Apêndice D

Análise de Convexidade para Snakes

Neste Apêndice analisamos a conexidade do modelo de snakes procurando com isto estabelecer relações entre o comportamento dos modelos das seções 3.1 e 3.2 e os parâmetros correspondentes.

Dentre as propostas encontradas na literatura para tratar os problemas da não conexidade da energia do modelo original, encontramos a utilização de métodos multi-escala , reparametrização, forças adicionais, programação dinâmica, métodos duais, interação com o usuário e ajuste de parâmetros.

Nos métodos multi-escala, o modelo é resolvido para uma resolução mais baixa (escala grossa) da imagem e sua solução nesta resolução é usada como condição inicial para a escala seguinte (Leymarie & Levine, 1993). À medida que o método avança para escalas mais finas espera-se ficar mais próximo do mínimo (global) desejado. Esta metodologia tem o custo computacional extra de se montar a representação multi-escala da imagem e, caso a seqüência de escalas utilizada não seja adequada, a convergência para o contorno procurado pode não ocorrer.

O princípio básico dos métodos multi-escala consiste no fato de que, ao passarmos de uma resolução mais grossa para a seguinte, acrescentamos detalhes na imagem (pequenos artefatos e ruídos) os quais *perturbam* a snake. Esta perturbação se reflete em um desequilíbrio de forças sobre a curva podendo fazer com que a mesma atinja uma posição mais próxima da borda desejada.

O efeito de perturbar a snake pode ser obtido também através de reparametrização da curva. Na prática, isto equivale a criar mais snaxels, diminuindo assim as forças internas.

O modelo de Balloon da seção 3.4 pode ser visto também como uma tentativa para vencer os efeitos da não conexidade do modelo original. Neste caso, a força normal adicional tem o papel de "conduzir" a snake para o mínimo global diminuindo assim a sensibilidade com relação à inicialização decorrente da falta de conexidade.

Assim como (Cohen, 1991), Gang Xu at al. (Xu *et al.* , 1994) sugerem também a adição de força internas extras mas de uma forma mais sistemática. Neste caso, a curva é aproximada localmente pelo círculo definido pelo centro e raio de curvatura e a partir desta aproximação é obtida uma relação envolvendo os parâmetros das forças internas. Esta relação fornece uma estimativa para a força normal interna a qual é usada para redefinir os parâmetros do modelo durante a evolução da snake. O método desenvolvido por Gang Xu at al. (Xu *et al.* , 1994) tem ainda a vantagem de ser menos sensível à escolha de parâmetros. Contudo, o método torna a curva menos sensível a contornos mal definidos (*subjetivos*), tem o custo adicional da determinação da aproximação local da curva e sua extensão para o caso 3D não é óbvia.

Os métodos envolvendo programação dinâmica e contornos duais foram discutidos em detalhe nos Capítulos 4 e 5.

A interação com o usuário é um ponto delicado no contexto de snakes. Embora o principal desafio nestes métodos seja prescindir totalmente da intervenção humana, isto pode ser difícil de conseguir na prática, não apenas pela não conexidade da energia mas também pela subjetividade inerente à definição de borda de objetos numa imagens.

Dentre as metodologias usadas para interação com o usuário temos a utilização de pontos atratores ou repulsores e a criação de modelos híbridos usando o método de snakes e métodos de extração de bordas baseados em paradigmas interativos, tais como o *live-wire* (Liang *et al.* , 1999b; Falcão *et al.* , 1996).

Outro método para lidar com este problema consiste primeiramente em procurar condições que garantam a conexidade da energia (3.6) na região de interesse. Tendo a garantia de conexidade, um método de otimização pode ser aplicado com segurança de convergência.

O ponto de partida deste Apêndice é procurar condições que garantam a conexidade da energia (3.6) na região de interesse. Em (Davatzikos & Prince, 1999) encontramos semelhante análise, baseada em um modelo discreto de snakes.

A apresentação a seguir está baseada em nosso relatório técnico (Giraldi & Oliveira, 1999). O principal objetivo deste trabalho é extender a análise de conexidade da energia apresentada em (Davatzikos & Prince, 1999) de forma a incorporar o espaço de velocidades da snake. A principal conseqüência desta análise é encontrar condições necessárias para garantir a convergência para o contorno desejado de uma versão para dimensão finita do modelo da seção 3.2.

Neste sentido, iniciamos revisando o trabalho de (Davatzikos & Prince, 1999). A seguir apresentamos o modelo de snake de interesse, o qual se constitui em um sistema dinâmico cuja análise qualitativa é apresentada na seção D.2.2. Finalmente, apresentamos a análise quantitativa do mesmo a qual interliga os parâmetros dinâmicos (massa linear μ e amortecimento γ) com a energia potencial do mesmo.

D.1 Análise de Convexidade do Modelo Original

A análise de conexidade do modelo (3.6) poderia em princípio ser feita via segunda variação (Dubrovin *et al.* , 1984) do funcional de energia. Infelizmente, os resultados de semelhante análise são de pouca utilidade prática o que dirigiu a pesquisa na direção de versões discretas do modelo (3.6).

Com esta simplificação, o funcional (3.6) se torna uma função não-linear. O problema de otimização correspondente pode ser resolvido então por um método do tipo *stepest descent* (Chapra & Canale, 1988), desde que se possa garantir conexidade da energia discretizada. Daí a importância do estudo de conexidade do modelo.

Consideramos então a curva (snake) como uma coleção de pontos

$$\left\{ q_i = (x_i, y_i)^T \ , \ i = 0, 1, ..., N \right\}, \tag{D.1}$$

onde $q_i = c\,(i/N)$ e c é a curva.

Na análise desta seção estaremos supondo contornos abertos e os parâmetros ω_1 e ω_2 do modelo (3.6) constantes. Desta forma, o vetor de pontos livres da curva (discreta) será:

$$d = (q_1, q_2, ..., q_{N-2}, q_{N-1}) \, . \tag{D.2}$$

Assim, nós podemos obter uma aproximação discreta expressão 3.6 pela aplicação de diferenças finitas do tipo usado na seção 3.2.3, obtendo-se

$$\bar{E}\,(d) = \bar{E}_{int}\,(d) + \bar{E}_{ext}\,(d)\,, \tag{D.3}$$

onde $\bar{E}_{int}\,(d)$ e $\bar{E}_{ext}\,(d)$ são as versões discretas das energias interna (funcional (3.4)) e externa (funcional (3.5)) do modelo original. As expressões exatas para $\bar{E}_{int}\,(d)$ e $\bar{E}_{ext}\,(d)$ pode ser encontradas em (Davatzikos & Prince, 1999) .

A condição necessária para d minimizar $\bar{E}\,(d)$ é dada por:

$$\nabla \bar{E}\,(d) = \omega_1 N\,(2A_1 d - b_1) + \omega_2 N^3\,(2A_2 d - b_2) + \nabla_d P = 0, \tag{D.4}$$

onde b_1, b_2 são vetores de dimensão $2(N-1)$ relacionados com as condições de fronteira, $A_1 = diag\,(B_1)$ e $A_2 = diag\,(B_2)$ com B_1 sendo uma matriz simétrica do tipo Toeplitz, 3-diagonal, cuja primeira linha é $(2, -1, ..., 0)$ e B_2 é uma matriz simétrica e 3-diagonal (para detalhes ver (Davatzikos & Prince, 1999)).

Se $\bar{E}\,(d)$ é estritamente convexa, então (D.4) é também condição suficiente, e d é o único ponto de mínimo para $\bar{E}\,(d)$.

No que segue, o domínio de definição do potencial P é denotado por R. Assim, o domínio D onde d toma valores é dado por:

$$D = \left\{ (q_1, q_2, ..., q_{N-2}, q_{N-1}) \in R^{2N-2};\ q_i \in \Re^2, i = 1, ..., N-1 \right\}, \tag{D.5}$$

D.1.1 Análise de Convexidade

O objetivo em (Davatzikos & Prince, 1999) é estabelecer condições para as quais $\bar{E}(d)$ é estritamente convexa. O fato de $\bar{E}(d)$ ser uma função escalar definida em D dado acima implica que $\bar{E}(d)$ será estritamente convexa em uma região R se a matriz Hessiana de $\bar{E}(d)$ (aqui denotada por $D^2\bar{E}(d)$) for definida positiva em R; isto é, se o menor autovalor de $D^2\bar{E}(d)$ for maior que zero:

$$\lambda_{\min}\left(D^2\bar{E}(d)\right) > 0 \Longleftrightarrow \lambda_{\min}\left(D^2\bar{E}_{int}(d) + D^2\bar{E}_{ext}(d)\right) > 0, \tag{D.6}$$

onde $D^2\bar{E}_{int}(d)$ e $D^2\bar{E}_{ext}(d)$ são as Hessianas de $\bar{E}_{int}(d)$ e $\bar{E}_{ext}(d)$, respectivamente.

Usando o fato de que o menor autovalor da soma de duas matrizes simétricas é maior ou igual à soma dos menores autovalores das duas matrizes, nós encontramos a seguinte condição suficiente para garantir a conexidade de $\bar{E}_{ext}(d)$:

$$\lambda_{\min}\left(D^2\bar{E}_{int}(d)\right) + \lambda_{\min}\left(D^2\bar{E}_{ext}(d)\right) > 0. \tag{D.7}$$

Pode ser mostrado que os autovalores de $D^2\bar{E}_{int}(d)$ coincidem com aqueles da matriz $2\omega_1 N A_1 +\ 2\omega_2 N^3 A_2$ (Davatzikos & Prince, 1999). Além disso, uma vez que A_1 é diagonal de blocos, seus autovalores coincidem com aqueles de B_1. De maneira similar, os autovalores de A_2 coincidem com aqueles de B_2. Portanto, concluímos que:

$$\lambda_{\min}\left(D^2\bar{E}_{int}(d)\right) \geq 2\omega_1 N \lambda_{\min}(B_1) + 2\omega_2 N^3 \lambda_{\min}(B_2) > 0. \tag{D.8}$$

Uma vez que B_1 é Toeplitz 3-diagonal, seus autovalores podem ser encontrados via uma fórmula recursiva (Davatzikos & Prince, 1999), obtendo-se o seguinte autovalor mínimo:

$$\lambda_{\min}(B_1) = 2\left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{N}\right)\right). \tag{D.9}$$

Os autovalores de B_2 satisfazem uma relação de recursão a qual não possui uma solução explícita, mas apresenta um limite inferior dado por (Davatzikos & Prince, 1999):

$$\lambda_{\min}(B_2) \geq \lambda_{\min}(B_1)^2 . \tag{D.10}$$

Substituindo as expressões (D.9)-(D.10) em (D.8) encontramos o seguinte resultado:

$$\lambda_{\min}\left(D^2 \bar{E}_{int}(d)\right) \geq 4\omega_1 N \left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{N}\right)\right) + 8\omega_2 N^3 \left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{N}\right)\right)^2 . \tag{D.11}$$

Analisaremos a seguir a energia externa.

D.1.2 Hessiana da Energia Externa

Primeiramente, nós devemos notar que a matriz $D^2 \bar{E}_{ext}(d)$ é diagonal de blocos com os elementos da diagonal dados por:

$$D_i = \frac{1}{N} \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 P(q_i)}{\partial x_i^2} & \frac{\partial^2 P(q_i)}{\partial x_i \partial y_i} \\ \frac{\partial^2 P(q_i)}{\partial x_i \partial y_i} & \frac{\partial^2 P(q_i)}{\partial y_i^2} \end{bmatrix}, \; i = 1, ..., N-1, \tag{D.12}$$

onde $q_i = (x_i, y_i)^T$.

Assim, os autovalores de $D^2 \bar{E}_{ext}(d)$ podem ser determinados encontrando os autovalores das matrizes 2×2 acima.

Uma solução direta produz:

$$\lambda_{i1} = \frac{P_{xx}(q_i) + P_{yy}(q_i)}{2N} + \frac{\sqrt{\left(P_{xx}(q_i) - P_{yy}(q_i)\right)^2 + 4P_{xy}^2(q_i)}}{2N}, \tag{D.13}$$

$$\lambda_{i2} = \frac{P_{xx}(q_i) + P_{yy}(q_i)}{2N} - \frac{\sqrt{\left(P_{xx}(q_i) - P_{yy}(q_i)\right)^2 + 4P_{xy}^2(q_i)}}{2N}, \tag{D.14}$$

para $i = 1, ..., N-1$. O autovalor mínimo é:

$$\lambda_{\min}\left(D^2 \bar{E}_{ext}(d)\right) = \min\left\{\lambda_{i1}, \lambda_{i2};\; i = 1, ..., N-1\right\}. \tag{D.15}$$

Nós podemos dar um passo além para eliminar a dependência destas expressões com relação à localização específica dos pontos $q_i = (x_i, y_i)^T$. Para isto, vamos definir:

$$h_1 = \frac{P_{xx}(x,y) + P_{yy}(x,y)}{2N} + \frac{\sqrt{\left(P_{xx}(x,y) - P_{yy}(x,y)\right)^2 + 4P_{xy}^2(x,y)}}{2N}, \tag{D.16}$$

$$h_2 = \frac{P_{xx}(x,y) + P_{yy}(x,y)}{2N} - \frac{\sqrt{\left(P_{xx}(x,y) - P_{yy}(x,y)\right)^2 + 4P_{xy}^2(x,y)}}{2N}, \qquad \text{(D.17)}$$

Vejamos como é possível simplificar estas expressões. Primeiramente, nós consideramos a curva isopotencial passando por um ponto $(x,y)^T$ e assumimos a princípio que sua curvatura é não nula. Nós podemos então definir um sistema de coordenadas polares (local) cuja origem coincide com o centro de curvatura da curva (ver (Xu *et al.* , 1994) para detalhes). Nós agora consideramos o potencial como uma função das coordenadas locais r e ϕ (Figura D.1), e procuramos expressões para P_{xx}, P_{yy}, e P_{xy} nas novas coordenadas.

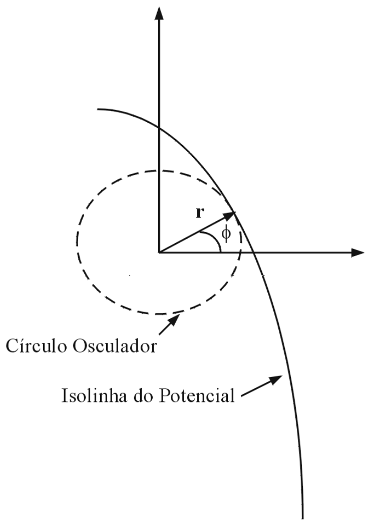

Figura D.1: Sistema de coordenadas locais no centro de curvatura da isolinha de potencial passando por um ponto q.

Primeiramente, pode ser mostrado que $P_\phi = P_{\phi\phi} = 0$ (Davatzikos & Prince, 1999). Além disso, notamos que os potenciais usados para extração de bordas possuem curvas impotênciais aproximadamente paralelas próximo às bordas, especialmente quando estas são suaves.

Por esta observação, é possível assumir $P_{r\phi} \approx 0$, e finalmente, aproximar (D.16)-(D.17) por:

$$h_1 \approx \frac{P_{rr}(x,y) + \frac{P_y(x,y)}{r(x,y)}}{4} + \left| P_{rr}(x,y) - \frac{P_y(x,y)}{r(x,y)} \right|, \qquad \text{(D.18)}$$

$$h_1 \approx \frac{P_{rr}(x,y) + \frac{P_y(x,y)}{r(x,y)}}{4} - \left| P_{rr}(x,y) - \frac{P_y(x,y)}{r(x,y)} \right|. \qquad \text{(D.19)}$$

Pode ser mostrado que (Davatzikos & Prince, 1999):

$$\underset{R}{min}\ \{h_1(x,y), h_2(x,y)\} = \underset{R}{min}\ \{e_1(x,y), e_2(x,y)\}, \tag{D.20}$$

onde:

$$e_1(x,y) = \frac{P_{rr}(x,y)}{2}, \qquad e_2(x,y) = \frac{P_r(x,y)}{2r(x,y)} \tag{D.21}$$

Usando esta expressão e o fato de que:

$$\lim_{N\to\infty} 2N^2\left(1-\cos\left(\frac{\pi}{N}\right)\right) = \pi^2. \tag{D.22}$$

nós podemos eliminar a dependência de N em (D.11) e finalmente escrever a condição de conexidade procurada na seguinte forma:

$$A(R") + \omega_1\pi^2 + \omega_2\pi^4 > 0, \tag{D.23}$$

onde $A(R") = \underset{R"}{min}\ \{e_1(x,y), e_2(x,y)\}$ e $R"$ é um subconjunto de R contendo a região de interesse.

Com esta análise é possível garantir que um método de otimização convergirá para a solução de (D.4) em $R"$. No entanto, nada garante que esta solução seja a borda desejada. A expressão acima fornece limites inferiores para os parâmetros do modelo. Estaremos mais seguros da eficiência do método se limitarmos superiormente o intervalo de variação de ω_1e ω_2.

Em (Davatzikos & Prince, 1995) encontramos um trabalho nesta direção no contexto de processamento de imagens tomográficas do córtex cerebral. Neste trabalho parte-se de um modelo de snakes sem rigidez ($\omega_2 = 0$) e uma força externa específica. Usando-se uma representação em série de Fourier para a snake, pode-se interpretar o as equações de Euler-Lagrange correspondentes como um filtro no espaço de freqüências aplicado sobre os dados. A freqüência de corte deste filtro (*cutoff frequency*) está diretamente relacionada ao parâmetro ω_1 e fornece o limite superior desejado (para maiores detalhes ver (Davatzikos & Prince, 1995)).

Este procedimento foi aplicado originalmente no contexto de modelos deformáveis em visão computacional (Witten, 1993) tendo resultado em um algoritmo elegante para o tracking no espaço de escalas linear (suavização Gaussiana). Contudo, estes métodos estão fora do escopo deste trabalho.

D.2 Snakes em Dimensão Finita

No modelo de contorno ativo original usado acima a otimização da energia pode ser feita via um método do tipo stepest descent, por exemplo.

Como mencionado na seção 3.2 um outro método para otimizar a energia da snake consiste em imergir a curva em um meio viscoso e resolver as equações dinâmicas correspondentes [Black-Yuille (1992)]. Esta metodologia é mais robusta em relação aos mínimos locais, mas é ainda sensível á não conexidade da energia. Nesta seção procuramos quantificar esta sensibilidade o que resulta em uma análise baseada em conceitos de sistemas dinâmicos e com um apelo geométrico característico do estudo das equações diferenciais ordinárias. Por outro lado, a análise que segue pode ser vista como uma generalização daquela apresentada acima, envolvendo agora também o espaço de velocidades.

Seja então um espaço de curvas admissíveis de dimensão finita, isto é, estaremos supondo que as bordas dos objetos de interesse possam ser representadas na forma:

$$c(s) = \sum_{i=0}^{N} q_i f_i(s) = B^T Q, \tag{D.24}$$

onde $B = \{f_0, f_1, ..., f_N\}$ é um conjunto de funções linearmente independentes (base do espaço) e $Q = (q_1, q_2, ..., q_{N-2}, q_{N-1})^T$ é um vetor coluna de pontos do plano, geralmente denominados pontos de controle da curva.

Os exemplos mais comuns de modelos deformáveis deste tipo são as D-NURBS (Qin & Terzopoulos, 1996), Splines Ativas (Black & Yuille, 1993) e B-Snakes (Brigger *et al.* , n.d.), os quais são baseados em funções polinomiais por partes pertencentes ao espaço das funções quadrado integráveis (?).

A configuração instantânea do sistema é dada por um ponto em um espaço de configurações de dimensão $(2N + 2)$, cujas coordenadas (*generalizadas*) são dadas pelos $N + 1$ pontos do vetor Q acima. Uma vez que a curva se deforma, os pontos de controle se movimentam e assim temos um vetor de velocidades $\dot{Q}$ associado com Q. O estado completo do sistema (snake) é definido pelo par $\left(Q, \dot{Q}\right)$.

Uma vantagem de usar curvas da forma (D.24) é que as equações de movimento correspondentes (equações de Euler-Lagrange) formam um sistema de equações diferenciais ordinárias. Estas equações são as análogas aquelas obtidas na seção 3.2, mas agora para dimensão finita.

Para desenvolver estas equações, procederemos analogamente ao que foi feito na seção 3.2. Assim, definimos:

Energia Cinética

$$T\left(\dot{c}\right) = \frac{1}{2}\int \mu \left\| \frac{\partial c}{\partial t} \right\| ds = \frac{\mu}{2}\, \dot{Q}^T\, M_0\, \dot{Q}\ . \tag{D.25}$$

onde $M_0 = \int BB^T ds$ e μ é a *massa linear.*

Dissipação de Energia

$$\frac{\partial U_{at}}{\partial t}\left(\dot{c}\right) = -\frac{\gamma}{2}\, \dot{Q}^T\, M_0\, \dot{Q}\ . \tag{D.26}$$

onde γ é o *coeficiente de amortecimento.*

Energia Potencial Elástica

$$E_{int} = \omega_1 Q^T M_1 Q + \omega_2 Q^T M_2 Q. \tag{D.27}$$

onde ω_1 e ω_2 são os parâmetros de elasticidade e rigidez definidos na seção 3.1 e:

$$M_1 = \int \frac{dB}{ds} \cdot \frac{dB^T}{ds} ds, \qquad M_2 = \int \frac{d^2 B}{ds^2} \cdot \frac{d^2 B^T}{ds^2} ds. \tag{D.28}$$

Energia Potencial Externa

$$E_{ext} = \int P\left(c\left(s,t\right)\right) ds. \tag{D.29}$$

Energia Potencial do Modelo

$$E_p = E_{int} + E_{ext}. \tag{D.30}$$

A Lagrangeana correspondente é dada por:

$$L\left(c, \dot{c}, c'.c''\right) = T - E_p - U_{at}, \tag{D.31}$$

As equações de Euler-Lagrange, derivadas via Princípio de Hamilton (Goldstein, 1981), para o sistema descrito pelas equações (D.25)-(D.30) compõe o modelo de snake que usaremos nesta seção. Estas equações possuem a seguinte forma (Black & Yuille, 1993):

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{Q}}\right) - \frac{\partial T}{\partial Q} - \frac{\partial}{\partial \dot{Q}}\left(\frac{\partial U_{at}}{\partial t}\right) + \frac{\partial E_p}{\partial Q} = 0 \tag{D.32}$$

Substituindo (D.25)-(D.30) nesta expressão nós encontramos o seguinte conjunto de equações:

$$\mu \ddot{Q} + \gamma \dot{Q} + M_0^{-1} (\omega_1 M_1 + \omega_2 M_2) Q = M_0^{-1} F, \tag{D.33}$$

onde:

$$F = -\frac{1}{2} \int \frac{\partial P (c(s,t))}{\partial Q} ds. \tag{D.34}$$

A análise de parâmetros apresentado na seção 3.2.1 se aplica igualmente para este modelo. Contudo, a restrição à dimensão finita permite agora reduzir o modelo de snakes a um sistema dinâmico, não mais envolvendo derivadas parciais no espaço (como no Capítulo 3, o que simplifica sua análise.

Vejamos inicialmente, o efeito da massa e coeficiente de amortecimento no comportamento do método numérico.

D.2.1 Análise Numérica

Uma vez que o sistema (D.33) é constituído por equações diferenciais ordinária, podemos discretizá-lo usando apenas diferenças finitas no tempo. O esquema numérico adotado é definido pelas expressões a seguir:

$$\dot{Q} (t - \tau) \approx \frac{1}{2\tau} [Q(t) - Q(t - 2\tau)], \tag{D.35}$$

$$\ddot{Q} (t - \tau) \approx \frac{1}{\tau^2} [Q(t) - 2Q(t - \tau) + Q(t - 2\tau)]. \tag{D.36}$$

Procedendo identicamente ao que foi feito na seção 3.2.3 encontramos o seguinte sistema linear:

$$AQ^{t+\tau} = B^{t,t-\tau}. \tag{D.37}$$

onde:

$$A = \left[\left(\frac{\mu}{\tau^2} + \frac{\gamma}{2\tau} \right) M_0 + K \right], \tag{D.38}$$

$$B^{t,t-\tau} = 2F(\overline{t} - \tau) + \left(\frac{2\mu}{\tau^2} \right) M_0 Q^t - \left(\frac{\mu}{\tau^2} - \frac{1}{2\tau} \right) M_0 Q^{t-\tau}, \tag{D.39}$$

O número de condição da matriz A na norma 2 é dado por (?):

$$\kappa_2(A) = 1 + \frac{\lambda_{\max}(M_0) - \lambda_{\min}(M_0)}{\lambda_{\min}(M_0)} + \frac{\lambda_{\max}(M_0)}{\beta}, \tag{D.40}$$

onde:

$$\beta = \left(\frac{\mu}{\tau^2} + \frac{\gamma}{2\tau}\right). \tag{D.41}$$

Portanto, obtemos conclusões equivalentes àquelas da seção 3.2.3, ou seja, que melhoramos a estabilidade numérica do sistema linear (D.37) quando aumentamos os valores de μ e λ ou diminuímos o passo no tempo τ.

Contudo, novamente temos um trade-off entre estabilidade, performance e eficiência do modelo. As próximas seções têm por objetivo final *quantificar* este trade-off.

D.2.2 Análise Qualitativa

A análise do esquema numérico apresentada acima foi um caminho para obter relações entre os parâmetros e o comportamento do modelo. Outra possibilidade neste sentido é analisar o modelo contínuo. Iniciemos por uma análise simples do sistema (D.33).

Do ponto de vista mecânico, temos um sistema físico cuja energia mecânica (potencial mais cinética) decresce em uma taxa dada pela expressão (D.26). Assim, uma vez que não há ganho de energia mecânica, o sistema atingirá o estado estacionário em algum ponto do espaço de configuração. Das equações (D.33) nós podemos mostrar (abaixo) que este ponto é um extremo da energia potencial.

Assim, independentemente das condições iniciais e parâmetros, esta análise simples mostra que um extremo da energia potencial é sempre atingido. Neste ponto, duas questões surgem naturalmente:

(1) Uma vez que a energia potencial não é convexa em geral, como encontrar condições iniciais e parâmetros apropriados para atingir o mínimo local (ou global) desejado?

(2) E quanto à taxa com a qual a solução do sistema converge para o mínimo desejado?

A primeira questão é discutida em (Giraldi & Oliveira, 1999) utilizando-se formalismo Hamiltoniano (Goldstein, 1981) e está fora do escopo desta apresentação.

Nesta seção e na próxima apresentaremos uma resposta para a segunda questão a qual liga a análise de conexidade da energia potencial e os parâmetros dinâmicos (μ e γ) do modelo. O resultado a ser obtido mostra a relação estreita entre a dinâmica do sistema (D.33) e os autovalores da Hessiana da energia potencial dada por (D.30), sendo portanto uma extensão da análise da seção D.1 incorporando agora o espaço de velocidades.

Primeiramente, vamos colocar o sistema de equações diferenciais ordinárias de segunda ordem da expressão (D.30) na forma:

$$\ddot{Q} = f\left(Q, \dot{Q}\right), \tag{D.42}$$

Vamos reduzir este sistema para um sistema de primeira ordem pela transformação usual (Sotomayor, 1979):

$$Q_1 = Q, \qquad Q_2 = \dot{Q}. \tag{D.43}$$

Assim, a equação (D.33) torna-se:

$$\begin{aligned} \dot{Q}_1 &= Q_2, \\ \dot{Q}_2 &= f\left(Q_1, Q_2\right) \end{aligned} \tag{D.44}$$

Chamando:

$$x = \begin{pmatrix} Q_1 \\ Q_2 \end{pmatrix}, \quad X_1 = Q_2 \text{ e } X_2 = f\left(Q_1, Q_2\right), \tag{D.45}$$

o sistema (D.44) torna-se:

$$\dot{x} = X\left(x\right), \tag{D.46}$$

onde $X\left(x\right) = \left(X_1, X_2\right)^T$. O sistema (D.46) é autônomo e de primeira ordem. Se a energia E_P é de classe C^2 então o campo X será de classe C^1 e o problema de Cauchy:

$$\dot{x} = X\left(x\right), \qquad x\left(0\right) = x_0, \tag{D.47}$$

tem solução única (Sotomayor, 1979).

Da teoria de sistemas dinâmicos nós sabemos que os pontos que resolvem a equação:

$$X\left(x\right) = 0, \tag{D.48}$$

chamados *pontos singulares (ou críticos)*, são fundamentais para a caracterização qualitativa da solução de (D.46). Um resultado fundamental no contexto das snakes emerge da análise destes pontos. Primeiramente, devemos notar que estes são exatamente os extremos da energia E_p.

Para mostrar isto, vamos denotar por $\bar{x}$ uma solução de (D.48). Assim, pelas definições de Q_1 e Q_2 dadas nas expressões (D.43) teremos:

$$\dot{Q} = 0, \tag{D.49}$$

para todo t, logo:

$$Q = Const. \tag{D.50}$$

Se nós tomarmos o modelo de snake (D.33) nós veremos que tal ponto, o qual é uma solução do sistema (D.44), é também uma solução da equação:

$$\frac{1}{2}\left(\omega_1 M_1 + \omega_2 M_2\right) Q = F, \tag{D.51}$$

e assim, é também um extremo da energia E_p. Inversamente, se um ponto $\bar{x}$ é uma borda ($Q_2 \equiv 0$ portanto) e satisfaz a equação (D.51) então é um ponto singular de X.

Portanto, as informações básicas da topologia do espaço de fase para (D.46) estão relacionadas às soluções de (D.51) as quais são de fato os pontos que procuramos. Para que o modelo (D.33) seja eficiente, qual deve ser a relação entre esta topologia e a borda que procuramos?

A única possibilidade é que a borda seja um atrator, isto é, um nó ou foco estável (Figuras D.2.a). As outras possibilidades para pontos singulares estão também representados na Figura D.2 e fica claro as dificuldades inerentes, isto é, ou encontramos subespaços instáveis nos quais a solução *foge* do ponto desejado (Figuras D.2.b-e) ou então teremos componentes cíclicas para a solução (foco instável da Figura D.3) o que vai dificultar, ou mesmo impedir, a convergência.

No caso da Figura D.3 existe ainda um problema relacionado com a *estabilidade estrutural* do sistema correspondente. De fato, o sistema neste caso é *estruturalmente instável* o que implica em problemas numéricos devido bifurcações que podem ocorrer.

Concluindo, para que a borda procurada seja um atrator, nós temos que escolher os parâmetros (μ, γ, ω_1 e ω_2) de tal forma que os autovalores de DX tenham parte real estritamente negativa (Sotomayor, 1979) na solução $\bar{x}$ da equação (D.51). Este é o resultado central desta seção, o qual pode ser colocado da seguinte forma:

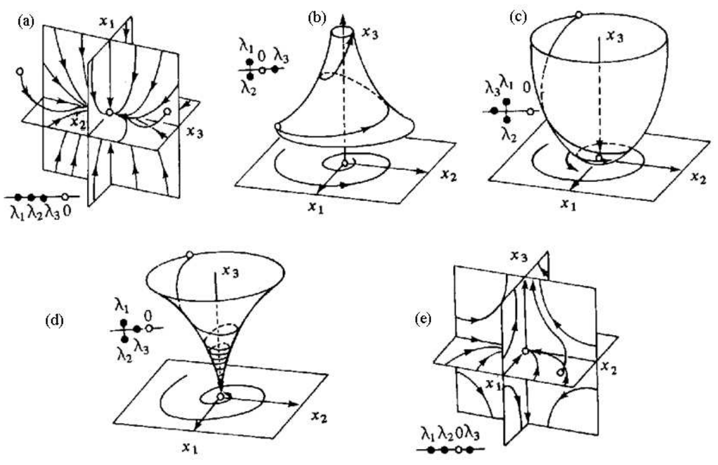

Figura D.2: Sistemas dinâmicos hiperbólico 3D.

Os parâmetros do modelo devem ser escolhidos de tal forma que a borda procurada seja um atrator ou foco estável na topologia do espaço de fase de (D.46).

Na próxima seção, nós demonstraremos que uma condição suficiente para isto é que a energia E_p tenha um mínimo (local ou global) na borda procurada.

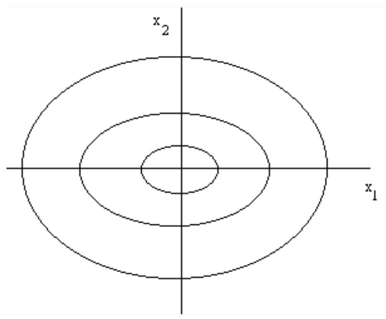

Figura D.3: Foco instável.

D.2.3 Convexidade e Atratores

Provaremos nesta seção a seguinte afirmação:

Um ponto singular x de X é um atrator ou foco estável se a energia dada por (D.30) é estritamente convexa em uma vizinhança de x, isto é, se x é um mínimo local de E_p.

Para demonstrar este fato, nós devemos analisar os autovalores da matriz DX em um ponto singular x supondo que a energia potencial é estritamente convexa em uma vizinhança V_x de x. Se estes autovalores têm parte real não-nula então nós podemos usar o Teorema de Hartman para linearizar o campo X em V_x (Sotomayor, 1979).

Portanto, da teoria de sistemas dinâmicos lineares, se todos os autovalores de DX têm parte real estritamente negativa nós teremos um nó ou foco estável e a afirmação acima fica demonstrada.

De (D.44)-(D.45) nós vemos que a matriz DX tem a forma:

$$DX = \begin{pmatrix} 0 & I_{N\times N} \\ -\frac{1}{\mu}M_0^{-1}D^2\left(E_p\right) & -\frac{\gamma}{\mu}I_{N\times N} \end{pmatrix}, \tag{D.52}$$

onde $I_{N\times N}$ é a matriz identidade de ordem N, $D^2\left(E_p\right)$ é a matriz Hessiana da energia potencial E_p e M_0^{-1} é a inversa de M_0 definida em (D.25).

A equação de autovalores/autovetores para $DX\left(x\right)$ é da forma:

$$DX \cdot v = \sigma v, \tag{D.53}$$

onde $(\cdot)$ significa multiplicação de matriz por vetor.

Usando (D.52) acima nós podemos escrever esta expressão na forma:

$$\begin{aligned} v_2 &= \sigma v_1, \qquad \text{(D.54)} \\ -\frac{1}{\mu}M_0^{-1}D^2\left(E_p\right)\cdot v_1 - \frac{\gamma}{\mu}I\cdot v_2 - \sigma v_2 &= 0. \end{aligned}$$

Isolando v_2 na primeira destas equações e substituindo o resultado na segunda obtemos a seguinte expressão:

$$-\frac{1}{\mu}M_0^{-1}D^2\left(E_p\right)\cdot v_1 - \sigma\frac{\gamma}{\mu}I\cdot v_1 - \sigma^2 v_1 = 0. \tag{D.55}$$

a qual depende somente de v_1:

Relembremos que nós estamos apenas interessados no sinal dos autovalores σ_i, $i = 1, ..., 2N$, supondo que os autovalores α_i, $i = 1, ..., 2N$ da Hessiana $D^2\left(E_p\right)$ são estritamente positivos. Primeiramente, notemos que a equação (D.55) pode ser colocada na forma:

$$D^2\left(E_p\right)\cdot v_1 = \beta M_0 \cdot v_1, \tag{D.56}$$

onde:

$$\beta = -\left(\sigma\gamma + \mu\sigma^2\right). \tag{D.57}$$

Assim, nós temos um *problema de autovalores/autovetores generalizado,* bem comum no estudo de modos de vibração para estruturas mecânicas (Bath & Wilson, 1976). Pode ser mostrado que se M_0 e $D^2(E_p)$ são definidas positivas e simétricas, os autovetores procurados são M_0, $D^2(E_p)-$*ortogonais*, isto é:

$$\Phi_i^T M_0 \Phi_j = \delta_{ij}, \qquad \Phi_i^T D^2(E_p)\,\Phi_j = \delta_{ij}\beta_i. \tag{D.58}$$

Usando estas relações, é direto mostrar que a equação (D.56) é equivalente a:

$$\beta_i + \sigma\gamma + \mu\sigma^2 = 0, \quad i = 1, ..., N, \tag{D.59}$$

cujas soluções são dadas por:

$$\sigma_i^{\pm} = \frac{-\gamma \pm \sqrt{\Delta_i}}{2\mu}, \quad i = 1, ..., N, \tag{D.60}$$

onde:

$$\Delta_i = \gamma^2 - 4\mu\beta_i. \tag{D.61}$$

Para x ser um atrator é necessário que:

$$4\mu\beta_i > 0, \quad i = 1, ..., N. \tag{D.62}$$

Uma vez que M_0 representa uma norma (portanto é definida positiva e simétrica), uma condição suficiente para a condição (D.62) ser verificada é que $D^2(E_p)$ seja definida positiva, ou seja, se a borda procurada seja um mínimo local da energia E_p. Portanto, a afirmação do início desta seção está demonstrada.

D.3 Discussão

Algumas considerações podem ser feitas a partir da discussão acima. Primeiramente, lembremos que o chamado *Amortecimento Crítico* ocorre quando:

$$\gamma^2 - 4\mu\beta_i = 0, \tag{D.63}$$

sendo caracterizado por uma convergência rápida para a solução, na direção Φ_i (*modo* correspondente). Como primeira conseqüência do resultado (D.62) nós vemos a impossibilidade de conseguir amortecimento crítico em mais de um modo neste modelo.

Uma forma de contornar esta dificuldade é substituir a matriz γM_0 pela série de Caughey dada por (Bath & Wilson, 1976):

$$C = M_0 \sum_{i=0}^{i=p-1} a_i \left[M_0^{-1} K \right]^i \tag{D.64}$$

uma vez que agora teríamos varias constantes de amortecimento. A expressão (D.64) tem a vantagem de manter a mesma transformação para diagonalizar a matriz de amortecimento (Bath & Wilson, 1976), mantendo portanto o desenvolvimento acima.

Analisando agora a expressão (D.60) observamos que esta interliga os dois elementos básicos do modelo dinâmico de snakes dado pela equação (D.64): a energia potencial (através do sinal dos autovalores β_i) e a dinâmica da snake (através dos parâmetros μ e γ). Neste sentido, (D.60) generaliza (Davatzikos & Prince, 1999), agora incorporando o espaço de velocidades.

Além disso, este resultado pode ser visto como um complemento para a discussão da seção D.2.1. Nesta última, nós observamos que quanto maiores μ e γ melhor era a estabilidade numérica, mas havia um trade-off com relação à performance/eficiência do modelo. A expressão (D.60) quantifica (ao menos teoricamente) este trade-off, mostrando também que a perda de performance para valores autos de μ e γ se deve ao fato de que estes podem fazer Δ_i mais negativo e assim o termo oscilatório correspondente mais alto.

O principal ponto agora seria como precisar a vizinhança V_x. A energia E_p não poderia fornecer a resposta a esta questão porque esta não envolve o espaço de velocidades. Tal observação aponta na direção da necessidade de uma quantidade (física) cuja análise de conexidade seja determinante da dinâmica do modelo e que incorpore o espaço de velocidades. Tal quantidade é exatamente a energia mecânica do sistema cujas propriedades de interesse surgem naturalmente na *Formulação Hamiltoniana* do modelo de snakes.

Esta formulação é desenvolvida no contexto de snakes em (Giraldi & Oliveira, 1999) mas está fora dos propósitos desta dissertação.