Sobre la generación variacional discreta de mallas casiortogonales en el plano

Francisco J. Domínguez Mota

22 de febrero de 2005

Ш

Agradecimientos

Deseo expresar mi gratitud a las siguientes personas:

Al Dr. Pablo Barrera Sánchez por su paciente y atinada dirección en la realización de este trabajo. Mi más sincero agradecimiento también a mis sinodales, Doctores Zeferino García, Pedro González Casanova, Jesús López, Humberto Madrid, Gerardo Tinoco, y muy especialmente a Stanly Steinberg y Cristóbal Vargas por sus valiosas sugerencias y comentarios que contribuyeron a enriquecer enormemente la versión final.

A Guilmer, por la amistad y el enorme apoyo para sacar adelante este trabajo.

Por último, agradezco también a la Facultad de Ciencias de la U.N.A.M. por hacer esto posible.

IV

Prefacio

El propósito del presente trabajo es desarrollar métodos efectivos para generar mallas estructuradas, convexas y casiortogonales, en regiones irregulares.

Una de las áreas donde es importante generar mallas estructuradas convexas es en la solución numérica de ecuaciones diferenciales en regiones irregulares empleando diferencias finitas (Veáse [40]).

Son pocos los métodos propuestos que operan de manera casi automática en regiones irregulares. Los más efectivos han sido propuestos por Barrera-Tinoco ([9], [11]) e Ivanenko ([17], [36]), que se basan en la discretización de un problema variacional el cual se transforma en uno de optimización de gran escala.

Por otra parte, el interés específico en la generación de las mallas ortogonales se debe a que tal problema es uno de los retos actuales en la generación de mallas ([23]), ya que ofrecen varias ventajas en la solución de sistemas de ecuaciones diferenciales parciales, entre las que destaca la reducción del número de términos adicionales en la solución de las ecuaciones diferenciales parciales por el método del mapeo.

Para generar mallas ortogonales se han propuesto dos grandes grupos de métodos: el primero a través de mapeos conformes, ver Toledo [57], y el segundo con base en el laplaciano escalado.

Para generar una malla se resuelve un sistema de ecuaciones diferenciales parciales *casiconformes* ([13], [43]). La dificultad práctica de esta idea radica en conocer el valor del módulo conforme, el cual es dependiente de la región, y por lo tanto se desconoce *a priori*, además de que su cálculo resulta muy ineficiente en regiones irregulares ([3]).

Cabe mencionar que, en términos generales, los mapeos conformes tienen las siguientes limitaciones para la generación numérica de mallas (Knupp y Steinberg, [40]):

- Permiten poco control sobre los puntos interiores de la malla.
- Las distribuciones de los puntos en la frontera no pueden ser arbitrarias.
- Los mapeos conformes están mal condicionados, en el sentido de que cambios pequeños en la frontera del dominio, pueden alterar significativamente las posiciones de los puntos que se mapean.

El segundo grupo de métodos para generar mallas ortogonales se obtiene a partir de la relación conocida como el *Laplaciano escalado* o *ecuación de Beltrami* ([40]), la cual involucra el cálculo de una expresión denominada función de distorsión.

A partir de tal Laplaciano escalado, se obtiene el sistema de ecuaciones diferenciales empleado originalmente por Leal y Ryskin ([41]), que con pequeñas variaciones se ha utilizado ampliamente como sistema generador de mallas; la mayor parte de los trabajos al respecto se diferencian entre sí sólo en la forma de proponer maneras distintas para el cálculo de la función de distorsión.

Las mallas generadas con las ecuaciones de Leal y Ryskin son de excelente calidad en regiones con frontera suave en donde es posible cálculo eficiente de la función de distorsión, pero, de manera semejante a los métodos basados en los mapeos casiconformes, la dificultad práctica al resolver el sistema de ecuaciones consiste en que la función de distorsión se desconoce a priori([22]).

Adicionalmente, hay que señalar que se ha encontrado que las soluciones de las ecuaciones de Ryskin y Leal existen sólo para ciertas funciones de distorsión ([40]).

Por lo tanto, tampoco los métodos basados en las ecuaciones de Leal y Ryskin resultan de utilidad para generar mallas ortogonales en regiones irregulares.

Así, de lo hasta ahora expuesto, se sigue que una gran parte de la dificultad para la generación de mallas estructuradas en regiones irregulares radica precisamente en la forma de la frontera.

Los métodos para la generación de mallas que han resultado útiles para resolver este problema, son esencialmente los métodos variacionales denominados directos, en los cuales, las mallas a generar se obtienen como las soluciones de un problema de optimización de gran escala, en el que las variables son las coordenadas de los nodos interiores de la malla. En este contexto, la convexidad de la malla se expresa en términos de un parámetro ϵ , el cual se elige para que el problema esté bien planteado; a esto nos referiremos de ahora en adelante como ϵ -convexidad.

Estos métodos han resultado eficientes debido a que es posible proponer un criterio muy sencillo para garantizar la ϵ -convexidad de las mallas generadas, de tal forma que el problema de optimización que se resuelve resulta ser sin restricciones, con las consiguientes ventajas que esto implica.

La tarea pendiente consistía naturalmente en aplicar estas ideas al problema de la generación de mallas ortogonales y casiortogonales.

De esta forma, es posible afirmar de manera más precisa que el objetivo de esta tesis es proponer métodos para generar variacionalmente mallas discretas ϵ -convexas y casiortogonales, con posiciones fijas de los puntos de la frontera, para toda región para la cual existan mallas estructuradas convexas.

A fin de evitar la pérdida de generalidad en la discusión, se considerará que en toda región para la cual se vayan a generar mallas convexas se ha hecho un escalamiento de tal forma que el promedio del área de las celdas es igual a la unidad, y que una malla es ϵ -convexa si el mínimo valor del área de una celda es mayor que ϵ , $0 < \epsilon \leq 1$.

En regiones irregulares, sólo existen mallas para valores muy pequeños de ϵ . Los trabajos previos más relevantes en esta dirección y los funcionales clásicos de área, ortogonalidad, longitud y suavidad empleados en esta tesis se deben a Barrera *et al* ([4]), Barrera-Tinoco ([9],[10],[11]), Castillo ([14]) e Ivanenko([17],[36]).

El funcional clásico de ortogonalidad es una de las opciones naturales para la generación de mallas cuasiortogonales, sin embargo, como no garantiza mallas convexas por sí solo, es necesario combinarlo con uno que sí lo garantice.

Por lo anterior fue necesario evaluar cuáles era los funcionales que garantizaban sus óptimos fueran mallas convexas para poder seleccionar los más adecuados para combinarlos con el funcional de ortogonalidad.

Contenido de los capítulos

Brevemente, el contenido de los capítulos de este trabajo puede resumirse de la manera siguiente:

Capítulo 1.

Se presentan las definiciones de malla y funcional, así como los funcionales de suavidad, longitud, área y ortogonalidad que se emplean en los capítulos posteriores.

• Capítulo 2.

Aquí se describen someramente los funcionales k-área y k-suavidad desarrollados por Barrera y Tinoco ([9], [11]), junto con los resultados que muestran cómo emplearlos para construir una malla convexa.

Capítulo 3.

Se presentan los funcionales que se desarrollaron para garantizar y preservar la convexidad. Para ello se enuncia una serie de condiciones que satisfacen algunos funcionales continuos de área que son de utilidad para generar variacionalmente mallas convexas.

Capítulo 4.

Se presentan los resultados que muestran cómo generar mallas casiortogonales, empleando combinaciones lineales entre un funcional de área que garantiza y preserva convexidad y el funcional de ortogonalidad.

• Capítulo 5.

Conclusiones del trabajo y algunas líneas de trabajo a futuro.

Cabe señalar que los funcionales de ejemplo empleados en este trabajo fueron incorporados como parte de los funcionales disponibles en el software **UNA-MALLA**, el cual se encuentra disponible en la dirección:

http://www.matematicas.unam.mx/unamalla/

VIII

Índice general

A	Agradecimientos II				
Pr	efaci	ю	\mathbf{v}		
1.	Intr	oducción	1		
	1.1.	Generación variacional continua	1		
		1.1.1. Suavidad y longitud	2		
		1.1.2. Area y Ortogonalidad	2		
	1.2.	Generación variacional discreta	3		
		1.2.1. El mapeo bilineal	5		
		1.2.2. Funcionales discretos para el mapeo bilineal	6		
		1.2.3. Expressiones para los funcionales discretos	8		
	1.3.	Caracterización de la convexidad	9		
	1.4.	Combinaciones lineales convexas de funcionales	10		
	1.5.	Sobre la optimización de los funcionales discretos	11		
2.	Los	funcionales k-área y k-suavidad	15		
	2.1.	Introducción	15		
	2.2.	Motivación para construir el funcional k-suavidad	15		
	2.3.	El funcional k-suavidad	16		
	2.4.	El funcional k-área	18		
	2.5.	Mallas generadas con kS y kA	19		
	2.6.	Importancia del denominador $k + \alpha$	19		
3.	Fun	cionales convexos de área	23		
	3.1.	Introducción	23		
	3.2.	Mallas convexas y dispersión	23		
	3.3.	Funcionales de Área	24		
	3.4.	Exponenciales de área	24		
	3.5.	Sumas de exponenciales	25		
	3.6.	Superficies de nivel de F_t	29		
	3.7.	Mallas óptimas del funcional F_t	34		
	3.8.	Sobre el escalamiento y la $\epsilon\text{-convexidad}$	35		
	3.9.	Algoritmo para la generación de mallas convexas $\ \ldots \ \ldots \ \ldots$	37		

	3.9.1. Resultados numéricos	37 38 42 42 44 44
4.	Mallas casiortogonales	49
	4.1. Panorama del problema	49
	4.1.1. Mallas ortogonales continuas y discretas	49
	4.1.2. Mapeos conformes y casiconformes	50
	4.1.3. Generación ortogonal de mallas empleando E.D.P	52
	4.1.4. El funcional continuo de ortogonalidad I_O	53
	4.1.5. El funcional discreto de ortogonalidad F_O	54
	4.1.6. Importancia de la convexidad	56
	4.1.7. El funcional área-ortogonalidad de Knupp	57
	4.2. Generación de mallas convexas casiortogonales	59
	4.2.1. Combinaciones lineales entre $kA \neq F_O$	60
	4.2.2. Generación de mallas casiortogonales con $kA \neq kS$	60
	4.2.3. Generación de mallas casiortogonales: problema general	62
	4.2.4. Generación de mallas casiortogonales: solución al problema	63
	4.2.5. Constantes de normalización	64
	4.3. Desviaciones maxima y promedio de la ortogonalidad	65 65
	4.3.1. Diferencias entre mailas ortogonales y casiortogonales	00 66
	4.4. Algunos resultados numericos	00 67
	4.4.1. Regiones sentinas	79
	4.4.2. Regiones inegulates $\dots \dots \dots$	72
	4.4.9. Li cociente a_{+}/a_{-}	10
5.	Conclusiones	79
	5.1. Conclusiones	79
	5.2. Trabajo a futuro	80
	5.3. Nota final	80
Α	. Interpolación Transfinita	81
В	Galería de mallas convexas	85
Ri	bliografía	143
	····· o- ·····	_ 10

x

Índice de figuras

1.1. Ejemplo una región definida por una poligonal cerrada y simple.	3
1.2. Mapeo bilineal entre $B_{i,j}$ y $c_{i,j}$	5
1.3. Los cuatro triángulos orientados en una celda	10
1.4. Mallas óptimas para los funcionales de longitud, área, ortogonal-	
idad y área-ortogonalidad	13
2.1 Mallas generadas con k suguidad	20
2.1. Mailas generadas con k-suavidad	20 91
2.2. Manas generadas con k-area	21
3.1. Triángulo de lados $(1,0)$ y (l,θ)	25
3.2. Contorno modelo de Ivanenko.	27
3.3. Curvas de nivel para f_1 y f_{50}	27
3.4. Mallas generadas con el funcional (3.3)	28
3.5. Las distribuciones de α para los contornos (figura 3.4)	28
3.6. Algunas curvas de nivel para F_t	31
3.7. Conjunto $F_t(x, y)$.	33
3.8. Conjuntos L_a	34
3.9. Mallas generadas empleando el funcional F_t	39
3.10. Significado geométrico de t .	41
3.11. Mallas generadas con el funcional S	43
3.12. Mallas generadas con la combinación $\frac{1}{2}S + \frac{1}{2}F_L$.	47
3.13. Mallas generadas con la combinación $\frac{1}{10}S + \frac{9}{10}F_L$	48
41. Contorno do Cron Protoño	51
4.1. Contorno de Gran Dietana	55
4.2. Malla de prueba	50
4.5. Malla spherida con al funcional E	50
4.4. Malla pore Crap Protoña y la Pakía de la Habara generadad	99
4.5. Manas para Gran Dretana y la Dama de la Habana generadas $con F_{+c}$	50
$4.6 \text{Melles de 10 \times 10 para } c^2 \text{ y}^{-1}$	66
4.0. Mailas de 10 × 10 para e $y \frac{1}{z}$	00
4.1. Manas generadas para el domo con distintas combinaciones de funcionales y $\sigma = 0.01$	60
A 8 Mallas generadas para la región B con distintas combinaciones	09
4.0. Manas generadas para la región D con distintas combinaciones do funcionalos y $\sigma = 0.01$	70
$u \in uncionales \ y \ 0 = 0.01. \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots $	10

4.10. Mallas generadas para la Bahía de la Habana con distintos fun-
cionales, v con un peso $\sigma = 0.01$
4.11. Mallas generadas para el Lago Ucha con distintos funcionales, y un peso $\sigma = 0.01$ 76
4.12. Mallas generadas para Sudamérica con distintos funcionales, y un para $\sigma = 0.01$
4.13. Mallas generadas para Gran Bretaña con distintos funcionales, y un peso $\sigma = 0.01$
A.1. Malla para la Bahía de la Habana generada por interpolación. 20
A.2. Malla para la Bahía de la Habana generada por interpolación. 40 puntos por lado. 83
B.1. Bahía de la Habana, 40 puntos por lado. Funcional de longitud
B.2. Bahía de la Habana, 40 puntos por lado. Funcional de ortogona- lidad (Capítulo, 1)
B.3. Bahía de la Habana, 40 puntos por lado. Funcional de área (Capítu- la 1)
B.4. Bahía de la Habana, 40 puntos por lado. Funcional de área-
ortogonalidad (Capitulo 1)
B.6. Gran Brotaña, 41 puntos por lado, kS (Capítulo 2) 90 B.6. Gran Brotaña, 41 puntos por lado, kS (Capítulo 2) 91
B.0. Gran Dietana, 41 puntos por lado kS (Capítulo 2) 91 B.7 Lago Ucha 41 puntos por lado kS (Capítulo 2) 92
B.8. Sudamérica, 41 puntos por lado, kS (Capítulo 2)
B.9. Bahía de la Habana. 41 puntos por lado, kA (Capítulo 2) 94
B.10.Gran Bretaña, 41 puntos por lado, kA (Capítulo 2) 95
B.11.Bahía de la Habana, 41 puntos por lado, kA (Capítulo 2) 96
B.12.Sudamérica, 41 puntos por lado, kA (Capítulo 2) 97
B.13. Bahía de la Habana, 41 puntos por lado , F_t (Capítulo $\ 3).$ 98
B.14. Sudamérica, 41 puntos por lado , F_t (Capítulo $\ 3).$ 99
B.15. Lago Ucha, 41 puntos por lado, F_t (Capítulo 3) 100
B.16.Gran Bretaña, 41 puntos por lado, F_t (Capítulo 3) 101
B.17.Bahía de la Habana, 41 puntos por lado, S (Capítulo 3) 102
B.18. Sudamérica, 41 puntos por lado, S (Capítulo 3) 103
B.19.Lago Ucha, 41 puntos por lado, S (Capitulo 3). \ldots 104
B.20. Gran Bretana, 41 puntos por lado, S (Capítulo 3) 105 D 21 D 16 $(1 + 1)$
B.21. Bahia de la Habana, 41 puntos por lado, $\frac{1}{2}S + \frac{1}{2}F_L$ (Capitulo 3). 106
D.22. Subamerica, 41 puntos por lado, $\frac{1}{2}S + \frac{1}{2}F_L$ (Capítulo 3) 107 D.22. Lago Liebo 41 puntos por lado $\frac{1}{2}S + \frac{1}{2}F_L$ (Capítulo 2) 108
B.25.Lago Ucha, 41 puntos por lado, $\frac{1}{2}S + \frac{1}{2}F_L$ (Capítulo 5) 108 B.24 Cran Brotaña, 41 puntos por lado, $\frac{1}{2}S + \frac{1}{2}F_L$ (Capítulo 2) 100
B 25 Bahía de la Habana 41 puntos por lado $\frac{1}{2}S + \frac{9}{2}F_L$ (Capítulo 3) 109
B.26.Sudamérica, 41 puntos por lado, $\frac{1}{10}S + \frac{9}{10}F_L$ (Capítulo 3) 111

B.27.Lago Ucha, 41 puntos por lado, $\frac{1}{10}S + \frac{9}{10}F_L$ (Capítulo 3).... 112 B.28.Gran Bretaña, 41 puntos por lado, $\frac{1}{10}S + \frac{9}{10}F_L$ (Capítulo 3)... 113 B.29.Domo, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01$, $\sigma kS + (1 - \sigma)F_O$ (Capítulo 4).114 B.30.Domo, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01$, $\sigma kA + (1 - \sigma)F_O$ (Capítulo 4).115 B.31.Domo, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01$, $\sigma F_t + (1 - \sigma)F_O$ (Capítulo 4).116 B.32.Domo, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01$, $\sigma S + (1 - \sigma)F_O$ (Capítulo 4).117 B.33.Región B, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01$, $\sigma kS + (1-\sigma)F_O$ (Capítu-B.34. Región B, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01$, $\sigma kA + (1-\sigma)F_O$ (Capítu-119B.35.Región B, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01$, $\sigma F_t + (1 - \sigma)F_O$ (Capítu-B.36. Región B, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01, \sigma S + (1-\sigma)F_O$ (Capítulo 4). 121 B.37.Circunferencia, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01$, $\sigma kS + (1 - \sigma)F_O$ B.38. Circunferencia, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01$, $\sigma kA + (1 - \sigma)F_O$ 123B.39.Circunferencia, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01$, $\sigma F_t + (1 - \sigma)F_O$ B.40. Circunferencia, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01$, $\sigma S + (1 - \sigma)F_O$ B.41. Bahía de la Habana, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma kS + (1-\sigma)F_O$ 126B.42.Bahía de la Habana, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01, \sigma k A + (1-\sigma) F_O$ B.43.Bahía de la Habana, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01, \sigma F_t + (1-\sigma)F_O$ B.44.Bahía de la Habana, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01$, $\sigma S + (1 - \sigma) F_O$ 129B.45.Lago Ucha, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01, \sigma kS + (1-\sigma)F_O$ (Capítu-B.46.Lago Ucha, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01, \sigma kA + (1-\sigma)F_O$ (Capítu-B.47.Lago Ucha, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01, \sigma F_t + (1-\sigma)F_O$ (Capítu-132B.48.Lago Ucha, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01, \sigma S + (1 - \sigma) F_O$ (Capítu-B.49.Sudamérica, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01$, $\sigma kS + (1 - \sigma)F_O$ B.50.Sudamérica, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01$, $\sigma kA + (1 - \sigma)F_O$ B.51.Sudamérica, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01, \sigma F_t + (1-\sigma)F_O$ (Capítu-B.52. Sudamérica, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01, \sigma S + (1-\sigma)F_O$ (Capítulo 4). \ldots 137

B.53. Gran Bretaña, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma kS + (1-\sigma)F_O$
(Capítulo 4)
B.54. Gran Bretaña, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma kA + (1-\sigma)F_O$
(Capítulo 4). \ldots 139
B.55. Gran Bretaña, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01$, $\sigma F_t + (1 - \sigma)F_O$
(Capítulo 4). \ldots 140
B.56. Gran Bretaña, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01, \sigma S + (1 - \sigma)F_O$
(Capítulo 4). \ldots 141

Capítulo 1

Introducción

Los principios variacionales son útiles para generar mallas convexas. La presentación que haremos se basa en el denominado enfoque directo, que consiste en resolver un problema de optimización, asociado a una discretización de un funcional continuo. Esta presentación evita resolver numéricamente las ecuaciones de Euler-Lagrange.

Analizaremos en este capítulo las expresiones de los funcionales de área, longitud, ortogonalidad y suavidad escritos en el contexto de la discretización propuesta por Barrera *et al.* ([4]).

Para cada celda de la malla, se consideran los cuatro triángulos que es posible formar con sus vértices, con la idea de tener un control estricto sobre cada una de las celdas. El fin es obtener mallas convexas.

1.1. Generación variacional continua

En este trabajo empleamos el término funcional en dos formas, la primera en el sentido clásico del cálculo de variaciones:

Definición 1 Un funcional $I(\mathbf{x})$ es una función definida sobre los mapeos \mathbf{x} que pertenecen a un subconjunto de un espacio de funciones,

y la segunda para referirnos a funciones de un número finito de variables, que operan sobre las mallas discretas que definiremos posteriormente. Consideraremos que el funcional I opera sobre el conjunto de todas los mapeos

diferenciables \mathbf{x} , los cuales mandan el rectángulo

$$R = \{(\xi, \eta) | \ 0 \le \xi \le 1; 0 \le \eta \le 1\}$$

sobre una región Ω del plano, de tal forma que las restricciones de \mathbf{x} a la frontera del rectángulo son biyecciones continuas sobre la frontera de Ω .

Decimos que cada uno de estos mapeos \mathbf{x} es una malla continua para Ω .

Generar variacionalmente una malla consiste en encontrar, en el conjunto de mallas para una región, los extremos (mínimos) de un funcional. La elección de éste último se basa en las propiedades geométricas que se desea tener en las mallas obtenidas.

1.1.1. Suavidad y longitud

Consideremos el conjunto de todas las biy
ecciones $\mathbf{x} = (x(\xi, \eta), y(\xi, \eta))$ diferenciables entre el rectángulo unitario R y la región Ω ; denotemos por J los jacobianos correspondientes.

Dos funcionales están directamente relacionados con sistemas de ecuaciones de Laplace correspondientes a dichas transformaciones.

El primer funcional I_S es el de suavidad (Winslow, [60]), que fue utilizado por Brackbill y Saltzman ([12])

$$I_S = \int \frac{x_{\xi}^2 + x_{\eta}^2 + y_{\xi}^2 + y_{\eta}^2}{J} d\xi d\eta, \qquad (1.1)$$

conocido también como funcional homogéneo de Thompson-Thames-Mastin. El funcional de suavidad alcanza su mínimo en un mapeo armónico ([36]). Sus ecuaciones de Euler-Lagrange son las de Laplace para la transformación inversa $(x, y) \mapsto (\xi, \eta).$

El segundo funcional es el de longitud ([50]):

$$I_L = \int_R (x_{\xi}^2 + x_{\eta}^2 + y_{\xi}^2 + y_{\eta}^2) d\xi d\eta; \qquad (1.2)$$

este tiene como ecuaciones de Euler-Lagrange las dos ecuaciones de Laplace de la transformación $(\xi, \eta) \mapsto (x, y)$.

Puede mostrarse que los mapeos óptimos del funcional de longitud satisfacen las ecuaciones de Cauchy-Riemann.

1.1.2. Area y Ortogonalidad

Los funcionales de área y ortogonalidad I_A y I_O ([14], [50]) se expresan como

$$I_A = \int_R J^2 d\xi d\eta, \qquad (1.3)$$

$$I_O = \int_R (x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta)^2 d\xi d\eta \tag{1.4}$$

respectivamente.

Las ecuaciones de Euler-Lagrange de (1.3) y (1.4) son acopladas y no lineales, por lo tanto resolverlas presenta varias dificultades.

En este trabajo no nos interesa resolver numéricamente las Ecuaciones de Euler-Lagrange para generar mallas, sino que emplearemos versiones discretas de los funcionales. Para información más detallada con respecto a la generación variacional continua, véanse [14], [15], [40] y [55].

1.2. Generación variacional discreta

Nuestro interés es discretizar los funcionales continuos para obtener mallas óptimas, como soluciones de un problema de optimización de gran escala, en lugar de resolver un problema de cálculo de variaciones. A esto se le conoce como generación variacional discreta de mallas.

En las siguientes definiciones, se precisará lo que entendemos por una malla estructurada¹ y por un funcional discreto.

Consideremos una región Ω del plano definida por una poligonal γ de vértices $V = \{v_1, v_2, \dots, v_q\}$, cerrada, simple y orientada en sentido positivo (Figura 1.1).



Figura 1.1: Ejemplo una región definida por una poligonal cerrada y simple.

Definición 2 Sean m y n números naturales mayores que 2. Decimos que el conjunto de puntos del plano

$$G = \{P_{i,j} | i = 1, ..., m; j = 1, ..., n\}$$

con lados

$$L_1(G) = \{P_{i,1} | i = 1, ..., m\}$$
$$L_2(G) = \{P_{m,j} | j = 1, ..., n\}$$
$$L_3(G) = \{P_{i,n} | i = 1, ..., m\}$$

 $^{^{1}}$ Es conveniente mencionar que una malla discreta estructurada, admisible y convexa, induce de manera natural la construcción de una malla continua empleando los mapeos bilineales que presentamos en la sección 1.2.1.

$$L_4(G) = \{P_{1,j} | j = 1, ..., n\}$$

es una malla estructurada² admisible y discreta de orden $m \times n$ para Ω , si se satisface que

$$V \subseteq \bigcup_{i=1}^{4} L_i(G).$$

Decimos además que la malla G es convexa si cada uno de los (m-1)(n-1)cuadriláteros (o celdas) $c_{i,j}$ de vértices $\{P_{i,j}, P_{i+1,j}, P_{i,j+1}, P_{i+1,j+1}\}$, con $1 \leq i < m \ y \ 1 \leq j < n$, es convexo.

Los conjuntos $L_1(G)$, $L_2(G)$, $L_3(G)$ y $L_4(G)$, a los cuales nos referimos como los lados de la frontera de la malla o los lados de la malla, aparecen en la definición para resaltar nuestro interés en que la frontera de la malla sea la misma que la frontera de la región.

Definición 3 Un funcional discreto I sobre una malla $G = \{P_{i,j}\}$ es una función

$$I(G) = \sum_{i,j} f(c_{i,j})$$
(1.5)

donde $c_{i,j}$ es la celda i, j de la malla y

$$f(c_{i,j}) = f(P_{i,j}, P_{i+1,j}, P_{i+1,j+1}, P_{i,j+1})$$

es una función de sus vértices.

Algunos funcionales discretos pueden obtenerse a partir de los funcionales continuos de la siguiente manera: Subdividimos R construyendo una malla R_0 dada por

$$R_0 = \{ (\xi_i, \eta_j) = (\frac{i}{m}, \frac{j}{n}) | 0 \le i \le m; 0 \le j \le n \}.$$

Empleando esta malla podemos escribir un funcional continuo de la forma

$$I(\mathbf{x}) = \int_{R} \psi(\mathbf{x}_{\xi}, \mathbf{x}_{\eta}) d\xi d\eta$$

 como

$$I(\mathbf{x}) = \sum_{i,j} \int_{B_{i,j}} \psi(\mathbf{x}_{\xi}, \mathbf{x}_{\eta}) d\xi d\eta.$$
(1.6)

Cada una de las restricciones del mapeo \mathbf{x} en las celdas $B_{i,j}$ de R_0 puede aproximarse empleando el mapeo bilineal \mathbf{r} que veremos en la siguiente sección (Figura 1.2).

²Formada con cuadriláteros.

Finalmente, la integral en la celda $B_{i,j}$ se aproxima empleando una fórmula de cuadratura:

$$\begin{split} \int_{B_{i,j}} \psi(\mathbf{x}_{\xi}, \mathbf{x}_{\eta}) d\xi d\eta &\approx \frac{1}{4} \bigg\{ \psi \Big(\mathbf{x}_{\xi} \Big(\frac{i}{m}, \frac{j}{n} \Big), \mathbf{x}_{\eta} \Big(\frac{i}{m}, \frac{j}{n} \Big) \Big) \\ &+ \psi \Big(\mathbf{x}_{\xi} \Big(\frac{i+1}{m}, \frac{j}{n} \Big), \mathbf{x}_{\eta} \Big(\frac{i+1}{m}, \frac{j}{n} \Big) \Big) \\ &+ \psi \Big(\mathbf{x}_{\xi} \Big(\frac{i}{m}, \frac{j+1}{n} \Big), \mathbf{x}_{\eta} \Big(\frac{i}{m}, \frac{j+1}{n} \Big) \Big) \\ &+ \psi \Big(\mathbf{x}_{\xi} \Big(\frac{i+1}{m}, \frac{j+1}{n} \Big), \mathbf{x}_{\eta} \Big(\frac{i+1}{m}, \frac{j+1}{n} \Big) \Big) \bigg\} \end{split}$$

Para más detalles sobre esta discretización, véase González ([30]).



Figura 1.2: Mapeo bilineal entre $B_{i,j}$ y $c_{i,j}$.

1.2.1. El mapeo bilineal

A fin de obtener las expresiones de los funcionales discretos, consideremos el mapeo bilineal que manda el rectángulo unitario R sobre un cuadrilátero de vértices $\mathbf{P}, \mathbf{Q}, \mathbf{R}$ y \mathbf{S} en el plano. Así

$$\mathbf{r}(\xi,\eta) = \mathbf{A} + \mathbf{B}\xi + \mathbf{C}\eta + \mathbf{D}\xi\eta$$

donde $\mathbf{A},\,\mathbf{B},\,\mathbf{C},\,\mathbf{y}\;\mathbf{D}$ son puntos tales que

$$\mathbf{r}(0,0) = \mathbf{P}, \qquad \mathbf{r}(1,0) = \mathbf{Q}, \\ \mathbf{r}(0,1) = \mathbf{S}, \qquad \mathbf{r}(1,1) = \mathbf{R}.$$

Estas cuatro condiciones implican:

$$\mathbf{r}(\xi,\eta) = \mathbf{P} + (\mathbf{Q} - \mathbf{P})\xi + (\mathbf{S} - \mathbf{P})\eta + (\mathbf{R} - \mathbf{Q} + \mathbf{P} - \mathbf{S})\xi\eta;$$

en consecuencia, las derivadas parciales de ${\bf r}$ son

$$\mathbf{r}_{\xi}(\xi,\eta) = \mathbf{Q} - \mathbf{P} + (\mathbf{R} - \mathbf{Q} + \mathbf{P} - \mathbf{S})\eta$$

$$\mathbf{r}_{\eta}(\xi,\eta) = \mathbf{S} - \mathbf{P} + (\mathbf{R} - \mathbf{Q} + \mathbf{P} - \mathbf{S})\xi,$$

por lo tanto

$$\begin{split} \mathbf{r}_{\xi}(0,0) &= \mathbf{Q} - \mathbf{P} \\ \mathbf{r}_{\xi}(1,0) &= \mathbf{Q} - \mathbf{P} \\ \mathbf{r}_{\xi}(0,1) &= \mathbf{R} - \mathbf{S} \\ \mathbf{r}_{\xi}(1,1) &= \mathbf{R} - \mathbf{S} \\ \mathbf{r}_{\eta}(0,0) &= \mathbf{S} - \mathbf{P} \\ \mathbf{r}_{\eta}(1,0) &= \mathbf{R} - \mathbf{Q} \\ \mathbf{r}_{\eta}(0,1) &= \mathbf{S} - \mathbf{P} \\ \mathbf{r}_{\eta}(1,1) &= \mathbf{R} - \mathbf{Q}. \end{split}$$

Es importante notar que $\mathbf{r}_{\xi}(0,0)$ y $\mathbf{r}_{\eta}(0,0)$ dependen solamente de los puntos **S**, **P** y **Q**, esto es, del triángulo \triangle **SPQ**. Análogamente $\mathbf{r}_{\xi}(1,0)$ y $\mathbf{r}_{\eta}(1,0)$ dependen sólo del triángulo \triangle **PQR** y así sucesivamente. El jacobiano de **r** es la magnitud

$$J(\xi, \eta) = \mathbf{r}_{\xi}^{T} J_{2} \mathbf{r}_{\eta}$$

= $(\mathbf{Q} - \mathbf{P}) J_{2}(\mathbf{S} - \mathbf{P}) + (\mathbf{R} - \mathbf{Q}) J_{2}(\mathbf{S} - \mathbf{P}) \xi$
+ $(\mathbf{Q} - \mathbf{P}) J_{2}(\mathbf{R} - \mathbf{S}) \eta$

 $donde^3$

$$J_2 = \left(\begin{array}{cc} 0 & 1\\ -1 & 0 \end{array}\right).$$

Podemos ver que en el triángulo $\triangle SPQ$ se tiene

$$J(0,0) = (\mathbf{Q} - \mathbf{P})^T J_2(\mathbf{S} - \mathbf{P})$$

= 2 \cdot \array \text{area} (\Delta \mathbf{S} \mathbf{P} \mathbf{Q}).

Observemos que la discretización del jacobiano, en los triángulos individuales corresponde exactamente al doble de su área, con el signo dado por la orientación del triángulo.

Expressiones equivalentes se obtienen para los valores J(1,0), J(0,1) y J(1,1) sobre los triángulos $\triangle PQR$, $\triangle QRS$ y $\triangle RSP$, respectivamente.

1.2.2. Funcionales discretos para el mapeo bilineal

Empleando el mapeo bilineal que hemos introducido, escribiremos las expresiones que corresponden a los funcionales de area, longitud, suavidad y ortogonalidad.

Definimos

$$\alpha(\Delta \mathbf{SPQ}) = (\mathbf{Q} - \mathbf{P})^T J_2(\mathbf{S} - \mathbf{P}), \qquad (1.7)$$

lo que nos permite escribir para el jacobiano en (0,0)

$$J(0,0) = \alpha(\triangle \mathbf{SPQ})$$

 $^{^3}$ Utilizamos el subíndice para distinguir esta matriz J_2 de la matriz jacobiana.

y las correspondientes expresiones para los otros tres vértices; estos cuatro valores representarán el "valor del área⁴" sobre una celda cuyos vértices son \mathbf{P} , \mathbf{Q} , \mathbf{R} y \mathbf{S} . Por lo tanto, el funcional discreto de área en esta celda es:

$$f_A = \frac{1}{4} \Big(J^2(0,0) + J^2(1,0) + J^2(0,1) + J^2(1,1) \Big) \\ = \frac{1}{4} \Big(\alpha^2 (\triangle \mathbf{SPQ}) + \alpha^2 (\triangle \mathbf{PQR}) + \alpha^2 (\triangle \mathbf{QRS}) + \alpha^2 (\triangle \mathbf{RSP}) \Big).$$

El funcional discreto de longitud λ para el mape
o ${\bf r}$ está dado por

$$\lambda(\xi,\eta) = \left\|\mathbf{r}_{\xi}\right\|^{2} + \left\|\mathbf{r}_{\eta}\right\|^{2},$$

de manera que para los cuatro triángulos de la celda de vértices ${\bf P},\,{\bf Q},\,{\bf R}$ y ${\bf S}$ se tiene:

$$\begin{aligned} \lambda(0,0) &= \|\mathbf{Q} - \mathbf{P}\|^2 + \|\mathbf{S} - \mathbf{P}\|^2\\ \lambda(1,0) &= \|\mathbf{Q} - \mathbf{P}\|^2 + \|\mathbf{R} - \mathbf{Q}\|^2\\ \lambda(0,1) &= \|\mathbf{R} - \mathbf{S}\|^2 + \|\mathbf{S} - \mathbf{P}\|^2\\ \lambda(1,1) &= \|\mathbf{R} - \mathbf{S}\|^2 + \|\mathbf{R} - \mathbf{Q}\|^2. \end{aligned}$$

Definiendo para $\triangle \mathbf{SPQ}$

$$\lambda(\triangle \mathbf{SPQ}) = \left\|\mathbf{S} - \mathbf{P}\right\|^{2} + \left\|\mathbf{Q} - \mathbf{P}\right\|^{2}$$

tenemos

$$\lambda(0,0) = \lambda(\triangle \mathbf{SPQ})$$

$$\lambda(1,0) = \lambda(\triangle \mathbf{PQR})$$

$$\lambda(0,1) = \lambda(\triangle \mathbf{RSP})$$

$$\lambda(1,1) = \lambda(\triangle \mathbf{QRS}).$$

Así, el funcional discreto de longitud en la celda es

$$f_L = \frac{1}{4} \Big(\lambda(0,0) + \lambda(1,0) + \lambda(0,1) + \lambda(1,1) \Big) \\ = \frac{1}{4} \Big(\lambda(\triangle \mathbf{SPQ}) + \lambda(\triangle \mathbf{PQR}) + \lambda(\triangle \mathbf{QRS}) + \lambda(\triangle \mathbf{RSP}) \Big).$$

Empleando α y λ , podemos escribir la expresión del funcional discreto de suavidad en un triángulo:

$$s(\triangle \mathbf{SPQ}) = \frac{\lambda(\triangle \mathbf{SPQ})}{\alpha(\triangle \mathbf{SPQ})},$$

que en la celda vale

$$f_S = \frac{1}{4} \Big(s(0,0) + s(1,0) + s(0,1) + s(1,1) \Big) \\ = \frac{1}{4} \Big(s(\triangle \mathbf{SPQ}) + s(\triangle \mathbf{PQR}) + s(\triangle \mathbf{QRS}) + s(\triangle \mathbf{RSP}) \Big).$$

 $^{^4\}mathrm{De}$ hecho, dos veces el área; sin embargo, la constante 2 no implica pérdida de generalidad.

Por último, uno de los funcionales de mayor interés para nuestro trabajo es el funcional de ortogonalidad⁵ O, dado como

$$O(\xi,\eta) = \mathbf{r}_{\xi}^T \mathbf{r}_{\eta}$$

Definiendo opara el triángulo
 $\bigtriangleup {\bf SPQ}$ como

$$o(\triangle \mathbf{SPQ}) = (\mathbf{S} - \mathbf{P})^T (\mathbf{Q} - \mathbf{P})$$

obtenemos

$$O(0,0) = o(\triangle \mathbf{SPQ})$$

$$O(1,0) = o(\triangle \mathbf{PQR})$$

$$O(0,1) = o(\triangle \mathbf{RSP})$$

$$O(1,1) = o(\triangle \mathbf{QRS}),$$

entonces el funcional en la celda es

$$f_{O} = \frac{1}{4} \Big(O^{2}(0,0) + O^{2}(1,0) + O^{2}(0,1) + O^{2}(1,1) \Big) \\ = \frac{1}{4} \Big(o^{2}(\triangle \mathbf{SPQ}) + o^{2}(\triangle \mathbf{PQR}) + o^{2}(\triangle \mathbf{RSP}) + o^{2}(\triangle \mathbf{QRS}) \Big).$$

1.2.3. Expresiones para los funcionales discretos

Con la notación de la sección 1.2.2, escribimos la discretización de los funcionales de suavidad, longitud, área y ortogonalidad para una malla.

Una vez definidos α , $\lambda \ge O$ para triángulos, sólo nos resta escribir los funcionales discretos correspondientes a los funcionales de la sección 1.1, considerando los cuatro triángulos en cada celda.

Para esto, denotemos los triángulos en la celda i,j con vértices $\mathbf{P}_{i,j}\mathbf{Q}_{i,j}\mathbf{R}_{i,j}\mathbf{S}_{i,j}$ como

$$\Delta \mathbf{S}_{i,j} \mathbf{P}_{i,j} \mathbf{Q}_{i,j} = \Delta^{1}_{i,j} \Delta \mathbf{Q}_{i,j} \mathbf{R}_{i,j} \mathbf{S}_{i,j} = \Delta^{2}_{i,j} \Delta \mathbf{P}_{i,j} \mathbf{Q}_{i,j} \mathbf{R}_{i,j} = \Delta^{3}_{i,j} \Delta \mathbf{R}_{i,j} \mathbf{S}_{i,j} \mathbf{P}_{i,j} = \Delta^{4}_{i,j}$$

de tal manera que el funcional discreto sobre una malla G sea

$$I(G) = \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{k=1}^{4} f(\triangle_{i,j}^k).$$
(1.8)

Así, el funcional de suavidad de Winslow F_S , el funcional de longitud F_L , el funcional de área F_A y el funcional de ortogonalidad F_O están dados como

$$F_S = \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{k=1}^{4} \frac{\lambda(\triangle_{i,j}^k)}{\alpha(\triangle_{i,j}^k)}$$

 $^{^5\}mathrm{En}$ [40], se presentan o tras formas posibles de funcionales de ortogonalidad sobre triángulos individuales.

$$F_{L} = \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{k=1}^{4} \lambda(\Delta_{i,j}^{k})$$

$$F_{A} = \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{k=1}^{4} \left(\alpha(\Delta_{i,j}^{k})\right)^{2}$$

$$F_{O} = \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{k=1}^{4} \left(o(\Delta_{i,j}^{k})\right)^{2}.$$
(1.9)

Un tratamiento más extenso de los funcionales discretos presentados en esta sección puede encontrarse en [9], [11], [14] y [56].

1.3. Caracterización de la convexidad

Empleando la orientación de la frontera de cada celda en una malla, es sencillo verificar que si el área en cada celda es positiva, la malla no necesariamente es convexa. Esto se debe a que existen cuadriláteros de área positiva que no son convexos ([14]).

Por esta razón, es importante buscar una manera de asegurar convexidad en una celda, esto es posible empleando la discretización que hemos presentado, considerando directamente cada uno de los cuatro triángulos que se forman con los vértices de cada celda de la malla ([4]). Se debe emplear la orientación de los triangulos, pues si el valor de α en cada triángulo es positivo, entonces la celda es convexa (Figura 1.3).

Sin embargo, no es conveniente resolver el problema

$$\min_{G} \{ I(G) \}$$

sujeto explícitamente a

$$\alpha(\Delta_i) > 0, \quad i = 1, \cdots, N \tag{1.10}$$

pues las restricciones no permiten un manejo eficiente y complican el proceso de optimización.

En vez de emplear las restricciones (1.10), es preferible que α aparezca directamente en la expresión (1.5), con el objeto de que la convexidad en las mallas óptimas sea consecuencia de las propiedades del funcional.

Además, se satisface automáticamente que la suma de los valores de α de los triángulos en una malla es igual al doble del área de la región Ω .

Esto es precisamente lo que permite escribir el problema de optimización de gran escala para generar mallas como un problema no restringido.

Debido a la importancia de α , en [56] se definen para una malla G de orden $m \cdot n$, sobre una región Ω : el promedio $\overline{\alpha}$, el mínimo α_{-} y el máximo α_{+} de los valores de α como

$$\overline{\alpha}(G) = \frac{1}{N} \sum_{q=1}^{N} \alpha(\triangle_q),$$

$$\begin{split} &\alpha_(G) = \min\{\alpha(\triangle_{i,j}^q) | 1 \le i \le m; 1 \le j \le n; 1 \le q \le 4\}, \\ &\alpha_+(G) = \max\{\alpha(\triangle_{i,j}^q) | 1 \le i \le m; 1 \le j \le n; 1 \le q \le 4\}. \end{split}$$

Claramente, si $\alpha_{-}(G) > 0$, entonces G es convexa. Ésta es la condición que emplearemos para garantizar convexidad.



Figura 1.3: Los cuatro triángulos orientados en una celda.

1.4. Combinaciones lineales convexas de funcionales

Para combinar los efectos de varios funcionales en una malla, es natural considerar combinaciones lineales convexas de ellos, como se discute en Knupp y Steinberg ([40]). Originalmente, Roache y Steinberg introdujeron funcionales del tipo ([50])

$$F(x) = \sigma_1 f_1(x) + \sigma_2 f_2(x) + \sigma_3 f_3(x)$$

donde $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3 \ge 0$ y $\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 = 1$.

La elección de los "pesos" σ_i y los funcionales f_i está motivada por las propiedades que se desea aparezcan en la malla. Es posible encontrar en la literatura pesos obtenidos de forma empírica buscando mallas satisfactorias.

Una de las combinaciones más útiles es el funcional de área-ortogonalidad de Knupp, para el cual $\sigma_1 = \sigma_2 = \frac{1}{2}$ y $f_1(x) = F_A(x)$, $f_2(x) = F_O(x)$, donde F_A y F_O representan a los funcionales de área y ortogonalidad; esta combinación es

$$F_{AO} = \frac{F_A + F_O}{2}.$$
 (1.11)

El funcional de area-ortogonalidad produce mallas muy suaves y con pocas celdas no convexas, pero no mallas convexas en general.

Cuando se utilizan combinaciones lineales de funcionales -debido a que el orden de magnitud de los funcionales individuales puede ser muy diferente- es importante normalizar las expresiones en la combinación con respecto a los valores que toman en sus mallas ideales (Capítulo 3).

1.5. Sobre la optimización de los funcionales discretos

Como se ha mencionado con anterioridad, la idea central de la generación variacional discreta de mallas se basa en construir una función cuyas variables, I, son las coordenadas de los nodos interiores de la mallas: A esta función se le denomina funcional discreta.

Generar mallas de manera variacional directa significa entonces resolver el problema de optimización

$$\min_{G \in \mathcal{D}} I(G)$$

Debido a la importancia de este problema en los desarrollos de la presente tesis, es muy importante enfatizar nuevamente algunos puntos:

- Primero, que el problema variacional continuo descrito en la sección 1.1 se ha tranformado en un problema de optimización multivariada por medio de la fórmula (1.6). Esto ocurre al discretizar el funcional continuo sobre Ω dividiendo la región en celdas, así obtenemos una función que refleja las propiedades del funcional sobre cada celda en función de las coordenadas de sus vértices.
- El segundo punto a señalar es que el problema de optimización, *per se*, no necesariamente conduce a una malla convexa; un ejemplo muy claro de este hecho es el funcional discreto de ortogonalidad que se presentará posteriormente. En consecuencia, es necesario imponer condiciones al problema de optimización para lograr la convexidad, lo que puede hacer muy costoso el proceso de optimización si las restricciones son explícitas.
- La idea clave entonces es lograr que la convexidad sea una restricción *im-plícita* dentro de la formulación de los funcionales, a fin de que el problema de optimización pueda ser resuelto eficientemente, lo cual efectivamente puede hacerse como se mostrará en el capítulo 3.
- El problema de optimización a resolver es de gran escala cuando la dimensión de la malla $m \times n$ es grande pues es una función de 2(m-2)(n-2)variables, debido a que cada nodo tiene 2 coordenadas y los puntos de la frontera son fijos. Es por ello que en problemas específicos, donde se requieren mallas con muchos nodos interiores, es necesario contar con un optimizador eficiente. En este trabajo se empleó el Método de Newton Truncado con Búsqueda en la Línea como estrategia global, que nos ha permitido obtener excelentes resultados. Para una referencia completa de este método de optimización y su implementación en el sistema UNAMALLA, véase [26].

Para finalizar, hemos de comentar que *no necesariamente* debemos obtener el óptimo del problema, lo que se requiere es generar un malla *convexa* que satisfaga algunas otras propiedades geométricas como la casiortogonalidad, razón por la cual el proceso de optimización se detiene al lograr $\epsilon\text{-convexidad},$ como se discute en la sección 3.7.

Como veremos más adelante, la fortaleza de los funcionales que presentaremos en los capítulos siguientes reside precisamente en los puntos anteriores.

A manera de ejemplo de las mallas óptimas de los funcionales de área, longitud, área-ortogonalidad y ortogonalidad, presentamos en la figura 1.4 mallas de 40 puntos por lado, generadas para un contorno que representa a la bahía de la Habana. A fin de apreciar su estructura, en el apéndice B se presentan nuevamente estas mallas a mayor escala.

En ninguno de los cuatro casos se logró una malla convexa, debido presumiblemente a que para estos funcionales no es posible garantizar mallas óptimas convexas en regiones con forma irregular.



Figura 1.4: Mallas óptimas para los funcionales de longitud, área, ortogonalidad y área-ortogonalidad

Capítulo 2

Los funcionales k-área y k-suavidad

2.1. Introducción

En este capítulo hacemos un breve listado de las propiedades de los funcionales denominados k-área y k-suavidad propuestos por Tinoco *et al.* ([9], [11]), los cuales serán nuestro punto de partida para desarrollar otros funcionales.

Los funcionales *k-área* y *k-suavidad* son algunos de los funcionales escritos en el contexto de la discretización que presentamos en el capítulo anterior. Permiten generar mallas convexas de manera muy eficiente, incluso en regiones muy irregulares.

En lo sucesivo, con el objeto de facilitar la notación escribimos los funcionales como:

$$I(G) = \sum_{q=1}^{N} f(\triangle_q) \tag{2.1}$$

en donde N = 4(m-1)(n-1) es el total de triángulos en la malla $G \ge m, n$ son el número de puntos horizontales y verticales de sus lados. Además, expresamos las funciones f evaluadas en el triángulo \triangle_q simplemente como f_q , esto es, $f_q = f(\triangle_q)$.

2.2. Motivación para construir el funcional ksuavidad

La versión discreta de suavidad

$$F_S = \sum_{q=1}^N \frac{\lambda_q}{\alpha_q}.$$
(2.2)

es la motivación para proponer el funcional de k-suavidad.

Es una tarea sencilla verificar dos cosas: Primero, si el proceso de optimización para el funcional de suavidad parte de una malla no convexa, no se llegará nunca a una malla convexa. Segundo, la dificultad radica en los denominadores que aparecen en la expresión (2.2), pues si se usa una malla inicial convexa, entonces el funcional de Winslow alcanza su mínimo en una malla convexa ([4]).

¿De qué manera puede reescribirse el denominador del funcional F_S para que sea posible emplear mallas iniciales no convexas?

Una respuesta consiste en "mover el polo"; trasladarlo de tal forma que los denominadores en el funcional de suavidad sean siempre positivos al permitir valores de α negativos mediante esta translación.

El valor $\alpha_{-}(G)$ es la "medida de la no convexidad" de la malla G. De ahí la importancia de considerar el conjunto siguiente:

Definición 4 Sea $M(\Omega)$ el conjunto de todas las mallas admisibles para una región¹; definimos

$$D_k = \{ G | G \in M(\Omega), \alpha_{\underline{}}(G) > -k \}$$

$$(2.3)$$

con k un número real.

Las propiedades siguientes son sencillas de verificar:

- 1. Si k y \tilde{k} son números reales tales que $k < \tilde{k} \Rightarrow D_k \subset D_{\tilde{k}}$.
- 2. $k \leq -\overline{\alpha} \Rightarrow D_k = \phi$.

De éstas se sigue que el conjunto $\mathcal{D} = \{k \in \mathbb{R} | D_k \neq \phi\}$ es no vacío y acotado inferiormente. Si inf $\mathcal{D} < 0$, entonces el conjunto D_0 de mallas convexas es no vacío.

La idea es minimizar un funcional semejante a F_S en D_k con k > 0; el objetivo es que el óptimo sea una malla convexa.

2.3. El funcional k-suavidad

Para presentar de manera clara el funcional k-suavidad, que se emplea para resolver el problema de optimización en el conjunto D_k , es conveniente comentar brevemente las ideas generales que se siguieron para proponerlo.

En 1998 Ivanenko estableció el resultado siguiente: El funcional de suavidad tiene al menos una malla óptima en el conjunto D_0 de mallas admisibles convexas ([36]).

En 1992, Barrera et al. ([4]) establecieron el funcional

$$f(\triangle) = \frac{\lambda(\triangle)}{\alpha(\triangle)},$$

¹Con $m \ge n$ fijos.

el cual alcanza su valor óptimo sobre el conjunto de triángulos con área orientada positiva, en el conjunto de triángulos rectángulos isósceles.

En 1996, Tinoco *et al.* ([9]) extendieron los resultados de Barrera e Ivanenko al establecer que el funcional

$$f(\Delta) = \frac{\lambda(\Delta) - 2\alpha(\Delta)}{k + \alpha(\Delta)},\tag{2.4}$$

considerado sobre todos los triángulos \triangle donde $\alpha(\triangle) > -k$, alcanza su valor óptimo en cualquier triángulo rectángulo isósceles.

Empleando el funcional (2.4), se escribe el funcional k-suavidad para una malla ${\cal G}$ como

$$S_k(G) = \sum_{q=1}^N \frac{\lambda(\triangle_q) - 2\alpha(\triangle_q)}{k + \alpha(\triangle_q)}.$$
(2.5)

La estrategia para generar mallas convexas con el funcional k-suavidad consiste en "aproximarse a la región convexa" empleando el parámetro k.

El siguiente teorema nos garantiza que, una vez elegido k, las mallas óptimas del funcional k-suavidad se encuentran precisamente en el conjunto D_k .

Teorema 1 Sea k > 0. Si $\{G_q\} \subset D_k$ es una sucesión de mallas que se aproxima a la frontera de D_k , entonces

$$S_k(G_q) \to \infty.$$

Demostración

Para cada q, sea \triangle_q un triángulo de área mínima en G_q . Por hipótesis, se cumple que $k + \alpha(\triangle_q) \to 0$. Si $\{S_k(G_q)\}$ está acotado, debe cumplirse que

$$\lambda(\triangle_q) - 2\alpha(\triangle_q) \to 0$$

lo que significa que la sucesión de triángulos $\{\triangle_q\}$ tiende a un triángulo rectángulo isósceles con área positiva o que los lados tienden a cero. Ninguno de estos casos es posible debido a la hipótesis sobre el área de $\triangle_q.\Box$ Como consecuencia, tenemos el corolario siguiente.

Corolario 2 Sea k > 0. Si el conjunto D_k es no vacío, entonces S_k tiene al menos un mínimo en D_k .

El teorema 3 proporciona, para k > 0, una estimación del incremento del valor α_{-} de las mallas óptimas del funcional S_k , a medida que k se aproxima a cero.

Teorema 3 Sea G_1 en D_k , k > 0. Sea $G_k \in D_k$ tal que

$$S_k(G_k) = \min\{S_k(G) | G \in D_k\}$$

entonces

$$\alpha_{\underline{}}(G_k) \ge -\tilde{k},$$

 $con \ \tilde{k} = k - \frac{2k}{S_k(G_1)+2}.$

El siguiente resultado nos indica que si existe una malla convexa para una región, entonces a medida que k > 0 se aproxima a cero, los valores de α_{-} de las mallas óptimas del funcional de k-suavidad se incrementan en proporción a un factor independiente de k.

Teorema 4 Supongamos que existe $\tilde{G} \in D_0$ y sea $\phi = S_0(\tilde{G})$. Si G_0 es una malla no convexa, entonces para k en el intervalo $\left(-\alpha_{-}(G_0), -\alpha_{-}(G_0) - \frac{\alpha_{-}(G_0)}{\phi}\right)$, las mallas óptimas G_k del funcional S_k satisfacen que

$$\alpha_{-}(G_k) > \left(\frac{\phi+1}{\phi+2}\right)\alpha_{-}(G_0).$$
(2.6)

Con este resultado se puede demostrar que es posible obtener una malla convexa en un número finito de pasos.

Los teoremas anteriores nos indican que efectivamente podemos seguir disminuyendo k en cada ocasión para eventualmente obtener mallas óptimas convexas. En caso de que estas últimas no existan para una región, el proceso de optimización arrojará como resultado una malla con el menor número posible de celdas no convexas.

2.4. El funcional k-área

En 1996, Tinoco ([11]) construyó un funcional de área basado solamente en los denominadores $k + \alpha$, para el cual se cumplen resultados semejantes al funcional de k-suavidad, el funcional k-área:

$$A_{k} = \sum_{q=1}^{N} \frac{1}{k + \alpha_{q}}.$$
(2.7)

En los siguientes teoremas se enuncian las propiedades de este funcional.

Teorema 5 Sea k > 0. Si $D_k \neq \phi$, entonces A_k tiene al menos un mínimo en D_k .

También se cumple que los valores α_{-} de las mallas óptimas del funcional A_k se incrementan a medida que k > 0 se aproxima a cero.

Teorema 6 Sean $G_0 \in D_k$ y G_1 en D_k tal que

$$A_k(G_1) = \min_{G \in D_k} A_k(G),$$

entonces

$$\alpha (G_1) > -\tilde{k},$$

donde $\tilde{k} = k - \frac{1}{A_k(G_0)}$.

Teorema 7 Supongamos que D_{k_0} es no vacío y sea $G_{k_0} \in D_{k_0}$; elijamos $G_0 \notin D_{k_0}$ una malla no convexa.

Entonces para todo k en el intervalo $\left(-\alpha_{-}(G_0), -\alpha_{-}(G_0) + \frac{1}{2\phi_{k_0}}\right)$, las mallas óptimas G_k del funcional A_k satisfacen que

$$\alpha_{-}(G_k) > \alpha_{-}(G_0) + \frac{1}{2\phi_{k_0}} \tag{2.8}$$

donde $\phi_{k_0} = A_{k_0}(G_{k_0})$

Con este resultado se puede demostrar que es posible obtener una malla convexa en un número finito de pasos.

De ahora en adelante, sin causar ambiguedad denotaremos a los funcionales de k-suavidad y k-área como kS y kA, respectivamente.

2.5. Mallas generadas con kS y kA

Como un ejemplo de las mallas óptimas generadas con kS y kA, en las figuras 2.1 y 2.2 se muestra una serie de mallas convexas de 40 puntos por lado para fronteras poligonales que aproximan a la bahía de la Habana, Gran Bretaña, el lago Ucha en Rusia y a Sudamérica. Las mallas iniciales fueron generadas por interpolación transfinita (Descrito en el apéndice A).

Estas mallas se presentan a mayor escala en el apéndice B.

2.6. Importancia del denominador $k + \alpha$

Los funcionales kS y kA generan mallas convexas admisibles de manera muy eficiente, y aunque los resultados se presentan de manera natural, lo único que se ha hecho es una translación del origen en un espacio euclidiano.

¿Qué es lo que hace que funcionen?

Resulta sugerente que los funcionales de este capítulo, que permiten generar mallas convexas en fronteras arbitrarias, se distinguen de los presentados en el capítulo anterior por la presencia del denominador $k + \alpha$, que funciona como una barrera para evitar que los valores de α en las mallas sean negativos.

Una desventaja que presentan es que el proceso de optimización numérica, cuando los valores de α se aproximan a -k, los funcionales kS y kA requieren ser reemplazados por expresiones continuas en una vecindad del polo. Es decir, el funcional kA de la teoría es uno, y el que se implanta en el algoritmo es otro para poder usar un método de optimización sin restricciones.



Figura 2.1: Mallas generadas con k-suavidad.




Capítulo 3

Funcionales convexos de área

3.1. Introducción

En este capítulo analizamos el significado de una expresión semejante al denominador $k + \alpha$ en los funcionales. Dicha expresión tiene la capacidad de distinguir si el área orientada de un triángulo es positiva o negativa.

Este es un hecho que sugiere que algunos funcionales son capaces de identificar los triángulos útiles para construir una malla convexa.

El objetivo central de este trabajo es generar mallas casi ortogonales. Es natural buscar los óptimos del funcional de ortogonalidad mencionado en el capítulo 1; sin embargo, lo que se observó fue que sus mallas óptimas casi nunca son convexas. Esta problemática se analizará en el capítulo 4.

Por otro lado, lo que si esta claro es lo siguiente; es indispensable combinar el funcional de ortogonalidad con algún funcional de área. La necesidad de esta combinación nos llevó a buscar el funcional de área más adecuado para la generación de mallas convexas, además es necesario entender completamente porque un funcional de área genera mallas convexas.

3.2. Mallas convexas y dispersión

El proceso de la generación de mallas empieza con una malla inicial, que se obtiene por interpolación. El área de los triángulos de la malla inicial en regiones irregulares tiene usualmente un rango muy grande de valores, las áreas estan muy dispersas. Al final del proceso de optimización se produce una reducción significativa de ese rango de valores. En este sentido, decimos que el proceso de generación de mallas logra una reducción de dispersión de las áreas.

Para facilitar la discusión que sigue, sobre los funcionales de área, es necesario

establecer una definición más precisa, es lo que haremos en la siguiente sección.

3.3. Funcionales de Área

Sea $f(x) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ una función continua y F un funcional, $F(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ dado como

$$F(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N} f(x_i).$$

Sea $M(\Omega)$ el conjunto de mallas admisibles con $N = 4 \cdot (m-1) \cdot (n-1)$ triángulos, para una región poligonal Ω de área igual a A. Sea φ la función, $\varphi : M(\Omega) \to \mathbb{R}^N$ que a cada malla le asigna el vector $\varphi(G) = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N)^T$, entonces definimos el funcional discreto de área F_A , asociado a la función F como

$$F_A(G) = F(\varphi(G))$$
$$= \sum_{q=1}^N f(\alpha_q).$$

3.4. Exponenciales de área

Un teorema que se discute en [14] y [56], sobre la utilidad de los funcionales de área, es el siguiente.

Teorema 8 Si G_u es una malla tal que todos sus triángulos tienen la misma área y F_A es el funcional de área expresado como $F_A(G) = \sum_{q=1}^N f(\alpha_q)$, donde f es una función $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, con $f''(x) \ge 0$, entonces G_u es un punto mínimo de F_A .

Este resultado nos sugiere que casi cualquier funcional convexo de área es útil. Sin embargo, esto no es así, ya que el funcional de área

$$F_A(G) = \sum_{q=1}^N \alpha_q^2$$

no es capaz de generar mallas convexas en regiones irregulares.

Para lograr mallas convexas, debemos buscar una función $f(\alpha)$ que se comporte de manera semejante a $1/(k+\alpha)$. Desglosando las condiciones implícitas de este tipo de funciones, se requiere que f sea:

- capaz de distinguir valores distintos de α
- convexa

- acotada inferiormente
- y se incremente a medida que los valores de α disminuyen

Además, es conveniente que tenga la mayor suavidad posible, para permitir en la práctica una optimización sencilla.

Una respuesta a nuestro planteamiento es la función

$$f(\alpha) = \exp(-\alpha). \tag{3.1}$$

Veamos el comportamiento de (3.1) sobre la familia de triángulos vértices son (0,0), (1,0) y (l,θ) en coordenadas polares, con l fijo y el ángulo θ variable, como se representa en la figura 3.1.



Figura 3.1: Triángulo de lados (1, 0) y (l, θ) .

Sobre éste triángulo $f = \exp(-2l\sin(\theta))$. Derivando e igualando a cero concluimos $\theta \equiv \frac{\pi}{2} \pmod{\pi}$. Esto significa que

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2}\right)_{\theta=\frac{\pi}{2}} = 2l \exp(-2l) > 0$$
$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2}\right)_{\theta=-\frac{\pi}{2}} = -2l \exp(-2l) < 0$$

El mínimo de f se alcanza en triángulos rectángulos orientados positivamente y su máximo en triángulos rectángulos orientados negativamente.

3.5. Sumas de exponenciales

Nuestro siguiente objetivo es mostrar que los funcionales semejantes a

$$F_A(G) = F(\varphi(G)) \tag{3.2}$$

donde

$$F(\mathbf{x}) = \sum_{q=1}^{N} \exp(-x_q) \tag{3.3}$$

son de utilidad para construir mallas convexas.

Como primer paso, presentamos un teorema clásico propuesto por Hardy, Littlewood y Pólya en su bello texto *Inequalities* ([32]).

Teorema 9 Sean g una función convexa y A un número real. Si x_1, \dots, x_N son números reales que satisfacen $\sum_{i=1}^{N} x_i = A$, entonces

$$Ng(\frac{A}{N}) \le \sum_{i=1}^{N} g(x_i).$$

Demostración:

De la convexidad de g se sigue la desigualdad

$$g(\frac{A}{N}) = g(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}x_i) \le \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}g(x_i).\square$$

De aquí en adelante, la constante A para nuestro problema es cuatro veces el área orientada de la región poligonal.

Este resultado refuerza la idea presentada en el teorema 8: Funcionales de la forma (3.3) alcanzan su valor mínimo en una malla con todos sus valores de α iguales.

Es importante comentar que el teorema 9 no garantiza la existencia de una malla convexa *per se*. Una malla como G_u no tiene porque ser una malla admisible para toda región, ya que existen varias restricciones implícitas en el problema de optimización:

- En las celdas que se encuentran en las esquinas, los triángulos que corresponden a los vértices no se mueven durante el proceso de optimización, esto es, tienen área constante.
- En cada una de las celdas, la suma del área orientada de los cuatro triángulos es dos veces el área orientada de la celda. Estos triángulos están relacionados por una relación lineal. Existe una restricción para cada celda de la malla.

Estas restricciones implican que para algunas fronteras no existirán mallas convexas para toda elección de puntos en los lados.

Un ejemplo de lo anterior fue propuesto por Ivanenko para la frontera mostrada en la figura 3.2. Para ese contorno¹, es sencillo verificar que no es posible generar una malla convexa de 3 puntos por lado².

Con el objetivo de hacer claro el camino a seguir, presentamos dos gráficas correspondientes a curvas de nivel de (3.3) para el caso de 2 variables. Aunque son más sencillas que las expresiones para el problema general que necesitamos resolver, nos sirven para imaginar la geometría asociada al funcional (3.3).



Figura 3.2: Contorno modelo de Ivanenko.



Figura 3.3: Curvas de nivel para f_1 y f_{50} .

A pesar de que las curvas en la segunda gráfica parecen no ser suaves, es solamente un efecto visual; consecuencia de un cambio de parámetro que incrementa de manera importante el crecimiento de la exponencial, pero no afecta su diferenciabilidad.

En ambos casos, las gráficas sugieren un comportamiento asintótico con respecto a rectas paralelas a los ejes coordenados. Así ocurre efectivamente, y tenemos en el caso general varios resultados al respecto.

La segunda gráfica nos sugiere que debemos hacer para generar mallas convexas. Notemos que es posible interpretar la gráfica de las curvas de nivel para f_1 como un "zoom" de f_{50} , pues tomando como argumento 50x en lugar de x podemos considerar, un cambio en el parámetro, o un cambio de escala dado por

 $x\mapsto 50x$

en la primera gráfica.

¹Los puntos que no están sobre el rectángulo tienen coordenadas (0.25, 0.5) y (0.75, 0.5).

²Tomando como puntos al interior de los lados (0,0.5), (0.25,0.5), (0.75,0.5) y (1,0.5).

Consideremos dos mallas de 40 puntos por lado generadas minimizando (3.3), una para un contorno que aproxima a la bahía de la Habana, otra para un polígono simple de prueba (figura 3.4). En ambos casos el proceso de optimización partió de una malla generada por interpolación de los lados.

La primera de estas mallas tiene 2 celdas no convexas y la segunda es una malla



Figura 3.4: Mallas generadas con el funcional (3.3).

convexa. Los histogramas para los valores de α en estas mallas se muestran en la figura 3.5.

El promedio $\overline{\alpha}$ es igual a la unidad en ambas mallas. Esto explica el fuerte



Figura 3.5: Las distribuciones de α para los contornos (figura 3.4).

agrupamiento alrededor del valor $\alpha = 1$ después del proceso de optimización. Sin embargo, la primera distribución no corresponde a una malla convexa. ¿Por qué fracasa el funcional

$$F_A(G) = \sum_{q=1}^N \exp(-\alpha_q),$$

en el caso de la bahía de la Habana?

El problema está en el hecho siguiente: La exponencial $\exp(-\alpha_q)$ no penaliza lo suficiente a los triángulos de área negativa pequeña, por esta razón es necesario aumentar la penalización.

Consideremos la función $\exp(-t\alpha)$, donde t > 1. Lo anterior da lugar al funcional

$$F_{A,t}(G) = F_t(\varphi(G))$$

donde

$$F_t(\mathbf{x}) = \sum_{q=1}^N \exp(-tx_q).$$

Aumentar la penalización es equivalente a escalar la malla. ¿Que queremos decir con esto? Como la malla G es un punto en un espacio euclideano de dimensión finita, si escalamos los puntos de la malla G por un factor \sqrt{t} , las áreas de los triángulos de las celdas quedan escaladas por un factor t. En forma simbólica

$$\begin{array}{rccc} G & \to & \sqrt{t}G \\ \alpha_q & \to & t\alpha_q \end{array}$$

por lo tanto, si denotamos $F(\sqrt{t}G)$ como $F_t(G)$ tenemos

$$F_{A,t}(G) = \sum_{q=1}^{N} \exp(-t\alpha_q).$$

3.6. Superficies de nivel de F_t

A continuación, establecemos algunos resultados sobre las superficies de nivel de ${\cal F}_t.$

Teorema 10 Sean u > 0, t > 0. Existe $\mathbf{x}_0 = (x_{01}, x_{02}, \dots, x_{0N})^T \in \mathbb{R}^m$ tal que

$$F_t(\mathbf{x}_0) = \sum_{i=1}^m e^{-tx_{0i}}$$
$$= u$$

Demostración:

Tomando $x_{0i} = x_{0j}$ para $1 \le i, j \le m$ tenemos $F_t(\mathbf{x}_0) = Ne^{-tx_{01}}$, entonces

$$x_{01} = \frac{\log m - \log u}{t}.\square$$

El anterior resultado también indica que el espacio cociente construido en $I\!\!R^N$ con la relación de equivalencia

$$\mathbf{x} \sim \mathbf{y} \qquad \iff \qquad F_t(\mathbf{x}) = F_t(\mathbf{y})$$

se identifica con los reales positivos, considerando la intersección de las superficies de nivel con la recta generada por el punto $(1, 1, 1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^n$. Es inmediato verificar que las superficies quedan dentro de una translación adecuada del primer "hipercuadrante" de \mathbb{R}^N en la dirección del vector $(1, 1, 1, \dots, 1)^T$. **Definición 5** Definamos para k real el conjunto

$$\Lambda_k = \{ \mathbf{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_N) \in \mathbb{R}^N | \min_i \{ x_i \} > k \}.$$
(3.4)

Teorema 11 La superficie de nivel $S_{\mathbf{x}_0}$ del punto $\mathbf{x}_0 = x_0(1, 1, \dots, 1)^T$, definida por el funcional

$$F_t(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N e^{-tx_i}$$

donde k, t son números reales y t > 0, cumple que

$$S_{\mathbf{x}_0} \subset \Lambda_k$$

$$si \ x_0 \ge k + \frac{\log N}{t}$$

Demostración:

Dada la simetría del funcional, sólo hay que verificar que no existe intersección con el plano $x_1 = k$. Si dicha intersección existe, entonces para el punto (k, x_2, \dots, x_N) tenemos

$$e^{-tk} + \sum_{i=2}^{N} e^{-tx_i} = Ne^{-tx_0}.$$

Como consecuencia del teorema 10, existen valores $x_2, x_3,...,x_N$ que satisfacen la expresión anterior, si $Ne^{-tx_0} > e^{-tk}$, de donde se deduce inmediatamente que

$$x_0 < k + \frac{\log N}{t}.\square$$

Es importante señalar que la forma de la frontera de los conjuntos Λ_k y las superficies de nivel del funcional F_t , es muy parecida para t grande (Figura 3.3).

Definición 6 Consideremos un número real k. El conjunto T_k es

$$T_k = \Lambda_k \cap P,$$

donde P es el plano

$$P = \{ (x_1, x_2, \cdots, x_N) | x_1 + x_2 + \cdots + x_N = A \}.$$
(3.5)

El vector de los valores de α de una malla admisible siempre está contenido en P, y cuando la malla sea convexa estará contenido en T_0 .

El siguiente ejemplo muestra cómo se puede aprovechar el comportamiento suigéneris de las superficies de nivel y el papel que juega el parámetro t. **Ejemplo.** Para la función

$$F_t(x, y, t) = exp(-tx) + exp(-ty),$$

consideremos un punto $(x_0, y_0) \in \Lambda_k \subset \mathbb{R}^2$. Sea la familia de curvas de la función F_t dada como:

$$\mathcal{S}(x_0, y_0, t) = \{ (x, y) | e^{-tx} + e^{-ty} = e^{-tx_0} + e^{-ty_0} \}.$$

Es inmediato verificar que cuando $t \to \infty$, las curvas de nivel quedan eventualmente contenidas en el cuadrante que define Λ_k , en otras palabras, a partir de cierto valor de t quedan contenidas completamente en Λ_k (Figura 3.6).



Figura 3.6: Algunas curvas de nivel para F_t .

Con base en este ejemplo, vamos a demostrar que en el caso general existen valores de t a partir de los cuales se cumple la siguiente condicion: "Si $x_0 \in \Lambda_k$ entonces existe un valor de t tal que la superficie de nivel esta contenida en Λ_k para valores de k < A/N".

El siguiente teorema sintetiza el proceso que hemos motivado.

Teorema 12 Si el punto $\mathbf{x}_0 = (x_{01}, x_{02}, \dots, x_{0N})^T \in \Lambda_k \cap P$ y si k < A/Nentonces existe un número real t > 0 tal que, la superficie de nivel $S_{\mathbf{x}_0}$ de $F_t(\mathbf{x})$ que pasa por \mathbf{x}_0 , está contenida en Λ_k .

Demostración

La primera observación es que si se aplican los teoremas 10 y 11, se obtiene la condición para de t, a saber

$$-\frac{\log F_t(\mathbf{x}_0)}{t} \ge k$$

Como $\frac{A}{N}(1, 1, ..., 1)^T$ es el mínimo de $F_t(\mathbf{x})$, tenemos

$$F_t(\mathbf{x}_0) \ge N \exp(-t\frac{A}{N})$$

de donde se sigue

$$-\frac{\log F_t(\mathbf{x}_0)}{t} \le \frac{A}{N} - \frac{\log N}{t}$$

Por otra parte, dado que $\mathbf{x}_0 \in \Lambda_k$

$$x_{-}^{0} = \min_{i} \{ x_{0i} \} > k,$$

lo que proporciona una cota superior para $F_t(\mathbf{x}_0)$

$$F_t(\mathbf{x}_0) \le N \exp(-tx_-^0)$$

de donde

$$x_{-}^{0} - \frac{\log(N)}{t} \le -\frac{\log(F_t(\mathbf{x}_0))}{t}.$$

En resumen

$$x_{-}^{0} - \frac{\log(N)}{t} \leq -\frac{\log(F_t(\mathbf{x}_0))}{t} \leq \frac{A}{N} - \frac{\log(N)}{t},$$

tomando límite $t \to \infty$ obtenemos

$$x_{-}^{0} \leq \lim_{t \to \infty} \left(-\frac{\log(F_{t}(\mathbf{x}_{0}))}{t} \right) \leq \frac{A}{N}$$

es decir,

$$k < x_{-}^{0} \leq \lim_{t \to \infty} \left(-\frac{\log(F_{t}(\mathbf{x}_{0}))}{t} \right)$$

por lo que para t suficientemente grande tal que

$$k < -\frac{\log(F_t(\mathbf{x}_0))}{t}$$

se sigue la afirmación del teorema $\Box.$

Ahora estamos interesados en el conjunto

$$L_a = \{ \mathbf{x} \in P | F_t(\mathbf{x}) \le a \}$$

que es la intersección del plano P con los puntos \mathbf{x} tales que $F_t(\mathbf{x}) \leq a$. El ejemplo siguiente muestra la forma del conjunto L_a **Ejemplo:** Consideremos las curvas de nivel de la función

$$F_t(x, y, z) = \exp(-tx) + \exp(-ty) + \exp(-tz)$$

sujetas a la condición x + y + z = 1. Se puede ver fácilmente que el conjunto L_a se obtiene de las curvas de nivel de F_t al eliminar la variable z. Así obtenemos la función

$$\tilde{F}_t(x, y) = \exp(-tx) + \exp(-ty) + \exp(-t(1 - x - y))$$

y L_a es el conjunto de puntos (x, y) tales que

$$F_t(x,y) \le a$$

Observemos de la figura 3.7 que el conjunto L_a es convexo, acotado y homeomorfo a la bola unitaria.



Figura 3.7: Conjunto $F_t(x, y)$.

Las propiedades del conjunto L_a son válidas para cualquier función parecida a la exponencial. El siguiente teorema establece esta afirmación.

Teorema 13 Sea

$$H_t((x_1, \cdots, x_N)^T) = \sum_{i=1}^N f(-tx_i),$$

donde f(x) es una función continua, estrictamente decreciente, convexa y positiva. Sean t > 0, A > 0 y P la expresión (3.5). Entonces para toda $a \ge Nf(\frac{tA}{N})$, los conjuntos

$$L_a = \{ \mathbf{x} \in P | a \ge H_t(\mathbf{x}) \}$$

$$(3.6)$$

satisfacen las siguientes propiedades:

- Los conjuntos L_a son cerrados y no vacíos.
- Si a < b, entonces $L_a \subset L_b$.
- para toda $\mathbf{x} \in P \setminus L_a$, $H_t(\mathbf{x}) > a$.
- La frontera de L_a es el conjunto

$$\{\mathbf{x} \in P | H_t(\mathbf{x}) = a\}.$$

• Los conjuntos L_a son convexos.

• Los conjuntos L_a son acotados (y en consecuencia compactos usando la primera propiedad).

Estas propiedades indican que las superficies de nivel de F_t restringidas a P son topológicamente equivalentes a esferas ([48]), lo que nos permite demostrar de una manera sencilla los teoremas de la sección siguiente.

En la figura 3.8 se muestran los conjuntos L_a que pasan por el punto \mathbf{x}_0 para distintos valores de t.

3.7. Mallas óptimas del funcional F_t

Sea $M(\Omega)$ el conjunto de mallas admisibles con N = 4(m-1)(n-1) triángulos para una región poligonal Ω de área orientada igual a A. Se define el conjunto³

$$M_k = \{ G \in M(\Omega) | \alpha_{-}(G) > k \}$$

para k < A/N.

Observemos que $G \in M_k$ si y sólo si $\varphi(G) \in \Lambda_k$.



Figura 3.8: Conjuntos L_a .

Teorema 14 Sea $k < \frac{A}{N}$ y supóngase que existe una malla convexa $G_0 \in M_0(\Omega)$. Entonces, para un valor de t suficientemente grande, existe $\hat{G} \in M_0(\Omega)$ tal que

$$F_{A,t}(\hat{G}) = \min\{F_t(G) | G \in M_k\}.$$

³Los conjuntos M_k son equivalentes a los conjuntos D_k del capítulo 2; para nuestros propósitos, por la manera como hemos planteado el problema en términos de los conjuntos Λ_k y T_k es conveniente hacer una nueva definición. Claramente, $D_{-k} = M_k$.

Demostración

Hagámos $\mathcal{G} = \varphi(G_0)$ y sea t tal que la superficie de nivel $S_{\mathcal{G}} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N | F_t(\mathcal{G}) = F_t(\mathbf{x})\}$ satisfaga $S_{\mathcal{G}} \subset \Lambda_0$.

La intersección $S_{\mathcal{G}} \cap P$ es no vacía, pues $\mathcal{G} \in P$, y dado que $S_{\mathcal{G}} \cap P \subset \Lambda_0 \cap P = T_0$, la superficie de nivel del funcional F_t restringido a P está contenida en T_0 . Esto significa que el conjunto

$$L_{F_t(\mathcal{G})} = \{ \mathbf{x} \in P | F_t(\mathcal{G}) \ge F_t(\mathbf{x}) \}$$

está completamente contenido en T_0 . De la definción de $L_{F_t(\mathcal{G})}$, se sigue que $\forall \mathbf{x} \in P \setminus L_{F_t(\mathcal{G})}$

$$F_t(\mathbf{x}) > F_t(\mathcal{G}) \tag{3.7}$$

y consecuencia de la propiedad 3 del lema 13, $\forall \mathbf{x} \in L_{F_t(\mathcal{G})}$ se cumple

$$F_t(\mathbf{x}) \le F_t(\mathcal{G}). \tag{3.8}$$

Finalmente, si G_1 y G_2 con mallas en M_k tales que $\varphi(G_1) \in L_{F_t(\mathcal{G})}$ y $\varphi(G_2) \notin L_{F_t(\mathcal{G})}$, las desigualdades (3.7) y (3.8) implican que

$$F_t(\varphi(G_2)) > F_t(\mathcal{G}) \ge F_t(\varphi(G_1));$$

en otras palabras tenemos

$$F_{A,t}(G_2) > F_{A,t}(G_0) \ge F_{A,t}(G_1).\square$$

3.8. Sobre el escalamiento y la ϵ -convexidad

Para m, n fijos, consideremos $M(\Omega)$ el conjunto de mallas de dimensión $m \times n$ donde los puntos a la frontera son fijos. Ahora bien, para cada $G \in M(\Omega)$ el promedio del área de los triángulos de las celdas lo escribimos como

$$\overline{\alpha}(G) = \frac{1}{N} \sum_{q=1}^{N} \alpha_q$$

donde N es el número de triángulos en la malla G; sin embargo, debido a que la frontera de Ω y los triángulos están orientados positivamente tenemos que

$$\overline{\alpha}(G) = \frac{\operatorname{Area}(\Omega)}{(m-1)(n-1)},$$

cantidad que es independiente de la malla, sólo depende de la región y de la dimensión de ésta. Por consiguiente lo denotaremos como

$$\overline{\alpha}(M(\Omega)) = \frac{\operatorname{Area}(\Omega)}{(m-1)(n-1)}.$$

Ahora bien, consideremos el conjunto de mallas convexas $M_0(\Omega)$ en la región Ω ; a cada malla $G \in M_0(\Omega)$ le asignamos $\alpha_-(G) = \min\{\alpha(\Delta) | \Delta \in G\}$, observemos las propiedades de esta función

$$\begin{array}{ccc} \alpha_{-} : & M_0(\Omega) \longrightarrow \mathbb{R} \\ & G \longmapsto \alpha_{-}(G) \end{array}$$

a) α_{-} esta acotada superiormente. En lo particular

$$0 < \alpha_{-}(G) \leq \overline{\alpha}(M(\Omega)).$$

b) Esta función alcanza su máximo para alguna malla $G \in M_0(\Omega)$, definimos ese número como

$$\epsilon_c(M_0(\Omega)) = \max_{G \in M_0(\Omega)} \alpha_-(G)$$

De manera particular observamos que

$$0 < \alpha_{-}(G) \le \epsilon_{c}(M_{0}(\Omega)) \le \overline{\alpha}(M(\Omega)),$$

para cualquier $G \in M_0(\Omega)$.

Cabe señalar que el valor $\epsilon_c(M_0(\Omega))$, es un punto de referencia para la dificultad esperada en la generación de mallas convexas en la región; sin embargo, este valor puede fluctuar en valores muy grandes o muy pequeños, dependiendo de las coordenadas espaciales de la región Ω , por lo que no habrá un valor de referencia a menos que escalemos las mallas y entonces podamos hablar en conjunto de una ϵ -convexidad.

El escalamiento propuesto consiste en hacer $\overline{\alpha}(M(\Omega)) = 1$, de esta manera, transformaremos Ω en Ω' , por un factor de $\frac{1}{\sqrt{\alpha}}$ de tal forma que $\overline{\alpha}(M(\Omega')) = 1$. A partir de ahora, cuando hablemos de Ω y el conjunto de mallas de dimensión $m \times n$, pensaremos que se encuentra ya escalada de esta forma.

Escalada la región, ya contamos con un patrón de referencia para $\epsilon_c(M_0(\Omega))$. Es importante subrayar, que este valor $\epsilon_c(M_0(\Omega))$ depende de la región Ω , para regiones muy irregulares, por ejemplo, con con dificultades de cambio de convexidad en su frontera, este valor podría ser muy pequeño.

$$0 < \epsilon_c(M_0(\Omega)) \ll 1$$

Esto puede ocasionar que el problema de la generación de mallas ϵ -convexas no tenga solución si $\epsilon > \epsilon_c(M_0(\Omega))$. En la práctica hemos encontrado, para nuestros problemas tipo, que con el escalamiento propuesto y para $\epsilon = 10^{-4}$, siempre hay mallas ϵ -convexas.

Todos los algoritmos se han implantado en doble precisión, de tal fortuna que, al usar este valor cota para la ϵ -convexidad, no tenemos problema de mal condicionamiento con el redondeo.

3.9. Algoritmo para la generación de mallas convexas

En esta sección se muestra la forma práctica de emplear los resultados hasta ahora discutidos para generar mallas convexas. Para tal propósito, es necesario tener presentes los siguiente hechos:

- El objetivo es generar mallas convexas, no mallas óptimas. Los funcionales cuyas mallas óptimas son convexas son sólo una herramienta para generar por medio del proceso de optimización, una sucesión de mallas que tiene un primer elemento convexo si existen mallas convexas para una región.
- En la optimización numérica se requiere un criterio de convergencia. El criterio de paro se basa en la norma del gradiente.

En resumen, empleando lo hasta ahora expuesto, se propone el siguiente algoritmo para generar mallas convexas:

- 1. Elegir valores iniciales para TOL, $t, \tau > 1$ y $\varepsilon > 0$.
- 2. Generar una malla inicial y escalarla para satisfacer $\overline{\alpha} = 1$.
- 3. Efectuar algunas iteraciones del problema de optimización

$$\hat{G} = \arg\min_{G \in M(\Omega)} \{F_t(G)\}$$

 con

$$F_t(G) = \sum_{q=1}^N f(t\alpha_q)$$

hasta satisfacer $\|\nabla F_t(\hat{G})\| < TOL$, donde ∇F_t es el gradiente de F_t

4. Si $\alpha_{-}(\hat{G}) > \varepsilon$, obtenemos una malla convexa y el proceso ha terminado; de lo contrario multiplicamos t por el factor $\tau > 1$ y regresamos al paso 3 con \hat{G} como la malla inicial.

Es importante observar que el factor τ y el valor inicial de t en el algoritmo son arbitrarios. y pueden, en principio, ser elegidos sin relación a un valor específico de k, aunque claramente diferentes elecciones implicarán que el proceso de optimización requerirá de más o menos iteraciones para generar una malla convexa.

3.9.1. Resultados numéricos

Usando el funcional $F_{A,t}$, generamos las mallas convexas de 41 puntos por lado que se muestran en la figura 3.9, para contornos que aproximan la bahía de la Habana, Sudamérica, el lago Ucha en Rusia y Gran Bretaña. Siguiendo el algoritmo descrito en la sección anterior:

- Las mallas iniciales fueron generadas empleando el funcional de área-ortogonalidad⁴ y escaladas para satisfacer $\overline{\alpha} = 1$.
- Se eligieron los valores $t = 1, \tau = 2, \varepsilon = 10^{-4}$ y $TOL = 10^{-4}$.
- Se empleó Newton Truncado con Búsqueda en línea para la optimización (Véase ([26])).

Es posible observar que las mallas óptimas convexas mostradas en la figura 3.9 presentan zonas con una densidad alta de los puntos interiores de la malla, lo que ocasiona un efecto visual de "conglomeración" a la escala a la que se han incluido en el presente capítulo. En el apéndice B se muestran nuevamente estas y otras mallas obtenidas en la tesis, pero dibujadas a mayor escala, lo que permite una mejor apreciación visual de su estructura.

En la tabla 3.1 se presentan los valores inicial y final de t, t_i y t_f , el número u de actualizaciones de t, así como α_{-} y α_{+} para las mallas finales y el número It de iteraciones del proceso de optimización.

En el apéndice B se muestran a mayor escala las mallas de esta sección.

Región	t_i	t_f	α_{-}	α_+	It	u
Bahía de la Habana	1.00	4.00	0.1220	1.9579	174	2
Sudamérica	1.00	2.00	0.0618	1.9269	52	1
Lago Ucha	1.00	8.00	0.0388	2.1271	74	3
Gran Bretaña	1.00	8.00	0.0022	10.7981	398	3

Cuadro 3.1: Parámetros empleados con el funcional F_t .

3.10. Caracterización de los funcionales suaves y convexos de área para generar mallas convexas

La sencillez del funcional (3.3) permite ver que nuestros resultados son válidos debido a que la función e^{-x} es

- Convexa.
- Estrictamente decreciente.
- Positiva.

Por lo tanto, proponemos los siguientes teoremas generales.

 $^{^4}$ Presentado en el capítulo 1.



Figura 3.9: Mallas generadas empleando el funcional F_t .

Teorema 15 Sea u > 0 y f una función continua, convexa, positiva y estrictamente decreciente. Entonces, existe un punto $\mathbf{z} = (z_1, ..., z_m) \in \mathbb{R}^m$ tal que para el funcional

$$F(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{m} f(x_i)$$

se cumple que:

$$F(\mathbf{z}) = u.$$

Demostración

Consideremos sin pérdida de generalidad que f>0.Solamente hay que hacer $z_i=c,$ para $1\leq i\leq n,$ así

$$F(\mathbf{z}) = mf(c)$$
$$= u.$$

Entonces

$$c = f^{-1}\left(\frac{u}{m}\right).\square$$

También es cierto que algunas curvas de nivel de F quedan completamente contenidas en el hipercuadrante positivo.

Teorema 16 Sean z, k números reales, f una función continua, convexa, positiva y estrictamente decreciente, $\Lambda_k = \{(x_1, \dots, x_N) | \min_{1 \le i \le N} \{x_i\} > k\} y$ $\mathbf{z} = (z, z, \dots, z) \in \mathbb{R}^N$. Entonces, la superficie de nivel S_z del punto \mathbf{z} definida por el funcional

$$F(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N} f(x_i)$$

satisface que

$$S_z \subset \Lambda_k$$

si
$$z \ge f^{-1}\left(\frac{1}{N}f(k)\right)$$
.

Demostración

Si la primera coordenada de un punto en S_z es k, debe cumplirse que

$$f(k) + \sum_{i=2}^{N} f(x_i) = F(\mathbf{z})$$

o en forma equivalente

$$\sum_{i=2}^{N} f(x_i) = Nf(z) - f(k).$$

La última expresión se satisface como consecuencia del teorema 15 si Nf(z) > f(k), esto es

$$z < f^{-1}\left(\frac{1}{N}f(k)\right).\square$$

A partir del teorema 16 el significado de t es geométricamente evidente. El valor

$$z_0 = f^{-1}\left(\frac{1}{N}f(0)\right)$$

representa un "umbral" medido sobre la recta generada por el punto $(1, \dots, 1)$, a partir del cual, todas las superficies de nivel que corresponden a puntos mayores que z_0 , están completamente contenidas dentro del hipercuadrante positivo. Escalar un punto en \mathbb{R}^N que esté asociado a una malla convexa, significa encontrar puntos en la recta generada por él en las superficies de nivel que están completamente contenidas en Λ_0 , (figura 3.10).

Teorema 17 Sean f con las hipótesis del teorema 16, F dada por

$$F = \sum_{i=1}^{N} f(x_i)$$



Figura 3.10: Significado geométrico de t.

y Ω una región poligonal para la cual existe una malla admisible G_0 . Entonces es posible encontrar un número real t para el cual existe una malla $\hat{G} \in M_0(t\Omega)$ tal que

$$F_{A,\sqrt{t}}(\hat{G}) = \min\{F_{A,\sqrt{t}}(G) | G \in M(\sqrt{t}\Omega)\}$$

Demostración

A partir de los teoremas 15 y 16, se sigue que la superficie de nivel de G_0 es una superficie contenida en el primer hipercuadrante, si se satisface

$$f^{-1}\left(\frac{1}{N}F(t\varphi(G_0))\right) \ge f^{-1}\left(\frac{1}{N}f(0)\right),$$

que es equivalente a pedir

$$F(t\varphi(G_0)) \le f(0). \tag{3.9}$$

Notemos que $F(tG_0) \leq Nf(t\alpha_{-}(G_0))$. En consecuencia, si

$$Nf(t\alpha_{-}(G_0)) \le f(0),$$

la afirmación del teorema se sigue inmediatamente. Por lo tanto, para satisfacer la expresión (3.9) sólo hay que elegir t tal que

$$t \ge \frac{1}{\alpha_{-}(G_0)} f^{-1}\left(\frac{1}{N}f(0)\right).\square$$
(3.10)

Los teoremas 13 y 17 nos proporcionan el resultado deseado. De hecho, indican que tenemos una gran libertad para diseñar funcionales para generar mallas convexas.

Es interesante observar que el conjunto de mallas convexas que podemos alcanzar depende continuamente de t debido a la continuidad del funcional Fsustentado en el teorema 15.

3.10.1. Resultados numéricos

Para concluir, sólo resta hacer el siguiente comentario. El teorema 17 afirma que lo único que hace falta para generar una malla convexa es un valor de t lo suficientemente grande. Aunque no se cuente con información sobre los valores de $\alpha_{(G)}$ para las mallas G en una región Ω , es posible incrementar t de manera gradual hasta obtener una malla convexa. Por lo tanto, podemos aplicar el mismo algoritmo presentado en la sección 3.7.

A manera de muestra, incluimos en la figura 3.11 mallas convexas generadas con el algoritmo anterior para la bahía de la Habana, Sudamérica, el lago Ucha en Rusia y Gran Bretaña con 41 puntos por lado con un funcional que denotamos como $S = \sum f$, para la cual f(x) es

$$f(x) = \begin{cases} (x-1)^2 - (x-1) + 1 & x \le 1\\ \frac{1}{x} & x > 1. \end{cases}$$

El valor inicial para t fue tomado igual a la unidad y $\tau = 2$. Las mallas iniciales fueron generadas con el funcional de área-ortogonalidad.

En la tabla 3.2 se muestran el valor final t_f de t, el número u de actualizaciones de t, los valores máximo y mínimo de α para las mallas finales y el número It de iteraciones del proceso de optimización.

Región	t_i	t_f	α_{-}	α_+	It	u
Bahía de la Habana	1.00	4.00	0.0024	2.0004	66	2
Sudamérica	1.00	4.00	0.1619	1.9510	48	2
Lago Ucha	1.00	4.00	0.0478	1.9897	13	2
Gran Bretaña	1.00	8.00	0.0003	3.7991	182	3

Cuadro 3.2: Parámetros empleados con el funcional S.

3.11. Combinaciones de funcionales

Consideremos una combinación lineal del tipo

$$\sigma F(\varphi(G)) + (1 - \sigma)F_L(\varphi(G)) \tag{3.11}$$

donde σ es un número real que satisface $0 < \sigma \leq 1$ y F_L es el funcional de longitud.

Como mencionamos en la introducción, la idea es reflejar el efecto de ambos funcionales. El papel de F es obligar a que las mallas óptimas sean convexas. El objetivo de emplear F_L es obtener mallas más suaves.

En la implementación numérica de las combinaciones, hay que tener presente el hecho de que el órden de magnitud de los funcionales puede ser muy diferente, por lo tanto, deben ser normalizados con respecto a los valores que toman en



Figura 3.11: Mallas generadas con el funcional S.

sus mallas óptimas.

La normalización para longitud se calcula tomando como referencia una malla ideal formada sólo con celdas rectángulares. La constante de normalización K_L está dada por ([56])

$$K_L = \frac{1}{2N\overline{\alpha}}$$

Por otra parte, el teorema 9 indica que para el funcional ${\cal F}$ que aparece en el teorema 15 debemos usar

$$K_F = \frac{1}{Nf(t\alpha)}.$$

3.11.1. Resultados numéricos con las combinaciones lineales

Como ejemplo de mallas óptimas de las combinaciones, mostramos mallas generadas con $\frac{1}{2}S + \frac{1}{2}F_L$ empleando los contornos y el funcional S de la sección 3.10.1 (Figura 3.12).

Las mallas iniciales fueron generadas por interpolación transfinita y escaladas para satisfacer $\overline{\alpha} = 1$. El valor inicial de t se tomó igual a la unidad; el valor de τ se eligió como $\tau = 2$.

También presentamos mallas generadas para las mismas regiones mediante la combinación $\frac{1}{10}S + \frac{9}{10}F_L$ (Figura 3.13). Es posible observar que al disminuir σ se obtienen mallas más suaves.

Todas las mallas que obtuvimos con las combinaciones son convexas.

En las tablas 3.3 y 3.4 se muestran los valores inicial y final de t, t_i y t_f , el número u de actualizaciones de t, los valores mínimo y máximo de α en las mallas finales y el número It de iteraciones del proceso de optimización.

Región	t_i	t_{f}	α_{-}	α_+	It	u
Bahía de la Habana	1.00	8.00	0.3075	3.1117	237	3
Sudamérica	1.00	4.00	0.0346	2.0567	34	2
Lago Ucha	1.00	8.00	0.2911	3.0065	137	3
Gran Bretaña	1.00	8.00	0.0018	4.0248	221	3

Cuadro 3.3: Parámetros empleados con la combinación $\frac{S+F_L}{2}$.

Región	t_i	t_f	α_{-}	α_+	It	u
Bahía de la Habana	1.00	8.00	0.2155	3.3764	148	3
Sudamérica	1.00	8.00	0.2427	2.2851	68	3
Lago Ucha	1.00	8.00	0.2164	3.0311	139	3
Gran Bretaña	1.00	8.00	0.0025	4.2426	189	3

Cuadro 3.4: Parámetros empleados con la combinación $0.1 * S + 0.9 * F_L$.

3.12. El cociente α_+/α_-

Como se ha mencionado, una malla "perfecta" es aquella para la cual todos los valores de α son iguales. En el problema que hemos resuelto, dado que no permitimos la reubicación de los puntos en los lados de la malla, en algunos casos tendremos valores máximo y mínimo de α que estarán más alejados mientras más irregular sea la frontera de la región. Esto no representa mayor problema

si nuestro interés es generar mallas convexas⁵. Sin embargo, es deseable que el área total de la región se distribuya lo más uniformemente posible en las celdas de las mallas; esto puede lograrse redistribuyendo puntos en la frontera.

Como en nuestro objetivo inicial no incluimos dicha tarea, su análisis y aplicación debe diferirse para trabajos posteriores. Por el mismo motivo, también queda como una actividad pendiente la búsqueda, entre todos los funcionales descritos por el teorema 17, de aquellos que sean más eficientes para generar mallas convexas.

En las tablas 3.5 a 3.8 presentamos los valores del cociente α_+/α_- para las mallas de este capítulo. Este cociente es independiente de la escala y nos indica que tan lejos estamos de la malla ideal donde es igual a la unidad. Es posible observar que, mientras más irregular es la forma de la frontera, más grande es el cociente.

No obstante, a pesar de la irregularidad de las fronteras en los ejemplos que presentamos, siempre que existan mallas convexas para una región, *el teorema 17* garantiza que podemos generarlas empleando los funcionales que desarrollamos en este capítulo: en esto radica precisamente la efectividad de los mismos.

No existen en la literatura especializada en generación de mallas resultados similares a los aquí propuestos, con excepción de los desarrollados por Barrera-Tinoco ([9],[10],[11]) e Ivanenko ([17],[36]).

Región	α_	α_+	α_+/α
Bahía de la Habana	0.1220	1.9579	16.0484
Sudamérica	0.0618	1.9269	31.1796
Lago Ucha	0.0388	2.1271	54.8222
Gran Bretaña	0.0022	10.7981	4908.2272

Cuadro 3.5: Cociente α_+/α_- para el funcional F_t .

Región	α_{-}	α_+	α_+/α
Bahía de la Habana	0.0024	2.0004	533.50002
Sudamérica	0.1619	1.9510	12.0506
Lago Ucha	0.0478	1.9897	41.4184
Gran Bretaña	0.0003	3.7991	1266.4020

Cuadro 3.6: Cociente α_+/α_- para el funcional S.

⁵Tampoco representa necesariamente una dificultad considerable en la solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales empleando diferencias finitas: Una vez que se ha generado una malla convexa, puede refinarse para obtener celdas con valores del cociente α_+/α_- más cercanos a la unidad.

Región	α	α_+	α_+/α
Bahía de la Habana	0.3075	3.1117	10.1193
Sudamérica	0.0346	2.0567	59.4422
Lago Ucha	0.2911	3.0065	10.3281
Gran Bretaña	0.0018	4.0248	2236.0002

Cuadro 3.7: Cociente α_+/α_- para la combinación $\frac{S+F_L}{2}$.

Región	α	α_+	α_+/α
Bahía de la Habana	0.2155	3.3764	15.6677
Sudamérica	0.2427	2.2851	9.4153
Lago Ucha	0.2164	3.0311	14.0069
Gran Bretaña	0.0025	4.2426	1697.0011

Cuadro 3.8: Cociente α_+/α_- para la combinación $0,1*S+0,9*F_L.$



Figura 3.12: Mallas generadas con la combinación $\frac{1}{2}S + \frac{1}{2}F_L$.



Figura 3.13: Mallas generadas con la combinación $\frac{1}{10}S + \frac{9}{10}F_L$.

Capítulo 4

Mallas casiortogonales

4.1. Panorama del problema

Como menciona Eça ([23]), la obtención de mallas ortogonales, es uno de los retos actuales en la generación de mallas.

Esto se debe a que ofrecen varias ventajas en la solución de sistemas de ecuaciones diferenciales parciales, como por ejemplo:

- La tranformación de las ecuaciones diferenciales parciales, por el método del mapeo, reduce el número de términos adicionales.
- Generalmente la precisión en las técnicas de diferenciación numérica es mayor en las mallas ortogonales.
- La implementación de modelos de turbulencia requiere información a lo largo de direcciones perpendiculares.

Sin embargo, las mallas ortogonales sólo existen en algunas regiones con distribuciones muy específicas de puntos en la frontera. Por esta razón, para tratar de aprovechar las ventajas anteriores, es necesario construir mallas que sean casiortogonales, es decir, lo más cercanas a la ortogonalidad.

En las mallas casiortogonales las condiciones de ortogonalidad, que presentamos en la siguiente sección, sólo se satisfacen parcialmente (Thompson *et al.* [46]).

El problema central que motivó nuestro trabajo, fue generar mallas discretas casiortogonales. En este capítulo, presentamos una propuesta variacional discreta, para generar este tipo de mallas.

4.1.1. Mallas ortogonales continuas y discretas

Sea **x** una malla continua del rectángulo $R = \{(\xi, \eta) | 0 \le \xi \le 1; 0 \le \eta \le 1\}$ sobre la región Ω y $(\xi_0, \eta_0) \in R$. Para cada η_0 y ξ_0 , definamos los segmentos horizontales \mathcal{H} y verticales \mathcal{V}

$$\mathcal{H}(\eta_0) = \{(\xi, \eta_0) | 0 \le \xi \le 1\}$$

$$\mathcal{V}(\xi_0) = \{ (\xi_0, \eta) | 0 \le \eta \le 1 \}.$$

Las líneas (o trayectorias) coordenadas en Ω son las imágenes bajo \mathbf{x} de $\mathcal{H}(\eta_0)$ y $\mathcal{V}(\xi_0)$, cuyos vectores tangente son $\mathbf{x}_{\xi} = (x_{\xi}, y_{\xi})$ y $\mathbf{x}_{\eta} = (x_{\eta}, y_{\eta})$, respectivamente.

Decimos que una malla continua \mathbf{x} es *ortogonal* si se satisface la condición

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{\xi}^{T} \mathbf{x}_{\eta} &= x_{\xi} x_{\eta} + y_{\xi} y_{\eta} \\ &= 0. \end{aligned}$$

En el caso discreto una malla ortogonal tiene una configuración trivial. Para ver lo que esto significa, consideremos una malla convexa y ortogonal G para una región Ω .

Debido a que la malla es convexa, las posiciones de todos sus puntos interiores están al interior de Ω . Si todos los ángulos interiores de las celdas son ángulos rectos, entonces cada celda es un rectángulo. Por lo tanto, como la malla es estructurada, la frontera de la región Ω es un rectángulo.

4.1.2. Mapeos conformes y casiconformes

Observemos que si una malla continua $\mathbf{x} = (x(\xi, \eta), y(\xi, \eta))$ es un mapeo conforme, entonces es ortogonal, pues satisface las ecuaciones de Cauchy-Riemann

$$\begin{array}{rcl} x_{\xi} &=& y_{\eta} \\ x_{\eta} &=& -y_{\xi} \end{array}$$

de donde

$$\mathbf{x}_{\xi}^{T} \mathbf{x}_{\eta} = x_{\xi} x_{\eta} + y_{\xi} y_{\eta} = = -x_{\xi} y_{\xi} + y_{\xi} x_{\xi} = 0.$$

Por lo tanto, una alternativa natural para generar mallas ortogonales es mediante mapeos conformes (Una revisión de los métodos basados en mapeos conformes para generar mallas convexas puede encontrarse en Toledo, [57]).

Sin embargo, como consecuencia del teorema de mapeo de Riemann (Henrici, [34]), no es posible transformar por medio de un mapeo conforme cualquier rectángulo sobre un dominio arbitrario Ω , a menos que el cociente ancho-largo del rectángulo sea igual a una constante M denominada módulo conforme. Para encontrar \mathbf{x} , se resuelve la ecuación diferencial

$$M^2 \mathbf{x}_{\xi\xi} + \mathbf{x}_{\eta\eta} = 0,$$

obteniéndose un mapeo \mathbf{x} que se denomina *casiconforme* (Lehto, [43]).

La dificultad práctica en la obtención de este mapeo consiste en que M depende de Ω , y por lo tanto no se conoce *a priori*; algunas propuestas para estimar Mpueden encontrarse en Anderson ([3]) y Challis ([13]).

Un caso particular del teorema del mapeo de Riemann, cuando la frontera de Ω es una poligonal con *m* vértices, es el lema de Schwarz-Christoffel ([1]). Debido a que las fronteras de nuestras regiones son poligonales, este lema parece ser la opción natural para generar mallas ortogonales.

El lema indica cómo transformar el interior del círculo unitario sobre el interior de Ω , por medio de la fórmula

$$S(w) = C \int_0^w \prod_{k=1}^m (w - w_k)^{\beta_k - 1} dw + C'$$
(4.1)

en donde C y C' son dos constantes complejas que dependen de la frontera de Ω , los puntos w_k son los prevértices ubicados sobre la frontera del círculo unitario que corresponden a los puntos que definen la poligonal, y los valores $\beta_k \pi$ son los ángulos entre los lados consecutivos, con vértice v_k .

Howell ([35]) presentó un estudio del cálculo numérico del mapeo de Schwarz-Christoffel, que resulta muy útil para generar mallas en regiones con un alto grado de simetría.

Sin embargo, en regiones de forma irregular, emplear la fórmula de Schwarz-Christoffel resulta complicado. Como ejemplo, consideremos la región que se muestra en la figura 4.1. Su frontera es una poligonal con 156 vértices $V = \{v_1, v_2, \dots, v_{156}\}$ que aproxima a la isla de Gran Bretaña.

La construcción de una malla discreta consiste en evaluar una integral del tipo



Figura 4.1: Contorno de Gran Bretaña

$$\mathcal{S}(w) = C \int_0^w \prod_{k=1}^{156} (w - w_k)^{\beta_k - 1} dw + C'.$$
(4.2)

Previamente, deben determinarse las constantes $C \ge C'$. Una vez conocidas, para encontrar los puntos interiores de la malla, se trazan trayectorias ortogonales dentro del circulo unitario y se calculan sus imágenes.

Para hacer esta evaluación, hay que considerar que la integral (4.2) tiene una cantidad importante de singularidades en las pre-imágenes de los puntos que definen la poligonal. Aproximarla numéricamente debe incluir una estrategia para manejar adecuadamente las singularidades.

Además, la distancia entre los prevértices disminuye de manera exponencial; esto causa el fenómeno conocido como conglomeración (crowding) (De Lillo, [18]). Por ésta razón, cuando el número de vértices en la frontera es grande, los prevértices pueden ser indistinguibles numéricamente.

En resumen, las singularidades en los prevértices y el número de los mismos dificultan el uso de la integral (4.2) para generar mallas ortogonales, en regiones irregulares, con la fórmula de Schwarz-Christoffel.

En general, los mapeos conformes tienen las siguientes limitaciones, para la generación numérica de mallas (Knupp y Steinberg, [40]):

- Permiten poco control sobre los puntos interiores de la malla.
- Las distribuciones de los puntos en la frontera no pueden ser arbitrarias.
- Los mapeos conformes están mal condicionados, en el sentido de que cambios pequeños en la frontera del dominio, pueden alterar significativamente las posiciones de los puntos que se mapean.

4.1.3. Generación ortogonal de mallas empleando E.D.P.

Las mallas ortogonales continuas también pueden ser definidas a través de la relación conocida como el *Laplaciano escalado* o *ecuación de Beltrami* ([40])

$$\mathcal{F}\mathbf{x}_{\xi} = -J_2\mathbf{x}_{\eta} \tag{4.3}$$

donde \mathcal{F} es la función distorsión

$$\mathcal{F} = \sqrt{\frac{\left(\frac{\partial x}{\partial \eta}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta}\right)^2}{\left(\frac{\partial x}{\partial \xi}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \xi}\right)^2}} \tag{4.4}$$

y J_2 la matriz

$$J_2 = \left(\begin{array}{cc} 0 & 1\\ -1 & 0 \end{array}\right).$$

A partir de la ecuación (4.3), se obtiene el sistema de ecuaciones diferenciales empleado por Leal y Ryskin ([41])

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\mathcal{F} \frac{\partial x}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{\mathcal{F}} \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\mathcal{F} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{\mathcal{F}} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) = 0.$$
(4.5)

Este sistema se ha utilizado ampliamente como generador de mallas ortogonales. Generar una malla consiste en resolverlo numéricamente. La mayor parte de los trabajos al respecto se basan en proponer distintas formas para \mathcal{F} .

Las mallas generadas con el sistema (4.5) son de excelente calidad en regiones con frontera suave, ya que permiten un cálculo eficiente de la función de distorsión.

La dificultad práctica al resolver el sistema (4.5) consiste en que la función de distorsión \mathcal{F} se desconoce *a priori*([22]). Leal *et al.* ([41]) proponen calcularla en la frontera de la región, y obtener los valores al interior por interpolación; o bien resolviendo una ecuación diferencial para \mathcal{F} en toda la región Ω , lo cual es fuertemente dependiente de la suavidad de la frontera (Eça, [23]).

En general, las soluciones del sistema (4.5) existen sólo para ciertas funciones de distorsión \mathcal{F} (Knupp y Steiberg, [40]).

4.1.4. El funcional continuo de ortogonalidad I_O

Como mencionamos en el capítulo 1, los trabajos de Winslow ([60]), Brackbill y Saltzman ([12]) sentaron las bases de la generación variacional de mallas, que permiten construir mallas buscando controlar las propiedades geométricas de suavidad, longitud, área y ortogonalidad, asociadas a una malla (Sección 1.1). Consideremos el funcional continuo de ortogonalidad I_{Ω} :

$$I_O(\mathbf{x}) = \int_R (\mathbf{x}_{\xi}^T \mathbf{x}_{\eta})^2 d\xi d\eta.$$
(4.6)

Si $\hat{\mathbf{x}}$ es una malla ortogonal para una región Ω , entonces $I_O(\hat{\mathbf{x}}) = 0$. Ahora bien, para toda malla \mathbf{x} sobre la misma región, se satisface

$$I_O(\hat{\mathbf{x}}) \le I_O(\mathbf{x}). \tag{4.7}$$

Esto significa, que toda malla ortogonal es un mínimo del funcional de ortogonalidad. Por lo tanto, una manera natural de buscar mallas ortogonales, es a través de la solución del problema de cálculo de variaciones, que consiste en minimizar $I_O(\mathbf{x})$.

Sin embargo, empleado individualmente, el funcional continuo de ortogonalidad produce mallas convexas sólo en algunas regiones muy simétricas.

Sus ecuaciones de Euler-Lagrange son cuasilineales, acopladas y no elípticas.

Knupp y Steinberg resolvieron estas ecuaciones y observaron que en la mayoría de los casos no había convergencia, presumiblemente debido a que no existen mallas ortogonales en la mayoría de los casos ([40]).

Para analizar el carácter de los puntos críticos de (4.6), observemos que el integrando de (4.6) puede escribirse como

$$(\mathbf{x}_{\xi}^{T}\mathbf{x}_{\eta})^{2} = \left(\|\mathbf{x}_{\xi}\|\|\mathbf{x}_{\eta}\|\cos\theta\right)^{2}$$

$$(4.8)$$

en donde θ es el ángulo entre los vectores tangentes \mathbf{x}_{ξ} y \mathbf{x}_{η} .

Claramente, si \mathbf{x} es una malla ortogonal, entonces $\mathbf{x}_{\xi}^T \mathbf{x}_{\eta} = 0$. Sin embargo, si $\mathbf{x}_{\xi}^T \mathbf{x}_{\eta} = 0$, la malla puede ser ortogonal o bien al menos uno de los vectores tangente es cero. Si alguno de los vectores tangente es cero en un punto $\mathbf{x}(\xi_0, \eta_0)$, entonces el jacobiano J se anula en (ξ_0, η_0) : la malla deja de ser una biyección.

Sólo restringiendo el dominio del funcional (4.6) de tal manera que \mathbf{x} sea un difeomorfismo, puede evitarse que se anule el jacobiano.

Si el mínimo del funcional I_O es cero, la malla es ortogonal; en el caso contrario, es la transformación más cercana a la ortogonalidad en el sentido de los mínimos cuadrados.

4.1.5. El funcional discreto de ortogonalidad F_O

Las propiedades del funcional I_O tienen consecuencias directas, al aplicar la discretización que propusimos en la sección 1.2. El funcional de ortogonalidad I_O , en una celda de vértices **P**, **Q**, **R** y **S** se aproxima mediante f_O como

$$f_O(\mathbf{P}, \mathbf{Q}, \mathbf{R}, \mathbf{S}) = \frac{1}{4} \left\{ \left((\mathbf{S} - \mathbf{P})^T (\mathbf{Q} - \mathbf{P}) \right)^2 + \left((\mathbf{P} - \mathbf{Q})^T (\mathbf{R} - \mathbf{Q}) \right)^2 + \left((\mathbf{Q} - \mathbf{R})^T (\mathbf{S} - \mathbf{R}) \right)^2 + \left((\mathbf{R} - \mathbf{S})^T (\mathbf{P} - \mathbf{S}) \right)^2 \right\},$$

de tal manera que el funcional de ortogonalidad F_O sobre la malla

$$G = \{P_{i,j} | 1 \le i \le m; 1 \le j \le n\}$$

se escriba como

$$F_O(G) = \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=1}^{n-1} f_O(P_{i,j}, P_{i+1,j}, P_{i,j+1}, P_{i+1,j+1})$$

Al minimizar, el método de optimización intenta hacer cero cada uno de los términos de f_O , los cuales pueden escribirse en forma genérica

$$\frac{1}{4} \left(\|\mathbf{a}\| \|\mathbf{b}\| \cos \theta \right)^2$$

donde θ es el ángulo entre **a** y **b**.

En consecuencia, muchos de los vectores **a** y **b** se harán cero, causando que existan triángulos con área cero en algunas mallas óptimas del funcional F_O . Además, la expresión $\cos^2 \theta$ alcanza su mínimo cuando $\theta = \frac{\pi}{2}$ o $-\frac{\pi}{2}$. Esto significa que los términos del funcional f_O se minimizan cuando alguno de los vectores **a** o **b** es cero; o bien, cuando éstos definen un triángulo rectángulo. Las mallas óptimas del funcional discreto de ortogonalidad, pueden no ser convexas, incluso en regiones elementales. El siguiente ejemplo muestra una malla de estas características para una región muy sencilla, cuya frontera es un cuadrado.

Problema modelo



Figura 4.2: Malla de prueba.

Consideremos una malla de 4×4 para el cuadrado unitario, con la distribución de puntos en la frontera dada por

$$L_{1} = \left\{ (0,0), (c^{2},0), (c,0), (1,0) \right\}$$

$$L_{2} = \left\{ (1,0), (1,1/3), (1,2/3), (1,1) \right\}$$

$$L_{3} = \left\{ (1,1), (2/3,1), (1/3,1), (0,1) \right\}$$

$$L_{4} = \left\{ (0,1), (0,c), (0,c^{2}), (0,0) \right\}$$

donde 0 < c < 1.

A medida que c disminuye, los puntos se acumulan cerca del origen. En la figura 4.2 se muestra una malla de 4×4 generada con esta distribución, para un valor c = 0.29.

En la figura 4.3, se presentan las mallas óptimas del funcional de ortogonalidad que corresponden a las distribuciones de puntos a la frontera que se obtienen empleando c=0.29, 0.28, 0.27 y 0.26. Como puede observarse, la última malla no es convexa.

Nuestros experimentos fueron corroborados en **Maple** comprobando que el mínimo del funcional de ortogonalidad para c=0.26, es una malla no convexa. Por otra parte, a medida que se disminuye el valor de c, el funcional de ortogonalidad produce mallas cada vez más dobladas.

Aun en éstas configuraciones elementales, el funcional de ortogonalidad genera mallas no convexas. Se aprecia claramente una fuerte dependencia de F_O con respecto a la distribución de los puntos en la frontera.



Figura 4.3: Mallas generadas con el funcional de ortogonalidad.

4.1.6. Importancia de la convexidad

En general, en regiones irregulares, el funcional de ortogonalidad produce mallas no convexas.

Nuestro interés es generar mallas casiortogonales, que sean convexas, pues una malla no convexa no es útil para propósitos numéricos.

El problema de generación de mallas convexas se podría plantear, en una primera instancia, como:

Problema 1 Determinar las mallas \tilde{G} que son los mínimos del funcional F_O sobre el conjunto de las mallas convexas, es decir

$$\min_{G \in M(\Omega)} F_O(G)$$

 $sujeto \ a$

$$\alpha_{-}(G) > 0.$$

Sin embargo, puede ocurrir que el problema no tenga solución, ya que en los mínimos del funcional F_O , existe la posibilidad de que α_{-} sea igual a cero.

Así, una reformulación más adecuada es la siguiente.

Problema 2 Determinar las mallas que son los mínimos del problema

$$\min_{G \in M(\Omega)} F_O(G)$$

 $sujeto \ a$

$$\alpha (G) > -\epsilon, \quad \epsilon > 0$$

Este problema involucra la elección de un parámetro: $\epsilon.$

En ambos casos, tratar de obtener mallas casiortogonales a través de un problema con restricciones explícitas, es una tarea demasiado compleja para ser útil en términos prácticos. El proceso de optimización se vuelve costoso y difícil de manejar.

iCómo podemos evitar las restricciones explícitas? Para responder a esta pregunta, es conveniente revisar una de las aplicaciones exitosas del funcional de ortogonalidad: el funcional área-ortogonalidad de Knupp.

4.1.7. El funcional área-ortogonalidad de Knupp

Roache y Steinberg ([50]) introdujeron las combinaciones lineales de funcionales, con el propósito de superar las limitaciones que tienen los funcionales de ortogonalidad, en la generación de mallas convexas.

El funcional que nos permitió entender la importancia del área en la generación de mallas casiortogonales convexas, fue el área-ortogonalidad F_{AO} de Knupp ([38]).

Como mencionamos en la sección 1.4, en una malla G con N triángulos, este se calcula a través de la fórmula

$$F_{AO} = \frac{1}{2}F_A + \frac{1}{2}F_O$$

= $\frac{1}{4}\sum_{i=1}^N \frac{(\alpha(\triangle_i))^2 + (o(\triangle_i))^2}{2}.$ (4.9)

Este funcional representó un "boom" en la generación variacional de mallas. Produce propiedades geométricas idóneas en sus mallas óptimas:

- Son suaves
- Cercanas a la ortogonalidad.
- Muy uniformes en área.
- Con pocas celdas no convexas.

Si aplicamos el funcional F_{AO} a la malla no convexa de la figura 4.3 (c = 0.26), obtenemos una malla convexa (Figura 4.4).



Figura 4.4: Malla obtenida con el funcional F_{AO} .

En este ejemplo, se observa lo siguiente: el funcional de área impidió que se "doblara" la malla. El funcional F_A intenta distribuir uniformemente el área entre los triángulos de la malla, así evita que las celdas se doblen.

Sin embargo, en regiones más complicadas el funcional de área-ortogonalidad no es suficiente para generar mallas convexas. En la figura 4.5 mostramos mallas óptimas de 30 puntos por lado, generadas con el funcional F_{AO} , para las regiones de Gran Bretaña y la Bahía de la Habana. Ninguna de las dos es convexa.


Figura 4.5: Mallas para Gran Bretaña y la Bahía de la Habana generadas con ${\cal F}_{AO}$

El funcional de área F_A no garantiza la convexidad de las mallas óptimas. De hecho, para ningún peso en la combinación entre F_A y el funcional de ortogonalidad podemos garantizar la obtención de mallas óptimas convexas.

4.2. Generación de mallas convexas casiortogonales

Las mallas generadas empleando el funcional F_{AO} , sugieren la posibilidad de evitar que el funcional de ortogonalidad, produzca mallas muy dobladas, si se combina adecuadamente con un funcional de área.

Esto es lo que nos indicó como debíamos proceder, para plantear un problema de optimización sin restricciones. En los resultados se observó que las mallas óptimas del funcional de área-ortogonalidad, son cercanas a la ortogonalidad.

Lo anterior nos llevó a replantear el problema 2 como:

Problema 3 Determinar mallas que son soluciones al problema de optimización

$$\min_{G \in M(\Omega)} (\sigma \hat{F} + (1 - \sigma) F_O)(G)$$

 $con \ 0 < \sigma < 1 \ y \ \hat{F}$ un funcional de área que garantice, y mantenga convexidad, en las mallas óptimas de la combinación.

Observemos que, de manera natural, las mallas óptimas de este problema son "más ortogonales" a medida que σ disminuye.

Esta reformulación es fundamental porque no hay restricciones explícitas y todo radica en la elección adecuada del funcional de área. El problema de optimización es mucho más simple.

 $_{i}$ Qué funcionales garantizan y mantienen convexidad? Los únicos funcionales que se conocían era k-área y k-suavidad, y con ellos obtuvimos una primera solución al problema 3.

4.2.1. Combinaciones lineales entre kA y F_O

Un funcional de área, que nos permite garantizar que, el valor mínimo de α en sus mallas óptimas satisface una desigualdad del tipo $\alpha_{-} > -\epsilon$, es el funcional k-área que presentamos en el capítulo 2.

Fue el empleado en la primera solución, a través de la combinación

$$\sigma(kA) + (1-\sigma)F_O$$

con valores de σ positivos y cercanos a cero (Barrera *et al.*, [5])

La combinación anterior nos permitió generar mallas convexas casiortogonales.

4.2.2. Generación de mallas casiortogonales con kA y kS

Teorema 18 Sea k un real positivo y σ tal que $0 < \sigma \leq 1$. Si F_O es el funcional de ortogonalidad, entonces para una sucesión de mallas $\{G_q\} \subset M_{-k}$ tal que $\alpha_{-}(G_q) \rightarrow -k$, se cumple

$$\left(\sigma(kA) + (1-\sigma)F_O\right)(G_a) \to \infty.$$

Demostración

Debido a que el funcional F_O es continuo y no negativo, la conclusión se sigue de manera inmediata.

El siguiente teorema nos indica que, eligiendo un valor de ϵ cercano a cero, es posible garantizar que las mallas óptimas para la combinación lineal

$$\sigma(kA) + (1-\sigma)F_O$$

son convexas.

Teorema 19 Supongamos que el conjunto $M_0(\Omega)$ es no vacío para una región Ω y sea σ un real positivo tal que $0 < \sigma < 1$. Entonces, existe un valor $\epsilon > 0$ para el cual una malla G_1 que satisface

$$(\sigma(kA) + (1 - \sigma)F_O)(G_1) = \min_{G \in M_{-\epsilon}} \{ (\sigma(kA) + (1 - \sigma)F_O)(G) \}$$

es tal que

$$\alpha_{(G_1)} > 0,$$

donde el valor del parámetro k, en el funcional de k-área, es ϵ .

Demostración

Sean k > 0 y G_0 una malla convexa; definimos

$$\phi_k = (\sigma(kA) + (1 - \sigma)F_O)(G_0)$$

y $k' = k - \frac{1-\sigma}{\phi_k}$. Veamos que $\alpha_{-}(G_1) \ge -k'$. Si $\alpha_{-}(G_1) < -k'$, entonces

$$\begin{aligned} (\sigma(kA) + (1 - \sigma)F_O)(G_1) &> & ((1 - \sigma)kA)(G_1) \\ &> & (1 - \sigma)\frac{1}{k + \alpha_-(G_1)} \\ &> & (1 - \sigma)\frac{1}{k - k'} \\ &= & \phi_k, \end{aligned}$$

así, no se cumpliría que $(\sigma(kA) + (1 - \sigma)F_O)(G_1)$ es el mínimo. Sea

$$H(G_0) = \sum_{q=1}^{N} \frac{1}{\alpha_q(G_0)}.$$

Dado que

$$\phi_k = (\sigma(kA) + (1 - \sigma)F_O)(G_0) < (\sigma H + (1 - \sigma)F_O)(G_0),$$

podemos sustituir el valor de ϕ_k en la definición de k' para obtener

$$\alpha_{-}(G_{1}) > \frac{1 - \sigma}{\sigma H(G_{0}) + (1 - \sigma)F_{O}(G_{0})} - k > 0.$$

Lo único que resta es elegirk>0,tal que
 $\alpha_{-}(G_{1})>0.$ Esto se logra eligiendo ktal que

$$\frac{1-\sigma}{\sigma H(G_0) + (1-\sigma)F_O(G_0)} > k > 0.$$

Observemos que k así elegido es el valor de ϵ para el teorema. \Box

En otras palabras, empleando la combinación

$$\sigma(kA) + (1-\sigma)F_O$$

con σ y k positivos y cercanos a cero, es posible obtener mallas casiortogonales.

Con la motivación de estos primeros resultados, se experimentó también combinando kS con ortogonalidad. Dos resultados casi idénticos a los teoremas 18 y 19, demuestran que las combinaciónes de kS y ortogonalidad también son útiles para generar mallas casiortogonales. **Teorema 20** Sea k un real positivo y σ tal que $0 < \sigma \leq 1$. Si F_O es el funcional de ortogonalidad, entonces para una sucesión de mallas $\{G_q\} \subset M_{-k}$ tal que $\alpha_{-}(G_q) \rightarrow -k$, se cumple

$$\left(\sigma(kS) + (1-\sigma)F_O\right)(G_q) \to \infty.$$

Teorema 21 Supongamos que el conjunto $M_0(\Omega)$ es no vacío para una región Ω y sea σ un real positivo tal que $0 < \sigma < 1$. Entonces, existe un valor k > 0para el cual una malla G_1 que satisface

$$(\sigma(kS) + (1 - \sigma)F_O)(G_1) = \min_{G \in M_{-k}} \{ (\sigma(kS) + (1 - \sigma)F_O)(G) \}$$

es tal que

$$\alpha_{-}(G_1) > 0.$$

4.2.3. Generación de mallas casiortogonales: problema general

El funcional de k-área es muy eficiente para construir mallas convexas. Representó un avance significativo en la generación variacional de mallas, pues permitió obtener mallas convexas, incluso en regiones muy irregulares, por medio de un algoritmo sencillo para la actualización del parámetro k.

Sin embargo, el funcional no permite triángulos con valores de α menores de -k. Como se desconoce *a priori*, cuales son las mallas óptimas del funcional de ortogonalidad, esto implica un problema para la elección de k.

Además, se debe tener especial cuidado durante el proceso de optimización, pues si en una malla existe triángulos con α cercano a -k, los algoritmos pueden generar puntos de prueba fuera de la región de definición del funcional.

El funcional k-área es de gran utilidad para generar mallas casiortogonales, pero su uso en regiones muy irregulares no es automático, ya que requiere una elección cuidadosa de k.

Por consiguiente, si queremos una solución satisfactoria al problema 3, es necesario determinar, en general, los funcionales de área que garantizan y mantienen convexidad. Es decir, la pregunta que se presentó de manera natural es

¿Existen otros funcionales, además de k-área y k-suavidad, que garanticen y mantengan convexidad?

Así, se inició el análisis de las propiedades del funcional de k-área, con el fin de encontrar las hipótesis importantes; buscamos qué condiciones debían satisfacer los funcionales de área, útiles para la generación de mallas convexas, es decir, que generan y mantienen convexidad.

El resultado de esta búsqueda es la principal aportación de nuestro trabajo. Es la caracterización que presentamos en la sección 3.10 del capítulo 3: los funcionales continuos que garantizan y mantienen convexidad, se obtienen por medio de funciones del tipo

$$\hat{F}_{A,t} = \sum_{i=1}^{N} f_i(\alpha(\Delta_i)), \qquad (4.10)$$

donde f es cualquier función f continua, convexa, decreciente y positiva.

En resumen, los funcionales de área que desarrollamos tienen varias propiedades fundamentales:

- 1. Garantizan la convexidad. Esto significa que si existe una malla convexa G_0 , entonces existe un parámetro t, tal que el mínimo \tilde{G} del funcional $\hat{F}_{A,t}$ es una malla convexa.
- 2. Mejoran la no convexidad en las mallas óptimas. El valor de α_{-} en las mallas óptimas del funcional se incrementa a medida que t se incrementa.
- 3. Mantienen la convexidad. Si existe una malla convexa G_0 en una región, entonces existe un valor de t, tal que el óptimo del funcional

$$\sigma \hat{F}_{A,t} + (1-\sigma)F_O$$

es también una malla convexa.

En resumen, las tres propiedades implican que hemos obtenido la solución al problema de generación de mallas casiortogonales.

Para ello basta con elegir cualquier funcional de área que garantice y mantenga convexidad, ya que el problema de optimización de gran escala se puede resolver de una forma rápida y eficiente.

En la siguiente sección, presentaremos algunas de las posibles combinaciones lineales que pueden emplearse para generar mallas casiortogonales.

4.2.4. Generación de mallas casiortogonales: solución al problema

El siguiente resultado presenta la solución al problema 3 que emplea los funcionales de área que desarrollamos.

Teorema 22 Sea $0 < \sigma \leq 1$. Si existe una malla convexa G_0 en la región Ω y \hat{F} es un funcional de área que satisface las condiciones del teorema 15, entonces el funcional

$$\sigma \hat{F}_{A,t}(G) + (1-\sigma)F_O(G)$$

tiene una malla óptima convexa para un valor de t suficientemente grande.

Demostración

Sea $\{t_q\} = \{t_1, t_2, \cdots\}$ una sucesión estrictamente creciente de números reales. Para cada q, sea G_q una malla en donde el funcional

$$\sigma \hat{F}_{A,t_q}(G) + (1-\sigma)F_O(G)$$

alcanza el mínimo.

Denotemos por $\alpha^0 = \alpha_{-}(G_0)$. Para cada t_q , se satisfacen las desigualdades

$$\sigma \hat{F}_{A,t_q}(G_0) + (1-\sigma)F_O(G_0) \le \sigma N f(t_1 \alpha_{-}^0) + (1-\sigma)F_O(G_0)$$
(4.11)

$$\sigma \hat{F}_{A,t_q}(G_q) + (1-\sigma)F_O(G_q) \le \sigma \hat{F}_{A,t_q}(G_0) + (1-\sigma)F_O(G_0).$$
(4.12)

de donde se sigue que

$$\sigma \hat{F}_{A,t_q}(G_q) + (1-\sigma)F_O(G_q) \le \sigma N f(t_1 \alpha_{\underline{0}}^0) + (1-\sigma)F_O(G_0).$$
(4.13)

Se
a δ un real positivo. Si para cada qse cumpliera que

$$\alpha_{-}(G_q) \le -\delta$$

el lado izquierdo de la desigualdad (4.13) no estaría acotado. Por lo tanto, existe un índice n a partir del cual

$$\alpha_{\underline{}}(G_q) \ge 0, \quad q \ge n.$$

De manera similar, se demuestra que no puede ocurrir $\alpha_{-}(G_q) = 0$ para todo t_q . Los detalles se omiten. \Box

Este teorema sintetiza nuestra propuesta para generar mallas cercanas a la ortogonalidad a través de un problema de optimización de gran escala sin restricciones.

Los funcionales F_t y S que presentamos en el capítulo 3, son sólo algunos de los muchos funcionales que pueden combinarse con F_O .

4.2.5. Constantes de normalización

Como mencionamos en la sección 1.4, para emplear combinaciones lineales de funcionales, es necesario normalizar estos últimos para que sus propiedades se reflejen eficientemente, en las mallas óptimas de las combinaciones. Considerando una malla con todos sus valores de α iguales ([56]), las constantes de normalización, para los funcionales de ortogonalidad, k-área y k-suavidad son

$$K_O = \frac{1}{N\overline{\alpha}^2},$$
$$K_{kA} = \frac{k + \overline{\alpha}}{N}$$
$$K_{kS} = \frac{1}{2N},$$

у

respectivamente.

$$\kappa_{kS}$$

Del teorema 9, las constantes de normalización, para los funcionales F_t y S son

$$K_{F_t} = \frac{\exp(t\overline{\alpha})}{N}$$
$$K_S = \frac{t\overline{\alpha}}{N}.$$

Antes de presentar los resultados numéricos obtenidos, es conveniente analizar algunos criterios que nos permiten comparar las mallas obtenidas con las combinaciones.

4.3. Desviaciones máxima y promedio de la ortogonalidad

En general, en una malla discreta, el valor del producto punto $\mathbf{r}_{\xi}^T \mathbf{r}_{\eta}$ en los ángulos interiores de las celdas no es cero. Por este motivo, requerimos de algún criterio que nos indique "qué tan ortogonal" es una malla discreta.

Motivados por razones prácticas, Allievi y Calisal ([2]) propusieron dos criterios¹ que se emplean con frecuencia en la literatura: la **desviación promedio de la ortogonalidad (A.D.O.)**

$$A.D.O. = \frac{1}{n-2} \frac{1}{m-2} \sum_{i=2}^{n-1} \sum_{j=2}^{m-1} (|90^o - \theta_{i,j}|)$$
(4.14)

y la desviación máxima de la ortogonalidad (M.D.O.)

$$M.D.O. = \max_{2 \le i \le n-1, 2 \le j \le m-1} (|90^o - \theta_{i,j}|)$$
(4.15)

donde $\theta_{i,j}$ es el ángulo entre los vectores $\mathbf{x}_{\xi} \neq \mathbf{x}_{\eta}$. Las desviaciones proporcionan información complementaria: en algunos casos es

 $^{^1}$ También pueden considerarse otras medidas en términos del error en las ecuaciones de Leal y Ryskin ([22]), que no utilizamos en este trabajo por estar basados en la solución numérica de estas ecuaciones.

suficiente considerar valores pequeños, para la desviación máxima; en otros, para mallas con muchas celdas rectángulares, la información dada por la desviación promedio es preferible.

Naturalmente, no es conveniente generar mallas casiortogonales minimizando directamente las desviaciones M.D.O. y A.D.O., ya que no son expresiones suaves.

4.3.1. Diferencias entre mallas ortogonales y casiortogonales

Observemos que el valor de las desviaciones máxima y promedio de la ortogonalidad se anula en las mallas ortogonales discretas.



Figura 4.6: Mallas de 10×10 para e^z y $\frac{1}{z}$.

Sin embargo, una malla discreta ortogonal sólo puede construirse en regiones con frontera rectángular. No es posible obtener valores de las desviaciones de la ortogonalidad arbitrariamente cercanos a cero, en regiones irregulares.

Como ejemplo de las magnitudes de las desviaciones en una malla discreta, consideremos las funciones e^z y $\frac{1}{z}$, que son analíticas en $\mathbb{C} \ y \ \mathbb{C} \setminus \{0\}$, respectivamente. Construyamos con ellas dos mallas, evaluando en una retícula uniforme en $[0, 1] \times [0, 1]$, para e^z y en $[\frac{1}{2}, \frac{3}{2}] \times [\frac{1}{2}, \frac{3}{2}]$ para $\frac{1}{z}$, empleando 10, 20, 30 y 40 puntos por lado.

En la figura 4.6 se muestran las mallas de 10 puntos por lado.

La tabla 4.1 muestra los valores de las desviaciones para estas mallas. Ambos resultados están medidos en grados.

Observemos que incluso para funciones conformes, las desviaciones pueden ser grandes si no se emplean muchos puntos.

4.4. Algunos resultados numéricos

Presentamos enseguida mallas óptimas de 41 puntos por lado, generadas por las combinaciones de k-suavidad, k-área, F_t y S con ortogonalidad.

n	Función	M.D.O.	A.D.O.
10	e^{z}	3.24	3.18
10	1/z	11.42	3.69
20	e^z	1.64	1.51
20	1/z	5.84	1.47
30	e^z	1.20	0.99
30	1/z	3.86	1.18
40	e^{z}	1.03	0.73
40	1/z	2.92	0.90

Cuadro 4.1: Valores de las desviaciones e^z y $\frac{1}{z}$.

Para obtener estos resultados, se emplearon los valores $\sigma = 10^{-2}$ para la combinación lineal entre funcionales y $k = 10^{-2}$ como tope para kA y kS. En todos los casos se partió de una malla inicial generada con el funcional F_{AO} .

4.4.1. Regiones sencillas

La primera región que empleamos apareció en el trabajo de Mobley y Stewart ([49]) y ha sido empleada ampliamente como región de prueba, para los métodos de generación de mallas casiortogonales, desde el trabajo de Coleman y Haussling ([33]).

Es una región que denominaremos "el domo", limitada por las curvas x = 0, x = 1, y = 0 y $y = \frac{3}{4} + \frac{1}{2} \operatorname{sen}(\pi(\frac{1}{2} + 2x))$ (Figura 4.7).

La segunda región de prueba, que denotaremos como B, está limitada por cuatro semicírculos sobre los lados del cuadrado unitario. Las mallas correspondientes se muestran en la figura 4.8.

Una tercera región es una circunferencia que se divide equitativamente para formar 4 lados de 41 puntos cada uno. Los resultados se muestran en la figura 4.9. Las mallas en estas tres regiones tienen una distribución uniforme de puntos en los lados. Sus valores de las desviaciones máxima y promedio de la ortogonalidad se encuentran en las tablas 4.2 a 4.4.

Observemos que los valores de la desviación promedio de la ortogonalidad indican que los valores altos de la desviación sólo se presentan localmente.

Funcional	M.D.O.	A.D.O.
$\sigma kS + (1 - \sigma)F_O$	7.28	1.84
$\sigma kA + (1 - \sigma)F_O$	13.30	2.74
$\sigma F_t + (1 - \sigma) F_O$	7.58	1.84
$\sigma S + (1 - \sigma) F_O$	9.01	2.02

Cuadro 4.2: Valores de M.D.O. y A.D.O. para la región Domo, con distintas combinaciones de funcionales y σ =0.01 (Figura 4.7)

Funcional	M.D.O.	A.D.O.
$\sigma kS + (1 - \sigma)F_O$	20.63	1.27
$\sigma kA + (1 - \sigma)F_O$	17.83	1.74
$\sigma F_t + (1 - \sigma) F_O$	17.68	1.43
$\sigma S + (1 - \sigma) F_O$	17.45	1.35

Cuadro 4.3: Valores de M.D.O. y A.D.O. para la región B, con distintas combinaciones de funcionales y $\sigma = 0.01$ (Figura 4.8)

Funcional	M.D.O.	A.D.O.
$\sigma kS + (1 - \sigma)F_O$	18.95	0.97
$\sigma kA + (1 - \sigma)F_O$	61.80	2.82
$\sigma F_t + (1 - \sigma) F_O$	19.14	0.96
$\sigma S + (1 - \sigma) F_O$	26.95	1.43

Cuadro 4.4: Valores de M.D.O. y A.D.O. para la Circunferencia, con distintas combinaciones de funcionales y σ =0.01 (Figura 4.9)



Figura 4.7: Mallas generadas para el domo con distintas combinaciones de funcionales y σ =0.01.



Figura 4.8: Mallas generadas para la región B con distintas combinaciones de funcionales y σ =0.01.



Figura 4.9: Mallas generadas para la circunferencia con distintas combinaciones de funcionales y σ =0.01.

4.4.2. Regiones irregulares

Consideramos ahora mallas generadas para las regiones de la bahía de la Habana, el lago Ucha en Rusia, Sudamérica y Gran Bretaña empleando las mismas combinaciones de funcionales de la sección anterior.

Los valores de las desviaciones para estas mallas se encuentran en las tablas 4.5 a 4.8. Las mallas obtenidas se muestran en las figuras 4.10, 4.11, 4.12 y 4.13. Las gráficas nos muestran que los funcionales k-suavidad, k-área, F_t y S efectivamente funcionan, aún con un peso pequeño, como una barrera que impide que el funcional de ortogonalidad doble las mallas.

Es interesante el efecto del funcional de ortogonalidad: las mallas que obtenemos recuerdan el efecto de "doblez" que tenía la malla de la figura 4.3, pero ahora la malla óptima es convexa.

Funcional	M.D.O.	A.D.O.
$\sigma kS + (1 - \sigma)F_O$	71.87	11.35
$\sigma kA + (1 - \sigma)F_O$	80.14	11.05
$\sigma F_t + (1 - \sigma) F_O$	77.17	19.87
$\sigma S + (1 - \sigma) F_O$	81.83	10.68

Cuadro 4.5: Desviaciones de los ángulos para la región Bahía de la Habana, con distintas combinaciones de funcionales y un peso $\sigma = 0.01$ (ver figura 4.10).

Funcional	M.D.O.	A.D.O.
$\sigma kS + (1 - \sigma)F_O$	68.68	7.01
$\sigma kA + (1 - \sigma)F_O$	81.16	6.30
$\sigma F_t + (1 - \sigma) F_O$	81.61	14.18
$\sigma S + (1 - \sigma) F_O$	88.14	10.89

Cuadro 4.6: Desviaciones de los ángulos para la región Lago Ucha, con distintas combinaciones de funcionales y un peso $\sigma = 0.01$ (ver figura 4.11).

Funcional	M.D.O.	A.D.O.
$\sigma kS + (1 - \sigma)F_O$	76.00	17.57
$\sigma kA + (1 - \sigma)F_O$	86.77	8.44
$\sigma F_t + (1 - \sigma) F_O$	80.30	13.76
$\sigma S + (1 - \sigma) F_O$	88.88	12.69

Cuadro 4.7: Desviaciones de los ángulos para la región Sudamérica, con distintas combinaciones de funcionales y un peso $\sigma = 0.01$ (ver igura 4.12).

Funcional	M.D.O.	A.D.O.
$\sigma kS + (1 - \sigma)F_O$	79.65	22.47
$\sigma kA + (1 - \sigma)F_O$	89.66	26.95
$\sigma F_t + (1 - \sigma) F_O$	89.41	22.25
$\sigma S + (1 - \sigma) F_O$	85.31	24.35

Cuadro 4.8: Desviaciones de los ángulos para la región Gran Bretaña, con distintas combinaciones de funcionales y un peso $\sigma = 0.01$ (ver figura 4.13).

Es importante señalar que hemos empleado sólo el funcional F_O , porque es muy sencillo de calcular y permite obtener resultados del mismo orden de magnitud que otros funcionales de ortogonalidad que se presentan en la literatura².

4.4.3. El cociente α_+/α_-

Para concluir, veamos en las tablas 4.9 a 4.12 los valores del cociente $\alpha_+/\alpha_$ para las mallas presentadas en la sección anterior. Es de esperarse que tal cociente sea más cercano a la unidad controlando la distribución de puntos en la frontera, lo cual no forma parte de los objetivos del presente trabajo.

α_	α_+	α_+/α	Funcional
0.2136	9.2697	43.3815	$\sigma F_t + (1 - \sigma) F_O$
0.0024	9.6002	386.7901	$\sigma S + (1 - \sigma) F_O$
0.0452	9.2922	205.4072	$\sigma kA + (1 - \sigma)F_O$
0.0029	2.6625	918.1034	$\sigma kS + (1 - \sigma)F_O$

Cuadro 4.9: Valores del cociente α_+/α_- para mallas sobre la región Bahía de la habana, generadas con distintas combinaciones de funcionales y un peso $\sigma = 0.01$.

α_{-}	α_+	α_+/α	Funcional
0.1700	6.9749	41.0138	$\sigma F_t + (1 - \sigma) F_O$
0.0003	7.8217	20708.8371	$\sigma S + (1 - \sigma) F_O$
0.0625	6.8754	109.8851	$\sigma kA + (1 - \sigma)F_O$
0.0001	3.7981	37981.0000	$\sigma kS + (1 - \sigma)F_O$

Cuadro 4.10: Valores del cociente α_+/α_- para mallas sobre la región Lago Ucha, generadas con distintas combinaciones de funcionales y un peso $\sigma = 0.01$

 $^{^2 {\}rm Otras}$ expresiones para funcionales de ortogonalidad pueden encontrarse en Knupp y Steinberg [40]

α_{-}	α_+	α_+/α	Funcional
0.2026	6.6379	32.7644	$\sigma F_t + (1 - \sigma) F_O$
0.0138	6.8959	498.0344	$\sigma S + (1 - \sigma) F_O$
0.0330	8.3822	253.7728	$\sigma kA + (1 - \sigma)F_O$
0.0015	3.2513	2167.5333	$\sigma kS + (1 - \sigma)F_O$

Cuadro 4.11: Valores del cociente α_+/α_- para mallas sobre la región Sudamérica, generadas con distintas combinaciones de funcionales y un peso $\sigma = 0.01$.

α_	α_+	α_+/α	Funcional
0.1520	14.0605	92.4996	$\sigma F_t + (1 - \sigma) F_O$
0.0066	18.3173	2761.7133	$\sigma S + (1 - \sigma) F_O$
0.0204	16.6607	815.1511	$\sigma kA + (1 - \sigma)F_O$
0.0015	2.3505	1567.0000	$\sigma kS + (1 - \sigma)F_O$

Cuadro 4.12: Valores del cociente α_+/α_- para mallas sobre la región Gran Bretaña, generadas con distintas combinaciones de funcionales y un peso $\sigma = 0.01$.



Figura 4.10: Mallas generadas para la Bahía de la Habana con distintos funcionales, y con un peso σ =0.01.



Figura 4.11: Mallas generadas para el Lago Ucha con distintos funcionales, y un peso σ =0.01.



Figura 4.12: Mallas generadas para Sudamérica con distintos funcionales, y un peso σ =0.01.



Figura 4.13: Mallas generadas para Gran Bretaña con distintos funcionales, y un peso σ =0.01.

Capítulo 5

Conclusiones

5.1. Conclusiones

En este trabajo, se abordó el problema de la generación de mallas casiortogonales sobre regiones planas irregulares:

- La generación de mallas casiortogonales sólo era posible sobre regiones planas relativamente simples.
- Se demostró que era indispensable combinar el funcional de ortogonalidad con un funcional que garantice la convexidad de la malla.
- Se introdujo el concepto de ϵ -convexidad de las mallas lo que permite hacer un planteamiento adecuado del problema.
- Los resultados que aquí se presentan se inspiran en los trabajos de Ivanenko para la generación de mallas armónicas y en el de Tinoco que extiende el trabajo de Ivanenko con sus funcionales kS de suavidad y kA de área.
- Se demuestra que el funcional kA de área de Tinoco se puede combinar con el de ortogonalidad para generar mallas cuasiortogonales, pero la dificultad en la elección de los parámetros y la discontinuidad del funcional kA, hace necesario buscar otros funcionales de área.
- Se desarrolla un esquema teórico que permite construir funcionales de área que generan y mantienen la convexidad de las mallas y que son C^2 en todo el dominio.
- Combinando el funcional de ortogonalidad con uno de los obtenidos en este trabajo, es posible generar mallas casiortogonales en regiones irregulares de manera satisfactoria.

- La comparación de éste método y el funcional kA de Tinoco, no es posible en condiciones similares, ya que el funcional de Tinoco necesita ser regularizado alrededor del polo para poder utilizar un método de optimización sin restricciones.
- La implantación de los métodos aquí propuestos es transparente, no requiere de ningun parámetro especial y se pueden utilizar con cualquier método de optimización sin restricciones.

Nota: La contribución fundamental de Ivanenko consiste en proponer un nuevo funcional para generar malla suaves y mostrar que es factible usarlo en regiones irregulares si tenemos una malla convexa. En su trabajo Tinoco, modifica el funcional de suavidad para ver que es posible obtener mallas convexas a partir de cualquier malla inicial, no necesariamente convexa. Además construye un funcional de Área que permite obtener mallas convexas cuando existen. La principal limitación de sus funcionales es que tienen un polo y esto representa un problema en la implantación de sus métodos ya que hay que resolver un problema de optimización y es necesario hacer una regularización del funcional para poder utilizar un método de optimización sin restricciones. Ivanenko y Tinoco usan diferentes regularizaciones, que dependen de parámetros extras, los cuales son elegidos en base a su experiencia. En este trabajo se construyeron un nuevo tipo de funcionales, con las mismas propiedades que los de Ivanenko y Tinoco, v que no tienen ninguna discontinuidad, son C^2 por lo que su implantación es transparente, y no requiere de ningún parámetro adicional, son sumamente eficientes.

5.2. Trabajo a futuro

Varias líneas de trabajo pueden seguirse de manera directa a partir de los desarrollos que hemos presentado. Específicamente, estamos interesados en

- 1. Aplicar nuestros resultados a regiones con fronteras suaves, permitiendo la reubicación de puntos en la frontera.
- 2. Construir siguiendo las ideas que discutimos un funcional de suavidad semejante al de Winslow.
- 3. Caracterizar las regiones donde es difícil generar mallas convexas.

5.3. Nota final

Los funcionales que hemos desarrollado para generar mallas casiortogonales y convexas pueden implementarse facilmente. Como mencionamos al principio de este trabajo, han sido incorporados en el software **UNAMALLA**, al cual puede accederse libremente en la dirección:

http://www.matematicas.unam.mx/unamalla/

Apéndice A

Interpolación Transfinita

Un aspecto importante en generación variacional discreta es la construcción de una malla inicial. Esto puede hacerse por medio de un método algebraico de generación muy sencillo, denominado *interpolación transfinita* (TFI, Transfinite interpolation) ([40]).

Para construir una malla por TFI, se seleccionan los lados derecho $L_2(\eta)$, izquierdo $L_4(\eta)$, inferior $L_1(\xi)$ y superior $L_3(\xi)$ de la frontera de una región Ω , parametrizados de tal forma que $0 \le \xi \le 1$ y $0 \le \eta \le 1$. Para estos lados deben cumplirse las condiciones

$$L_1(0) = L_4(0)$$

 $L_1(1) = L_2(0)$
 $L_2(1) = L_3(1)$
 $L_3(0) = L_4(1).$

La expresión que se utiliza para la generación algebraica es

$$\mathbf{x}(\xi,\eta) = (1-\eta)L_1(\xi) + \eta L_3(\xi) + (1-\xi)L_3(\eta) + \xi L_4(\eta) - \{\xi\eta L_3(1) + \xi(1-\eta)L_1(1) + \eta(1-\xi)L_3(0) + (\xi-1)(\eta-1)L_1(0)\},\$$

y la malla se genera como la imagen bajo \mathbf{x} del rectángulo

$$R = \{(\xi, \eta) | 0 \le \xi \le 1; 0 \le \eta \le 1\}.$$

Este método tiene el inconveniente de que las sigularidades diferenciales en la frontera de Ω se propagan hacia el interior, por lo que produce mallas muy dobladas en regiones irregulares.

Como ejemplo, mostramos mallas de 20 y 40 puntos por lado generadas por interpolación transfinita para el contorno de la la bahía de la Habana (Figuras A.1 y A.2). Notemos que ninguna de las dos mallas es convexa.



Figura A.1: Malla para la Bahía de la Habana generada por interpolación. 20 puntos por lado.



Figura A.2: Malla para la Bahía de la Habana generada por interpolación. 40 puntos por lado.

Apéndice B

Galería de mallas convexas

En este apéndice se presentan las mallas óptimas empleadas como muestra de los resultados obtenidos a lo largo del presente trabajo. Se reproducen a mayor tamaño con el objeto de apreciar su estructura.



Figura B.1: Bahía de la Habana, 40 puntos por lado. Funcional de longitud (Capítulo $\ 1).$



Figura B.2: Bahía de la Habana, 40 puntos por lado. Funcional de ortogonalidad (Capítulo $\ 1).$



Figura B.3: Bahía de la Habana, 40 puntos por lado. Funcional de área (Capítulo 1).



Figura B.4: Bahía de la Habana, 40 puntos por lado. Funcional de área-ortogonalidad (Capítulo 1).



Figura B.5: Bahía de la Habana, 41 puntos por lado, kS (Capítulo $\ 2).$



Figura B.6: Gran Bretaña, 41 puntos por lado, kS (Capítulo $\ 2).$



Figura B.7: Lago Ucha, 41 puntos por lado, kS (Capítulo $\ 2).$



Figura B.8: Sudamérica, 41 puntos por lado, kS (Capítulo $\ 2).$



Figura B.9: Bahía de la Habana, 41 puntos por lado, kA (Capítulo $\ 2).$


Figura B.10: Gran Bretaña, 41 puntos por lado, kA (Capítulo $\ 2).$



Figura B.11: Bahía de la Habana, 41 puntos por lado, kA (Capítulo $\ 2).$



Figura B.12: Sudamérica, 41 puntos por lado, kA (Capítulo $\ 2).$



Figura B.13: Bahía de la Habana, 41 puntos por lado, ${\cal F}_t$ (Capítulo~3).



Figura B.14: Sudamérica, 41 puntos por lado, ${\cal F}_t$ (Capítulo $\,$ 3).



Figura B.15: Lago Ucha, 41 puntos por lado, ${\cal F}_t$ (Capítulo $\,$ 3).



Figura B.16: Gran Bretaña, 41 puntos por lado, ${\cal F}_t$ (Capítulo $\,$ 3).



Figura B.17: Bahía de la Habana, 41 puntos por lado, S (Capítulo $\ 3).$



Figura B.18: Sudamérica, 41 puntos por lado, S (Capítulo $\,$ 3).



Figura B.19: Lago Ucha, 41 puntos por lado, S (Capítulo $\ 3).$



Figura B.20: Gran Bretaña, 41 puntos por lado, S (Capítulo $\,$ 3).



Figura B.21: Bahía de la Habana, 41 puntos por lado, $\frac{1}{2}S + \frac{1}{2}F_L$ (Capítulo 3).



Figura B.22: Sudamérica, 41 puntos por lado, $\frac{1}{2}S + \frac{1}{2}F_L$ (Capítulo 3).



Figura B.23: Lago Ucha, 41 puntos por lado, $\frac{1}{2}S + \frac{1}{2}F_L$ (Capítulo 3).



Figura B.24: Gran Bretaña, 41 puntos por lado, $\frac{1}{2}S + \frac{1}{2}F_L$ (Capítulo 3).



Figura B.25: Bahía de la Habana, 41 puntos por lado, $\frac{1}{10}S + \frac{9}{10}F_L$ (Capítulo 3).



Figura B.26: Sudamérica, 41 puntos por lado, $\frac{1}{10}S + \frac{9}{10}F_L$ (Capítulo 3).



Figura B.27: Lago Ucha, 41 puntos por lado, $\frac{1}{10}S + \frac{9}{10}F_L$ (Capítulo 3).



Figura B.28: Gran Bretaña, 41 puntos por lado, $\frac{1}{10}S + \frac{9}{10}F_L$ (Capítulo 3).



Figura B.29: Domo, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma kS + (1-\sigma)F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.30: Domo, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma kA + (1-\sigma)F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.31: Domo, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma F_t + (1-\sigma) F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.32: Domo, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma S + (1-\sigma) F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.33: Región B, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma kS + (1-\sigma)F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.34: Región B, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma kA + (1-\sigma)F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.35: Región B, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma F_t + (1-\sigma)F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.36: Región B, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma S+(1-\sigma)F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.37: Circunferencia, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01$, $\sigma kS + (1 - \sigma)F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.38: Circunferencia, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01$, $\sigma kA + (1 - \sigma)F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.39: Circunferencia, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01$, $\sigma F_t + (1 - \sigma)F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.40: Circunferencia, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01$, $\sigma S + (1 - \sigma)F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.41: Bahía de la Habana, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma kS + (1-\sigma)F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.42: Bahía de la Habana, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma kA + (1-\sigma)F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.43: Bahía de la Habana, 41 puntos por lado, $\sigma = 0.01$, $\sigma F_t + (1 - \sigma)F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.44: Bahía de la Habana, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma S + (1-\sigma) F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.45: Lago Ucha, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma kS + (1-\sigma)F_O$ (Capítulo 4).


Figura B.46: Lago Ucha, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma kA + (1-\sigma)F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.47: Lago Ucha, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma F_t + (1-\sigma) F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.48: Lago Ucha, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma S + (1-\sigma) F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.49: Sudamérica, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma kS + (1-\sigma)F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.50: Sudamérica, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma kA + (1-\sigma)F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.51: Sudamérica, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma F_t + (1-\sigma) F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.52: Sudamérica, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma S + (1-\sigma) F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.53: Gran Bretaña, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma kS + (1-\sigma)F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.54: Gran Bretaña, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma kA + (1-\sigma)F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.55: Gran Bretaña, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma F_t + (1-\sigma) F_O$ (Capítulo 4).



Figura B.56: Gran Bretaña, 41 puntos por lado, σ =0.01, $\sigma S + (1-\sigma) F_O$ (Capítulo 4).

Bibliografía

- [1] Ahlfors, L.V. Complex Analysis. McGraw-Hill, 1979.
- [2] Allievi, A. y Calisal, S.M. Application of bubnov-galerkin formulation to orthogonal grid generation. Journal of Computational Physics 98, 1992.
- [3] Anderson, D.A. Constructing adaptive grids with poisson grid generatios. Numerical Grid Generation in Computational Fluid Dynamics, 1986.
- [4] Barrera, P., Castellanos, L. y Pérez, A. Curvilinear coordinate system generation over plane irregular regions. Reportes técnicos de la Facultad de Ciencias, U.N.A.M., 1992.
- [5] Barrera, P., Domínguez-Mota, F.J. y González, F.G. Some experiences on orthogonal grid generation. Proceedings of the 9th International Meshing Roundtable, 2000.
- [6] Barrera, P., Domínguez-Mota, F.J. y González, F.G. Variational grid generation using exponentials of area. Proceedings of the 10th International Meshing Roundtable, 2001.
- [7] Barrera, P., Domínguez-Mota, F.J. y González, F.G. Robust discrete grid generation on plane irregular regions. Proceedings of the Computing Centre RAS and R&D Company 2002 Workshop, Moscow, Russia, 2002.
- [8] Barrera, P., Domínguez-Mota, F.J. y González, F.G. Some experiences on orthogonal grid generation. Applied Numerical Mathematics 40, 2002.
- [9] Barrera, P. y Tinoco, J.G. Smooth and convex grid generation over general plane regions. Mathematics and Computers in Simulation, 1998.
- [10] Barrera, P. y Tinoco, J.G. Area functionals in plane grid generation. 6th Conference in Numerical Grid Generation in Computational Field Simulation Conference, 1998.
- [11] Barrera, P. y Tinoco, J.G. Area control in generating smooth and convex grids over general plane regions. Journal of Computational and Applied Mathematics, 1999.

- [12] Brackbill, J.U. y Saltzman, J.S. Coordinate system control: Adaptive meshes. Numerical Grid Generation, 1982.
- [13] Burley, D.M. y Challis V. Numerical method for conformal mapping. J. Numerical Analysis 2, 1982.
- [14] Castillo, J.E. Variational Grid Generation. PhD thesis, University of New Mexico, 1987.
- [15] Castillo, J.E. Mathematical Aspects of Numerical Grid Generation. SIAM, 1991.
- [16] Carey, G.F. Grid Generation, Refinements and Redistribution. Wiley, New York, 1993.
- [17] Charakhch'yan, A.A. y Ivanenko S.A. Curvilinear grids of convex quadrilaterals. USSR Comput. Maths. Math. Phys. Vol. 28, No.2, 1988.
- [18] De Lillo, T.K. A note on rengel's inequality and the crowding phenomenon in conformal mapping methods. J.Comp.Appl.Math, 9, 1987.
- [19] Dennis, J.E. y Schnabel R.B. Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations. SIAM, Philadelphia, 1996.
- [20] Dubiner, M. Theoretical and Numerical Analysis of Conformal Mappings. PhD thesis, MIT, 1981.
- [21] Duraiswami, R. y Prosperetti, A. Orthogonal mapping in two dimensions. Journal of Computational Physics 98, 1992.
- [22] Eça, L. 2d orthogonal grid generation with boundary point distribution control. Journal of Computational Physics 125, 1996.
- [23] Eça, L. Orthogonal generating systems. Handbook of Grid Generation, CRC Press, capítulo 7, 1999.
- [24] Forsey, C.R. y Weatherhill P. Grid generation and flow calculations for complex aircraft grometries using a multi-block scheme. AAIA 17th Fluid Dynamics, Plasma Dynamics and Laser Conference, 1984.
- [25] Frey, P.J. y George, P.L. Maillages: Applications aux Elements Finis. Hermes Science Publications, 1999.
- [26] García, I.D. Métodos de optimización de gran escala y algunas aplicaciones a funciones parcialmente separables. Tesis de Maestría, Facultad de Ciencias U.N.A.M., 1999.
- [27] George, P.L. Authomatic Mesh Generation: Applications to Finite Element Methods. Wiley, New York, 1991.

- [28] George, P.L., Hecht, F. y Saltel, E. Constraint of the boundary and automatic mesh generation. Proc. 2nd International Conference on Numerical Grid Generation in Computational Fluid Mechanics, 1988.
- [29] Godunov, S.K. On the ideas underlying grid generation methods. Computational Mathematics and Mathematical Physics, Vol. 43, No. 6, 2003.
- [30] González, F.G. Generación en Mallas en Regiones Planas Irregulares. Tesis de Licenciatura, Universidad Autónoma de Yucatán, 1994.
- [31] González, F.G. Un sistema automático para la generación numérica de mallas basado en los nuevos funcionales de área y suavidad. Tesis de Maestría, Universidad Nacional Autónoma de México, 2003.
- [32] Hardy, G., Littlewood, J.E. y Pólya, G. Inequalities. Cambridge University Press, 1934.
- [33] Haussling, H.J. y Coleman, R.M. A methos for generation of orthogonal and nearly orthogonal boundary fitted coordinate systems. J. Comp. Physics 42, p. 373-381, 1981.
- [34] Henrici, P. Applied and Computational Complex Analysis. Wiley, 1986.
- [35] Howell, L.H. Modified Schwarz-Christoffel Transformations. PhD thesis, MIT, 1990.
- [36] Ivanenko, S.A. Generation of non-degenerate meshes. USSR Comput. Maths. Math. Phys. Vol. 28, No.2, 1988.
- [37] Ives, D.C. y Zacharias, R.M. Conformal mapping and orthogonal grid generation. 23rd Joint Propulsion Conference, 1987.
- [38] Knupp, P. Intrinsec algebraic grid generation. Mathematical aspects of numerical grid generation, J.E. Castillo Ed., 1991.
- [39] Knupp, P. A robust elliptic grid generator. J. Comp- Phys. 100, 409-418, 1992.
- [40] Knupp, P. y Steinberg, S. Fundamentals of grid generation. CRC Press, 1992.
- [41] Leal, L.G. y Ryskin, G. 2d orthogonal grid generation. Journal of Computational Physics 50, 1983.
- [42] Lee, K.D. y Rubbert, P.E. Patched coordinate systems. Numerical Grid generation, 1982.
- [43] Lehto, O. y Virtaanen, K.I. Quasiconformal Mappings in the Plane. Springer-Verlag, 1973.
- [44] Marsden, J. Complex Analysis. McGraw-Hill, 1988.

- [45] Marshall, A. y Olkin, I. Inequalities: Theory of Majorizations and its Applications. Cambridge University Press, 1979.
- [46] Mastin, C.W., Warsi, Z.U.A. y Thompson, J.F. Numerical Grid Generation: Foundations and Applications. Elsevier Science Publications Co., Inc. New York, NY., 1985.
- [47] Miki, K. y Takagi, T. A domain decomposition and overlapping method for the generation of three-dimensional boundary-fitted coordinate systems. J. Comput. Phys. 53, 1984.
- [48] Milnor, J. Morse Theory. Princeton University Press, 1969.
- [49] Mobley, C.D. y Stewart, R.J. 2d orthogonal grid generation. Journal of Computational Physics 34, 1980.
- [50] Roache, P.J. y Steinberg, S. Variational grid generation. Num. Meth. for P.D.E.s 2, 71-96, 1986.
- [51] Roberts, A.W. y Varberg, D.E. Convex Functions. Academic Press, 1973.
- [52] Rudin, W. Principles of Mathematical Analysis. McGraw-Hill, 1974.
- [53] Schur, I. Uber eine Klasse von Mittelbildungen mit Anwendungen auf die Determinantentheorie. Sitzunsber. Berlin. Math., 1920.
- [54] Smale, H. Differential equations, dynamical systems and linear algebra. McGraw-Hill, 1988.
- [55] Soni, B.K., Thompson, J.F. y Weatherhill, P. Handbook of Grid Generation. CRC Press, 1999.
- [56] Tinoco, J.G. Funcionales Discretos para la Generación de Mallas Suaves y Convexas sobre Regiones Planas Irregulares. Tesis de Doctorado, CIMAT, 1997.
- [57] Toledo, F. Métodos Nuéricos para Mapeo Conforme con Aplicación a la Generación de Mallas. Tesis de Maestría, Facultad de Ciencias, U.N.A.M., 1995.
- [58] Volkan, A., Ghattas, O. y Jaramaz, B. Nearly orthogonal two-dimensional grid generation with aspect ratio control. Journal of Computational Physics 171, 805 821, 2001.
- [59] Wilkin, J. y Hedstrom, K.S. User's Manual for an Orthogonal Curvilinear Grid-generation Package. Rutgers University, 1998.
- [60] Winslow, A.M. Numerical solution of quasilinear poisson equation in nonuniform triangle mesh. J. Comput. Phys. 1(2), p. 149-172, 1966.