2)),...
##      (zeros(length(CA),1));
##### 4.4 - Unit Sphere surface #Eq.(12)
[cb] = [(sin(CA(:,1)).*cos(CA(:,2))), (sin(CA(:,1)).*sin(CA(:,2))), (cos(CA(:,1)))];
##### 5 - n-Vector at Star partial derivatives points matrix #Eq.(16)
[DB] = cross(DZt(:, :), DZp(:, :), 2) ./ norm(cross(DZt(:, :), DZp(:, :), 2), 'rows');
##### 6 - MATRIX EXPANSION
##### 6.1 - (A,B) Pairs Polar coordinates
##### LINE = (A-1)*(0-1)+(B):(B<A), (A-1)*(0-1)+(B-1):(B>A)
C2 = [Q, CA];
C3 = repmat(C2, 0, 1); # (B) 0 ARRAYS (1,2,...,0;1,2...,0...)
C4 = sortrows(C3, 1); # (A) 0 ARRAYS (1,1,...,0;2,2...,0...)
C5 = [C4(:, 1), C3(:, 1), C4(:, 2:3), C3(:, 2:3)]; # C4=A, C3=B
C6 = a11((C5(:, 2)-C5(:, 1))==0, 2);
C3(C6, :) = [];
C4(C6, :) = [];
C5(C6, :) = [];
##### 6.2 - (A,B) Pars cartesian coordinates star surface
##### LINE = (A-1)*(0-1)+(B):(B<A), (A-1)*(0-1)+(B-1):(B>A)
D2 = [Q, CB];
D3 = repmat(D2, 0, 1); # (B) 0 ARRAYS (1,2,...,0;1,2...,0...)
D4 = sortrows(D3, 1); # (A) 0 ARRAYS (1,1,...,0;2,2...,0...)
D5 = [D4(:, 1), D3(:, 1), D4(:, 2:4), D3(:, 2:4)]; # D4=A, D3=B
D6 = a11((D5(:, 2)-D5(:, 1))==0, 2);
D3(D6, :) = [];
D4(D6, :) = [];
D5(D6, :) = [];
##### 6.3 - (A,B) Pars cartesian coordinates DERIVATIVES
##### LINE = (A-1)*(0-1)+(B):(B<A), (A-1)*(0-1)+(B-1):(B>A)
DB2 = [Q, DB];
DB3 = repmat(DB2, 0, 1); # (B) 0 ARRAYS (1,2,...,0;1,2...,0...)
DB4 = sortrows(DB3, 1); # (A) 0 ARRAYS (1,1,...,0;2,2...,0...)
DB5 = [DB4(:, 1), DB3(:, 1), DB4(:, 2:4), DB3(:, 2:4)]; # D4=A, D3=B
DB6 = a11((DB5(:, 2)-DB5(:, 1))==0, 2);
DB3(DB6, :) = [];
DB4(DB6, :) = [];
DB5(DB6, :) = [];
##### 6.4 - (A,B) Pars cartesian coordinates Unit Sphere
##### LINE = (A-1)*(0-1)+(B):(B<A), (A-1)*(0-1)+(B-1):(B>A)
d2 = [Q, cb];
d3 = repmat(d2, 0, 1); # (B) 0 COLECOES DE VETORES CADA SEQUENCIAL (1,2,...,0;1,2...,0...)
d4 = sortrows(d3, 1); # (A) 0 COLECOES DE VETORES ORDENADAS (1,1,...,0;2,2...,0...)
d5 = [d4(:, 1), d3(:, 1), d4(:, 2:4), d3(:, 2:4)]; # d4=A, d3=B
d6 = a11((d5(:, 2)-d5(:, 1))==0, 2);
d3(d6, :) = [];
d4(d6, :) = [];
d5(d6, :) = [];
##### 7 - F(AB) CALCULATIONS
##### 7.1 - T(AB) Star surface for ds(AB) #Eq.(17)
TAB = [(((D5(:, 6:8)-D5(:, 3:5))-dot((D5(:, 6:8)-D5(:, 3:5)), DB5(:, 6:8), 2).*DB5(:, 6:8)...
)./norm(((D5(:, 6:8)-D5(:, 3:5))-dot((D5(:, 6:8)-D5(:, 3:5)),...
DB5(:, 6:8), 2).*DB5(:, 6:8)), 'rows'))];
##### 7.2 - dS(AB) Calculation Star surface
##### 7.2 - Curvature calculation at (Ka) #Eq. (28)
K = abs(-(dot((cross(DZt, DZp, 2)), (cross((cross(DZtT, DZp, 2))+cross(DZt, DZpT, 2))), DZp, 2
))+cross(DZt, (cross(DZtP, DZp, 2))+cross(DZt, DZpP, 2)), 2))./(2.*(norm(cross(
DZt, DZp, 2), 'rows').^3)));
K1 = [Q, K]; ##### K COM NUMERACAO DE NOS PARA CONTROLO #####

```

```

K2 = sortrows(repmat(K1,0-1,1),1); ##### 0 COLECOES DE Ka ORDENADAS #####
##### 7.2 - ||B-A|| Calculation
AB = (norm((D3(:,2:4)-D4(:,2:4)),'rows'));
ds = AB;
##### 7.3 - F(AB) Star surface aproximation ponderation by curvature
KAB = ((AB.^2)).*(1+(K2(:,2))./0.1);#.*K2(:,2))/(max(K2(:,2))-min(K2(:,2)));
FABV1 = TAB./KAB; ##### F from A over B
##### 7.3.1 - Forces over each B point
FABV1ACUx = accumarray(D5(:,2),FABV1(:,1)); ##### F accumulation x
FABV1ACUy = accumarray(D5(:,2),FABV1(:,2)); ##### F accumulation y
FABV1ACUz = accumarray(D5(:,2),FABV1(:,3)); ##### F accumulation z
FABV1b = [FABV1ACUx, FABV1ACUy, FABV1ACUz]; ##### F's on each B
##### 7.4 - TOTAL ENERGY (distance inter points)
TE = sum(1./AB)/2;
#####
##### END F(AB) CALCULATION #####
##### START ITERATION CALCULATION #####
#####
##### 8 - n VECTOR At B
nCB = DB(:,:)./(norm(DB(:,:)),'rows'));
##### 9 - f(B) Tangent at B
FABTAN = FABV1b-(dot(FABV1b,nCB,2).*nCB);
##### 10 - f(B) MAGNITUDE
FV1b = [Q,(norm(FABV1b,'rows'))]; # f(B) Acu all As
FV1c = [Q,(norm(FABTAN,'rows'))]; # f(B) Acu tangent all As
##### 11 - ITERATION PLOT
##if i>WAIT;
## run('Cush_Iter');
##endif
##### 12 - APPLY FORCES f(AB)
QST = FABTAN.*FACTOR; #.*(K(:,1)/(max(K(:,1))-min(K(:,1)))); #(FACTOR./max(FV1c(:,2)));
[zD7] = CB + QST;
##### 13 - POLAR COORDINATES NEW POSITION
CA1 = (pi/2)-atan2(zD7(:,3),sqrt(zD7(:,1).^2+zD7(:,2).^2));
CA2 = atan2(zD7(:,2),zD7(:,1));
CDCA2 = all((CA2)<0,2);
CDCA2 = CDCA2.*(2*pi);
CA2 = CA2+CDCA2;
CA = [CA1 CA2];
##### 14 - Stop Variable + Accumulations
stop = max(FV1c(:,2));
FV1C(i) = max(FV1c(:,2));
LAMBDA(i) = FACTOR;
CONTA(i) = counter;
FV1B(i) = max(FV1b(:,2));
FVTOT(i) = sum(FV1c(:,2));
TEI(i) = TE;
##### 15 - Stopping condition and save minima
printf('stop : %d %d \n',FACTOR,stop);
if stop < stop_global;
stop_global = stop;
ii = i;
counter = 0;
F1 = CA;
F2 = zD7;
F3 = FV1c;
F4 = FABTAN;
F5 = tRi_A;
F5 = real(F5);
F6 = tRi_dists;
else
counter = counter+1;
printf("counter : %d \n",counter);
if counter > 2499 && stop_global < 9;
printf("Break condition \n");
break;
endif
endif
endwhile
##### 16 - Triangles Distance

```

```

lpts = F2;
npts=size(lpts,1);
caux=0.6;
lptsaux=[lpts;caux*lpts];
tetra=de1aunay(lptsaux(:,1),lptsaux(:,2),lptsaux(:,3));
pos=(tetra<=npts);
pos=(sum(pos,2)==3);
tetra_surf=tetra(pos,:);
tetraaux=sort(tetra_surf,2);
tri=tetraaux(:,1:3);
DISTS = [(norm((lpts(tri(:,1),:))-lpts(tri(:,2),:)), 'rows'))...
          (norm((lpts(tri(:,2),:))-lpts(tri(:,3),:)), 'rows'))...
          (norm((lpts(tri(:,3),:))-lpts(tri(:,1),:)), 'rows'))];
##### 16.b - Surface Triangles Distance
tRi_pairs = [sort([tri(:,1),tri(:,2)],2), sort([tri(:,2),tri(:,3)],2), sort(...
[tri(:,3),tri(:,1)],2)];
tRi_lines = [((tRi_pairs(:,1)-1)*(0-1)+(tRi_pairs(:,2)-1)), ((tRi_pairs(:,3)-1)*(...
0-1)+(tRi_pairs(:,4)-1)), ((tRi_pairs(:,5)-1)*(0-1)+(tRi_pairs(...
:,6)-1))]; # (A-1)*(0-1)+(B-1):(B>A)
tRi_dists = [(ds(tRi_lines(:,1))), (ds(tRi_lines(:,2))), (ds(tRi_lines(:,3)))];
tRi_S = ((tRi_dists(:,1)+tRi_dists(:,2)+tRi_dists(:,3))./2);
tRi_A = sqrt(tRi_S.*(tRi_S-tRi_dists(:,1)).*(tRi_S-tRi_dists(:,2)).*(...
tRi_S-tRi_dists(:,3)));
tRi_C = tRi_dists./max(tRi_dists(:));
##### 16.c - tRi_dists std
tRi_area = sum(tRi_A(:))/length(tRi_A(:));
F5 = real(tRi_A);
##### 17.a - Definitions
d = min(tRi_dists(:));
epsilon = max(tRi_dists(:))-d;
##### 18 - RESULTS
Z1 = ii; ## N_ITERACOES
Z2 = CONTA(2:(end))';
Z3 = LAMBDA(2:(end))';
Z4 = FV1C(2:(end))'; # CONVERGENCIA FORCA TANGENTE
Z5 = FVTOT(2:(end))';
Z6 = TEI(2:(end))';
R1 = mean(tRi_dists(:));
R2 = std(tRi_dists(:));
R3 = mean(real(tRi_A(:)));
R4 = std(real(tRi_A(:)));
F5 = real(tRi_A);
F6 = tRi_dists;
F7 = unique(F6(:));
F8 = min(real(tRi_A(:)));
F9 = max(real(tRi_A(:)));
TIME = toc;
TIME

```