

Una revisión de los Funcionales de Área

Pablo Barrera-Sánchez¹ Francisco J. Domínguez-Mota²
Guilmer F. González Flores³

¹U.N.A.M., Mexico City, Mexico, pablo@athena.fciencias.unam.mx

²U.M.S.N.H., Morelia, Mexico, dmota@zeus.umich.mx

³U.N.A.M., Mexico City, Mexico, gfgf@athena.fciencias.unam.mx

Resumen

En este documento, hacemos una revisión de los funcionales discretos de área para la generación de mallas que hemos estudiado en los últimos años. Mencionamos las propiedades primeras que dieron origen a cada uno de ellos. De igual manera describimos la teoría moderna que sustenta a los nuevos funcionales de área, y planteamos un nuevo funcional que implementado adecuadamente, podría ser muy eficiente. Se presentan resultados numéricos y se describen las implantaciones dentro del sistema computacional **Unamalla**.

1. Introducción

El problema de la generación de mallas puede introducirse a partir de la necesidad existente de resolver numéricamente ecuaciones diferenciales parciales por aproximaciones en diferencias finitas. De esta manera, la aproximación se obtiene, al resolver la ecuación algebraica asociada a la discretización y sobre puntos específicos de la región de trabajo. Luego son estos puntos tanto en el interior como en la frontera, los que deben ser localizados; estos son los llamados **puntos de la malla** y el procedimiento para generarlos se conoce como **generación de mallas**.

La generación de mallas para la solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales no es la única aplicación, pero explica en forma esquemática el propósito que perseguimos. De manera general la generación de mallas es una herramienta que nos permite discretizar la región mediante regiones más simples y sobre de estas poder entonces medir en forma aproximada un fenómeno a observar, por ejemplo, el flujo de las corrientes sobre un lago. Otro ejemplo lo encontramos en la necesidad de representar una estructura metálica, digamos un brazo de palanca, para medir su resistencia al medio y su interacción con una maquinaria específica.

2. Descripción del problema continuo

El problema de la generación de mallas planas puede ser planteado de la siguiente forma. Sobre de una región Ω plana acotada y simplemente conexas, consideremos una transformación continua del cuadrado unitario en la región Ω

$$\mathbf{x} : B_2 \longrightarrow \Omega, \quad (1)$$

una malla sobre Ω es una transformación continua $\mathbf{x}(\xi, \eta) = (x(\xi, \eta), y(\xi, \eta))$

$$\mathbf{x} : B_2 \longrightarrow \Omega \quad (2)$$

donde B_2 es el cuadrado unitario $[0, 1] \times [0, 1]$.

Si sobre del cuadrado unitario generamos una retícula de tal manera que una los lados opuestos dos a dos; al mapear estas líneas bajo el mapeo \mathbf{x} obtendremos una malla sobre la región, ver Figura 1.

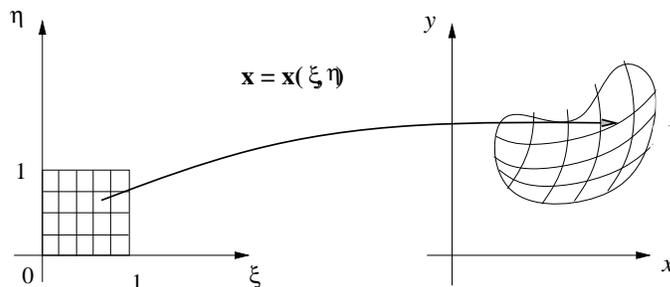


Figura 1: Una malla sobre Ω .

De manera particular, estamos interesados en aquellos mapeos \mathbf{x} que conformen la frontera de Ω ,

$$\mathbf{x}(\partial B_2) = \partial\Omega \quad (3)$$

esto es, que la frontera de B_2 sea mapeada a la frontera de Ω . Bajo esta idea, el problema de la generación de mallas puede plantearse como:

dada una transformación biyectiva y continua entre la frontera de B_2 y de Ω , extenderla a una transformación continua entre B_2 y Ω

en otras palabras, extender un mapeo continuo y biyectivo entre fronteras

$$\mathbf{x} : \partial B_2 \longrightarrow \partial\Omega \quad (4)$$

a un mapeo continuo entre regiones

$$\mathbf{x} : B_2 \longrightarrow \Omega. \quad (5)$$

Sin embargo, no cualquier mapeo es adecuado. Para generar una malla razonablemente útil sobre Ω , debe considerarse que las líneas no se entrelacen y que los lados del cuadrado sean mapeados a líneas sobre la frontera. La característica de que el mapeo sea continuo garantiza que el orden de los lados del cuadrado bajo el mapeo sea conservado.

Contar con un mapeo continuo entre fronteras nos lleva a considerar la frontera de la región en cuatro segmentos, segmentos curvilíneos a decir verdad o sub-fronteras, conservando el orden impuesto por el cuadrado unitario. Estamos interesados en que el mapeo sea biyectivo, por consiguiente, hemos de observar que el mapeo cuente con jacobiano positivo, $J = x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi > 0$.

3. Generación de mallas como un problema variacional

Bajo la idea de imponer condiciones al homeomorfismo deseado podemos considerar al problema de la generación de mallas como un problema variacional continuo: encontrar un mapeo de entre aquellos de frontera conforme; es decir, que cubra la frontera, que sea no doblado y con algunas características geométricas a observar.

Típicamente los funcionales considerados en un problema variacional para la generación de mallas que involucran medidas de suavidad y de tensión de los segmentos curvilíneos, así como el comportamiento del jacobiano, tienen la forma:

$$I(\mathbf{x}) = \int_0^1 \int_0^1 L(x_\xi, x_\eta, y_\xi, y_\eta) d\xi d\eta \quad (6)$$

donde L , al que llamaremos Lagrangiano, mide características geométricas de los segmentos curvilíneos y es nuestro objetivo estudiar aquellos que describan un mapeo acorde a nuestros propósitos.

Así, considerando un Lagrangiano continuo con las características a observar sobre la malla, el problema de la generación de mallas puede plantearse como *hallar el mapeo entre B_2 y Ω de entre todos aquellos donde la frontera de B_2 es mapeada a $\partial\Omega$ y que minimice a $I(\mathbf{x})$* , lo que escribimos como

$$\mathbf{x}^* = \arg \min_{\mathbf{x}(\partial B_2) = \partial\Omega} I(\mathbf{x}). \quad (7)$$

Por el momento sólo estamos interesados en considerar propiedades que hacen que L sea continuamente diferenciable sobre Ω . Bajo esta observación, y siguiendo la teoría básica del cálculo de variaciones [23] tenemos que la solución a (7) debe satisfacer

$$\frac{d}{d\xi} \left(\frac{\partial L}{\partial x_\xi} \right) + \frac{d}{d\eta} \left(\frac{\partial L}{\partial x_\eta} \right) = 0 \quad (8)$$

$$\frac{d}{d\xi} \left(\frac{\partial L}{\partial y_\xi} \right) + \frac{d}{d\eta} \left(\frac{\partial L}{\partial y_\eta} \right) = 0 \quad (9)$$

Estas son las condiciones de Euler–Lagrange. La solución de (7) está ligada a cómo resolver el sistema (8)–(9) con condiciones a la frontera

$$\mathbf{x}(\partial B_2) = \partial\Omega.$$

3.1. Una interpretación de los funcionales clásicos

Como hemos señalado, estamos interesados en medir ciertas propiedades geométricas en las mallas. Por ejemplo, si nuestro interés es generar mallas cuyos segmentos curvilíneos sean suaves una manera de lograrlo es medir la razón de cambio de los segmentos sobre la región [55], una representación de tal medida es

$$I(\mathbf{x}) = \int_0^1 \int_0^1 (x_\xi^2 + x_\eta^2 + y_\xi^2 + y_\eta^2) d\xi d\eta \quad (10)$$

este es el funcional de Longitud y mide la tensión de los segmentos curvilíneos en las direcciones $\xi - \eta$.

Como se observa en este funcional, la medida involucrada actúa tanto en la línea ξ como en la η , luego si la región de estudio es muy irregular, necesitaremos tenzar unas líneas más que otras [3] usando para esto un peso $0 \leq \omega \leq 1$ entre cada medida y de la forma

$$I(\mathbf{x}) = \omega \int_0^1 \int_0^1 (x_\xi^2 + y_\xi^2) d\xi d\eta + (1 - \omega) \int_0^1 \int_0^1 (x_\eta^2 + y_\eta^2) d\xi d\eta \quad (11)$$

Ahora bien, siendo el Jacobiano de la transformación \mathbf{x} una medida del área local, estamos interesados en su comportamiento a lo largo de la región de tal forma que al considerar la funcional

$$I(\mathbf{x}) = \int_0^1 \int_0^1 J(\xi, \eta)^2 d\xi d\eta \quad (12)$$

deseamos encontrar un mapeo que transforme la retícula uniforme en B_2 en una malla de área uniforme en Ω .

Sin embargo, no siempre es posible obtenerlo, ya que las ecuaciones de Euler–Lagrange son no lineales y no elípticas [20]; y si añadimos la irregularidad de una región, pudiera no existir su solución. Por otra parte, numéricamente este tipo de sistemas son muy difíciles y costosos de resolver.

Regresando a las propiedades que deseamos observar en la malla, podemos combinar los dos últimos funcionales de manera que el comportamiento de la tensión de las líneas y entonces su suavidad, se encuentren en correspondencia al área local de la región de tal manera que donde el área sea pequeña las líneas no se tencen tanto y donde el área sea grande sí ocurra esto. Bajo esta característica, un funcional que mide esta propiedad es

$$I(\mathbf{x}) = \int_0^1 \int_0^1 \frac{x_\xi^2 + x_\eta^2 + y_\xi^2 + y_\eta^2}{J(\xi, \eta)} d\xi d\eta. \quad (13)$$

Acorde a su propiedad, las líneas de mallas resultantes por este funcional se aproximan a fronteras cóncavas y se alejan de las convexas [32]. Este es el funcional de Suavidad o de Winslow.

Otra medida muy importante es el ángulo que forman los segmentos curvilíneos que se intersectan. Por ejemplo, si la malla deseada sobre la región es aplicada a la solución numérica de ecuaciones diferenciales, y los segmentos de la malla son ortogonales, los términos $\xi\eta$ se anulan por lo que el sistema a resolver es más sencillo. En el caso de que los segmentos estén cercanos a la ortogonalidad, esos términos influyen poco en la solución. El funcional de Ortogonalidad

$$I(\mathbf{x}) = \int_0^1 \int_0^1 (x_\xi y_\xi + x_\eta y_\eta)^2 d\xi d\eta. \quad (14)$$

cuenta con esta propiedad. Sin embargo, no siempre es posible obtener una malla sobre cualquier región ya que sus ecuaciones de Euler–Lagrange suelen ser no elípticas lo que dificulta el proceso de obtención de una malla.

Hasta aquí, la solución a (7) de estos funcionales no siempre existe y de existir podrían no generar mallas convexas. Sin embargo, la necesidad de observar las propiedades de convexidad y suavidad de las líneas nos invita a experimentar con combinaciones de los funcionales ponderados, dependiendo del comportamiento global o incluso local, que deseamos cuente la malla.

Un ejemplo lo encontramos al considerar el Lagrangiano de área en suma ponderada con el de longitud, digamos en la forma

$$L(\mathbf{x}) = \sigma J(\xi, \eta)^2 + (1 - \sigma)[x_\xi^2 + x_\eta^2 + y_\xi^2 + y_\eta^2] \quad (15)$$

donde σ es un escalar entre 0,0 y 1,0, que se elige dependiendo de si deseamos observar mayor área de las celdas o bien, tensar más las líneas.

La importancia de esta combinación radica en que si σ no es cero, las ecuaciones de Euler–Lagrange asociadas a (7) son acopladas y elípticas, la solución existe y es fácil de encontrar. Sin embargo, la misma combinación no garantiza mallas convexas ni pidiendo uniformidad en celdas; esto es, eligiendo σ cercana a 1,0.

Otra combinación atractiva viene al considerar el Lagrangiano de área y el de ortogonalidad, en combinación

$$L(\mathbf{x}) = J(\xi, \eta)^2 + (x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta)^2 \quad (16)$$

expandiendo a J y agrupando términos tenemos que

$$L(\mathbf{x}) = (x_\xi^2 + x_\eta^2)(y_\xi^2 + y_\eta^2) \quad (17)$$

dando lugar a un funcional muy sencillo de evaluar y que en la práctica produce mallas con celdas uniformes, o cerca de lograrlo y de líneas cercanas a la ortogonalidad. Las ecuaciones de Euler–Lagrange para este funcional son elípticas. Por esta última propiedad tenemos que las mallas generadas tienen líneas suaves, es decir, este funcional es muy útil a nuestro propósito. Sin embargo, por la influencia de la ortogonalidad, las mallas así obtenidas pueden resultar dobladas y entonces no convexas, esto puede ocurrir en muchas regiones, pero con una adecuada reparametrización de la frontera o bien con frontera suave, en ocasiones podemos hallar una malla con estas tres características [31].

4. Funcional de Área continuo clásico

El funcional de Área continuo clásico se ha planteado como una medida del área de las celdas sobre las coordenadas del mapeo directo en Ω para uniformizar el tamaño de las celdas, siempre que ésto pueda lograrse.

Una de las propiedades geométricas que deseamos medir en una malla es la uniformidad del área de las celdas para de esta forma controlar su tamaño y no se presenten cambios inesperados entre celda y celda acorde a la medición a realizar sobre la región. Por una parte, el jacobiano del mapeo directo \mathbf{x} mide localmente el área sobre la región de estudio Ω ; por otra, la relación que guardan las coordenadas físicas y lógicas viene dada por

$$dxdy = J d\xi d\eta \quad (18)$$

de ésta manera, el área de la región Ω viene dado por

$$A(\Omega) = \int \int_{\Omega} dxdx = \int_0^1 \int_0^1 J d\xi d\eta. \quad (19)$$

Esta relación es válida para todo mapeo directo \mathbf{x} entre B_2 y Ω que conforme la frontera, aún para aquellos mapeos cuyos segmentos curvilíneos se entrelacen.

Brackbill y Saltzman [12] propusieron en 1982 minimizar el jacobiano de la transformación controlando la variación de J a lo largo de Ω por medio de una función de peso $w = w(\xi, \eta)$. Para lograrlo sugirieron minimizar el funcional

$$I(\mathbf{x}) = \int_0^1 \int_0^1 w(\xi, \eta) J(\xi, \eta) d\xi d\eta \quad (20)$$

al que llamaron funcional de **Área ponderada**. La función de peso w adecúa la malla dándole más peso a aquellas subregiones de Ω donde se desea observar con mayor precisión la propiedad del área. Esta función de peso es muy socorrida si de antemano sabemos cuál es ese comportamiento a lograr a lo largo de Ω , lo cual no siempre es posible.

Nuestro interés es construir mallas convexas sobre regiones muy irregulares de manera automática, por lo que contar con una función de peso de acuerdo a una región involucra un enorme esfuerzo en cómputo y tiempo.

Steinberg y Roache [43], propusieron que la función de peso w fuese precisamente el jacobiano de la transformación, con lo cual el problema variacional que atacaron fue

$$\begin{aligned} I_a(\mathbf{x}) &= \frac{1}{2} \int_0^1 \int_0^1 J^2(\xi, \eta) d\xi d\eta \\ &= \frac{1}{2} \int_0^1 \int_0^1 (x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi)^2 d\xi d\eta \end{aligned} \quad (21)$$

A diferencia de Brackbill y Saltzman, Steinberg y Roache formularon éste funcional de manera independiente y se basaron en un enfoque geométrico a observar en las mallas: la uniformidad de las celdas. Analicemos las ecuaciones de Euler–Lagrange para el funcional de Área.

Las ecuaciones de Euler–Lagrange para el funcional I_a son

$$\begin{aligned}\frac{d}{d\xi} \left(\frac{\partial J^2}{\partial x_\xi} \right) + \frac{d}{d\eta} \left(\frac{\partial J^2}{\partial x_\eta} \right) &= 0 \\ \frac{d}{d\xi} \left(\frac{\partial J^2}{\partial y_\xi} \right) + \frac{d}{d\eta} \left(\frac{\partial J^2}{\partial y_\eta} \right) &= 0\end{aligned}$$

por una parte tenemos

$$\begin{aligned}\frac{\partial J^2}{\partial x_\xi} &= 2Jy_\eta & \frac{\partial J^2}{\partial x_\eta} &= -2Jy_\xi \\ \frac{\partial J^2}{\partial y_\xi} &= -2Jx_\eta & \frac{\partial J^2}{\partial y_\eta} &= 2Jx_\xi\end{aligned}$$

desarrollando cada expresión

$$\begin{aligned}\frac{d}{d\xi} \frac{\partial J^2}{\partial x_\xi} &= \frac{d(2Jy_\eta)}{d\xi} \\ &= 2Jy_{\xi\eta} + 2y_\eta \frac{dJ}{d\xi} \\ \frac{d}{d\eta} \frac{\partial J^2}{\partial x_\eta} &= \frac{d(-2Jy_\xi)}{d\eta} \\ &= -2Jy_{\xi\eta} - 2y_\xi \frac{dJ}{d\eta} \\ \frac{d}{d\xi} \frac{\partial J^2}{\partial y_\xi} &= \frac{d(-2Jx_\eta)}{d\xi} \\ &= -2Jx_{\xi\eta} - 2x_\eta \frac{dJ}{d\xi} \\ \frac{d}{d\eta} \frac{\partial J^2}{\partial y_\eta} &= \frac{d(2Jx_\xi)}{d\eta} \\ &= 2Jx_{\xi\eta} + 2x_\xi \frac{dJ}{d\eta}\end{aligned}$$

con esto, las ecuaciones de Euler–Lagrange para el funcional de Área se escriben como

$$\begin{aligned}2 \left(y_\eta \frac{dJ}{d\xi} - y_\xi \frac{dJ}{d\eta} \right) &= 0 \\ 2 \left(-x_\eta \frac{dJ}{d\xi} + x_\xi \frac{dJ}{d\eta} \right) &= 0\end{aligned}$$

o bien, en forma matricial por

$$2 \begin{pmatrix} y_\xi & y_\eta \\ x_\xi & x_\eta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{dJ}{d\xi} \\ \frac{dJ}{d\eta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

el cual es un sistema cuasi-lineal y no elíptico. Sobre éste sistema no se cuenta con prueba de existencia y de unicidad sobre una región Ω

arbitraria. El hecho de que el sistema es no elíptico se ve reflejado en las mallas al no ser éstas suaves.

Steinberg y Knupp [32] observaron que sobre un conjunto de regiones de prueba (la Galería de Roache) no era posible obtener mallas con la característica de que cuenten con área uniforme y sean convexas. Resolvieron el sistema de Euler–Lagrange por medio del método iterativo **SOR** con un *stencil* de nueve puntos y observaron que el proceso diverge en pocos pasos presumiblemente porque en esas regiones no era posible encontrar una malla uniforme en tamaño de celda. Sin embargo, el problema se debe principalmente al orden de precisión de los esquemas involucrados.

5. Funcionales de Área continuos

El funcional de Área continuo puede ser generalizado de manera que conservemos la propiedad del funcional de Área clásico: área uniforme [49].

Consideremos a $L = L(x)$ una función escalar diferenciable dos veces y J el jacobiano de la transformación, . Nuestro interés se centra en observar las propiedades que pediremos a L de manera que la expresión

$$\int_{B_2} L(J) d\xi d\eta \quad (22)$$

represente una funcional con propiedades geométricas semejantes al funcional de Área.

Consideremos las ecuaciones de Euler–Lagrange del problema variacional asociado

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi} \left(\frac{\partial L(J)}{\partial x_\xi} \right) + \frac{d}{d\eta} \left(\frac{\partial L(J)}{\partial x_\eta} \right) &= 0 \\ \frac{d}{d\xi} \left(\frac{\partial L(J)}{\partial y_\xi} \right) + \frac{d}{d\eta} \left(\frac{\partial L(J)}{\partial y_\eta} \right) &= 0 \end{aligned}$$

Por claridad denotemos

$$L' = \frac{dL}{dJ}, \quad L'' = \frac{d^2L}{dJ^2}$$

con esto, cada elemento de las ecuaciones las expresamos como

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi} \left(\frac{\partial L}{\partial x_\xi} \right) &= \frac{d}{d\xi} \left(L' \frac{\partial J}{\partial x_\xi} \right) \\ &= \frac{d}{d\xi} (y_\eta L') \\ &= y_{\xi\eta} L' + y_\eta L'' \frac{dJ}{d\xi} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\eta} \left(\frac{\partial L}{\partial x_\eta} \right) &= \frac{d}{d\eta} \left(L' \frac{\partial J}{\partial x_\eta} \right) \\
&= -\frac{d}{d\eta} (y_\xi L') \\
&= -y_{\xi\eta} L' - y_\xi L'' \frac{dJ}{d\eta}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\xi} \left(\frac{\partial J}{\partial y_\xi} \right) &= \frac{d}{d\xi} \left(L' \frac{\partial J}{\partial y_\xi} \right) \\
&= -\frac{d}{d\xi} (x_\eta L') \\
&= -x_{\xi\eta} L' - x_\eta L'' \frac{dJ}{d\xi}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\eta} \left(\frac{\partial L}{\partial y_\eta} \right) &= \frac{d}{d\eta} \left(L' \frac{\partial J}{\partial y_\eta} \right) \\
&= \frac{d}{d\eta} (x_\xi L') \\
&= x_{\xi\eta} L' + x_\xi L'' \frac{dJ}{d\eta}
\end{aligned}$$

con esto, las ecuaciones Euler–Lagrange de (23) son

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\xi} \left(\frac{\partial L(J)}{\partial x_\xi} \right) + \frac{d}{d\eta} \left(\frac{\partial L(J)}{\partial x_\eta} \right) &= \\
&= L'' (y_\eta \frac{dJ}{d\xi} - y_\xi \frac{dJ}{d\eta}) = 0 \\
\frac{d}{d\xi} \left(\frac{\partial L(J)}{\partial y_\xi} \right) + \frac{d}{d\eta} \left(\frac{\partial L(J)}{\partial y_\eta} \right) &= \\
&= L'' (x_\eta \frac{dJ}{d\xi} - x_\xi \frac{dJ}{d\eta}) = 0
\end{aligned}$$

y en forma matricial

$$L'' \begin{pmatrix} y_\eta \frac{dJ}{d\xi} - y_\xi \frac{dJ}{d\eta} \\ x_\eta \frac{dJ}{d\xi} - x_\xi \frac{dJ}{d\eta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

las cuales son idénticas al funcional de área clásico excepto por el factor L'' . De aquí, se concluye que una solución para el funcional de área clásico será solución para cualquier otro funcional continuo de área de la forma (22). De igual manera, si G^* es una malla solución de un funcional continuo de área con la propiedad de que $L'' \neq 0$ entonces G^* será solución del funcional de área clásico.

Haciendo un pequeño cambio en el orden de las ecuaciones últimas podemos reescribirlas como

$$L'' \begin{pmatrix} x_\xi & x_\eta \\ y_\xi & y_\eta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{dJ}{d\xi} \\ \frac{dJ}{d\eta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Si consideramos mapeos no singulares, es decir con

$$J = \det \begin{pmatrix} x_\xi & x_\eta \\ y_\xi & y_\eta \end{pmatrix} \neq 0,$$

las ecuaciones de Euler–Lagrange resultan

$$L'' \begin{pmatrix} \frac{dJ}{d\xi} \\ \frac{dJ}{d\eta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Ahora bien, si para estos mapeos nuestra función L es de tal forma que $L'' \neq 0$, el jacobiano J de la transformación será constante en Ω ; esto es, la malla así generada por el funcional continuo será uniforme en Ω .

Cabe señalar que la forma de la función L es muy importante para lograr la propiedad de área uniforme ya que mide el cambio en el jacobiano J a lo largo de Ω .

Algunos ejemplos de funcionales de Área del tipo señalado arriba, son

1. $L(J) = (J - \bar{\alpha})^4$
2. $L(J) = J^{-1}$
3. $L(J) = \frac{1}{J - \omega}$, con $\omega \in \mathbb{R}$ adecuado.
4. $L(J) = \frac{1}{J + \omega}$, con $\omega \in \mathbb{R}$ adecuado.

En el primer ejemplo, $\bar{\alpha}$ representa al valor promedio de α de un triángulo. En el ejemplo 2, el funcional tiene sentido sobre mapeos no singulares, $J \neq 0$. En el ejemplo 3 el valor de ω debe ser tal que $J > \omega$ sobre las mallas del conjunto que puede ser descrito con esta propiedad. De igual forma usar el Lagrangiano en el ejemplo 4 nos obliga a contemplar mallas tales que $J > -\omega$, siempre que ésto pueda ocurrir. En la siguiente sección abordaremos las funciones construidas por la discretización de estos funcionales y veremos para qué valores de ω es posible definirlos.

Describamos ahora, el problema de la construcción de mallas planas.

6. Descripción del problema discreto

El problema discreto de la generación de mallas puede plantearse como una representación de la región Ω a través de una colección de partes más simples, por ejemplo los cuadriláteros, de cuya unión resulta la región. Consideremos la siguiente definición

Definición 1 Una **malla** para Ω es una colección de elementos c_i simples llamados **celdas** de la malla, con las propiedades siguientes

1. $\bigcup c_i = \Omega$
2. $Int(c_i) \cap Int(c_j) = \emptyset$; con $i \neq j$
3. $Int(c_i) \cap \partial\Omega = \emptyset$

Las celdas c_i pueden ser triángulos o cuadriláteros. Estamos interesados en trabajar con celdas formadas por cuadriláteros. Una observación importante es que estas mallas no se solapen.

La discretización de la región de estudio juega un papel importante cuando se desea resolver numéricamente un problema continuo sobre de ella, como lo es la solución numérica de alguna ecuación diferencial parcial. La discretización es un paso del trabajo a desarrollar sobre un problema específico y es esencial cuando se desea evitar errores innecesarios de aproximación, llevar a cabo una adecuada discretización de las ecuaciones diferenciales.

En muchas aplicaciones la región de trabajo Ω es solución de un problema diferencial o algebraico; en otros es posible contar con la descripción de la región en forma continua a través de una parametrización de las componentes o bien, del contorno mismo. En muchas más, sólo se dispone de puntos sobre el contorno obtenidos previamente de alguna forma.

Consideremos que el contorno de la región Ω está formado por un conjunto finito de puntos en el plano, con esto, el dominio a tratar es una región poligonal. Si (x_i, y_i) , para $i = 1, \dots, n$ es una colección de puntos en el plano, bajo una orientación, estamos interesados en estudiar la región poligonal que describe esos puntos

$$\gamma = \partial\Omega = \text{polígono}((x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n), (x_1, y_1)). \quad (23)$$

La orientación del contorno es muy importante ya que nos describirá por una parte la forma de la región y por otra tendremos una referencia clara cuando señalemos los puntos y las celdas de la malla. Los puntos del polígono bajo una orientación, la orientación positiva (el sentido contrario a las manecillas del reloj) será nuestra referencia de Ω en adelante; en cuyo caso, Ω es una *región poligonal* formada por los segmentos generados por la unión orientada de los puntos en la frontera. Dos regiones poligonales se muestran en la Figura 2.

La idea de la discretización que usaremos, se sigue del planteamiento continuo (7), lograr un mapeo entre el cuadrado unitario y ésta poligonal. Para lograr un mapeo con esta condición es indispensable fijar los puntos sobre la frontera de Ω a dónde irán a ser mapeadas las esquinas del cuadrado unitario.

Una vez asignados los puntos, el siguiente paso es obtener una parametrización de los segmentos del contorno y de acuerdo a la dimensión de la malla $m \times n$ fijar los puntos sobre cada una de los cuatro segmentos de frontera, Figura 4(b). Bajo una adecuada numeración de los nodos de la malla, nuestro problema se aboca a encontrar los puntos hacia el interior de Ω que nos conduzca a una malla, Figura 4(c).

Existen muchas formas de atacar este problema, por ejemplo, con métodos algebraicos, diferenciales y variacionales continuos, por mencionar algunos, que nos permiten obtener los puntos interiores. La forma en que nosotros lo haremos será mediante un esquema de optimización de funcionales discretos que miden características geométricas de las celdas. Describamos esta idea.

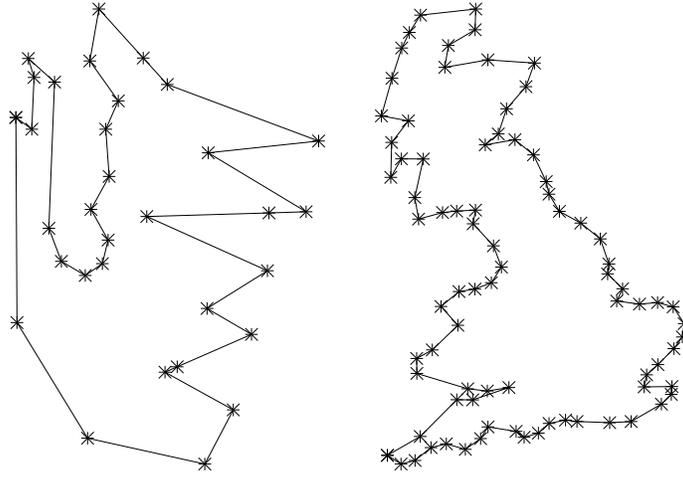


Figura 2: Ejemplo de regiones poligonales en el plano.

7. 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 estructurada y por un funcional discreto.

Consideremos una región Ω del plano definida por una poligonal $\gamma = \partial\Omega$ de vértices $V = \{v_1, v_2, \dots, v_q\}$, cerrada, simple y orientada en sentido positivo (Figura 5).

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

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

con lados

$$L_1(G) = \{P_{i,1} | i = 1, \dots, m\}$$

$$L_2(G) = \{P_{m,j} | j = 1, \dots, n\}$$

$$L_3(G) = \{P_{i,n} | i = 1, \dots, m\}$$

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

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

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

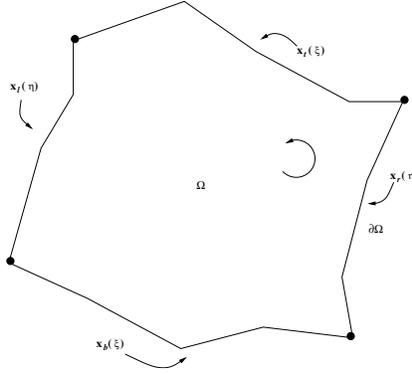


Figura 3: Asignando puntos de las esquinas sobre la frontera de Ω .

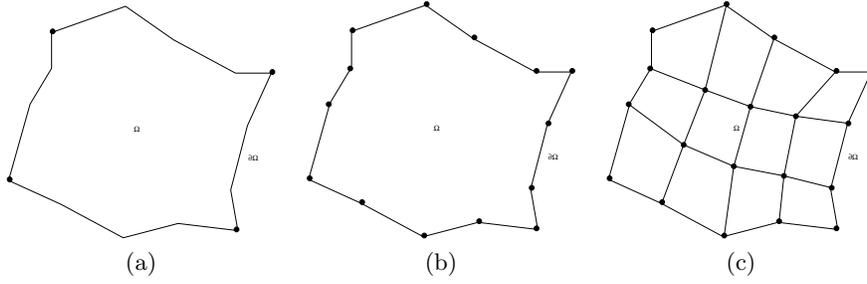


Figura 4: Construcción de una malla a partir de los puntos sobre la frontera.

Diremos 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 sobre las celdas de la malla

$$I(G) = \sum_{i,j} f(c_{i,j}) \quad (24)$$

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.

La función $f = f(c_{i,j})$ mide alguna cantidad geométrica de interés sobre la celda $c_{i,j}$. Por ejemplo, área, ortogonalidad, suavidad o longitud. El

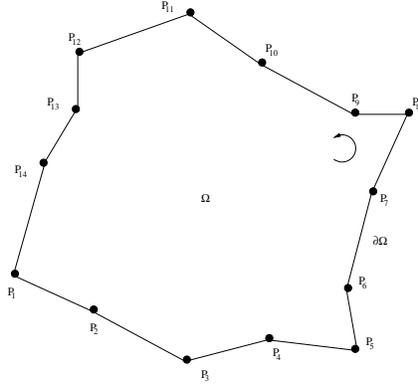


Figura 5: Ejemplo una región definida por una poligonal cerrada y simple.

problema de la generación de mallas con la propiedad f puede plantearse a través de la minimización del funcional sobre toda la malla

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

habiendo fijado los puntos sobre la frontera, los nodos interiores son las variables a determinar y la dimensión del problema es de $2(m-2)(n-2)$. Este problema de optimización es de gran escala para m y n grande. Mallas de dimensión grande son utilizadas en problemas reales de aplicación.

Algunos funcionales discretos pueden obtenerse a partir de los funcionales continuos mediante una discretización adecuada de ellos, véase González [26]. Veamos una representación adecuada para los funcionales discretos de área.

8. Funcional de Área discreto, t -Área

El funcional de Área lo podemos escribir como una suma del funcional restringido a cada una de las celdas de B_2

$$\begin{aligned} I_a(\mathbf{x}) &= \sum_{i,j} \int_{B_{i,j}} J^2 d\xi d\eta \\ &= \sum_{i,j} \int_{B_{i,j}} (\mathbf{x}_\xi^t J_2 \mathbf{x}_\eta)^2 d\xi d\eta \end{aligned} \quad (25)$$

y para cada celda $B_{i,j}$ el mapeo restringido a ella, aproximararlo por la función bilineal $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\xi, \eta)$,

$$\mathbf{r} \approx x|_{\partial B_{i,j}}$$

es decir, con la forma más simple de mapear dos cuadriláteros, obteniendo

$$I_a(\mathbf{x}) \approx \sum \int_{B_{i,j}} (\mathbf{r}_\xi^t J_2 \mathbf{r}_\eta)^2 d\xi d\eta. \quad (26)$$

Sea G una malla de $m \times n$ en B_2 uniforme en ξ y η y por claridad consideremos la celda $c_{i,j}$ como el cuadrilátero compuesto por los puntos P, Q, R, S , ver Figura 6.

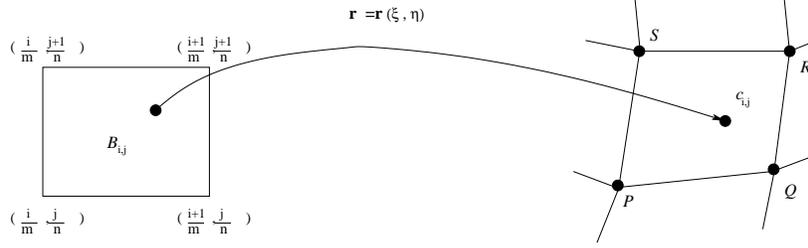


Figura 6: Mapeo bilineal entre $B_{i,j}$ y $c_{i,j}$

Escribiendo el mapeo bilineal entre $B_{i,j}$ y el cuadrilátero P, Q, R, S en la forma

$$\mathbf{r}(\xi, \eta) = \mathbf{A} + \mathbf{B}\left(\xi - \frac{i}{m}\right) + \mathbf{C}\left(\eta - \frac{j}{n}\right) + \mathbf{D}\left(\xi - \frac{i}{m}\right)\left(\eta - \frac{j}{n}\right) \quad (27)$$

los coeficientes del mapeo son determinados por la correspondencia entre los puntos; así tendremos que

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= P \\ \mathbf{B} &= m(Q - P) \\ \mathbf{C} &= n(S - P) \\ \mathbf{D} &= mn(R - Q + P - S) \end{aligned}$$

Una vez hecho esto, usando una regla de cuadratura basada sobre los nodos, aproximamos la integral sobre $B_{i,j}$

$$\begin{aligned} \int_{B_{i,j}} (\mathbf{r}_\xi^t J_2 \mathbf{r}_\eta)^2 &\approx \frac{1}{4} \left[\left(\mathbf{r}_\xi^t \left(\frac{i}{m}, \frac{j}{n} \right) J_2 \mathbf{r}_\eta \left(\frac{i}{m}, \frac{j}{n} \right) \right)^2 \right. \\ &\quad + \left(\mathbf{r}_\xi^t \left(\frac{i+1}{m}, \frac{j}{n} \right) J_2 \mathbf{r}_\eta \left(\frac{i+1}{m}, \frac{j}{n} \right) \right)^2 \\ &\quad + \left(\mathbf{r}_\xi^t \left(\frac{i+1}{m}, \frac{j+1}{n} \right) J_2 \mathbf{r}_\eta \left(\frac{i+1}{m}, \frac{j+1}{n} \right) \right)^2 \\ &\quad \left. + \left(\mathbf{r}_\xi^t \left(\frac{i}{m}, \frac{j+1}{n} \right) J_2 \mathbf{r}_\eta \left(\frac{i}{m}, \frac{j+1}{n} \right) \right)^2 \right] \quad (28) \end{aligned}$$

Por una parte, las parciales de \mathbf{r} son

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_\xi &= m(Q - P) + mn(R + P - Q - S)(\eta - \frac{j}{n}) \\ \mathbf{r}_\eta &= n(S - P) + mn(R + P - Q - S)(\xi - \frac{i}{m})\end{aligned}$$

y sus valores en las esquinas de $B_{i,j}$ son

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_\xi(\frac{i}{m}, \frac{j}{n}) &= m(Q - P) & \mathbf{r}_\eta(\frac{i}{m}, \frac{j}{n}) &= n(S - P) \\ \mathbf{r}_\xi(\frac{i+1}{m}, \frac{j}{n}) &= m(Q - P) & \mathbf{r}_\eta(\frac{i+1}{m}, \frac{j}{n}) &= n(R - Q) \\ \mathbf{r}_\xi(\frac{i+1}{m}, \frac{j+1}{n}) &= m(R - S) & \mathbf{r}_\eta(\frac{i+1}{m}, \frac{j+1}{n}) &= n(R - Q) \\ \mathbf{r}_\xi(\frac{i}{m}, \frac{j+1}{n}) &= m(R - S) & \mathbf{r}_\xi(\frac{i}{m}, \frac{j+1}{n}) &= n(S - P)\end{aligned}$$

Con esto, reescribimos el primer elemento de (28)

$$\mathbf{r}_\xi^t(\frac{i}{m}, \frac{j}{n}) J_2 \mathbf{r}_\eta(\frac{i}{m}, \frac{j}{n}) = mn(Q - P)^t J_2(S - P)$$

y de manera semejante tendremos los restantes términos

$$\mathbf{r}_\xi^t(\frac{i+1}{m}, \frac{j}{n}) J_2 \mathbf{r}_\eta(\frac{i+1}{m}, \frac{j}{n}) = mn(Q - P)^t J_2(R - Q)$$

$$\mathbf{r}_\xi^t(\frac{i+1}{m}, \frac{j+1}{n}) J_2 \mathbf{r}_\eta(\frac{i+1}{m}, \frac{j+1}{n}) = mn(R - S)^t J_2(R - Q)$$

$$\mathbf{r}_\xi^t(\frac{i}{m}, \frac{j+1}{n}) J_2 \mathbf{r}_\eta(\frac{i}{m}, \frac{j+1}{n}) = mn(R - S)^t J_2(S - P)$$

con esto, la aproximación al funcional de Área sobre $B_{i,j}$ la escribimos en términos de los puntos P, Q, R, S de la forma:

$$\begin{aligned}\int_{B_{i,j}} (\mathbf{r}_\xi^t J_2 \mathbf{r}_\eta)^2 &\approx \frac{1}{4} m^2 n^2 \left[((Q - P)^t J_2(S - P))^2 + ((Q - P)^t J_2(R - Q))^2 \right. \\ &\quad \left. + ((R - S)^t J_2(R - Q))^2 + ((R - S)^t J_2(S - P))^2 \right] \quad (29)\end{aligned}$$

Hagamos un examen atento de los cuatro triángulos que pueden ser descritos sobre un rectángulo. En nuestro caso será sobre cada celda $c_{i,j}$, con orientación positiva, tal como se muestra en la Figura 7.

Dado que los triángulos cuentan con orientación positiva, el área de cada uno de ellos está representarlo por la expresión

$$2 \text{ área}(P, Q, S) = \det(Q - P, S - P) = (Q - P)^t J_2(S - P)$$

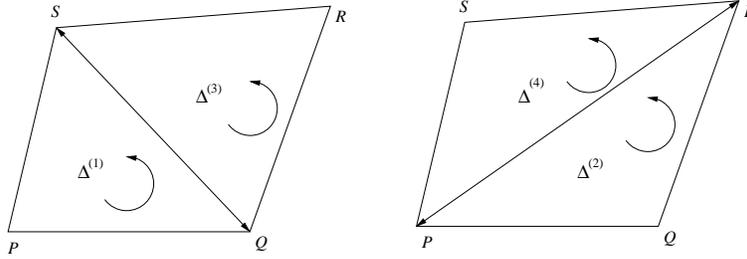


Figura 7: Triángulos de una celda.

lo que nos lleva a escribir la integral de Área restringida a la celda $B_{i,j}$ en forma compacta como

$$\int_{B_{i,j}} \mathbf{r}_\xi^t J_2 \mathbf{r}_\eta \approx \frac{1}{4} m^2 n^2 [(2 \text{ área}(P, Q, S))^2 + (2 \text{ área}(Q, R, P))^2 + (2 \text{ área}(R, S, Q))^2 + (2 \text{ área}(S, P, R))^2] \quad (30)$$

Podemos simplificar aún más la expresión anterior escribiéndola como función de triángulos en la forma

$$\int_{B_{i,j}} \mathbf{r}_\xi^t J_2 \mathbf{r}_\eta \approx m^2 n^2 \sum_{k=1}^4 f(\Delta^{(k)}) \quad (31)$$

donde

$$f(\Delta) = \alpha^2(\Delta)$$

y

$$\alpha(\Delta) = \frac{1}{2} \det(Q - P, R - P) = \text{área}(P, Q, R).$$

no perdamos de vista que P, Q, R representan los vértices del triángulo $\Delta^{(k)}$ en curso, ver Figura 7.

Nótese que en esta forma de escribir el funcional hemos omitido la cantidad $m^2 n^2$ de (30) ya que sólo es un factor. Este factor lo tomaremos en cuenta cuando normalicemos los funcionales para usarlos en combinaciones entre ellos.

Ahora bien, la integral de Área la hemos aproximado por una función o colección de funciones, que dependen únicamente de los nodos interiores de la malla.

$$\begin{aligned} I_a \approx I_{\mathcal{D}_A} &= m^2 n^2 \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{k=1}^4 f(\Delta_{ij}^{(k)}) \\ &= m^2 n^2 \sum_{q=1}^N f(\Delta_q) \end{aligned} \quad (32)$$

donde N es el número de triángulos de la malla. Con esto, hemos transformado el problema continuo de Área en un problema de minimización sobre los triángulos de la malla identificando aquellas configuraciones de mallas cuyos triángulos satisfagan el problema de gran escala

$$\min_{G \in \mathcal{D}} I_{\mathcal{D}_A} \quad (33)$$

donde \mathcal{D} es el conjunto de mallas sobre Ω de dimensión $m \times n$.

Este funcional, excepto por un factor constante, coincide con la propuesta de Barrera-Pérez para el funcional de área midiendo los triángulos orientados de la malla. Por una parte, el funcional de Barrera-Pérez es una discretización simple del funcional continuo de área y por la otra, cuenta con propiedades muy atractivas descritas por sus autores en [4].

Siguiendo las ideas de la discretización del funcional de Área y atendiendo a la forma de los funcionales discretos: sumas de funciones simples, veamos una manera sencilla y moderna de representar funcionales discretos que miden el área de los triángulos.

9. Funcionales discretos de Área

Sea $f(x) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ una función continua y F una función, $F(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ 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 . Sea φ la función, $\varphi : M(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}^N$ que a cada malla le asigna el vector $\varphi(G) = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N)^T$, donde los elementos α_i representan dos veces el área de los triángulos de G . Definimos un funcional discreto de área F_A , asociado a la función F como

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

Bajo esta notación, podemos mencionar algunos funcionales de área estudiados:

$$\begin{aligned}
\text{área clásica} \quad F_{Ac} &= \sum_{q=1}^N \alpha_q^2 \\
\text{área cuarta promedio} \quad F_{A4p} &= \sum_{q=1}^N (\alpha_q - \bar{\alpha})^4 \\
\text{inverso de área} \quad F_{A-} &= \sum_{q=1}^N \frac{1}{\alpha_q} \\
k - \text{área} \quad F_{kA} &= \sum_{q=1}^N \frac{1}{k + \alpha}; \quad \text{con } k \text{ adecuada}
\end{aligned}$$

Cualquier aplicación real que se lleve a cabo con la discretización de la región, requiere que la malla sea convexa. Esta será nuestra preocupación al momento de diseñar funcionales que garanticen en el óptimo una malla convexa, de otra forma no será útil. Veamos una caracterización de la convexidad en las mallas y cómo analizar ésta caracterización en la formulación de funcionales discretos de área.

9.1. 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. Por esta razón, es importante buscar una manera de asegurar convexidad en una celda. Esto es posible considerando directamente cada uno de los cuatro triángulos que se forman con los vértices de cada celda de la malla ([3]). Por otra parte, se debe emplear la orientación de los triángulos, ya que el valor de α en cada triángulo es positivo, entonces la celda es convexa (Figura 7).

Lo inmediato para obtener mallas convexas, es resolver el problema

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

sujeto explícitamente a

$$\alpha(\Delta_q) > 0, \quad q = 1, \dots, N. \quad (34)$$

Sin embargo, no es conveniente atacar un problema así, ya que las restricciones no permiten un manejo eficiente y dificultan el proceso de optimización.

En vez de emplear las restricciones (34), es preferible que éstas aparezcan directamente en la expresión (24), con el objeto de que la convexidad en las mallas óptimas sea consecuencia de las propiedades del funcional. Esta idea nos permite escribir el problema de optimización de gran escala para generar mallas como un problema no restringido.

Debido a la importancia de α , en [49] se definen para una malla G de orden $m \cdot n$, sobre una región Ω : el promedio $\bar{\alpha}$, el mínimo α_- y el máximo α_+ de los valores de α como

$$\bar{\alpha}(G) = \frac{\text{área}(\Omega)}{(m-1)(n-1)},$$

$$\alpha_-(G) = \min\{\alpha(\Delta_{i,j}^q) | 1 \leq i \leq m; 1 \leq j \leq n; 1 \leq q \leq 4\},$$

$$\alpha_+(G) = \max\{\alpha(\Delta_{i,j}^q) | 1 \leq i \leq m; 1 \leq j \leq n; 1 \leq q \leq 4\}.$$

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

Veamos algunos aspectos de los funcionales de área señalados.

9.2. Funcional Clásico de Área

Un teorema que se discute en [15] y [49], sobre la utilidad de los funcionales de área, es el siguiente.

Teorema 1 *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 $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, con $f''(x) \geq 0$, 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 clásico

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

no es capaz de generar mallas convexas en regiones irregulares. En [4] se hace un análisis detallado de este funcional discreto.

9.3. Funcional área 4 promedio

La funcional de área cuarta promedio es muy interesante. Es una funcional de área considerada por Tinoco [49] para penalizar la desviación del área con respecto al área promedio de una malla en $M(\Omega)$

$$F_{A4p} = \sum_{q=1}^N (\alpha_q - \bar{\alpha})^4$$

este funcional falla en la obtención de mallas convexas para regiones irregulares. Sin embargo ha sido útil su estudio para retomar la preocupación de construir mallas convexas penalizando la desviación con respecto al área promedio.

9.4. Funcional discreto inverso de Área

Otro ejemplo de funcional discreto de área lo representa el funcional discreto inverso de área

$$F_{A^-} = \sum_{q=1}^N \frac{1}{\alpha_q} \quad (35)$$

Este funcional discreto de área tiene la particularidad de estar definido sobre mallas con triángulos de área positiva. Como ya fue señalado en [49] y [26], cuando se aplica un método iterativo de optimización cabe la posibilidad de que el optimizador nos lleve a considerar puntos de prueba a mallas no convexas o bien, con celdas degeneradas; en cuyo caso la expresión (35) puede no estar definida (para alguna $\alpha_q \leq 0$). Si $\alpha < 0$ el funcional carece de significado y el optimizador podría conducirnos a puntos o mallas que nada tienen que ver con la propiedad ideal de estos funcionales: convexidad.

Por esta razón debe emplearse una regularización del funcional inverso de área para permitir al optimizador rechazar puntos (configuraciones de triángulos, las mallas) de prueba no aceptables durante su proceso.

Barrera propone realizar un corrimiento del polo de la siguiente forma

$$\tilde{f}(\Delta) = \begin{cases} \frac{l(\Delta)}{2\alpha(\Delta)} & \text{si } \alpha(\Delta) \geq \epsilon_c \\ \frac{4\epsilon_c l(\Delta)}{(2\alpha(\Delta) + \epsilon_c)^2} & \text{si } -\epsilon_c < \alpha(\Delta) \leq \epsilon_c \end{cases} \quad (36)$$

en la Figura 8, se observa la propuesta de correr el polo.

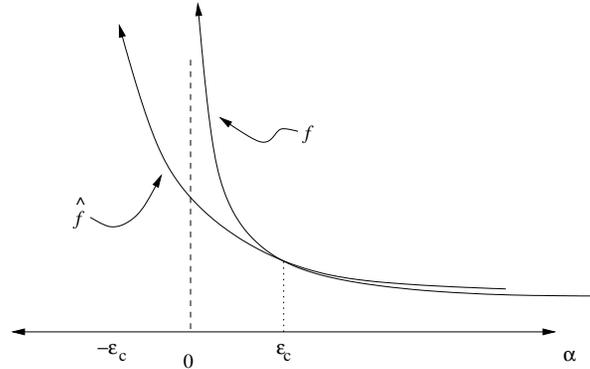


Figura 8: Regularización del funcional.

El valor de ϵ_c representa hacia dónde se ha de correr el polo y por consiguiente depende de la complejidad de la región, y de la ϵ -convexidad del conjunto de mallas sobre las que se va a optimizar.

Un valor experimental ha sido

$$\epsilon_c = \frac{\text{área}(\Omega)}{2(m-1)(n-1)}.$$

El trabajo de Barrera dió la pauta para analizar ésta forma de atacar el problema del polo en funciones del tipo $1/t$ para posteriormente diseñar funcionales que consideren la idea de ampliar el dominio a mallas casi-convexas.

9.5. Funcional k -Área

Tomando como base la idea de correr el polo, Tinoco, propuso ampliar el dominio de definición del funcional inverso de área, construyendo un funcional modificado del tipo de área. Describamos un poco el trabajo desarrollado y cómo consideró esa ampliación de dominios, véase la Figura 9.

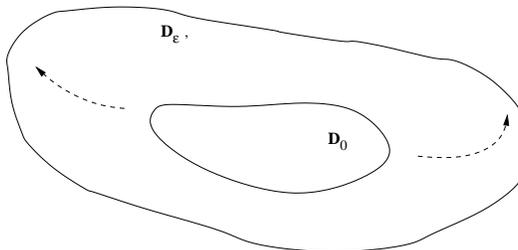


Figura 9: Ampliación de dominios.

Una medida de la no convexidad de una malla, viene dado por $\alpha_-(G)$, dos veces la menor área del triángulo en G . De ahí la importancia de considerar el conjunto siguiente:

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

$$\mathcal{D}_k = \{G \mid G \in M(\Omega), \alpha_-(G) > -k\} \quad (37)$$

con k un número real.

Las propiedades siguientes son sencillas de verificar:

1. Si k y \tilde{k} son números reales tales que $k < \tilde{k}$ entonces $\mathcal{D}_k \subset \mathcal{D}_{\tilde{k}}$.
2. $k \leq -\bar{\alpha}$ entonces $\mathcal{D}_k = \phi$.

De éstas propiedades se sigue que el conjunto $\mathcal{D} = \{k \in \mathbb{R} \mid \mathcal{D}_k \neq \phi\}$ es no vacío y acotado inferiormente. Por otra parte, si $\inf \mathcal{D} < 0$, entonces el conjunto \mathcal{D}_0 de mallas convexas es no vacío.

En 1997, Tinoco [49] propuso un funcional de área basado en la idea de extender las propiedades del funcional inverso de área sobre los conjuntos \mathcal{D}_k , para ello, consideró el funcional

$$F_{kA} = \sum_{q=1}^N \frac{1}{k + \alpha_q}. \quad (38)$$

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

Teorema 2 Sea $k > 0$. Si $\mathcal{D}_k \neq \phi$, entonces F_{kA} tiene al menos un mínimo en \mathcal{D}_k .

También se cumple que los valores α_- de las mallas óptimas del funcional F_{kA} se incrementan a medida que $k > 0$ se aproxima a cero. Esta idea sugiere diseñar un procedimiento homotópico en los valores de k .

El punto central es obtener un valor de k y proponer una actualización de ella para lograr un procedimiento homotópico.

Teorema 3 Sean $G_0 \in \mathcal{D}_k$ y G_1 en \mathcal{D}_k tal que

$$F_{kA}(G_1) = \min_{G \in \mathcal{D}_k} F_{kA}(G),$$

entonces

$$\alpha_-(G_1) \geq -\tilde{k},$$

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

Sin embargo, hemos de contar con el valor de la función en el óptimo para hacer esta actualización de k . Un resultado que nos sugiere un algoritmo efectivo para la actualización de k viene del

Teorema 4 Supongamos que \mathcal{D}_{k_0} es no vacío y sea $G_{k_0} \in \mathcal{D}_{k_0}$; elijamos $G_0 \notin \mathcal{D}_{k_0}$ una malla no convexa.

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

$$\alpha_-(G_k) > \alpha_-(G_0) + \frac{1}{2\phi_{k_0}} \quad (39)$$

donde $\phi_{k_0} = F_{k_0A}(G_{k_0})$. \square

Con este resultado se puede demostrar que es posible obtener una malla convexa en un número finito de pasos, ver Barrera-Tinoco [7]. El algoritmo que sugieren es el siguiente:

Algoritmo

1. Obtener una malla inicial G_0 sobre Ω .
2. Calcular k para G_0 con $\alpha_-(G_0)$ con $\alpha_-(G_0) > -k$.
3. Optimizar F_{kA}

$$G_k = \arg \min_{G \in \mathcal{D}_k} F_{kA}(G)$$

4. Repetir los pasos 2-3 hasta obtener una malla convexa con las propiedades de F_{kA} o una cercana a la convexidad.

Este algoritmo genera una trayectoria que nos lleva al conjunto de mallas convexas.

Una actualización experimental para k muy efectiva es la siguiente.

$$\begin{aligned} \tilde{k} &= -1,0015 * \alpha_- + 0,01 * \bar{\alpha} \\ k &= \max\{k^* \bar{\alpha}, \tilde{k}\} \end{aligned} \quad (40)$$

con $k^* = 0,01$. Este funcional genera mallas convexas admisibles de manera muy eficiente, y aunque los resultados se presentan de manera natural,

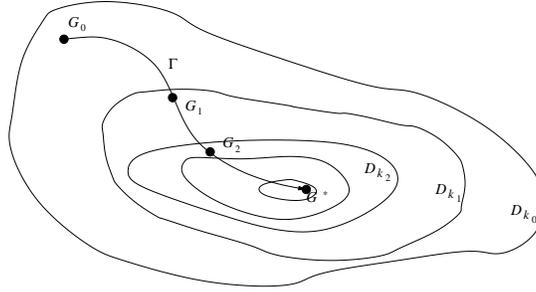


Figura 10: Trayectoria hacia el conjunto \mathcal{D}_0 , de mallas convexas

lo único que se ha hecho es una translación del origen del funcional $1/\alpha$ en un espacio euclidiano. A este procedimiento de actualizar k y optimizar el funcional, le llamamos k -funcional de área.

Este funcional nos garantizó una manera de obtener mallas convexas, si estas existen, y ha sido objeto de varios estudios para proponer actualizaciones de k eficientes, analizar la trayectoria Γ del procedimiento y las propiedades inherentes de este tipo de funcionales, para extenderlas a otros funcionales de área.

Observemos que el denominador $k + \alpha$, en este funcional opera como una barrera para evitar que los valores de α en las mallas sean negativos. Una desventaja que presenta es que en el proceso de optimización numérica, cuando los valores de α se aproximan a k , el funcional requiere una regularización del funcional.

La idea de la regularización que propusieron Barrera-Tinoco, es “empatar” en un punto $\hat{\alpha}$ ésta curva con una función cuadrática

$$q(\alpha) = a(\alpha - \hat{\alpha})^2 + b(\alpha - \hat{\alpha}) + c \quad (41)$$

sólo cuando sea necesario. Para lograr que el empate en $\hat{\alpha}$ sea dos veces continuamente diferenciable los coeficientes de la cuadrática deberán cumplir que

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{(k + \hat{\alpha})^3} \\ b &= -\frac{1}{(k + \hat{\alpha})^2} \\ c &= \frac{1}{k + \hat{\alpha}} \end{aligned} \quad (42)$$

Experimentalmente, el punto de empate se ha considerado cuando

$$\hat{\alpha} = -k + 0,015\alpha_-$$

y la regularización sólo se lleva a cabo cuando

$$\alpha < 0,15\alpha_- \quad (43)$$

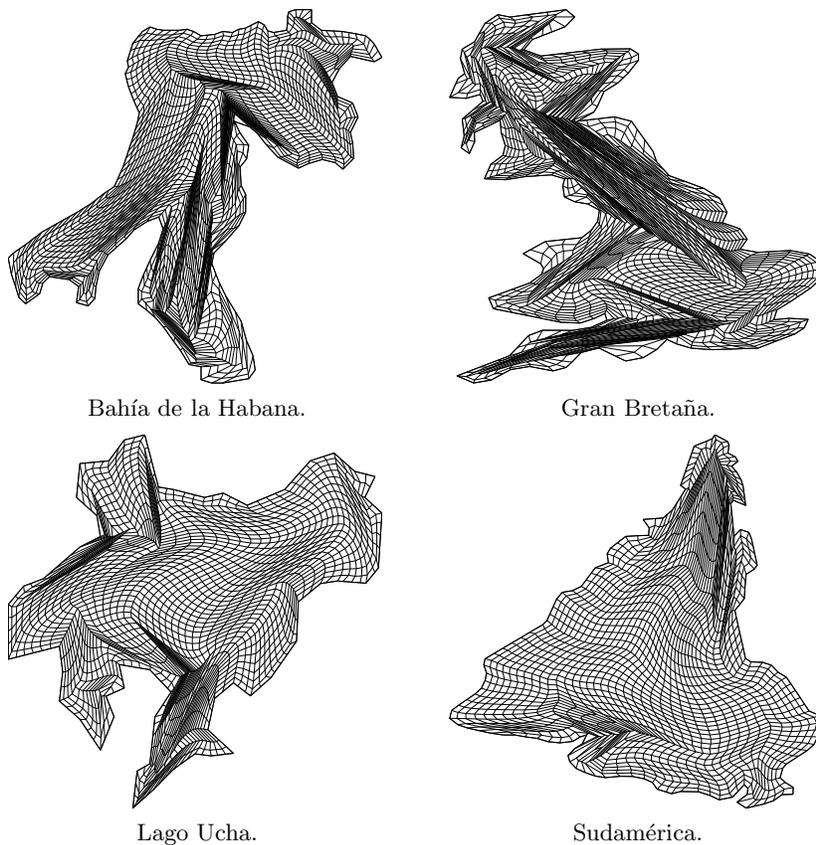


Figura 11: Mallas generadas con el funcional de k-área.

Nuestro interés ahora, es caracterizar los funcionales de área que nos conduzcan a una malla convexa en el óptimo.

Para lograr mallas convexas por funcionales de área, debemos de buscar una función $f(\alpha)$ que se comporte de manera semejante a $1/(k + \alpha)$, y esté definido sobre todo el conjunto de mallas $M(\Omega)$.

Entre las propiedades que debemos observar sobre f , tenemos

- debe ser capaz de distinguir valores distintos de α
- convexa,
- acotada inferiormente,
- y se incremente a medida que los valores de α disminuyen.

Hemos de considerar funciones con éstas características, además, es conveniente que sea muy suave, para permitir en la práctica una optimización sencilla.

9.6. Funcional exponencial de área

Una propuesta planteada por Mota en su trabajo doctoral [19] es usar la función exponencial

$$f(\alpha) = \exp(-\alpha). \quad (44)$$

Para de esta forma penalizar a los triángulos de área negativa y entonces el optimizador pueda conducirnos sin dificultad a mallas convexas. Nuestro siguiente objetivo es mostrar que los funcionales semejantes a

$$F_A(G) = F(\varphi(G)) \quad (45)$$

donde

$$F(\mathbf{x}) = \sum_{q=1}^N \exp(-x_q) \quad (46)$$

son de utilidad para construir mallas convexas.

Un teorema que nos ayuda a comprender la utilidad de este funcional es el teorema de Hardy, Littlewood y Pólya ([27]).

Teorema 5 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

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

Si aplicamos esta idea a los funcionales de área, nos dice que la malla uniforme es un punto crítico.

Esta idea de penalizar los triángulos de área negativa es muy interesante, ya que no requiere de regularización alguna. Sin embargo, en la práctica el procedimiento de optimización se torna lento y puede conducirnos a una malla con triángulos de área cero.

Es importante comentar que el teorema 5 no garantiza la existencia de una malla convexa *per se*. La malla uniforme G_u no tiene porque ser una malla admisible para toda región, ya que existen varias restricciones implícitas en el problema de optimización de mallas

- 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 12. Para ese contorno, es sencillo verificar que no es posible construir una malla convexa de 3 puntos por lado.

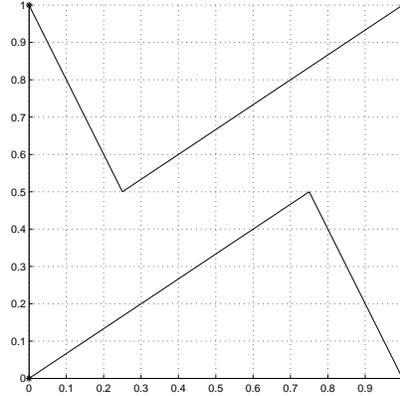


Figura 12: Contorno modelo de Ivanenko.

Este funcional de área opera muy bien en regiones complicadas, sin embargo es muy lento en el proceso de optimización y en algunos casos no se logra una malla convexa [19]. Sin embargo la idea de penalizar los triángulos de área negativa es atractiva.

9.7. Funcional Escalado de área

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. Esto es, la malla G es un punto en un espacio euclidiano de dimensión finita, si escalamos los puntos de la malla G por un factor \sqrt{t} , el área de los triángulos de las celdas quedan escalados por un factor t . De manera simbólica

$$\begin{aligned} G &\rightarrow \sqrt{t}G \\ \alpha_q &\rightarrow t\alpha_q \end{aligned}$$

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

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

Esta propuesta es interesante, ya que para un valor de t grande, los triángulos de área negativa son penalizados fuertemente y la función es convexa. Incluso nos sugiere un mecanismo para iniciar con un valor de t e ir incrementando éste. Veamos cómo se comporta este funcional para t grande.

9.8. Superficies de nivel de F_t

Describamos las superficies de nivel de F_t para observar su óptimo.

Teorema 6 Sean $u > 0$, $t > 0$. Existe $\mathbf{x}_0 = (x_{01}, x_{02}, \dots, x_{0N})^T \in \mathbb{R}^m$ tal que

$$\begin{aligned} F_t(\mathbf{x}_0) &= \sum_{i=1}^N e^{-tx_{0i}} \\ &= u \end{aligned}$$

Demostración: Tomando $x_{0i} = x_{0j}$ para $1 \leq i, j \leq N$ tenemos que $F_t(\mathbf{x}_0) = Ne^{-tx_{01}}$, y en particular para

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

El resultado anterior también indica que el espacio cociente construido en \mathbb{R}^N con la relación de equivalencia

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

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

$$\Lambda_k = \{\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_N) \in \mathbb{R}^N \mid \min_i \{x_i\} > k\}. \quad (47)$$

Teorema 7 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 $x_0 \geq k + \frac{\log N}{t}$.

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 6, existen valores x_2, x_3, \dots, 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.

Definición 6 Consideremos un número real k . Definamos el conjunto T_k como

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

donde P es el plano

$$P = \{(x_1, x_2, \dots, x_N) | x_1 + x_2 + \dots + x_N = A\}. \quad (48)$$

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 *sui-generis* de las superficies de nivel y el papel que juega el parámetro t para obtener mallas convexas.

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 nivel 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 $t \rightarrow \infty$, 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 13).

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 condición: “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 se ha motivado.

Teorema 8 Si el punto $\mathbf{x}_0 = (x_{01}, x_{02}, \dots, x_{0N})^T \in \Lambda_k \cap P$ y si $k < A/N$ entonces 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 .

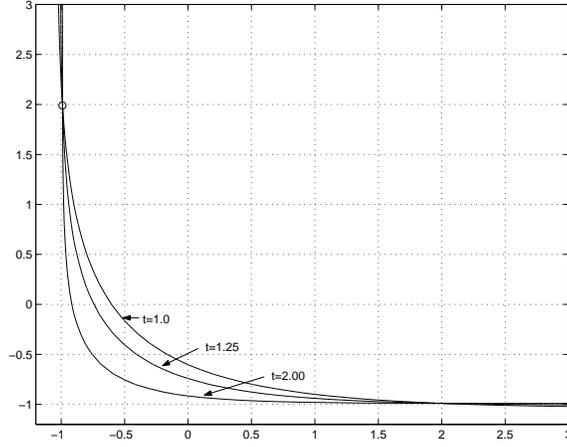


Figura 13: Algunas curvas de nivel para F_t .

Demostración La primera observación es que a partir de los teoremas anteriores, se obtiene una condición para determinar t , a saber

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

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

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

de donde se sigue

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

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 $F_t(\mathbf{x}_0)$

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

de donde

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

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 $t \rightarrow \infty$ obtenemos

$$x_-^0 \leq \lim_{t \rightarrow \infty} \left(-\frac{\log(F_t(\mathbf{x}_0))}{t} \right) \leq \frac{A}{N}$$

es decir,

$$k < x_-^0 \leq \lim_{t \rightarrow \infty} \left(-\frac{\log(F_t(\mathbf{x}_0))}{t} \right)$$

por lo que para t suficientemente grande tal que

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

se sigue la afirmación del teorema. \square

Ahora analicemos en el conjunto

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

que representa la intersección del plano P con el conjunto de nivel $F_t \leq a$. Veamos un ejemplo para observar 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

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

Observemos de la Figura 14 que el conjunto L_a es convexo, acotado y homeomorfo a la bola unitaria.

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

Teorema 9 Sea

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

donde $f(x)$ es una función continua, estrictamente decreciente, convexa y positiva. Sean $t > 0$, $A > 0$ y P la expresión (48). Entonces para toda $a \geq Nf(\frac{tA}{N})$, los conjuntos

$$L_a = \{\mathbf{x} \in P | a \geq H_t(\mathbf{x})\} \quad (49)$$

satisfacen las siguientes propiedades:

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

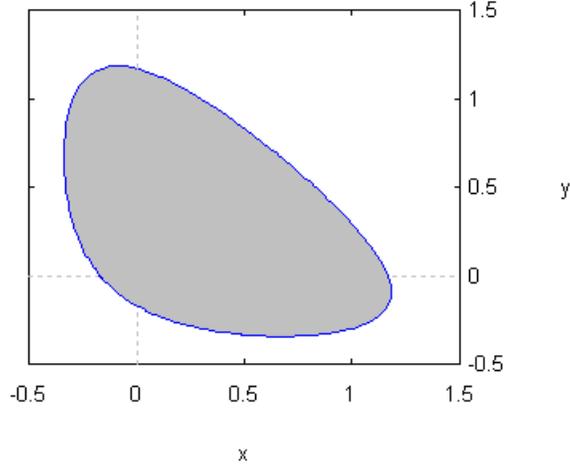


Figura 14: Conjunto $F_t(x, y)$.

- 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 ([37]). Este resultado nos permite obtener mallas convexas por medio de este funcional, si sobre Ω puede construirse una.

En la Figura 15 se muestran los conjuntos L_a que pasan por el punto \mathbf{x}_0 para distintos valores de t .

9.9. 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 conjunto

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

para $k < A/N$. Los conjuntos M_k son equivalentes a los conjuntos D_k , claramente, $D_{-k} = M_k$. Observemos que $G \in M_k$ sí y solo si $\varphi(G) \in \Lambda_k$.

Teorema 10 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

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

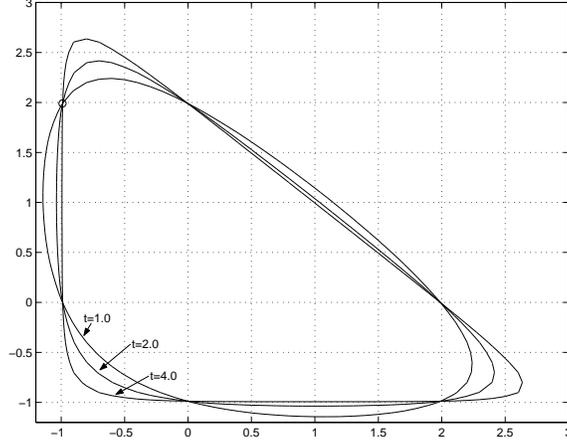


Figura 15: Conjuntos L_a .

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

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

está completamente contenido en T_0 .

De la definición de $L_{F_t(\mathcal{G})}$, se sigue que $\forall \mathbf{x} \in P \setminus L_{F_t(\mathcal{G})}$

$$F_t(\mathbf{x}) > F_t(\mathcal{G}) \quad (50)$$

y consecuencia de la propiedad 3 del lema 9, $\forall \mathbf{x} \in L_{F_t(\mathcal{G})}$ se cumple

$$F_t(\mathbf{x}) \leq F_t(\mathcal{G}). \quad (51)$$

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 (50) y (51) implican que

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

en otras palabras tenemos

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

Notemos que el valor de k sirve solamente para definir el conjunto en donde resolvemos el problema de optimización.

El teorema anterior, indica que existe un valor de t a partir del cual el funcional F_t tiene una malla óptima convexa. Este resultado nos permite usar este funcional para construir mallas convexas en combinación

con otros funcionales como longitud y ortogonalidad para garantizar las propiedades geométricas de la combinación.

Por otra parte, resolver el problema de optimización puede hacerse de una manera robusta, es posible partir de una condición inicial dada por una malla arbitraria. No obstante, hay que proceder de manera cuidadosa al implementarlo, ya que la función exponencial crece rápidamente y si t crece indiscriminadamente podríamos obtener un *overflow*.

En consecuencia, podemos emplear el siguiente algoritmo:

Algoritmo

1. Tomar un valor inicial para t .
2. Generar una malla inicial.
3. Resolver el problema de optimización

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

con

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

4. Si $\alpha_-(\hat{G}) > 0$, obtenemos una malla convexa y el proceso ha terminado; de lo contrario multiplicamos t por un factor $\tau > 1$ y regresamos al paso 3 con \hat{G} como la malla inicial.

Observemos que el factor τ y el valor inicial de t en el algoritmo son arbitrarios. Pueden ser elegidos sin relación a un valor específico de k , es decir, independientemente del grado de convexidad de la malla.

Hemos de hacer notar que los resultados obtenidos para este funcional escalado de área se basan en tres ideas fundamentales de la función $f = f(x)$

- Convexa.
- Estrictamente decreciente.
- Positiva.

Por lo tanto, de lo hasta aquí visto, se obtienen los siguientes teoremas en forma general.

Teorema 11 *Sea $u > 0$ y f una función continua, convexa, positiva y estrictamente decreciente. Entonces, existe un punto $\mathbf{z} = (z_1, \dots, z_m) \in \mathbb{R}^m$ 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 $1 \leq i \leq m$, así

$$\begin{aligned} F(\mathbf{z}) &= mf(c) \\ &= u. \end{aligned}$$

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 12 Sean z, k números reales, f una función continua, convexa, positiva y estrictamente decreciente, $\Lambda_k = \{(x_1, \dots, x_N) \mid \min_{1 \leq i \leq N} \{x_i\} > k\}$ 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 $z \geq f^{-1}\left(\frac{1}{N}f(k)\right)$.

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 11 si $Nf(z) > f(k)$, esto es

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

A partir del teorema 12 el significado de t es geoméricamente 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.

El significado geométrico de 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 16).

Teorema 13 Sean f con las hipótesis del teorema 12, F dada por

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

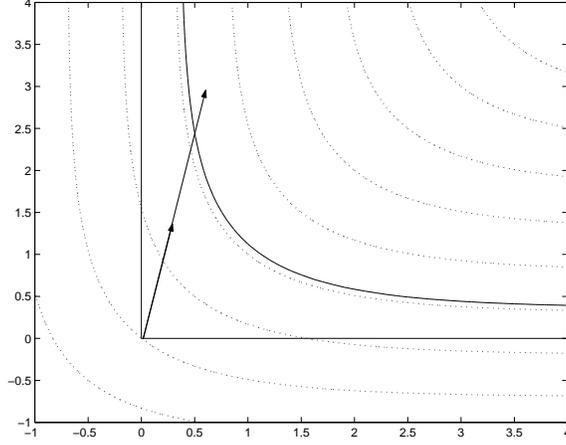


Figura 16: Significado geométrico de t .

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 11 y 12, se sigue que la superficie de nivel de G_0 es una superficie contenida en el primer hipercuadrante, si se satisface

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

que es equivalente a pedir

$$F(t\varphi(G_0)) \leq f(0). \quad (52)$$

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

$$Nf(t\alpha_{\underline{}}(G_0)) \leq f(0),$$

la afirmación del teorema se sigue inmediatamente. Por lo tanto, para satisfacer la expresión (52) sólo hay que elegir t tal que

$$t \geq \frac{1}{\alpha_{\underline{}}(G_0)} f^{-1}\left(\frac{1}{N}f(0)\right). \quad \square \quad (53)$$

Es interesante observar que el conjunto de mallas convexas que podemos alcanzar depende continuamente de t debido a la continuidad del funcional F sustentado en el teorema 11.

Los teoremas 9 y 13 nos proporcionan el resultado deseado. De hecho, indican que tenemos una gran libertad para diseñar funcionales para generar mallas convexas. Con todo, hemos extendido y comprendido con

mayor claridad las propiedades de los funcionales de área, lo cual nos permite proponer una colección de funcionales muy sencillos de implantar.

Con estos resultados, un funcional escalado de área que propusimos, es el siguiente

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

El valor inicial para t que consideró tomado igual a la unidad y para el crecimiento de t , consideró $\tau = 2$. Este funcional opera muy rápido, y para pocas actualizaciones de t se logran mallas convexas.

Este funcional es muy sencillo, e ingenioso, cumple con las características enunciadas en los 3 últimos teoremas, es un funcional de área que nos conduce a mallas convexas sobre $M(\Omega)$. Podemos observar que se trata de una “regularización” global del funcional inverso de área. Esta idea de regularización puede ser extendida de manera inmediata al funcional de suavidad.

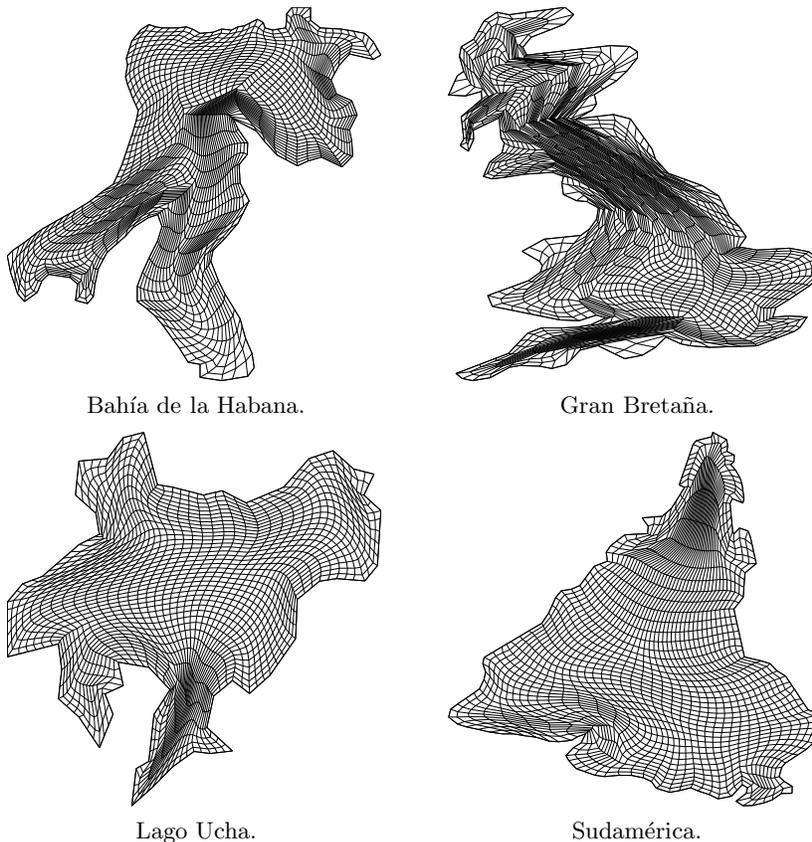


Figura 17: Mallas generadas con el funcional F_t .

10. Funcional positivo escalado de Área

La penalización del área, en términos de α , ha estado presente en casi todos los funcionales que hemos estudiado, ya sea para no permitir una desviación grande con respecto al área promedio, o bien para no permitir triángulos con área negativa para de esta manera, la condición de convexidad vaya implícita en la formulación de los funcionales y nuestro problema de optimización resulte sin restricciones.

El trabajo central de Mota propone trabajar con funcionales de área

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

con la propiedad de que $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ sea una función

- convexa,
- estrictamente decreciente y
- positiva

para entonces, de existir una malla convexa, a través de un proceso de optimización lograr una con este funcional. La propiedad de que f sea convexa y estrictamente decreciente, permite al optimizador lograr ese óptimo, y desde luego, al ser positiva y acotada por abajo, aproximarnos al punto crítico que representa un mínimo.

Relajemos la propiedad de ser estrictamente decreciente la función, consideremos funciones que sean, convexas, decrecientes y no negativas.

Antes de pasar a señalar las propiedades que se conservan, observemos una función interesante.

Uno de los funcionales que estudiamos fue, el de área promedio

$$F_{Ap}(G) = \sum_{q=1}^N (\alpha - 1)^2$$

considerando mallas G escaladas a $\bar{\alpha} = 1$. Este funcional penaliza las desviaciones de α con respecto al promedio, es convexo y positivo, pero no es estrictamente decreciente. Consideremos el funcional en la forma

$$F_{Ap+}(G) = \sum_{q=1}^N (\alpha - 1)_+^2$$

donde

$$(\alpha - 1)_+^2 = \left\{ \begin{array}{ll} (\alpha - 1)^2 & \text{si } \alpha \leq 1 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{array} \right\}$$

este funcional es positivo y únicamente opera sobre los triángulos para los cuales α esté por debajo del promedio esperado. Este funcional es del tipo de los funcionales de área de Mota restringido a los triángulos de las mallas por debajo del promedio.

Este proceso lo podemos ver como optimizar una sub-malla de G para la cual los triángulos tengan α por debajo del promedio global. Este es un

funcional de área que nos debe conducir a una malla convexa de existir ésta.

Sin embargo, no penaliza lo suficiente a los triángulos por debajo del promedio por lo que el proceso de optimización por los métodos cuasi-newton puede tornarse muy lento

Ahora, bien, consideremos la funcional

$$F_{Ape}(G) = \sum_{q=1}^N (\alpha - 1)_+^2 \exp(-t\alpha) \quad (54)$$

Este funcional penaliza a los triángulos por debajo del promedio esperado. Veamos algunos resultados de una generalización de este funcional

Sean $\hat{\alpha} > 0$, dado y $t > 0$. Definamos la función

$$\mathcal{P}(x) = e^{-tx} (x - \hat{\alpha})_+^2 \quad (55)$$

donde

$$(x - \hat{\alpha})_+^2 = \begin{cases} (x - \hat{\alpha})^2 & x \leq \hat{\alpha} \\ 0 & x > \hat{\alpha}. \end{cases}$$

La función \mathcal{P} nos permite, de manera análoga a los desarrollos presentados previamente, escribir un funcional de área para generar mallas convexas, aquí penalizamos los triángulos con $\alpha < \hat{\alpha}$

Teorema 14 Sean $u \geq 0$, $\tau > 0$. Existe $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N)^T \in \mathbb{R}^n$ tal que

$$Y(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N \mathcal{P}(x_i) = u.$$

Demostración:

Tomemos $x_i = x_1$, $i = 1, \dots, N$. Entonces

$$Y(\mathbf{x}) = N e^{-tx_1} (x_1 - \hat{\alpha})_+^2.$$

Si $u = 0$, elegimos $x_1 = \hat{\alpha}$. Para $u > 0$, el resultado se sigue del hecho que $\mathcal{P}(x)$ no está acotada a medida que $x \rightarrow -\infty$. \square

Teorema 15 Sean $\hat{\alpha} > k > 0$, y $\hat{x}_i > k$, $i = 1, \dots, N$. Entonces, para un valor de $t > 0$ suficientemente grande, la superficie de nivel del punto $\mathbf{x}_0 = (\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_N)$ definida por el funcional $Y(\mathbf{x}) = \sum \mathcal{P}(x_i)$ se encuentra completamente contenida en el primer hipercuadrante de \mathbb{R}^N .

Demostración:

La superficie de nivel del punto \mathbf{x}_0 queda completamente contenida dentro de Λ_k si

$$Y(\mathbf{x}_0) \leq \mathcal{P}(k),$$

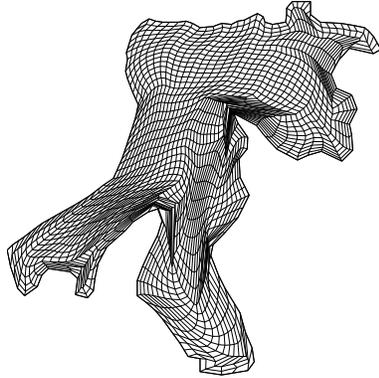
o en otras palabras

$$\sum_{i=1}^N e^{-t(\hat{x}_i + k)} (\hat{x}_i - \hat{\alpha})_+^2 \leq (k - \hat{\alpha})_+^2.$$

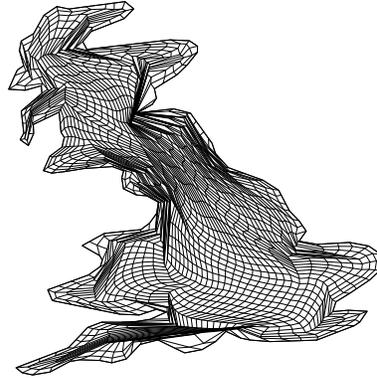
Dado que $\hat{x}_i > k$, $i = 1, \dots, N$, la expresión anterior implica que una condición suficiente para garantizar la conclusión del teorema es que

$$e^{-2tk} \sum_{i=1}^N (\hat{x}_i - \tau)_+^2 \leq (k - \hat{\alpha})_+^2,$$

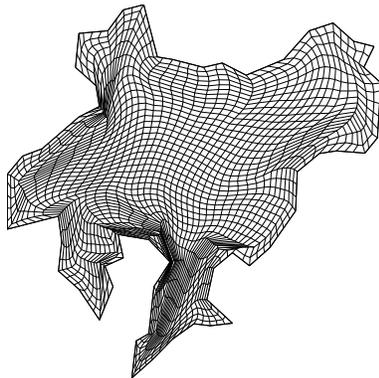
lo cual evidentemente puede ser satisfecho para un valor de t suficientemente grande. \square



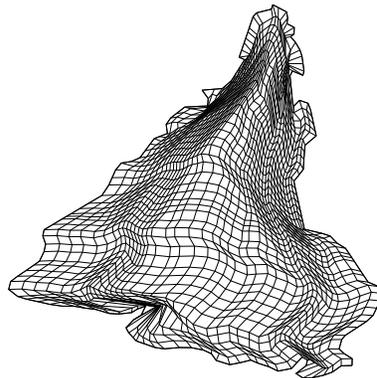
Bahía de la Habana.



Gran Bretaña.



Lago Ucha.



Sudamérica.

Figura 18: Mallas generadas con el funcional de Area positivo escalado.

11. Conclusiones

En este documento, se han descrito los funcionales de área que hemos desarrollado en los últimos años, así como la idea detrás de cada uno que le dió origen; también, se han presentado los detalles técnicos de su implantación en un sistema automático.

El funcional positivo escalado de área, último descrito, tiene la ventaja, sobre los anteriores, que únicamente afecta sub-regiones de la malla

donde llevar a cabo el procedimiento de optimización. Si se pudiera detectar de manera dinámica esas regiones, podríamos enfocar el esfuerzo del optimizador de manera que se centrara en ellas, no tomando en cuenta a las otras sub-regiones. Esto reduciría considerablemente el costo de cómputo y tiempo para obtener una malla convexa sobre la región de estudio.

Para fines prácticos, se recomienda combinar los funcionales de área con el de longitud, a fin de que la malla a obtener, cuente con un grado de suavidad en las líneas curvilíneas y sea de utilidad sobre aplicaciones concretas.

Los funcionales aquí descritos se encuentran implantados en el sistema **Unamalla** que puede ser obtenido de manera gratuita a través de la página `tycho.fciencias.unam.mx\unamalla`.

Referencias

- [1] Barrera, P. and J.E. Castillo. 1987. *A Large Scale Optimization problem arising from Numerical Grid Generation*, Tech. Rep. Dept. of Math. and Stat. Univ. of New Mexico.
- [2] Barrera, P. y Pérez, A. 1988. *Numerical Grid Generation* presentado en el III Congreso de la Sociedad Cubana de Matemáticas.
- [3] Barrera, P., Castellanos, N. and Pérez, A. 1989. *A New Method for Grid Generation*, 4th Workshop of Numerical Analysis, Mérida, Yuc.
- [4] Barrera, P., Castellanos, N. and Pérez, A. 1993. *Curvilinear Coordinate System Generation over Plane Irregular Regions*, Vínculos Matemáticos No. 133. Dept. de Matemáticas, Facultad de Ciencias, UNAM, México.
- [5] Barrera, P., Castellanos, L., y Pérez, A. 1994. *Métodos Variacionales Discretos para la Generación de Mallas*, DGAPA-UNAM, México.
- [6] Barrera, P., González, G., Rivera, A. y Ugalde, I. 1995. *Generación de Mallas en Regiones Planas Irregulares Usando Métodos Variacionales Continuos*, artículo auspiciado por el proyecto Triangulaciones Óptimas, No. IN103594, DGAPA, UNAM.
- [7] Barrera, P. and Tinoco J.G. 1997. *Smooth and Convex Grid Generation over General Plane regions* in Mathematics and Computer in Simulation.
- [8] Barrera, P., García, I. y González, G. 2000. *Manual Operativo del Sistema UNAMALLA v. 2.0 para PC*, Cuadernos de Investigación, 21 Área I, Física-Matemáticas e Ingeniería, Universidad Autónoma de Coahuila, México.
- [9] Barrera, P., Domínguez-Mota, F. and González, G. 2002. *Some experiences on orthogonal grid generation*, App. Num. Maths. 40, pp. 179–190.
- [10] Barrera, P., Domínguez-Mota, F. and González, G. 2003. *Robust Grid Generation on Plane Irregular Regions*, Comp. Maths. Math. Phys. 46, No. 6. pp. 845–853.

- [11] Birkhoff, G., and Lynch, R.E. 1984. *Numerical Solution of Elliptic Problems*, SIAM, Philadelphia.
- [12] Brackbill, J.U., and Saltzman, J.S. 1982. *Application on Generalizations of Variational Methods for Generating Adaptive Meshes*, in *Numerical Grid Generation*, J.F. Thompson, ed. North-Holland, New York, 865–884.
- [13] Castellanos, J.L. *Generación Numérica de Redes usando Newton Truncado*. Tesis Doctoral, ICIMA, Ministerio de la Ciencia, Tecnología y el Medio Ambiente. La Habana, Cuba, 1994.
- [14] Castillo, J.E., 1986. *Mathematical Aspects of Numerical Grid Generation I*. on *Numerical Grid Generation in Computational Fluid Dynamics*. J.Hauser and C. Taylor eds., pp. 35–43.
- [15] Castillo, J.E., 1987. *On Variational Grid Generation*. Ph.D. thesis, University of Mexico, Alburquerque, New Mexico.
- [16] Castillo, J.E., Steinberg, S., and Roach, P.J. 1997. *Mathematical aspects of variational grid generation II*. *J. Comp. and Appl. Math.* **20**, pp. 127–135.
- [17] Castillo, J.E., 1991. *Discrete Variational Grid Generation* in *Mathematical aspects on Numerical grid generation*. J.E. Castillo, ed. SIAM Press, pp. 35–58.
- [18] Dembo, R.S., and Steihaug, T. 1983. *Truncated Newton Algorithms for Large-Scale Unconstrained Optimization*, *Math. Prog.*, **26**, pp. 190–212.
- [19] Domínguez-Mota, F. 2004. *Sobre la generación variacional de mallas casi ortogonales en el plano*. Tesis Doctoral. Facultad de Ciencias, UNAM, México.
- [20] Eiseman, P.R. 1982. *Numerical Grid Generation*, in *Numerical Grid Generation*, J.F. Thompson, ed., North-Holland, New York, pp. 193–226.
- [21] Fletcher, R. 1980. *Practical Methods of Optimization 1: Unconstrained Optimization*, John Wiley, New York.
- [22] Forsythe, G.E., and Wasow, W.R. *Finite Difference Methods for Partial Differential Equations*, Wiley, New York.
- [23] Gelfand, I.M. and Fomin, S.V. 1963. *Calculus of Variations*, Prentices–Hall, Englewood, Cliffs, N.J.
- [24] García, I.D., 1999. *Métodos de Optimización de Gran Escala y algunas aplicaciones a Funciones Parcialmente Separables*. Tesis de Maestría, Facultad de Ciencias, UNAM, México.
- [25] González Flores, G.F., 1994. *Generación de Mallas en Regiones Planas Irregulares*. Tesis de Licenciatura. Universidad Autónoma de Yucatán, México. 1994.
- [26] González Flores, G.F. , 2003, *Un Sistema Automático para la Generación Numérica de Mallas basado en los Nuevos Funcionales de Área y Suavida*. Tesis de Maestría, Facultad de Ciencias, UNAM.

- [27] Hardy, G., Littlewood, J.E. y Pólya, G. 1934. *Inequalities*. Cambridge University Press.
- [28] Ivanenko, S.A., and Charkhch'yan, A.A., 1998. *Curvilinear Grids of Convex Aquadrilaterals*, J. Comp. Physics.
- [29] Ivanenko, S.A. *Adaptive-harmonic grid generation and its application for numerical solution of the problems with boundary and interior layers*, Comput. Math. Math. Phys., **35**(10), pp. 1203-1220.
- [30] Ivanenko, S.A., 1999. *Harmonic maps in Handbook of Grid Generation*, CRC Press Inc. 8.1–8.43.
- [31] Knupp, P., 1992. *A Robust Elliptic Grid Generator*. J. Comp. Phys. **100**, 409–418.
- [32] Knupp, P. and Steinberg, S. 1993. *Fundamentals of Grid Generation*. CRC Press, Inc.
- [33] Liao, G. 1991. On harmonic maps. In *Mathematical Aspects of Numerical Grid Generation*, J.E. Castillo, ed. SIAM, Philadelphia.
- [34] Liao, G. 1992. *Variational approach to grid generation*. Num. P.D.E's, **8**, pp. 143-147.
- [35] Mastin, C.W., and Thompson, J.F. 1978. *Elliptic Systems and Numerical Transformations*. J. Math. Anal. App., 62, pp. 52–62.
- [36] Mastin, C.W., 1982. *Error Induced by Coordinate System on Numerical Grid Generation*. J.F. Thompson, ed., pp. 31–40. North Holland, New York.
- [37] Milnor, J., 1969. *Morse Theory*. Princeton University Press.
- [38] Moré, J.J. and Thuente D.J. 1990. *On line search algorithms with guaranteed sufficient decrease*. Math. and Computer Science Division Preprint MCS-P153-0590, Argonne National Laboratory, Argonne, Ill. USA.
- [39] Moretti, G. 1980. *Grid Generation using classical techniques*. on *Numerical Grid Generation Techniques*. R.E. Smith. ed., pp. 1–35. NASA CP 2166, NASA Langley Research Center, Hampton VA.
- [40] Ojeda, R.B. 1991. *Métodos Directos para la Generación de Redes en Regiones Planas*, Tesis de Maestría, Facultad de Ciencias, UNAM, México.
- [41] Smith, R.E. 1982. *Algebraic Grid Generation on Numerical Grid Generation*, J.F. Thompson, ed., pp. 137–170. North Holland. New York.
- [42] Soni, B.K., Thompson, J.F. and Weatherbill, N.P. 1999. *Handbook of Grid generation*, CRC Press, Inc.
- [43] Steinberg, S., and Roache, P.J., 1986. *Variational Grid Generation*, Num. Meth. for P.D.E.s., **2**, 71–96.
- [44] Steinberg, S., and Roache, P.J., 1990. *Anomalies in Grid Generation on Curves*, J. Comp. Physics, **91**, 255–277.
- [45] Steinberg, S., and Roache, P.J., 1992. *Variational Curve and Surface Grid Generation*, J. Comp. Phys., **100**, 163–178.

- [46] Spekrijse, S.P., [1999]. *Elliptic Generation Systems in Handbook of Grid Generation*, Thompson, J.F., Soni, B.K. and Weatherill N.P. eds., CRC Press, Inc., 4.1–4.49.
- [47] Owen, S. *A survey of Unstructured Mesh Generation Technology*, Department of Civil and Environmental Engineering, Ansys, Inc. <http://www.andrew.cmu.edu/sowen/survey>.
- [48] Thompson, J.E., Warsi, Z.U.A., and Mastin, C.W., *Numerical Grid Generation: Foundations and Applications*, Elsevier, New York.
- [49] Tinoco, J.G. 1997. *Funcionales Discretos para la Generación de Mallas Suaves y Convexas sobre Regiones Planas Irregulares*, Tesis de Doctorado, CIMAT, México.
- [50] Tinoco, J.G. and Barrera, P. 1998. *Area functionals in plane Grid Generation in International conference on Numerical Grid Generation in Computational Field Simulation*. International Society of Grid Generation.
- [51] Tinoco, J.G., Barrera, P. and Cortés, A. 2001. *Some properties of Area in Numerical Grid Generation* Proceedings, 10th International Meshing Roundtable, Sandia National Laboratories, pp. 43-54, October 7-10.
- [52] Toledo, F. 1995. *Métodos Numéricos para Mapeo Conforme con Aplicación a la generación de Mallas*. Tesis de Maestría. Facultad de Ciencias, UNAM, México.
- [53] Van Vliet, H. *Software Engineering: Principles and practice*. John Wiley & Sons, England.
- [54] Winslow, Z.U.A., 1967. *Numerical Solution of the quasilinear poisson equations in a nonuniform triangle mesh*, J. Comput. Phys., **2**, pp. 149–172.
- [55] Warzi, Z.U.A., 1982. *Basic Differential Models for Coordinate Generation on Numerical Grid Generation*. J.F. Thompson, ed., pp. 41–78. North Holland.