

GENERACIÓN DE MALLAS TRIDIMENSIONALES POR MÉTODOS DUALES

por

Nestor Alberto Calvo

Director: Sergio Rodolfo Idelsohn

Tesis remitida al Comité Académico del Doctorado en Ingeniería

de la

FACULTAD DE INGENIERÍA Y CIENCIAS HÍDRICAS

Como parte de los requisitos para la obtención

del grado de

DOCTOR EN INGENIERÍA

Mención Mecánica Computacional

de la

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL

2005

AGRADECIMIENTO Y DEDICATORIA

Todos los temas tratados en esta tesis han sido desarrollados en un ambiente de generosa colaboración académica. Sin los que me enseñaron no habría podido hacer nada, pero tampoco sin la valiosa ayuda del resto de mis compañeros, quienes me dan y quienes a la vez me exigen, sean jefes o sean pinches. El CIMEC ha logrado construir un ambiente de trabajo cuya calidad humana está tan desarrollada como la científica. No puedo menos que resaltar la generosidad puesta de manifiesto por quienes, en medio de sus propios apuros, te brindan su tiempo para enseñarte, para discutir o tan solo para escucharte. Me siento orgulloso de ser parte de semejante equipo y agradezco de corazón a todos los que ayudan constantemente para que resulte gratificante trabajar en el CIMEC.

Por eso es que les dedico esta tesis a ellos

A mis compañeros de laburo.

RESUMEN

En esta tesis se presentan algunos desarrollos implementados para construir mallas poliédricas por métodos duales. La dualidad entre una malla construida mediante la Triangulación de Delaunay y la estructura geométrica provista por el Diagrama de Voronoï de sus nodos se explota y se generaliza en dos direcciones distintas. Una de ellas conduce a una teselación de excelente calidad con Poliedros Esféricos, éstos son poliedros que tienen sus nodos en las cercanías de una superficie esférica y cuya unión es una malla que se aproxima al dual geométrico y topológico del Diagrama de Voronoï. Para utilizar estas poliedrizaciones, tanto en el Método de Elementos Finitos como en Métodos de Partículas, se implementaron y se explican aquí las Coordenadas Laplacianas Elementales utilizadas como funciones de forma para la interpolación. Para problemas que incluyen una superficie libre se desarrollo una variante del método de *Alpha-Shapes*, modificado para reconocer la superficie libre de una distribución de puntos con densidad variable, tal como la requieren estos métodos de cálculo. La otra dirección hacia la cual se extendió el concepto de dualidad consiste en un análisis de la dualidad entre las mallas de hexaedros y un conjunto de superficies mutuamente interceptadas. Dicho análisis se aprovechó para desarrollar algoritmos útiles para la generación de mallas de hexaedros. Para completar el desarrollo se implementaron y describen aquí, algunos métodos y rutinas de tratamiento de las mallas de frontera y los mecanismos de optimización de la calidad de dichas mallas.

ABSTRACT

This thesis is about some implemented developments for building polyhedral meshes by means of dual methods. The duality between a mesh built by the Delaunay Triangulation and the geometric structure provided by the Voronoï Diagram made from their nodes is exploited and generalized in two different ways. One of them leads to an excellent quality tessellation by Spherical Polyhedra, those are polyhedra having their nodes near a spherical surface, and whose union makes a mesh approximating the geometric and topological dual of the Voronoï Diagram. In order to use those polyhedra into the Finite Element Method as well as into Particle Methods, the Elemental Laplace Coordinates were implemented and they are also explained here. For problems having a free surface, a variant of the Alpha-Shapes method was developed, modified in order to recognize the free surface over a variable density point distribution, as this is required by those methods. The other direction, over which the dual concept was extended, is the analysis of the duality between all-hexahedral meshes and a set of mutually intersecting surfaces. From such analysis, some algorithms were made, useful for the process of generating all-hexahedral meshes. In order to complete this development, the process of boundary mesh treatment and the quality optimization methods for such meshes were developed and are also described herein.

TABLA DE CONTENÍDOS

Tabla de Contenidos	i
Tabla de Ilustraciones	iii
Índice de Definiciones	v
1 Introducción	1
1.1 Justificación	8
2 Conceptos Preliminares	10
2.1 Contenedores	10
2.2 Poliedrización y Malla - Conformidad	11
2.3 Circunfera y Mediatrices	11
2.3.1 Cálculo de la Esfera	13
3 Diagrama de Voronoï y Triangulación Delaunay	14
3.1 Diagrama de Voronoï	14
3.2 Triangulación Delaunay – Dualidad	16
3.3 Entorno Natural y Cavidad de un punto	18
3.4 Continuidad	21
3.5 Slivers y Caps	22
3.6 Implementación de la Triangulación Delaunay	23
3.6.1 Tetraedro Virtual	24
3.6.2 Cavidad del nuevo nodo	25
3.6.2.1 Primera Esfera y Costo del Algoritmo	25
3.6.2.2 Posición de un Nodo respecto de una Esfera	28
3.6.2.3 Frontera de la Cavidad y Formación de <i>Slivers</i>	29
3.6.3 Limpieza final	31
4 Poliedros Esféricos y Teselación Delaunay Extendida	32
4.1 Concavidad de los poliedros	35
5 Reconocimiento de la Frontera – <i>Alpha-Shapes</i>	38
6 Medida de la Calidad para elementos Poliédricos	42
7 Coordenadas Laplacianas Elementales	44
7.1 Interpolación - Funciones de Forma	44
7.2 Coordenadas Laplacianas	45
7.3 Propiedades	46
7.4 Cálculo de las Funciones y sus Derivadas	48
7.5 Coordenadas Laplacianas Elementales	51
7.5.1 Continuidad entre elementos	53
7.5.2 Coordenadas Locales	55
7.6 Problemas y alternativas en el cálculo de las funciones de forma	56
8 Generación de Nodos	61
8.1 Malla de Frontera	61
8.1.1 Orientación de la Frontera	63
8.1.2 Normales	64
8.1.3 Función de Distribución (h) de los nodos	65
8.2 Triangulación Inicial	67
8.3 Identificación del Interior del Dominio	68
8.4 Generación de Nodos	74
8.5 Limpieza final y Poliedrización	75

9 Topología de las Mallas de Cuadriláteros y Hexaedros	77
9.1 Construcción dual de una malla de cuadriláteros en el plano	77
9.2 Construcción dual de una malla de hexaedros	78
9.3 Análisis de la Dualidad en Mallas de Hexaedros	80
9.4 Conformidad y Unicidad de la Malla y el Dual	82
9.5 Propiedades de la Malla de Frontera.	84
10 Generación de hexaedros a partir del dual	87
10.1 Generación de una malla de poliedros duales	87
10.2 Trazado de superficies con frontera libre	87
10.2.1 Manipulación de líneas y superficies internas	88
10.3 Trazado de superficies con frontera mallada	91
10.3.1 Autointersecciones	95
10.3.1.1 Resolución interior de los autocruces	96
10.3.1.2 Resolución de los autocruces en la frontera	97
10.3.1.2.1 Intercambio de extremos positivo y negativo	97
10.3.1.2.2 Diagrama Circular	98
10.3.1.2.3 Resguardo de las Aristas Geométricas	101
11 Suavizado de mallas de hexaedros	103
11.1 Preposicionamiento	103
11.2 Suavizado	104
11.2.1 Métrica de la ortogonalidad	106
11.2.2 Métrica combinada	108
11.3 Influencia de los nodos adyacentes	112
11.4 Estrategia de optimización	113
11.5 Corrección del tamaño de elementos y refinamiento	115
Referencias	119

TABLA DE ILUSTRACIONES

Figura 1: <i>Bounding-Box</i> , Contenedor Esférico y <i>Convex-Hull</i> _____	10
Figura 2: Circunferas y Mediatrices. _____	12
Figura 3: Intersección de las esferas de dos tetraedros vecinos. _____	12
Figura 4: Definición de una circunferencia por tres puntos. _____	13
Figura 5: Diagrama de Voronoï, Esferas Vacías y Triangulación Delaunay. _____	14
Figura 6: Esferas Vacías Maximales en el Diagrama de Voronoï. _____	15
Figura 7: Conos con vértice en los nodos. _____	15
Figura 8: El Diagrama de Voronoï en la naturaleza. _____	16
Figura 9: Dualidad entre la Triangulación Delaunay y el Diagrama de Voronoï _____	17
Figura 10: Entorno Natural y Cavidad de un punto _____	18
Figura 11: Esfera del nodo más cercano y que contiene a un punto. _____	19
Figura 12: Cubrimiento de la Celda de Voronoï. _____	20
Figura 13: Intercambio de Diagonales en la Triangulación Delaunay. _____	21
Figura 14: Discontinuidad de la Triangulación Delaunay en 3D: Cara \leftrightarrow Arista _____	22
Figura 15: Deformación y Circunferas de <i>Slivers</i> y <i>Caps</i> . _____	22
Figura 16: Tetraedro Virtual, contenedor esférico y esferas problemáticas. _____	24
Figura 17: Cavidad de un punto con muchas esferas que lo contienen. _____	26
Figura 18: Zona donde un nuevo nodo producirá un <i>sliver</i> . _____	30
Figura 19: Cavidad de un punto prácticamente cocircular con una cara. _____	30
Figura 20: DT vs. EDT en una distribución cúbica de nodos. _____	32
Figura 21: Formación de un Poliedro Esférico y asignación de la Esfera Media. _____	32
Figura 22: Serie de poliedrizaciones con δ variable. _____	33
Figura 23: Proporción entre triángulos y polígonos para $\delta=0.1$ y $\delta=0.8$. _____	34
Figura 24: Concavidad formada al unir dos tetraedros _____	35
Figura 25: Concavidad muy pronunciada _____	36
Figura 26: Ángulo Diedro entre dos caras de un tetraedro _____	37
Figura 27: Fronteras posibles de una nube de puntos. _____	38
Figura 28: Burbujas en al <i>Alpha-Shape</i> de un proceso de mezcla. _____	39
Figura 29: Superficie libre sobre una distribución de densidad variable. _____	40
Figura 30: Diagrama de Voronoï ampliado con la celda del punto variable. _____	46
Figura 31: Secuencia de aproximación del punto móvil a un nodo. _____	47
Figura 32: Teorema de Minkowski sobre la Celda del punto de cálculo _____	48
Figura 33: Elementos para el cálculo de las Coordenadas Laplacianas _____	49
Figura 34: Función de Forma y sus derivadas en un pentágono. _____	50
Figura 35: Imposibilidad de utilizar un <i>master</i> para cada tipo de elemento. _____	51
Figura 36: Función de Forma del nodo central en una disposición cuadrada. _____	52
Figura 37: Coordenada Laplaciana Elemental en un Poliedro Esférico. _____	52
Figura 38: CLE del nodo común a tres polígonos circulares distintos. _____	54
Figura 39: Secuencia de Centros formando un polígono invertido _____	56
Figura 40: Punto variable saliendo de la intersección de las esferas _____	57
Figura 41: Punto de cálculo cerca del plano de una cara _____	58
Figura 42: Punto de cálculo cerca del plano de una cara. _____	58
Figura 43: Función de Forma en un cuadrilátero no circular. _____	60
Figura 44: El nodo mas alejado del origen pertenece a la frontera exterior. _____	62
Figura 45: Aristas del nodo con coordenada x máxima. _____	63
Figura 46: Error de la dirección promedio, ponderada por áreas. _____	64
Figura 47: Error al promediar normales _____	65
Figura 48: Mallas de frontera y de h alrededor de un vehículo. _____	66
Figura 49: Malla inicial de los nodos de frontera y de h . _____	67

Figura 50: Caras de frontera original cruzadas respecto de los tetraedros Delaunay.	68
Figura 51: Elementos de difícil discriminación.	70
Figura 52: Cámara de combustión con grupos de elementos indefinidos.	71
Figura 53: Elementos indefinidos aplastados contra la frontera.	72
Figura 54: Error por <i>slivers</i> apilados.	72
Figura 55 Corte de la malla de frontera	73
Figura 56: Detalle de la frontera resultante.	73
Figura 57: Posible formación de elementos invertidos.	74
Figura 58: Corte de la malla de tetraedros y <i>slivers</i> interiores aislados.	75
Figura 59: Histogramas de distintos índices de calidad	76
Figura 60: Construcción del Dual de una malla plana.	78
Figura 61: Corte de los hexaedros que comparten una arista.	78
Figura 62: Conjunto de hexaedros cortados por una misma superficie.	79
Figura 63: Intersección de dos superficies en una línea dual.	79
Figura 64: Intersección de superficies duales.	80
Figura 65: Distorsión provocada por la valencia de un nodo	82
Figura 66: Dígono	84
Figura 67: Círculo y Autocruce.	85
Figura 68: Superficies duales internas con una autointersección que llega a la frontera.	86
Figura 69: Mallado del interior de una región plana.	87
Figura 70: Algunas limitaciones al libre trazado de las líneas duales.	88
Figura 71: Solución de problemas con un “offset” de la frontera.	89
Figura 72: Reparación por agregado de superficies cerradas.	89
Figura 73: Izquierda: Intercambio de extremos. Derecha: Coalescencia y división.	90
Figura 74: Construcción y destrucción de un cruce.	90
Figura 75: Construcción y destrucción de tres cruces.	90
Figura 76: Subdivisión recurrente y proyección de un casquete en el corte.	93
Figura 77: Línea con muchas autointersecciones.	95
Figura 78: Eliminación de un par consecutivo de autocruces	96
Figura 79: Dos formas de intercambio de extremos en un autocruce.	98
Figura 80: Eliminación de todos los autocruces de una línea.	98
Figura 81: Numeración de autocruces y diagrama circular.	99
Figura 82: Diagrama de una eliminación.	99
Figura 83: Contraejemplo que muestra que el algoritmo voraz no es óptimo.	100
Figura 84: Efecto de la eliminación y métodos de preservación de las aristas.	101
Figura 85: Resultado de la eliminación de autocruces	102
Figura 86: Esquema del preposicionamiento.	103
Figura 87: Nomenclatura de ángulos y vectores en un triedro.	106
Figura 88: Gráfico de j bidimensional	109
Figura 89: Gráfico combinando el Jacobiano negativo y el normalizado positivo.	110
Figura 90: Métrica combinando ortogonalidad, tamaño y relación de aspecto.	111
Figura 91: Isolíneas y algunas posiciones del nodo móvil con la misma calidad.	112
Figura 92: Kernel de los polígonos donde la calidad es positiva.	113

ÍNDICE DE DEFINICIONES

<i>Alpha-Shapes</i>	38	Esfera	11
Arista Geométrica	65, 101	Cálculo	13
Autointersección o Autocruce		Cercanas	33
Cruces Sucesivos	96	Factor de Proximidad (δ)	33
Eliminación Positiva o Negativa	97	Supernumeraria	17, 33
Líneas Duales	77	Vacía	14
Superficies Duales	86	Vacía Maximal	15
<i>Background-Mesh</i>	66	Estrategia de Optimización	114
<i>Bounding-Box</i>	10	Extrusión	5
Calidad	42, 104	Factor de Proximidad de Esferas (δ)	33
Casquete Opuesto a una Cara	12	Frontera	84
Cavidad		Esférica	93
de un Punto	18	Orientación	63
Frontera	29	Pieza Conexa	61
Celda de Voronoï	14	Reconocimiento por <i>Alpha-Shapes</i>	38
Circunfera	11	Función de Distribución (h)	65
Coalescencia	90	Función de Forma	44
Combinación Convexa	45	en Poliedros	52
Conexo	20	Generación de Nodos	61
Conformidad	11, 83	Grilla	4
Contenedor Esférico	10	<i>Handlebody</i>	85
Continuidad		Hexaedro	82
Delaunay vs. Voronoï	21	Inserción Aleatoria	26
<i>Convex-Hull</i>	10	Intercambio de Extremos	90
Coordenada local	44	Interpolación	44
Coordenadas Laplacianas	45	Jacobiano Normalizado	107
Cálculo	48	Kernel	113
Elementales	52	Línea Dual	
Costo de la Triangulación	26	Malla de Cuadriláteros	77
Delta de Kronecker	44	Malla de Hexaedros	79
Destrahe de la Malla	103	<i>Linear Completeness</i>	44
<i>Diagonal Swapping</i>	21	Malla	11
Diagrama Circular	98	Conforme	11, 83
Diagrama de Voronoï	14	de Frontera	84
Diedro	37	Destrahe	103
Dígono	84	Estructurada	4
Distribución		Mínima	116
de Nodos	16	Semiestructurada	4
Degenerada	17	Simplicial	4
General	16	Mediatriz	12
Dualidad	16	<i>Meshless Methods</i>	6
en Mallas de Hexaedros	80	Métrica	
Métrica	81	Combinada	110
Topológica	81	de Distorsión	42
EDT	32	de Ortogonalidad	107
Elemento <i>Master</i> o Patrón	51	Relación de Aspecto	110
Entorno	6	Monógono	88
Natural	18	Multibloques	5

Nodo	10	Refinamiento y Desrefinamiento	116
de h	66	Relación de Aspecto	105
Generación	61	Simplemente Conexo	20
Preposicionamiento	103	Símplice	10
Versor Normal	64	<i>Simulated Annealing</i>	115
Virtual	24, 81	<i>Sliver</i>	
Octree	27	de Frontera	40
<i>Offset</i>	88	Formación	29
Paridad en la Esfera	85	Soporte Local	45
Partición de la unidad	44	Suavizado	103, 104
Perturbación	28	Subdivisión	93
Poliedrización	11	Superficie Dual	78
Poliedro		Teorema de Minkowski	47
Captura	34	Teselación Delaunay Extendida	32
Circular	32	Test del Rayo	68
Complejo	33	Tetraedro Vértice	69
Cóncavo	35, 58	Tetraedro Virtual	24
de Centros	55	Topología	77
de Inserción	25	Triangulación	11
Esférico	17, 32	Delaunay	16
o Politopo	14	<i>Unconstrained</i>	62
Unión	33	Unicidad de Conexión	11, 83
Preposicionamiento de los Nodos	103	Valencia	82
Proyección	93	Vecino Natural	18

1 Introducción

Una malla es básicamente una subdivisión del espacio en celdas poliédricas. Si bien existen muchas aplicaciones, esta tesis trata sobre la generación de mallas para el cálculo numérico de ecuaciones diferenciales en tres dimensiones. El objetivo primario consiste en generar mallas para el Método de Elementos Finitos (FEM), pero los resultados obtenidos se utilizan igualmente para otros métodos de cálculo, que también requieren una poliedrización.

Un problema físico se simula mediante un modelo matemático, generalmente se trata de un sistema de ecuaciones diferenciales que describen la variación de las incógnitas entre distintos puntos del espacio y en el tiempo. En el FEM, las soluciones se calculan en forma aproximada, reemplazando el espacio continuo por un conjunto de poliedros “pegados” entre sí por las caras y que rellenan completamente el dominio; el tiempo también se discretiza en intervalos finitos y se calcula la solución en cada paso. En el interior de un poliedro elemental, las funciones se aproximan mediante un valor interpolado a partir de los que se calcularon en los vértices. Las celdas poliédricas de la malla reciben el nombre de “elementos” y sus vértices se denominan “nodos”. La forma y el tamaño de los elementos se relacionan con el error admisible de la solución aproximada.

En los métodos sin malla o *meshless*, de puntos o de partículas, la discretización del espacio consiste en un conjunto discontinuo y finito de puntos o nodos y las soluciones, en un punto cualquiera del espacio, se interpolan de los valores nodales según distintas técnicas. Siempre se requiere que los nodos más cercanos tengan mayor influencia sobre el valor en el punto, una de esas técnicas describe las relaciones de vecindad entre nodos mediante una poliedrización: el espacio ocupado por los nodos se rellena con poliedros cuyos vértices son los nodos.

La diferencia entre los procesos de poliedrización y mallado es muy sutil, en la poliedrización el dato son los nodos y en cambio, para el mallado, el dato es la frontera. El resultado es el mismo: una malla, solo que luego del mallado se pueden reacomodar los nodos para mejorar la distribución y la forma de los elementos, mientras que en la poliedrización los nodos deben permanecer fijos; sobretodo en algunos métodos de partículas donde los nodos representan puntos materiales.

Las mallas no se utilizan solamente para obtener la solución numérica de sistemas de ecuaciones diferenciales. Las otras aplicaciones también requieren la subdivisión del espacio para manipular individualmente cada celda. Se trata de resolver problemas de

almacenamiento y visualización de datos; reemplazando el espacio, completamente suave, por medio de una aproximación por tramos, con requisitos más simples de suavidad. Los datos y resultados, en todos los casos son reemplazados por valores elementales, constantes a tramos, o por valores nodales que pueden ser interpolados para obtener las magnitudes aproximadas en el continuo.

Un ejemplo de aplicación alternativa es el cálculo de la iluminación y la aplicación de texturas para la visualización de superficies en el espacio; allí se reemplaza el continuo bidimensional por medio una malla de triángulos y/o cuadriláteros. Las características en cada elemento se interpolan de acuerdo a los valores en los nodos y la manipulación geométrica se hace más sencilla. Los requisitos de este problema son muy distintos a los del FEM; para la iluminación, el tamaño de los elementos está gobernado principalmente por la curvatura de la superficie original y se admiten elementos muy largos en una dirección poco curva y muy cortos en la otra con mayor curvatura. Otro ejemplo, pero volumétrico, es el análisis de la información que obtienen los tomógrafos y escáners en medicina, dicha información se almacena para un conjunto finito de celdas hexaédricas llamadas voxels y allí la densidad de elementos está gobernada por la variabilidad (gradiente) de la información almacenada y limitada por la resolución del aparato.

En todos los casos se utilizan polígonos o poliedros elementales que permitan un tratamiento simple de la información o el cálculo de las incógnitas. La poliedrización más sencilla es una división en tetraedros, pero también se utilizan hexaedros (ladrillos), prismas triangulares y a veces, pirámides cuadrangulares. La restricción de forma de los elementos y el cumplimiento o no de determinadas condiciones respecto a la estructura de conexión, la frontera y el método empleado para construirlas, dan lugar a una complicada taxonomía de las mallas. Existen muy buenas fuentes que tratan las generalidades del tema y muchas son de libre acceso en Internet, en particular se deben citar los extraordinarios esfuerzos de recopilación que hacen Robert Schneiders y Steve Owen en las siguientes direcciones respectivamente:

<http://www-users.informatik.rwth-aachen.de/~roberts/meshgeneration.html>

<http://www.andrew.cmu.edu/user/sowen/mesh.html>

Con el *hardware* disponible actualmente y los datos adecuadamente presentados, se pueden construir mallas con decenas de millones de elementos en mucho menos que una jornada de trabajo. El problema de la fiabilidad del *software* (“robustez”, en la jerga de los programadores) es grave: Si existe alguna mínima posibilidad de falla el algoritmo fallará,

pues se utiliza millones de veces; una posibilidad de falla de uno en un millón es casi una certeza de falla y las fallas son catastróficas en términos de tiempo perdido, ya sea porque el programa se detiene sin entregar una malla o, peor aun, entrega una malla malformada, sin preaviso, y le costará mucho al calculista descubrir la fuente del error. El *debugging* (la reparación de errores del método o del programa, que es la gran parte del trabajo de un programador) se hace virtualmente imposible con millones de elementos, tanto porque en modo de *debug* el programa adquiere una lentitud invalidante, como por la extrema dificultad de encontrar geoméricamente la raíz el problema y entender su causa. Por otro lado, el algoritmo perfecto es muy caro: cuesta mucho tiempo de máquina revisar y deshacerse de los problemas potenciales. En la práctica se obtienen buenos resultados cuando el usuario es experto en el manejo de generadores de malla y ya sabe que cosas debe prevenir al alimentar un generador con datos. Si bien los algoritmos son cada vez más robustos, el problema del “curado” de los datos (*mesh healing*) es un tema en el cual hay mucha gente trabajando y aún no hay una técnica acabada.

La generación de mallas de tetraedros es un tema hartamente estudiado y existen muchos algoritmos con mayor o menor velocidad y robustez. De entre ellos se destacan dos métodos: Uno es un método heurístico de avance frontal: partiendo de una frontera cerrada y triangulada, se van ubicando estratégicamente los nodos interiores y armándose los tetraedros por capas paralelas a la superficie y avanzando hacia el centro del dominio o partiendo de un punto y rellenando por capas el dominio. En el otro método, analítico pero con algunos problemas de robustez, el dominio se rellena con puntos y se construye la triangulación a través de su dual: el diagrama de Voronoï del conjunto de nodos.

En esta tesis se analizan algunos mecanismos para la generación de mallas y la poliedrización, que son generalizaciones del concepto de dualidad topológica y métrica que provee el diagrama de Voronoï. El fracaso del avance frontal para generar hexaedros y la versatilidad del diagrama de Voronoï nos indujeron a intentar un mecanismo dual para la producción de mallas de hexaedros. Ese objetivo fue logrado con algunas restricciones a través del “Método de Subdivisión Recursiva y Proyección” de las líneas duales de la frontera. Otra directriz de generalización en los métodos duales la utilizamos para la generación de mallas de poliedros a través de la “Teselación Delaunay Extendida” (EDT), esta técnica es una aproximación al dual del diagrama de Voronoï y ha sido utilizada con excelentes resultados en métodos sin malla, para describir las vecindades entre las partículas. Con la EDT también se pueden generar mallas de poliedros que pueden ser utilizadas en el FEM con algunas ventajas respecto de los tetraedros.

Las mallas simpliciales (de triángulos o tetraedros) definen una aproximación lineal por tramos; y son las más sencillas de generar en forma no estructurada. Aunque siempre aparecen nuevos desafíos y nuevos métodos, el problema algorítmico de la generación de mallas simpliciales está muy bien resuelto. Existen técnicas bien establecidas desde hace mucho tiempo.

Por diversas razones, para algunos métodos numéricos o problemas en particular, se prefieren las mallas de cuadriláteros / hexaedros. La generación de estas mallas presenta un grado de dificultad notablemente superior a la generación de símplices.

Para generar mallas de cuadriláteros hay algunos métodos disponibles, tanto en el plano como en el espacio; y justamente, aprovechando la sencillez de la generación de símplices, uno de los métodos preferidos parte de una malla de triángulos para formar cuadriláteros uniendo los triángulos de a dos vecinos y reacomodando los nodos^[1,2]. Nosotros desarrollamos además un programa de generación de cuadriláteros por avance frontal^[3]. Para generar hexaedros en cambio, el mecanismo de unión de tetraedros es inviable y tampoco se ha logrado extender un método de avance frontal, más allá de algunos ejemplos académicos muy sencillos^[4]. La interconexión entre los hexaedros es tan complicada que se hace muy difícil idear mecanismos y más difícil implementar las ideas.

Cuando el dominio es muy simple se puede utilizar una grilla regular, que puede consistir en un grupo de isosuperficies mutuamente ortogonales, puede ser la solución de un sistema de ecuaciones diferenciales o una simple transformación conforme de la grilla cartesiana. En estos casos se utiliza el término “grilla” en lugar de “malla”, pero son mallas, solo que totalmente estructuradas: todos los nodos interiores tienen la misma cantidad de hexaedros y conectados según la misma disposición; se puede decir que todos los nodos (interiores) son topológicamente equivalentes^[5,6,7]. Una grilla es casi siempre una excelente malla; pero el método adolece de dos defectos invalidantes: uno es la falta de generalidad, pues no siempre el dominio es lo suficientemente sencillo como para utilizar esta solución; el otro defecto es que la estructura obliga a poner gran cantidad de elementos donde no se requiere. Las mallas no estructuradas aparecieron para resolver principalmente este último problema.

Para generar mallas “semiestructuradas” existen los métodos de multibloques y extrusión, con los que también se obtienen mallas de hexaedros de muy buena calidad y en forma sencilla.

El método de multibloques consiste en dividir el dominio en grandes bloques hexaédricos, para luego subdividir cada bloque, en forma estructurada, en hexaedros más pequeños. El método es un poco más general que el de una sola grilla, pero no alcanza a revertir ninguno de los dos problemas mencionados.

La extrusión o *sweeping* (barrido), consiste en partir de una malla de cuadriláteros (también se utiliza con triángulos) y hacer múltiples copias en una dirección ortogonal, por eso suele llamarse método o malla $2\frac{1}{2}$ dimensional. Esta herramienta es mucho más fructífera que las antes mencionadas y puede resolver una gama mucho más amplia de geometrías. La gran versatilidad se debe a la posibilidad de hacer un mapeo o un *morphing* desde una superficie curva hacia otra, ambas con “la misma” malla de cuadriláteros, por un camino “ortogonal” curvo. El mayor avance se obtuvo con el esquema de *multisource / multitarget*, donde cada porción de partida se mapea sobre una porción de llegada para formar piezas complejas^[8,9,10,11]. La principal dificultad asociada a este método consiste en evitar la superposición de superficies intermedias durante el mapeo por un camino curvo. De todos modos tampoco este método es aplicable en general y requiere de un trabajo manual previo para asociar los pares *source / target*.

Cuando pueden emplearse, los esquemas semiestructurados son de elección casi obligada; en primer lugar porque producen mallas de muy buena calidad y alineadas con las superficies (para fluidodinámica), pero además son el único medio confiable para hacer una malla de hexaedros. De todos modos, no siempre pueden utilizarse, ya sea por la complejidad del dominio o porque la estructura impide un control adecuado de la densidad de elementos.

El objetivo de máxima es un programa capaz de mallar, solo con hexaedros, cualquier geometría complicada (prácticamente todos los problemas tienen geometría complicada), con control de densidad (no estructurado), buena calidad y respetando la malla de cuadriláteros impuesta como frontera del dominio. Todos los generadores de hexaedros, que han podido ser efectivamente implementados, renuncian a varios de esos objetivos.

Los métodos que se han probado, con mayor o menor éxito, están descriptos en las recopilaciones de Steven Owen^[12] y Ted Blacker^[13]. En la segunda mitad de la década de 1990 hubo algunos avances prometedores; pero finalmente, todos los grupos nos topamos con problemas topológicos, y en la actualidad (2004/5) no hay ningún generador de mallas de hexaedros cuya robustez y versatilidad se aproxime, ni siquiera en forma remota, a las prestaciones de los generadores de símplexes. En aquellos años, todos nos contentábamos

con pequeños avances y la solución parecía cercana. En las últimas mesas redondas internacionales de generación de mallas sólo se presentaron trabajos sobre algunos aspectos de la calidad y de la generación de mallas híbridas de hexaedros con pirámides y tetraedros. La conclusión común^[14] es que el tema debe quedar en espera de la solución de los problemas topológicos o bien de algún método alternativo. La solución de los problemas topológicos parece estar muy cerca; quizás una persona con la combinación adecuada de conocimientos de geometría matemática y geometría computacional pueda encontrarla o demostrar su inexistencia.

Algunos de los temas desarrollados aquí sobre las mallas de hexaedros, resultaron en innovaciones esenciales para comprender e idear los mecanismos de generación^[15], corrección y suavizado^[16], y finalmente, renunciando a la frontera impuesta^[17], el generador implementado pudo confeccionar algunas mallas útiles para problemas reales.

El desarrollo de las mallas de poliedros esféricos a través de la EDT, surgió como un subproducto de la necesidad de conectar los nodos vecinos en métodos sin malla. Todos los *meshless methods*, Lagrangianos o de puntos, requieren información del entorno y los vecinos de cada nodo. El entorno de un nodo es (en este contexto) el soporte de las funciones de forma, la región influenciada por el nodo. Puede ser infinito, como en los problemas gravitatorios o, por el contrario, de muy corto alcance, como en materiales granulares sueltos. En todos los métodos, las variables de un nodo influyen a los nodos vecinos, son influenciadas por ellos y en el continuo definen el valor interpolado en cualquier punto del dominio.

El grafo de influencias mutuas entre nodos, para un método sin malla, es información topológica muy parecida a una malla. De hecho, cuando la influencia es de corto alcance, puede lograrse con una malla, idéntica a las de elementos finitos. En los métodos de partículas, los nodos se mueven gobernados por las ecuaciones y la malla sólo representa las vecindades entre partículas.

Se necesita de un método muy rápido para interconectar los nodos en cada paso de tiempo, a veces se requiere reconocer además la superficie libre de un fluido, o una interfase cambiante entre dos materiales. La triangulación Delaunay fue el método elegido para satisfacer el requisito de velocidad, proveyendo además la información necesaria para identificar la superficie libre por el método de *alpha-shapes*.

La triangulación de Delaunay en tres dimensiones posee algunos elementos de muy mala calidad, que provocan errores numéricos, fundamentalmente debido a la cocircularidad

aproximada de cuatro nodos vecinos formando unos tetraedros aplastados llamados *slivers*. En tal caso, un quinto vecino no coplanar será prácticamente coesférico con los nodos del *sliver*. Por ello se pensó en utilizar el dual del diagrama de Voronoï, es decir poliedros que resultan de la unión de tetraedros prácticamente coesféricos^[18].

Dentro de los poliedros no pueden utilizarse las funciones de forma comunes del FEM, pero adaptando las coordenadas Laplacianas y restringiéndolas al elemento, se consiguió un conjunto de funciones de forma que permite utilizar los elementos poliédricos producidos por la EDT como elementos finitos.

Como ya se mencionó, el problema de triangular un conjunto de puntos es distinto al problema de la generación de una malla. En el primer caso los puntos vienen dados y hay que interconectarlos. Para generar una malla en cambio, los puntos se ubican donde convenga para obtener elementos de buena calidad. Contando con las rutinas de poliedrización, al agregar un generador de puntos se obtuvo un generador de mallas de tetraedros (*slivers* incluidos) que luego, utilizando la EDT se puede convertir en una malla de poliedros de excelente calidad y sin necesidad de ningún proceso posterior para mejorarla. La ausencia de las (innecesarias) rutinas de suavizado de la malla hicieron que el método resulte muy veloz y pueda ser utilizado varias veces en problemas no estacionarios.

Al generar una malla, dado que se pueden colocar y mover los nodos interiores a voluntad, es sencillo deshacerse de los *slivers* internos, pero aún así persiste la ventaja de utilizar poliedros: Para problemas clásicos de elementos finitos con malla, pero con frontera móvil o variable, algunos analistas prefieren deformar la misma malla entre pasos de tiempo y remallar localmente sólo cuando sea estrictamente necesario, con ello se minimiza el “suavizado de la solución” que se produce al interpolar los valores nodales de un paso de tiempo en la malla (distinta) del paso siguiente. Más allá del aumento de la calidad, que es la primera motivación para generar poliedros, hemos comprobado que los poliedros soportan mayor deformación que los tetraedros antes de que la calidad se degrade como para requerir el remallado. Un tetraedro resulta inválido cuando un nodo se aproxima al plano de la cara opuesta, en un poliedro puede haber nodos coplanares, o aún puede llegar a ser cóncavo, sin que la calidad lo invalide.

1.1 Justificación

“Oigo y olvido. Veo y recuerdo. Hago y entiendo.”

Confucio.

Los temas abarcados en esta tesis son parte del trabajo que he realizado en los últimos diez años en el Centro Internacional de Métodos Numéricos para Ingeniería (CIMEC). En nuestro Centro se realizan cálculos numéricos para estudiar y resolver problemas provenientes de distintas ramas de la ingeniería, algunos esenciales para el desarrollo tecnológico del país o para el mejoramiento de nuestro hábitat. Si la intención se quedara sólo en la resolución de problemas industriales o estatales, podríamos utilizar programas comerciales y eso nos convertiría en una consultora altamente especializada y competitiva; pero seguiríamos dependiendo, tanto en tecnología como en *software*. Además de la necesaria y enriquecedora interacción con la industria, cada problema se aprovecha para desarrollar o mejorar los métodos de cálculo y para formar profesionales y científicos con capacidad de innovar. Eso expande el horizonte de posibilidades y da sentido a una institución dedicada a la investigación científica y el desarrollo tecnológico.

La generación de mallas es un auxiliar del cálculo; es una parte de la etapa de “preprocesamiento” de los datos. Es necesaria, pero tan marginal como el CAD o los programas de visualización de resultados. De hecho en la Argentina hay muy poca gente trabajando en este tema. Un buen usuario del FEM y aún un innovador, puede depender de generadores comerciales, del mismo modo que puede depender de programas comerciales para el diseño o el cálculo. Pero para este grupo, dedicado al cálculo, es muy ventajoso contar con *software* propio, de cálculo y de apoyo. Si bien el objetivo de los generadores de mallas está centrado en la automatización y la versatilidad, siempre se requiere alguna propiedad, variante o rutina nueva para aplicar en algún caso particular; en un centro de investigación, hay una muy alta frecuencia de nuevos problemas y cada uno trae desafiantes particularidades. Teniendo acceso a las fuentes del *software* y personal que sepa cómo y donde hacer las alteraciones requeridas, se pueden resolver problemas de índole más variada y ensayar modificaciones para experimentar con los resultados y contribuir con nuevas técnicas o mejoras.

La generación de mallas involucra algunos aspectos teóricos de la geometría y la topología matemáticas y también algunos temas especializados de índole práctica en la implementación de las rutinas gráficas. Todas esas necesidades son compartidas por

muchas otras aplicaciones; es una muy buena excusa para formar profesionales e investigadores en geometría computacional, un área que abarca a los otros auxiliares mencionados (CAD y visualización) y también a muchos métodos de almacenamiento y análisis de información –como tomografías (CT, MNR) o información geográfica (GIS)– a los programas de visualización geométrica para matemáticas y también a programas de simulación fotorealista, como los empleados en animación y efectos especiales gráficos.

El estilo de escritura de esta tesis está orientado más a la facilidad de lectura por parte de quien quiera utilizarla que a la demostración de novedad y propiedad intelectual de los conceptos o los algoritmos. Espero que el jurado la encuentre adecuada, pero más me gustaría que algún joven investigador la encuentre útil.

2 Conceptos Preliminares

2.1 Contenedores

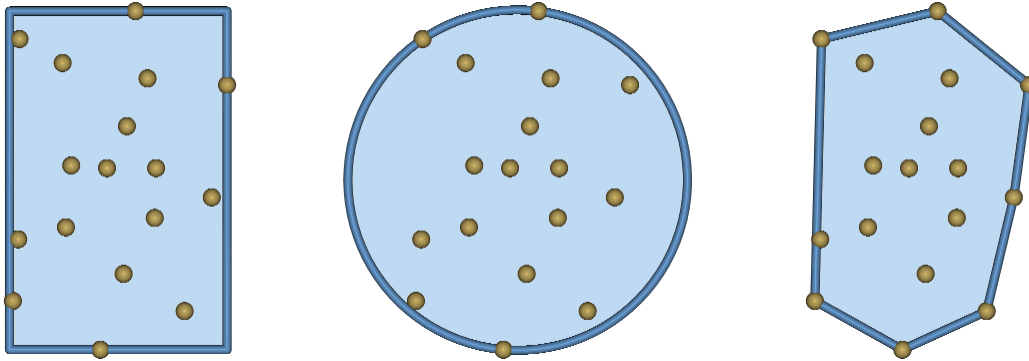


Figura 1: *Bounding-Box*, Contenedor Esférico y *Convex-Hull* de un conjunto finito de puntos aislados.

Para un conjunto N de puntos en el espacio se pueden definir los siguientes contenedores:

- La caja o *bounding-box* $B(N)$ es la intersección de todosⁱ los paralelepípedos de caras paralelas a los planos coordenados que contienen al conjunto. Indica solo el mínimo y el máximo de cada coordenada.
- El contenedor esférico es la esfera de menor radio que contiene al conjunto.
- El envoltorio convexo o *convex-hull* $H(N)$ es la intersección de todas las regiones convexas que contienen a los puntosⁱⁱ.

En el presente contexto se tratará con conjuntos discretos y finitos de puntos (nodos) en el espacio Euclídeo tridimensional: $N = \{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_n\}$; $\mathbf{p}_q \in \mathbb{R}^3$. Los contenedores así definidos son entonces cerrados y acotados, es decir compactos. Los mismos contenedores se definen a veces abiertos o incluso como superficies; lo importante es la superficie, pero aquí se utilizarán siempre como regiones cerradas, sólo para ahorrar palabras.

Un k -símplice es el *convex-hull* de $k + 1$ puntos en \mathbb{R}^d , donde $d \geq k$. Es una generalización dimensional de triángulo y tetraedro que incluye al segmento, al punto y también al conjunto vacío, si éste último se acepta como un símplice de dimensión -1 . Los elementos de un símplice (caras, aristas, vértices) son símplices de dimensión menor.

ⁱ La intersección de una colección de conjuntos anidados puede llamarse “el menor” (con el orden de la inclusión de conjuntos: $A < B \Leftrightarrow A \subset B$), si los conjuntos incluyen su frontera (son cerrados).

ⁱⁱ Puede definirse como la intersección de todos los semiespacios que contienen al conjunto, o también como la intersección de todas las esferas que contienen al conjunto, que no es el contenedor esférico, como podría parecer, sino el *convex-hull*.

2.2 Poliedrización y Malla - Conformidad

La forma estándar de interconectar un conjunto de nodos es mediante una triangulaciónⁱ. Una triangulación de un conjunto de nodos es una particiónⁱⁱ de su *convex-hull* mediante símplexes cuyos vértices son los nodos. Por extensión, una conexión de los nodos mediante polígonos o poliedros, se denomina poliedrización, independientemente del tipo de poliedros utilizados.

El algoritmo de poliedrización debe rellenar el *convex-hull* respetando la posición de los nodos dados; un generador de mallas, en cambio, debe rellenar con elementos un dominio posiblemente cóncavo y con huecos. Un generador de mallas tiene libertad de ubicar los nodos en posiciones adecuadas para garantizar una cierta calidad de los elementos. Más allá de la diferencia semántica y de uso, ambos procesos dan como resultado una malla.

Las mallas que se analizarán aquí deben cumplir además los siguientes requisitos:

- 1) Conformidad: La intersección de dos elementos sólo puede ser un elemento común de ambos: una cara, una arista o un vértice o bien el conjunto vacío.
- 2) Unicidad de conexión: El elemento de máxima dimensión, común a dos poliedros debe ser único y completo.

Existen métodos numéricos que aceptan mallas no conformes, pero en esta tesis se tratará solo con mallas conformes.

2.3 Circunfera y Mediatrices

La circunfera de un tetraedro es la esfera definida por sus vértices. Es mayor o igual que el contenedor esférico.

Mientras no se preste a confusión se utilizará el término “esfera” en cualquier dimensión y en lugar de “circunfera” o “circuncírculo”. También se usará “centro” en lugar de “centro de la circunfera”.

Todo punto de la línea perpendicular al plano de un triángulo y que pasa por el centro, equidista de sus tres vértices. Si el triángulo fuese una cara de algún tetraedro, la línea antes mencionada contendría al centro de la cara y al centro del tetraedro. Generalizando el

ⁱ La palabra “triangulación” se usará en sentido general (en lugar de tetraedrización) y en una de sus acepciones. Otras son: a) la ubicación de un punto conociendo la distancia a tres puntos dados y b) la división de un polígono en triángulos sin agregar puntos interiores.

ⁱⁱ En todo el texto, las particiones no son estrictas porque los elementos tienen intersección (de medida nula pero no vacía).

concepto bidimensional, se llamará mediatriz de un triángulo a la recta que pasa por el centro y es perpendicular al plano. Del mismo modo, y también en 3D, la mediatriz de un segmento será el plano que lo corta por la mitadⁱ.

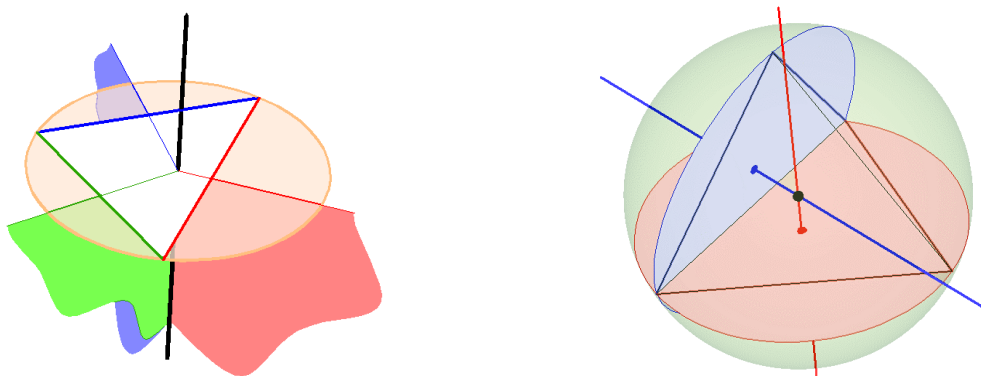


Figura 2: Circunferas y Mediatrices.

En el dibujo de la izquierda, cada plano es mediatriz de la arista del mismo color, la intersección de las tres mediatrices es la mediatriz del triángulo y corta al plano del triángulo en el centro del círculo. Para el tetraedro (a la derecha) el centro es la intersección común de todas las mediatrices.

Si dos tetraedros comparten una cara, ambas esferas contienen los vértices de la cara, por lo tanto la intersección de las esferas es la circunferencia de la cara. Los centros de ambos tetraedros están en la mediatriz de la cara común.

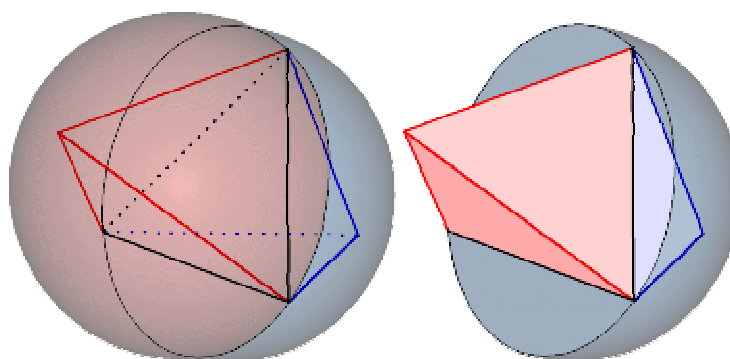


Figura 3: Intersección de las esferas de dos tetraedros vecinos.

La circunferencia de la cara común a dos tetraedros divide a cada esfera en dos casquetes, uno que contiene al tetraedro y uno opuesto. Si ninguna esfera contiene al vértice opuesto del tetraedro vecino, entonces cada casquete, opuesto al tetraedro propio, está completamente contenido en la esfera vecina.

ⁱ Con mayor generalidad, la mediatriz de un tetraedro es el centro de la circunferencia y así cada mediatriz es la intersección de las mediatrices de las partes.

En resumen:

- La mediatriz de un segmento es el plano perpendicular que lo divide por la mitad.
- La mediatriz de un triángulo es la línea perpendicular que pasa por el centro.
- El centro de un tetraedro es la intersección de las cuatro mediatrices de las caras.
- Si dos tetraedros comparten una cara, la circunferencia de la cara es la intersección de sus esferas, y ambos centros están en la mediatriz de la cara común. El casquete opuesto a un tetraedro esta completamente contenido en la esfera vecina.

2.3.1 Cálculo de la Esfera

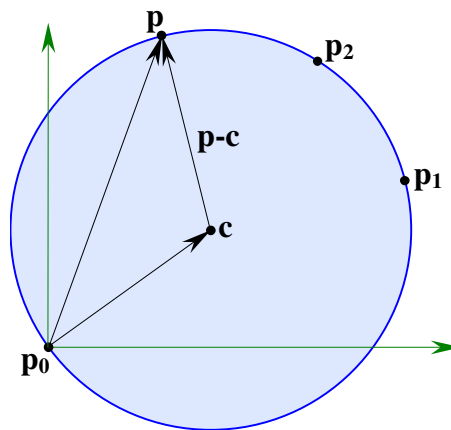


Figura 4: Definición de una circunferencia por tres puntos.

Dados cuatro puntos en tres dimensiones $\{\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3\}$, si uno de los puntos de definición se considera origen de coordenadas, $\mathbf{p}_0 = (0, 0, 0)$, la ecuación de un punto cualquiera \mathbf{p} de la superficie de la esfera que definen es:

$$(\mathbf{p} - \mathbf{c})^2 = r^2 = \mathbf{c}^2 \quad (1)$$

La ecuación (1) se puede expandir para obtener un sistema de tres ecuaciones:

$$\mathbf{p}_q \cdot \mathbf{c} = \mathbf{p}_q^2 / 2 \quad (q \in \{1, 2, 3\}) \Rightarrow \mathbf{c} \Rightarrow r = \|\mathbf{c}\| = \sqrt{\mathbf{c} \cdot \mathbf{c}} \quad (2)$$

Este es el sistema de ecuaciones que se resuelve para calcular el centro y el radio de la esfera.

El determinante de los coeficientes es el producto triple de los tres vectores (seis veces el volumen del tetraedro), habrá entonces problemas numéricos cuando los puntos sean casi coplanares o cuando haya puntos demasiado cercanos.

3 Diagrama de Voronoï y Triangulación Delaunay

3.1 Diagrama de Voronoï

El Diagrama de Voronoï de un conjunto de puntos aislados o nodos, $V(N)$, es una partición del espacio completo en regiones, a cada nodo \mathbf{p}_q se le asigna la región o celda cuyos puntos no son más cercanos a ningún otro nodo.

$$V_q = V(\mathbf{p}_q) = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d: \|\mathbf{x} - \mathbf{p}_q\| \leq \|\mathbf{x} - \mathbf{p}_r\| \}; \quad \{ \mathbf{p}_q, \mathbf{p}_r \} \subset N \quad (\Rightarrow \cup V_q = \mathbb{R}^d) \quad (3)$$

$$V = V(N) = \{ V_q; q \in \{1, 2, \dots, n\} \} \quad (4)$$

Así definidasⁱ, cada celda incluye su frontera. Un punto de la frontera de una celda equidista de dos o más nodos, es decir que pertenece a alguna mediatriz. Dado que las mediatrices son planas o rectas, las fronteras solo pueden ser polígonos, cuyos vértices equidistan de cuatro o más puntos.

La celda de un nodo es un poliedroⁱⁱ convexo por ser la intersección de varios semiespacios que contienen al nodo, cada uno limitado por la mediatriz del segmento que une al nodo con algún otro.

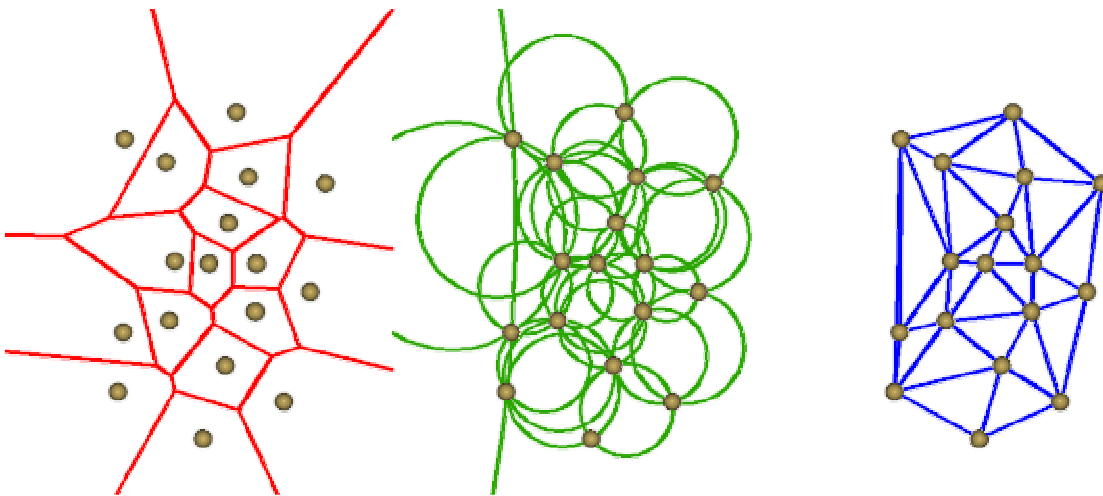


Figura 5: Diagrama de Voronoï, Esferas Vacías y Triangulación Delaunay.

Si la circunferencia de cualquier conjunto de cuatro nodos contiene otro nodo en el interior, su centro es más cercano al nodo interior. Una esfera centrada en un vértice del diagrama y cuyo radio es la distancia común a los (al menos) cuatro nodos correspondientes, no contiene ningún nodo interior. Dichas esferas se denominan esferas vacías.

ⁱ Generalmente, V se define por regiones abiertas, y se puede definir en distintos espacios con diferentes métricas y aún para conjuntos continuos de puntos.

ⁱⁱ Se pueden llamar poliedros o politopos, pero no hay consenso en el alcance de las definiciones (véase: <<http://mathworld.wolfram.com/Polyhedron.html>>).

Por contrario, supóngase una esfera centrada en un punto cualquiera de \mathbb{R}^3 , con radio infinitesimal y que crece hasta alcanzar uno o más nodos. Si alcanza solo un nodo es porque el centro de la esfera está en el interior de la celda de ese nodo. Si alcanza dos nodos es porque el centro equidista de esos dos nodos, el centro está en la cara del diagrama que separa las dos regiones correspondientes. Con el mismo razonamiento, si equidista de tres nodos, el centro está en una arista y si equidista de cuatro es un vértice.

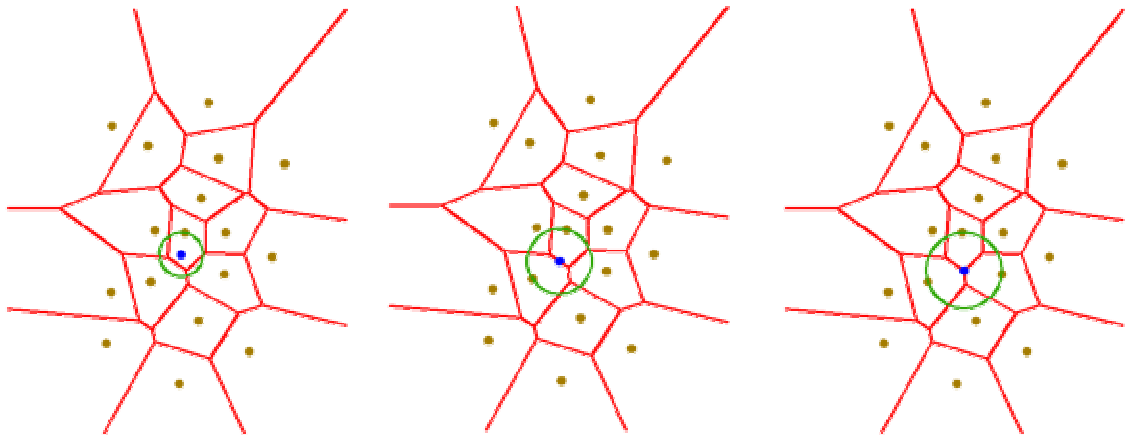


Figura 6: Esferas Vacías Maximales en el Diagrama de Voronoï.

Izquierda: Centrada en un punto cualquiera. Centro: Centrada en una arista. Derecha: Centrada en un vértice.

El diagrama de Voronoï captura los conceptos de entorno y de vecindad. Supóngase una función o propiedad que se expande radialmente y a velocidad uniforme, partiendo de algunos centros aislados; el choque de los frentes de avance dibuja automáticamente el diagrama de Voronoï.

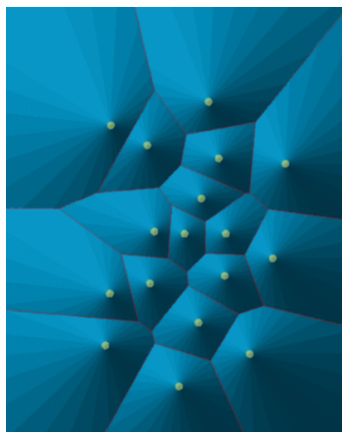


Figura 7: Conos con vértice en los nodos.
Sus intersecciones forman el diagrama de Voronoï.

En la Figura 7 varios conos con vértices en los nodos representan un crecimiento radial uniforme. Vistos desde una dirección paralela a los ejes, sus intersecciones forman el diagrama de Voronoï.

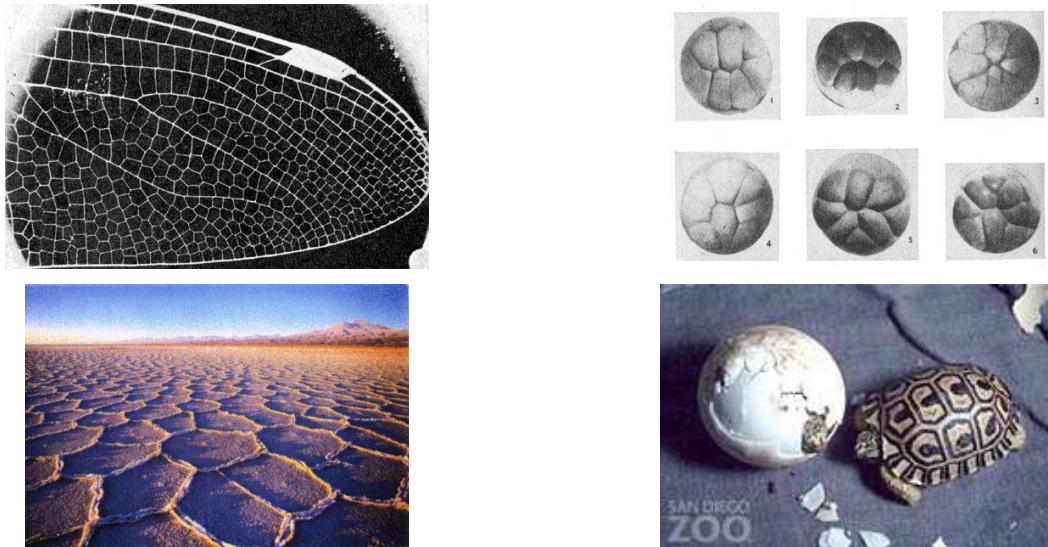


Figura 8: El Diagrama de Voronoï en la naturaleza.

Ala de mosca^[19], Huevos de Rana^[19], Proceso de Desertificación^[20] y Tortuga Leopardo^[21]

Ese efecto puede verse en muchos procesos naturales de crecimiento a partir de “semillas” o puntos aislados^[20,22]. La Figura 8 muestra algunas imágenes donde aparece el diagrama de Voronoï en la naturaleza.

3.2 Triangulación Delaunay – Dualidad

De entre todas las posibles triangulaciones de un conjunto N de nodos, la triangulación de Delaunay $D(N)$ es aquella en la que las circunferencias de los tetraedros no contienen ningún nodo en su interior. Los tetraedros Delaunay están definidos por los cuatro nodos de las esferas vacías.

La distribución de nodos (la ubicación de los nodos en el espacio) se llama general o no degenerada cuando no hay más de tres nodos coplanares ni más de cuatro coesféricos. Es decir que cuatro nodos cualesquiera definen correctamente una esfera que no tiene un quinto nodo en su superficie. Una definición más complaciente de posición general se refiere solo a los nodos de las esferas vacías.

Para una distribución general, la triangulación de Delaunay y diagrama de Voronoï son estructuras mutuamente duales: En d dimensiones, a cada elemento k -dimensional ($k \leq d$) de una, le corresponde un elemento $(d-k)$ -dimensional de la otra.

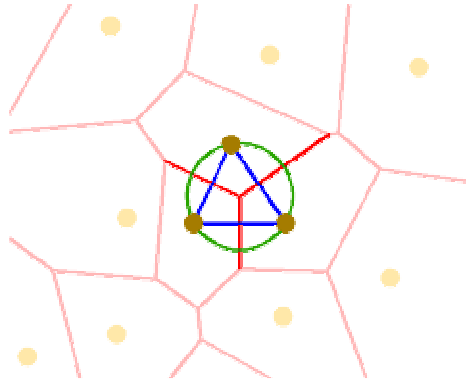


Figura 9: Dualidad entre la Triangulación Delaunay y el Diagrama de Voronoï en Posición General.

La dualidad también tiene una componente métrica además de la topológica: La densidad espacial de los nodos gobierna el tamaño de los elementos en ambas estructuras; pero además el diagrama de Voronoï está compuesto por las mediatrices de los elementos y subelementos de la triangulación Delaunay, por eso los ángulos entre pares duales son rectos y los ángulos internos suplementarios.

En el caso degenerado, si hay alguna esfera vacía supernumeraria (con más de cuatro nodos en la superficie) habrá más de una forma de elegir los tetraedros. En tal caso, dado que se definió como triangulación, D no es única. El dual del V sigue siendo único, pero cada esfera supernumeraria contiene un poliedro no simplicial formado por la unión de los tetraedros posibles.

En posición general, en cada vértice del diagrama confluyen cuatro caras que se interceptan en cuatro aristas dividiendo el espacio circundante en cuatro triedros, duales de los del tetraedro. Si hay alguna esfera supernumeraria, habrá alguna mediatriz más y algunas aristas más; la estructura del dual (no tetraédrico) estará en correspondencia con las caras y aristas que convergen en el centro. La mutua dualidad implica que la estructura de una celda de Voronoï está relacionada con el conjunto de poliedros (tetraédricos o no) que comparten un nodo.

La conformidad y unicidad de conexión son respetadas (o violadas) simultáneamente por el par dual: Dos elementos de dimensión k que comparten un elemento m -dimensional, (siendo $m < k \leq d$) se corresponden en el dual con un elemento $(d-m)$ -dimensional, dual de la frontera común, entre cuyos componentes se encuentran los dos elementos de dimensión $(d-k)$, duales de los primeros. Un ejemplo: un grupo de tetraedros Delaunay comparten “solo una” arista que conecta dos nodos; en el diagrama de Voronoï, las dos celdas que se

corresponden con los nodos de la malla son vecinas por una cara, cuyos vértices se corresponden con los tetraedros que comparten la arista.

3.3 Entorno Natural y Cavidad de un punto

Para un punto cualquiera del espacio, se llama entorno natural a la unión de las esferas de Voronoï que lo contienen (en el interior o la superficie), sus nodos son los vecinos naturales del punto. Dos nodos son vecinos naturales entre sí cuando sus correspondientes poliedros de Voronoï tienen una cara común.

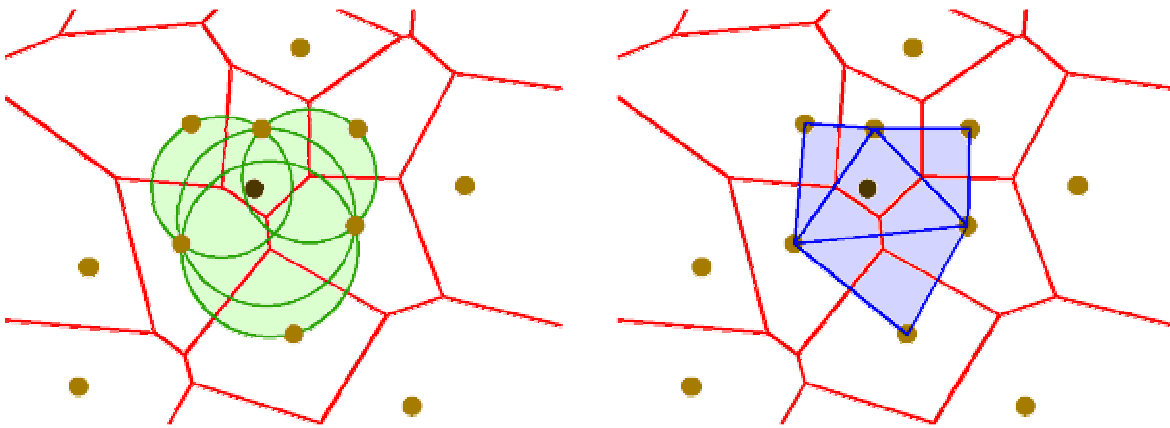


Figura 10: Entorno Natural y Cavidad de un punto

La alternativa poliédrica del entorno natural es la cavidad de un punto que se muestra a la derecha de la figura. Es el poliedro resultante de unir los tetraedros cuyas esferas contienen al punto. La cavidad se utiliza para implementar la triangulación Delaunay y para tal fin serán necesarios algunas observaciones detalladas acerca de las cavidades de puntos interiores al *convex-hull*:

- La cavidad puede ser cóncava.
En la Figura 10 se puede ver un ejemplo, los tres nodos superiores de la cavidad forman un ángulo ligeramente cóncavo, y bien podrían moverse un poco de modo de aumentar la concavidad.
- La cavidad no contiene ningún nodo interior. Los nodos que la forman son sus vértices. Supóngase un nodo interior a la cavidad del punto. El nodo no es interior a ninguna esfera de Voronoï, la única posibilidad es que todas las esferas del nodo contengan al punto. Si el nodo es frontera del *convex-hull*, es necesariamente frontera de la cavidad. Si es interior, está rodeado de tetraedros. Un segundo punto, infinitesimalmente próximo al nodo, colineal con el nodo y el primer punto y que deja al nodo entre medio, estará en el interior o en la frontera de algún tetraedro del nodo y por lo tanto en

el interior (estricto) de alguna esfera. Al estar los tres puntos alineados, con el nodo en medio, no puede haber ninguna esfera que tenga al nodo en la superficie y a los dos puntos en el interior. Por lo tanto existe alguna esfera del nodo que no contiene al punto.

- El nodo más cercano al punto es un vértice de la cavidad.

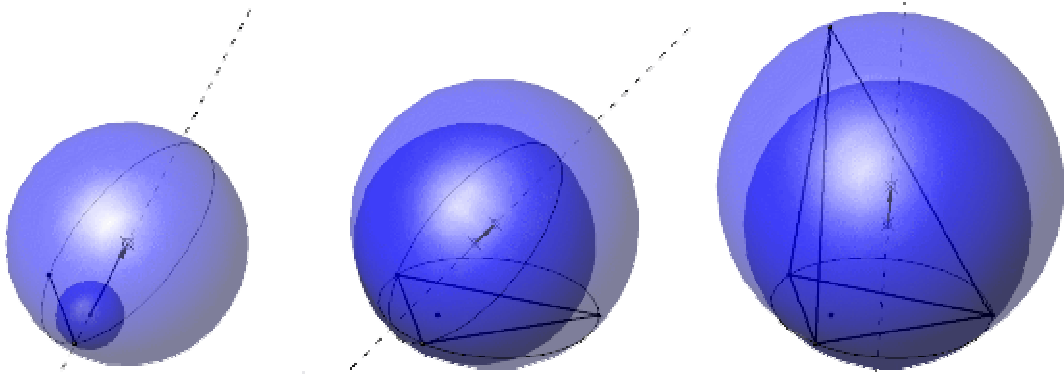


Figura 11: Esfera del nodo más cercano y que contiene a un punto.

Supóngase una esfera centrada en el punto y que llega hasta el nodo más cercano, la esfera no contiene ningún nodo interior. La esfera se hace crecer, con el nodo siempre en la superficie y el centro en la línea que une al nodo y al punto. Crece hasta encontrar un segundo nodoⁱ. En este proceso, la esfera contiene siempre al punto en el interior pues el centro está mas cerca del punto que del nodo. La esfera continua creciendo, pero ahora con los dos nodos en la superficie y el centro alejándose por la línea de intersección de la mediatriz del segmento que une los nodos con el plano (perpendicular) definido por el punto y los nodos. Crece hasta encontrar un tercer nodo. El punto sigue dentro de la esfera: considérese una línea por el punto y paralela al segmento que une los nodos, el centro de la esfera se alejó perpendicularmente a esa línea por lo tanto siempre estará mas cerca del punto que de los nodos. Encontrado el tercer nodo, sigue creciendo hasta encontrar un cuarto, pero con el centro en la mediatriz del triángulo de los tres nodos. Dado que el centro se aleja perpendicularmente a un plano que pasa por el punto y es paralelo al del triángulo, siempre contiene al punto. Como resultado se halló una esfera vacía definida por el nodo más cercano al punto y otros tres y que contiene al punto.

La única posibilidad en contra del mecanismo anterior es que no se encuentre alguno de los nodos, con lo que la esfera crecerá sin límite. Pero tal posibilidad implica que el

ⁱ Si originalmente el punto estaba en la frontera de la región del nodo, éste paso y/o alguno(s) de los siguientes se cumplen inmediatamente, sin requerir el crecimiento de la esfera.

punto es exterior al *convex-hull*: si el punto está en el interior, está en algún tetraedro, una esfera que contiene al punto no puede crecer como fue indicado, pero sin limite, sin contener los nodos del tetraedro.

Se debe notar que la unión de los tetraedros de un nodo puede no contener algunos vértices de la celda.

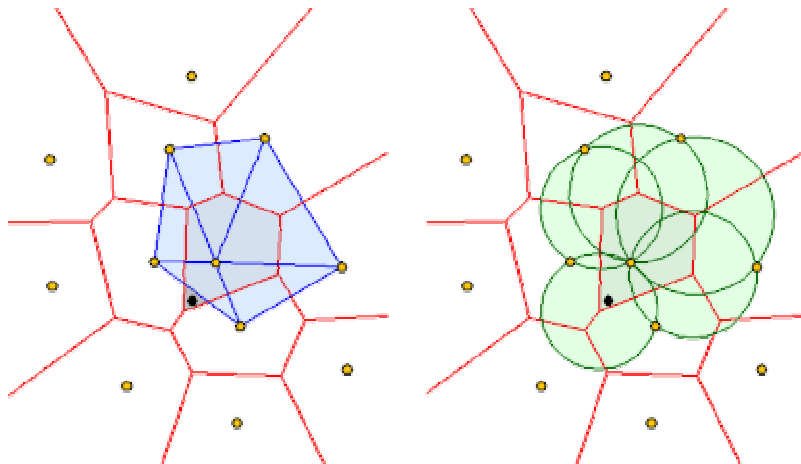


Figura 12: Cubrimiento de la Celda de Voronoi.

Izquierda: Cubrimiento incompleto con los tetraedros del nodo.

Derecha: Cubrimiento completo con esferas.

En la Figura 12 se puede observar que el punto marcado no esta en ningún triángulo del nodo más cercano, mientras que sí queda cubierto por las esferas. Esta observación es aprovechada en nuestra variante de la implementación.

- El punto “ve” a todas las caras de la cavidad.

Si el punto es interior a un tetraedro entonces obviamente ve todas sus caras. Si no esta en el tetraedro, al menos está el interior de su esfera, en uno o dos casquetes opuestos al tetraedro (Figura 3), con sus caras obstruyendo la visibilidad del resto. Pero al estar en algún casquete opuesto pertenece a la esfera del vecino, que entonces formará parte de la cavidad. Al unirse los tetraedros desaparece la cara común que obstruía la visibilidad.

- La cavidad es simplemente conexa y no tiene huecosⁱ.

Es corolario de la visibilidad, utilizando el argumento anterior para construir la cavidad.

ⁱ Un conjunto continuo de puntos es conexo (arco conexo) si cualquier par de puntos interiores se puede conectar con una línea curva interior. Es simplemente conexo si es conexo y cualquier circuito o *loop* interior se puede achicar continuamente hasta hacerse un punto. Un toroide no es simplemente conexo. Un conjunto simplemente conexo y sin huecos es homeomorfo a una bola.

3.4 Continuidad

Tanto el diagrama de Voronoï como la triangulación de Delaunay dependen de la posición de los nodos; $V(N)$ es una función continua y $D(N)$ no.

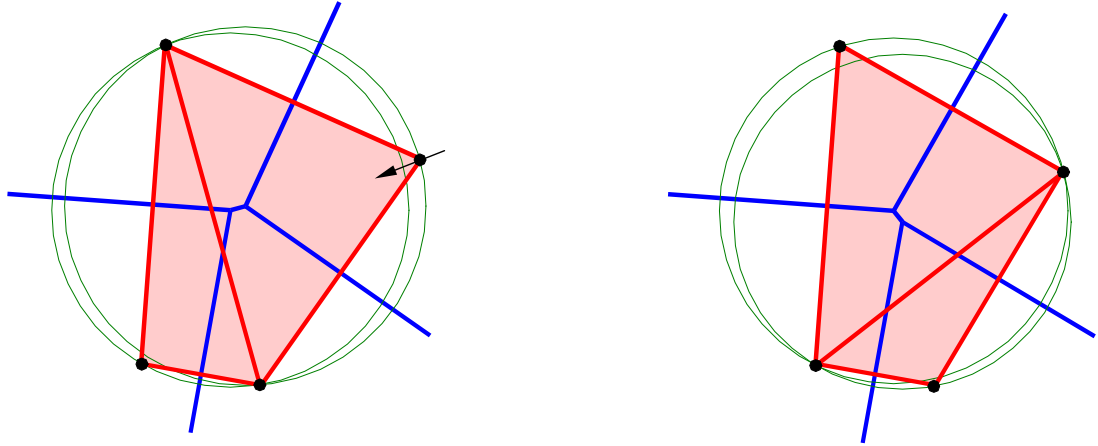


Figura 13: Intercambio de Diagonales en la Triangulación Delaunay.

Como se ve en la figura, una pequeña alteración en la posición de los nodos, provoca un pequeño cambio en el diagrama de Voronoï. El nodo móvil de la derecha estaba originariamente fuera de la esfera de los otros tres. A medida que se aproxima a la esfera, la arista de Voronoï que une los centros, disminuye hasta anularse. Cuando el punto entró en la esfera, la arista crece pero en otra dirección. Las esferas se aproximan hasta juntarse y comienzan a separarse nuevamente en otra dirección y formadas por distintos nodos, porque las originales dejan de ser huecas. El proceso es continuo.

En el mismo proceso, cuando el punto atraviesa la esfera, la triangulación sufre un cambio brusco pues cambian los nodos que definen las esferas. El cambio se denomina “intercambio de diagonales” o “*diagonal swapping*”, en referencia a las diagonales del cuadrilátero formado por los cuatro nodos involucrados en dos dimensiones. Con los cuatro puntos exactamente cocirculares (en 2D), el dual de V es el cuadrilátero y D queda indefinida o multivaluada.

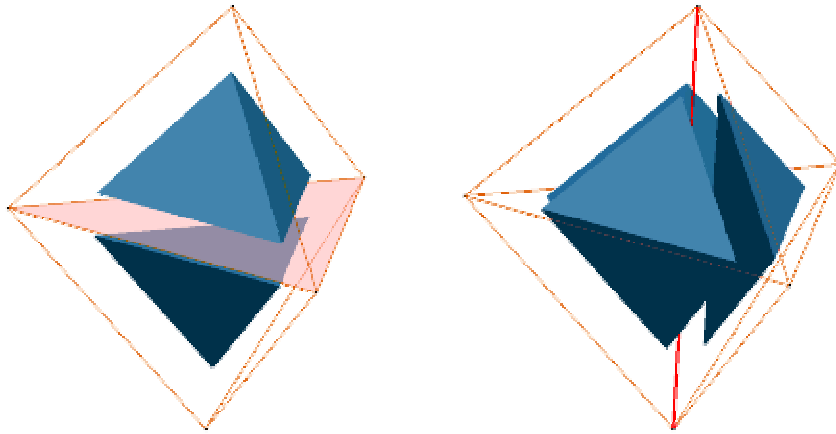


Figura 14: Discontinuidad de la Triangulación Delaunay en 3D: Cara \leftrightarrow Arista

En tres dimensiones sucede exactamente lo mismo, sólo que en lugar de un intercambio de diagonales, la discontinuidad en D se produce mediante el reemplazo de una cara por una arista (dos esferas por tres).

3.5 Slivers y Caps

El error de la aproximación en el FEM esta en relación directa al tamaño y a la deformación de los elementos. En dos dimensiones, de todas las triangulaciones posibles de un conjunto dado de nodos, la triangulación Delaunay maximiza el mínimo ángulo de los triángulos, pero eso no se generaliza a más dimensiones. En 3D, los ángulos diedros suelen resultar tan pequeños que invalidan la malla.

Si en la distribución existe algún nodo con unos vecinos muy cercanos y otros vecinos muy alejados, algún tetraedro resultará necesariamente deforme. Pero si se obtiene un tetraedro aplastado, con una distribución uniforme, es por culpa de una mala triangulación.

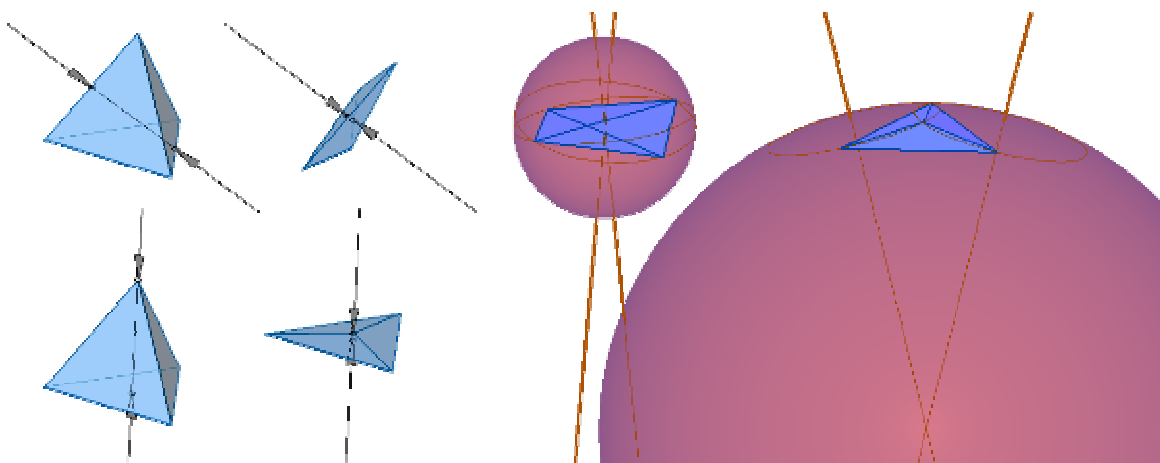


Figura 15: Deformación y Circunferas de *Slivers* y *Caps*.

Si bien hay denominaciones alternativas para los tetraedros deformes^[23,24,25], para los dos importantes aquí: *slivers* y *caps*, el consenso es general. Ambos son tetraedros aplastados, que no son producto de una mala distribución de nodos.

En un *sliver* hay dos aristas opuestas que son muy próximas; su contorno mayorⁱ es un cuadrilátero bien proporcionado. El contorno mayor del *cap* es un triángulo; el *cap* tiene un vértice muy próximo, y más o menos centrado, al plano de la cara opuesta. Ambos tienen mediatrices con poco ángulo; pero en el *sliver* el centro puede permanecer cerca del tetraedro, mientras que el centro del *cap* se aleja cada vez más a medida que se aplasta.

Dado que la esfera del *cap* es inmensa, para una distribución homogénea, D solo puede tener *caps* en la frontera y con el centro fuera del H , pues en caso contrario la esfera contendría nodos.

En lo que concierne al cálculo, si hay un *cap* es porque el nodo que está muy cerca de la cara de frontera fue mal puesto por un generador de puntos ineficiente o empujado a la superficie por las ecuaciones en métodos de puntos. En el segundo caso se debe considerar que ese nodo es parte de la superficie y eliminar el *cap* del dominio.

El *sliver*, en cambio, es muy común en el interior de D , aún con nodos bien distribuidos, y es la principal fuente de falta de robustez de los programas. Los *slivers* son tan importantes y tan temidos, que hay varias publicaciones sobre métodos para eliminarlos, obteniendo una triangulación “mejor” que D ^[25,26,27,28,29,30].

Como corolario, la triangulación Delaunay, que es muy adecuada para el FEM en dos dimensiones, no es una buena triangulación en tres dimensiones y esto es casi exclusivamente por la presencia de tetraedros interiores aplastados a la manera de los *slivers*.

3.6 Implementación de la Triangulación Delaunay

Para desarrollar el programa que realiza la triangulación Delaunay de un conjunto de nodos dado, se utilizó el algoritmo de inserción aleatoria sobre una variante del método de Bowyer^[31]-Watson^[32]. El método consiste en agregar los nodos de a uno y en orden aleatorio a una triangulación preexistente, haciendo las modificaciones locales que se requieran para mantener la triangulación Delaunay. La información que se calcula es el

ⁱ Visto según una dirección perpendicular promedio de las caras.

conjunto de esferas vacías, para cada una se almacenan el centro, el radio y los cuatro nodos que la definen.

Supóngase la triangulación ya comenzada y en un estado intermedio, con una cierta cantidad de esferas ya definidas. Al agregar un nodo nuevo hay que buscar el conjunto de esferas que lo contienen y dejan de ser vacías, esas esferas deberán desaparecer y crearse nuevas esferas vacías definidas por el nuevo nodo y algunos nodos preexistentes.

3.6.1 Tetraedro Virtual

Para garantizar que todo nodo se encuentre en alguna esfera hay que proveer una triangulación de partida. La más sencilla (la que se implementó) es un gran tetraedro que envuelve al dominio. Los nodos “virtuales” de ese tetraedro se agregan antes de comenzar y son eliminados al final.

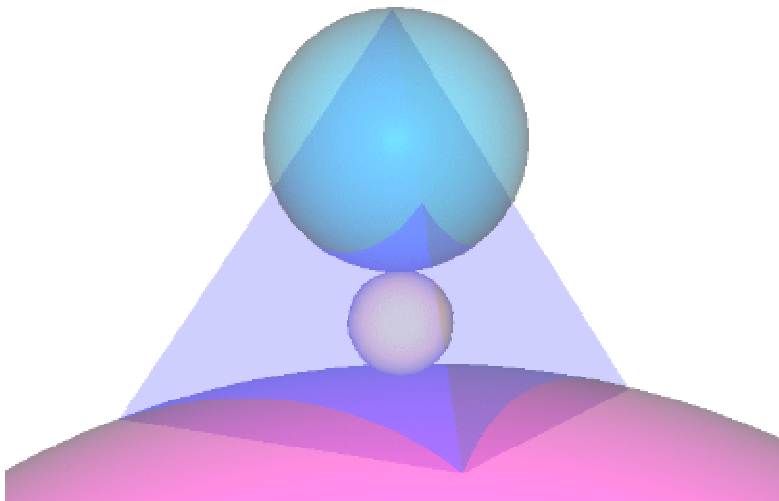


Figura 16: Tetraedro Virtual, contenedor esférico y esferas problemáticas.

En la figura se muestra el contenedor esférico de los nodos (la esfera central) centrado en el tetraedro virtual. La esfera superior tiene un nodo virtual en la superficie y es tangente al contenedor esférico. La esfera inferior tiene tres nodos del tetraedro virtual y también es tangente al contenedor esférico.

El Tamaño del tetraedro virtual está determinado a modo de impedir que genere errores de cálculo: Si es muy chico puede que algún nodo resulte muy cerca de una cara del tetraedro y se obtenga una esfera casi plana, cuyo centro resulte muy alejado (como la esfera inferior de la Figura 16). Por el contrario, si es muy grande, puede que uno de sus alejados vértices defina una esfera muy grande con tres nodos cercanos entre sí (esfera superior de la Figura 16). La inestabilidad numérica se producirá, en ambos casos, al tratar de averiguar si un cuarto nodo, cercano a alguno de los nodos que definen la esfera, está dentro o fuera de la

esfera. Tanto mayor será la dificultad cuanto menor sea la relación entre la distancia mínima entre nodos y el radio de la esfera.

Una posible solución sería rodear el dominio con bastante más que cuatro puntos, pero el tetraedro virtual funciona bien si tiene un tamaño intermedio razonable que puede ser el doble del mínimo necesario, que es aquel cuya esfera inscrita es el contenedor esférico de los nodos. Para simplificar el cálculo se utilizó un tetraedro cuya esfera inscrita tiene un radio igual a la diagonal del *bounding-box*.

Otro problema potencial asociado al tamaño del tetraedro virtual es que alguno de sus nodos puede estar contenido en un *cap* de la frontera, el *cap* entonces desaparece de la triangulación y el resultado de eliminar los tetraedros con nodos virtuales no es exactamente el *convex-hull* del conjunto de nodos. Para que eso no suceda, los nodos virtuales deberían alejarse infinitamente. El radio de la esfera superior de la Figura 16, o equivalentemente la distancia mínima entre nodos del conjunto y nodos virtuales, determina un límite a tener en cuenta en la identificación de la frontera por cualquier método.

En el tratamiento de la frontera que se desarrollará en el capítulo 5, y en general, esto sólo implica que no se pueden poner demasiado cerca los nodos virtuales. En síntesis: no representa ningún problema práctico.

3.6.2 Cavidad del nuevo nodo

El siguiente problema consiste en encontrar el conjunto de esferas que contienen al nuevo nodo y con ellas la cavidad del nuevo nodo en la triangulación preexistente. La cavidad, que en este contexto suele llamarse poliedro de inserción^[33], será luego reemplazada por una nueva triangulación local.

Para identificarla, se utilizan algunas propiedades analizadas en 3.3. Primero se busca una esfera que contenga al nuevo nodo y luego se construye la cavidad buscando el resto entre las esferas vecinas a cada una encontrada.

3.6.2.1 Primera Esfera y Costo del Algoritmo

La búsqueda de alguna esfera que contenga al nuevo nodo es la operación más costosa de todo el procedimiento, por lo tanto debe ser realizada con la ayuda de algoritmos que reduzcan el costo computacional del proceso.

El procedimiento consiste en partir de un nodo cualquiera, identificar el vecino más cercano al nuevo nodo y repetir la búsqueda hasta que el más cercano sea él mismo. La búsqueda de un tetraedro que contenga al nodo es sensiblemente más difícil que la búsqueda de una esfera que lo contenga. Si se busca el tetraedro, el proceso antes mencionado puede no converger^[34]. Pero, de acuerdo a lo analizado en 3.3 alrededor de la Figura 12, se puede ver que cuando un nodo es el más cercano de entre todos sus vecinos, alguna de sus esferas debe contener al punto.

El costo de este procedimiento es $O(e n^{1/d})$, donde d es la dimensión del problema, e es la cantidad máxima de esferas o de nodos vecinos por nodo y n la cantidad de nodos.

La cantidad e de esferas por nodo es un valor que crece mucho con el número de dimensiones, pero en dos o tres dimensiones no representa gran peso, excepto por los nodos virtuales y cuando los nodos se agregan por capas.

Cuando los nodos se incorporan en orden, se encuentran configuraciones como la que puede verse en la Figura 17, con muchas esferas conteniendo a un mismo nodo. Estas configuraciones encarecen notablemente el proceso. Siempre que se pueda, el orden de inserción debe ser aleatorio. Pero no siempre se puede, el caso de la figura corresponde a los primeros nodos en la generación de puntos que se explicará más adelante, de todos modos, aún en ese caso, los primeros nodos y algunos nodos interiores preubicados destruyen enseguida el orden y la velocidad de generación se acelera inmediatamente.

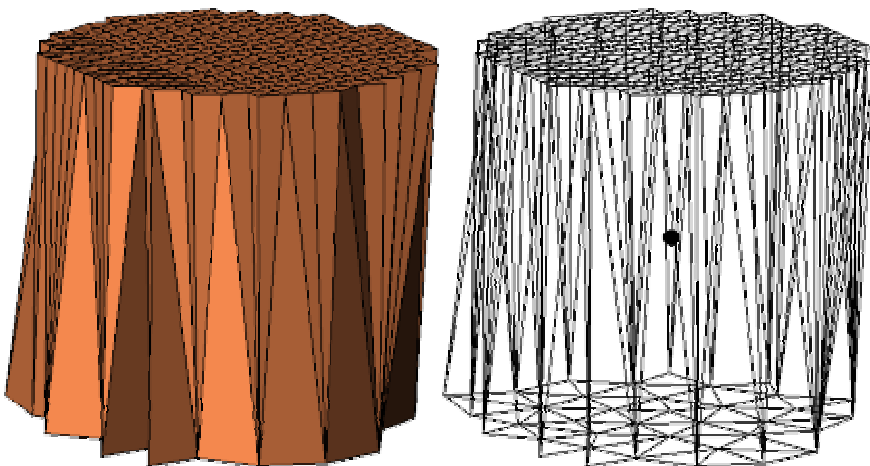


Figura 17: Cavidad de un punto con muchas esferas que lo contienen.

Los nodos virtuales también tienen gran cantidad de esferas, pero pueden ser evitados partiendo siempre de nodos interiores. Solo el primer nodo interior estaría fuera de este esquema, pero en realidad, la triangulación de partida se hace con el primer nodo ya incorporado.

En la triangulación propiamente dicha, con la nube de puntos como dato y suponiendo pocas dimensiones y una distribución razonablemente suave, el número de esferas por nodo está acotado y puede obviarse al calcular el costo computacional.

La parte $n^{1/d}$ del costo se explica por el hecho de que el algoritmo parte de un nodo cualquiera y recorre una línea unidimensional y aproximadamente rectilínea, en un conjunto d -dimensional de n nodos. Si la distribución es suave la longitud de una línea (medida en cantidad de nodos) será del orden indicado.

Para disminuir aún más el costo, se puede comenzar la búsqueda partiendo desde un nodo puesto que se sabe cercano al nuevo nodo a insertar. Se recurrió a una estructura de datos que divide el dominio en cajas pequeñas, cada caja no contiene más que una cierta cantidad fija de nodos cercanos entre sí, en nuestra implementación son 15 nodos por caja. La función de esta estructura es que al agregarle un nodo indique otro nodo cualquiera de entre los que ya estaban en la misma caja. De esa forma, la longitud de la línea de búsqueda no es mayor que unos pocos nodos (en cantidad fija) y el costo de la búsqueda se reduce a $O(n)$, pero ahora el costo está gobernado por el proceso más “caro” que es la construcción de la estructura de contenedores.

En particular se eligió utilizar un octree para albergar a los nodos y entregar un nodo cercano. El octree es un conjunto de cajas anidadas, cada una con un “padre” y (en 3D) ocho “hijos”. El primer padre es el *bounding-box* del conjunto de nodos. Al agregar un nuevo nodo se verifica que la caja no haya llegado ya a su límite de contención de unos pocos nodos; si alcanzó el límite, la caja se divide, por mitades, en ocho octantes iguales y los nodos se reparten.

La operación más costosa es la recorrida, entrando por el *bounding-box*, hasta llegar al hijo terminal en donde se alojará el nuevo nodo. En una distribución razonablemente homogénea (como las que se requieren para el FEM), el costo es $O(\log(n))$ para cada nodo agregado. La cota teórica para el costo computacional no es tan benigna, se pueden buscar configuraciones académicas de nodos que hagan difícil la tarea, por ejemplo cuando todos los nodos están en una misma línea excepto uno. En la práctica, para los algoritmos implementados, el costo total es lineal ($O(n)$) y depende más de factores tales como el manejo de la memoria que de cuestiones algorítmicas teóricas.

3.6.2.2 Posición de un Nodo respecto de una Esfera

Una vez encontrado el nodo más cercano se procede a buscar el conjunto de esferas que contienen al nuevo nodo y por lo tanto dejan de ser vacías.

Aquí el problema no es de costo sino numérico: hay que decidir que hacer con los nodos que están “muy cerca” de la superficie de una esfera. En cualquier problema de tamaño razonable se producirán errores invalidantes si se confía sólo en la precisión numérica de la computadora.

Para empeorar la situación, el error es de tipo absoluto. El esquema estándar del error es así: dos tetraedros Delaunay comparten una cara, ninguna de las dos esferas debe contener al nodo opuesto de la otra. Si el análisis se basara en una tolerancia relativa, que depende del radio de la esfera, a medida que el proceso avanza y las esferas se reducen, se producirá alguna incompatibilidad entre la decisión actual y alguna decisión previa. La tolerancia debe ser, entonces, un valor numérico absoluto. El problema puede relativizarse un poco si se escala todo el conjunto de posiciones nodales de modo que la distancia mínima entre nodos y el radio máximo de una esfera queden en un rango seguro entre los límites numéricos de la máquina, pero esos datos suelen ser desconocidos *a priori*.

El método que utilizamos para averiguar si un nodo está dentro de una esfera, cuando resulta muy cercano a la superficie, consiste en realizar un movimiento o perturbación del nodo a una distancia ϵ , muy pequeña y absoluta. Si el nodo a agregar se encuentra a menos que ϵ de la superficie de una esfera, el nodo se mueve $\epsilon/2$ hacia el centro o hacia afuera, según donde estaba originalmente. Luego ϵ se divide a la mitad. Debido a que la sumatoria finita de la serie $\frac{1}{2}^k$ es menor que uno, en sucesivos movimientos el nodo no saldrá de ninguna esfera que ya lo consideraba interior ni entrará en una que lo consideraba fuera. La cantidad de divisiones no es grande, aun en el peor caso en el que todos los puntos sean coesféricos, las primeras perturbaciones evitan las subsiguientes. El movimiento total del nodo no supera la distancia ϵ . Por cada nodo que se agrega, ϵ retoma su valor original.

Al finalizar la triangulación los nodos retoman sus posiciones originales. La consecuencia de haber perturbado los nodos será un error en los centros y radios de las esferas. En la identificación de conectividades y en la generación de mallas, las esferas sólo se utilizarán para definir los tetraedros. El error no tiene ninguna consecuencia en la medida en que no se necesita gran precisión en esos datos una vez finalizada la triangulación, ni gran precisión en la posición de los nodos durante la misma.

La idea del método proviene del sistema de evaluación de predicados geométricos SoS^[35], pero allí las perturbaciones son virtuales y se utiliza aritmética exactaⁱ, resultando en procesos muy precisos pero también muy costos. Aquí se optó por robustez y velocidad en lugar de precisión en las esferas.

La distancia ε inicial de cada nodo se podría tomar como una pequeña fracción de la distancia típica h entre nodos en la posición del nodo nuevo. Si se desconoce la función de distribución se puede conocer la mínima distancia entre nodos de toda la malla, o se puede dividir la diagonal del *bounding-box* por un valor que se relacione con la cantidad de nodos ($\sim n^{1/d}$) y la variabilidad de la distribuciónⁱⁱ, en la práctica un valor constante de 10^{-8} de la diagonal ha resultado adecuado para todos los casos.

3.6.2.3 Frontera de la Cavidad y Formación de *Slivers*

Una vez encontradas todas las esferas que contienen al nuevo nodo, se busca la frontera de la cavidad: el conjunto de triángulos formados por las caras de cada tetraedro de la cavidad cuyo vecino no esté en la cavidad. Las esferas se eliminan y se forman nuevas con el nodo y cada cara de frontera de la cavidad.

En esta etapa el problema más grave son los *slivers*. Ya se analizó en 3.3 que la cavidad no es necesariamente convexa y que el nuevo nodo ve a todas sus caras. Alguna cara puede tener una visibilidad marginal, con un ángulo muy pequeño. Cuando el nodo nuevo es prácticamente coplanar con una cara de la cavidad (adyacente a una concavidad) formará un *sliver* con esa cara.

Debe tenerse en cuenta que un punto puede ser bien interior a la esfera y aún así ser coplanar con una cara, basta con que se sitúe en el interior del círculo de la cara. Pero sucede que en tal caso el punto también pertenece a la esfera del vecino y eso no genera problemas. El problema es cuando el punto pertenece a una esfera y no a la opuesta, formando un *sliver* con la cara que ve casi de punta. Por eso, los *slivers* Delaunay se forman siempre con cuatro nodos que además de ser prácticamente coplanares son casi cocirculares.

ⁱ La precisión se aumenta por software, de a 32 bits, en la medida en que se va necesitando.

ⁱⁱ Suponiendo que no habrá mas de 10^9 puntos en 3D, una distribución homogénea dará una distancia entre nodos del orden de 10^{-3} por la diagonal del *bounding-box*, si admitimos una razonable falta de homogeneidad bastará con tomar 10^{-8} como factor multiplicador, para admitir además una generosa cantidad de divisiones por dos, en reales de 15 cifras.

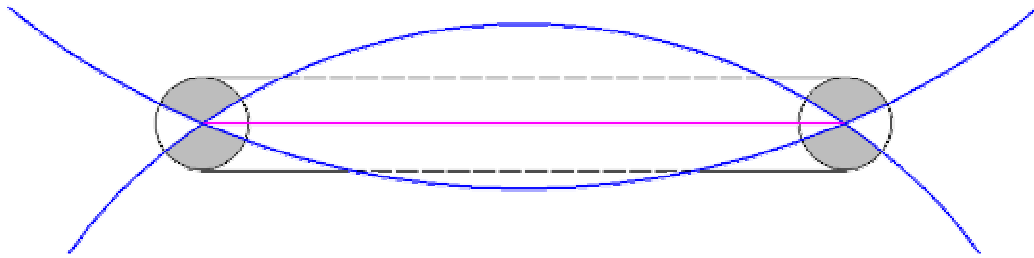


Figura 18: Zona donde un nuevo nodo producirá un *sliver*.

La Figura 18 es un corte de dos esferas vecinas por un plano que pasa por los centros, la circunferencia de la cara común se ve como un segmento horizontal. Los *slivers* se producen cuando el nuevo nodo cae en la zona sombreada. Dicha región se forma a partir de un pequeño toroide que rodea la circunferencia de la cara y es la parte del mismo que esta en una esfera pero no en la otra.

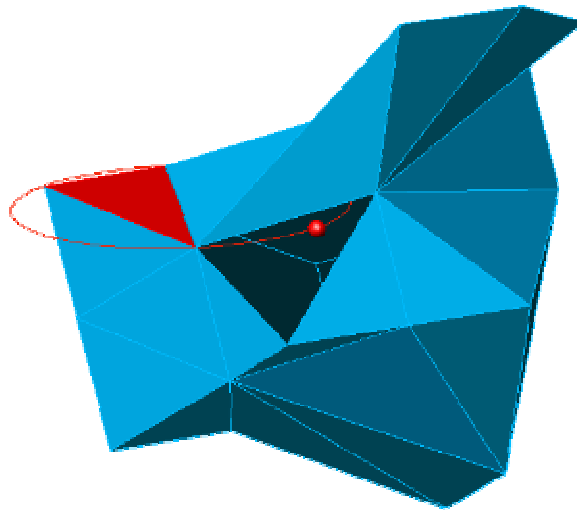


Figura 19: Cavidad de un punto prácticamente cocircular con una cara.

En la Figura 19 se muestra un caso real de una cavidad, con una cara eliminada para mostrar el punto interior que formará un *sliver*. El nodo a incorporar está prácticamente en la circunferencia de la cara resaltada en el dibujo. El nodo está dentro de la esfera del tetraedro que esta debajo de la cara marcada pero fuera de la esfera del tetraedro que está arriba y, por lo tanto, no forma parte de la cavidad.

El volumen de un *sliver* será del orden de σh^2 , donde σ es la pequeña distancia del punto al plano de la cara y h es la distancia típica entre nodos, el volumen del tetraedro es la sexta parte del determinante que se utiliza para el cálculo de la esfera. La perturbación del nuevo nodo, no resuelve entonces el problema numérico, pues el nodo se mueve menos que ϵ sobre las líneas que lo unen con el centro de cada esfera analizada. Si bien no están relacionados de forma sencilla, cuanto menor sea la perturbación, tanto menor será σ , es

decir que ε no debe ser extremadamente pequeño porque puede provocar una gran indefinición en el cálculo de la esfera y pérdida de estabilidad del programa. En el presente contexto es preferible el error en el centro o el radio de algunas esferas, antes que provocar errores numéricos que debiliten la robustez del programa completo.

3.6.3 Limpieza final

Al finalizar la inserción de nodos se procede a realizar algunas operaciones de mantenimiento.

En primer lugar, todos los nodos recuperan su posición original; con lo cual, como ya se aclaró, las esferas quedan definidas con algún error.

Los nodos virtuales del tetraedro gigante se eliminan, al igual que sus esferas, resultando en una triangulación (incompleta) del *convex-hull* de los nodos. La ausencia de algunos tetraedros muy aplastados (caps) en la frontera del *convex-hull* resulta totalmente irrelevante pues el proceso de reconocimiento de la frontera los eliminaría de todos modos.

4 Poliedros Esféricos y Teselación Delaunay Extendida

La Teselación Delaunay Extendida o EDT^[36] es una partición del *convex-hull* de un conjunto de nodos en poliedros de vértices aproximadamente coesféricos. Los poliedros se pueden llamar poliedros casi-esféricos o más sencillamente poliedros esféricos¹.

La EDT se genera mediante el siguiente procedimiento:

- 1) Triangulación Delaunay.
- 2) Unión de poliedros con esferas cercanas.
- 3) Captura de poliedros contenidos.

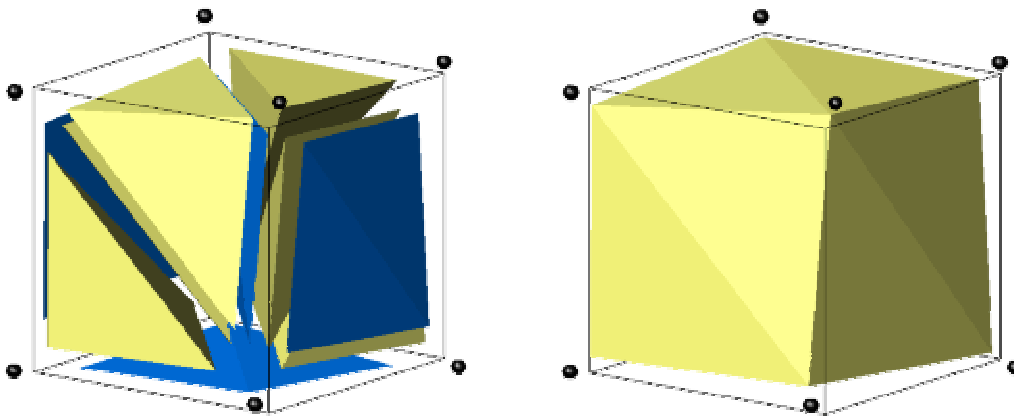


Figura 20: DT vs. EDT en una distribución cúbica de nodos.

Izquierda: Diez Tetraedros Delaunay.

Derecha: Un único Poliedro Esférico.

En la figura se representan ocho nodos en una distribución cúbica, que fue perturbada aleatoriamente para exagerar el efecto. La triangulación Delaunay de ese conjunto consiste en los diez tetraedros que se muestran reducidos e incluye cuatro *slivers* que se representaron en distinto color. A la derecha se puede ver la EDT de ese conjunto: un solo poliedro aproximadamente cúbico.

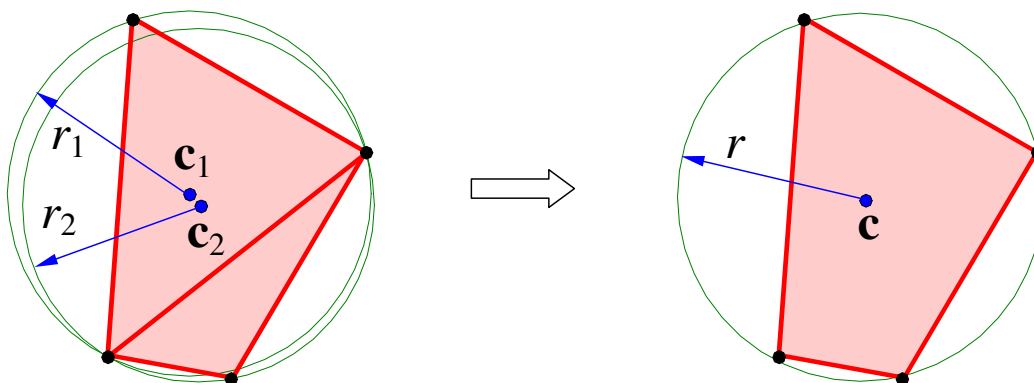


Figura 21: Formación de un Poliedro Esférico y asignación de la Esfera Media.

¹ La versión bidimensional se puede llamar polígono circular.

Supónganse dos símlices Delaunay vecinos como en la figura. Dado que sus esferas son huecas, ninguna puede contener completamente a la otra, entonces la proximidad de sus centros implica poca diferencia de radios:

$$d_c = \|\mathbf{c}_2 - \mathbf{c}_1\|, \quad d_r = |r_2 - r_1| \quad (5)$$

$$d_c + r_1 - r_2 \geq 0; \quad d_c + r_2 - r_1 \geq 0 \Rightarrow d_c \geq d_r \quad (6)$$

Por lo tanto, dos esferas de Voronoï con centros cercanos serán además parecidas en tamaño.

Siendo $r_m = \frac{1}{2}(r_1 + r_2)$ y δ un parámetro que definirá la proximidad, se define que:

$$\text{dos esferas son cercanas} \Leftrightarrow d_c \leq \delta r_m. \quad (7)$$

Si dos poliedros tienen esferas cercanas, se unen y se asigna al poliedro unión una esfera de radio y centro promedios, pesados por volumen. La razón del promedio ponderado se explicará más adelante con el proceso de captura.

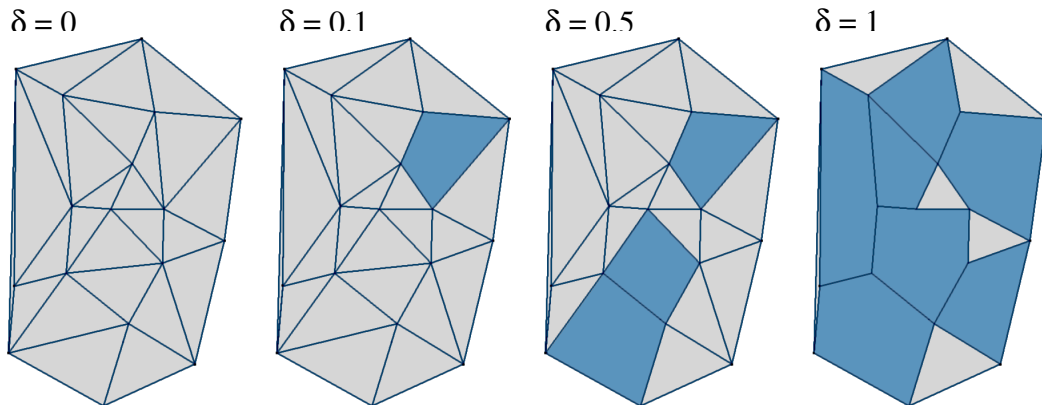


Figura 22: Serie de poliedrizaciones con δ variable.

En la figura se observa una secuencia de δ creciente. Cuando el factor de proximidad δ se acerque a la unidad, se unirán esferas separadas por una distancia aproximada al radio medio, obteniéndose poliedros que poco tendrán ya de esféricos.

Cuando el factor de proximidad δ es 0, la EDT es el dual (exacto) del diagrama de Voronoï, sólo hay poliedros en esferas con más de cuatro nodos (esferas supernumerarias). Cuando δ se aproxima a 0, la EDT también resulta una aproximación al dual de V y cuando δ crece, crece también la proporción de poliedros complejos (no simpliciales). La intención

primaria es unir tetraedros con esferas cercanas y *slivers* para mejorar la calidad de los elementosⁱ.

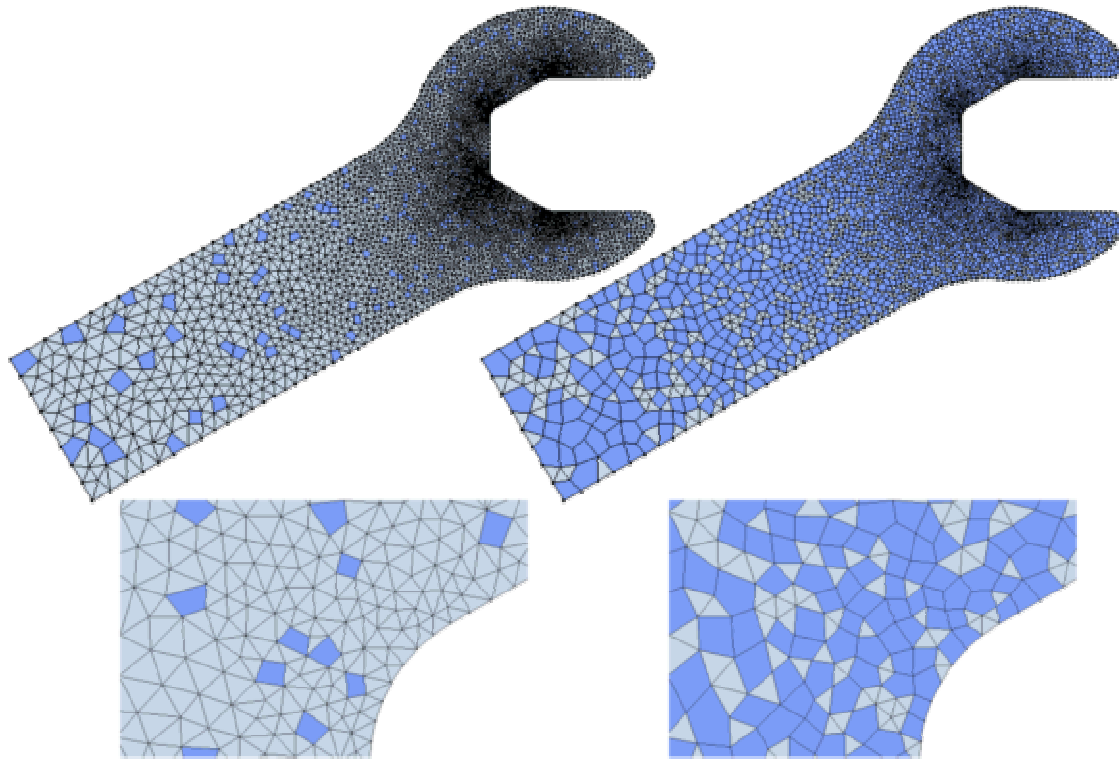


Figura 23: Proporción entre triángulos y polígonos para $\delta=0.1$ y $\delta=0.8$.

Abajo se muestran ampliaciones de una zona muy densa en la boca de la llave.

La triangulación inicial podría obviarse y construirse directamente el dual de Voronoï. Si se construye la triangulación, en caso de haber esferas supernumerarias, cualquier elección del conjunto de tetraedros estará bien. El único requisito es reconocer finalmente las caras del poliedro en forma correcta. Un tetraedro queda completamente determinado por sus vértices, pero un poliedro no; el poliedro requiere la identificación de sus caras. Cuando hay caras cocirculares no importa la elección de los triángulos, ni siquiera es importante que dos poliedros vecinos por una cara no triangular tengan los triángulos de la cara cruzados, se verá mas adelante que las funciones de forma igualmente serán correctasⁱⁱ.

No todos los *slivers* de la Figura 20, fueron unidos al cubo por tener esferas cercanas. Un *sliver* puede tener el centro de la esfera cerca de su centro geométrico, en el ejemplo de la figura sería en la cara del cubo y recién se unirían con $\delta \approx 1/2$, mucho más que el valor

ⁱ Calificando, más por experiencia que por arbitrariedad, se puede decir que un valor de 0.01 – 0.1 es suficiente para evitar *slivers* que arruinen la malla y bien por encima de 0.5 se pueden provocar errores para *debugging* o experimentación.

ⁱⁱ De todos modos, en la practica, la triangulación se hace perturbando los nodos coesféricos y los vecinos resultan con la cara límite definida del mismo modo.

adecuado. Los *slivers* son atrapados por un proceso que consiste en unir dos poliedros si uno tiene todos los nodos del otro. Un *sliver* suele ser interfase entre dos poliedros y sus nodos estar en ambos, en ese caso se une al que tenga el centro más cercano con la única finalidad de dejar la menor concavidad posibleⁱ.

La razón de la ponderación por volumen para ubicar el centro y radio del poliedro complejo es que los *slivers* tienen el centro muy alejado y poco volumen, el centro de la esfera del cubo de la Figura 20 debe depender mas de los tetraedros masivos que de los delgados *slivers*.

La EDT presenta falta de continuidad y unicidad como la DT. En lugar del *diagonal swapping*, hay un paso intermedio por un poliedro no simplicial, se puede decir que la discontinuidad se suaviza un poco en términos de nodos vecinos, pero aún así subsiste. La falta de unicidad, cuando $\delta \neq 0$, es consecuencia de que la relación de cercanía no es transitiva. Para definir bien el método, se comparan de a dos las esferas de poliedros en lugar de comparar varias esferas de tetraedros; el resultado dependerá del orden de búsqueda de esferas cercanas. Pero, dado un orden, el resultado queda determinado; de modo que no hay riesgo de indefiniciones peligrosas.

4.1 Concavidad de los poliedros

La EDT puede contener elementos cóncavos. En dos dimensiones las concavidades sólo se producen por un valor excesivo de δ , es posible verlo en la Figura 22, donde el polígono central, con $\delta = 1$, es levemente cóncavo. En tres dimensiones, las concavidades pueden tener otra causa y ser muy severas.

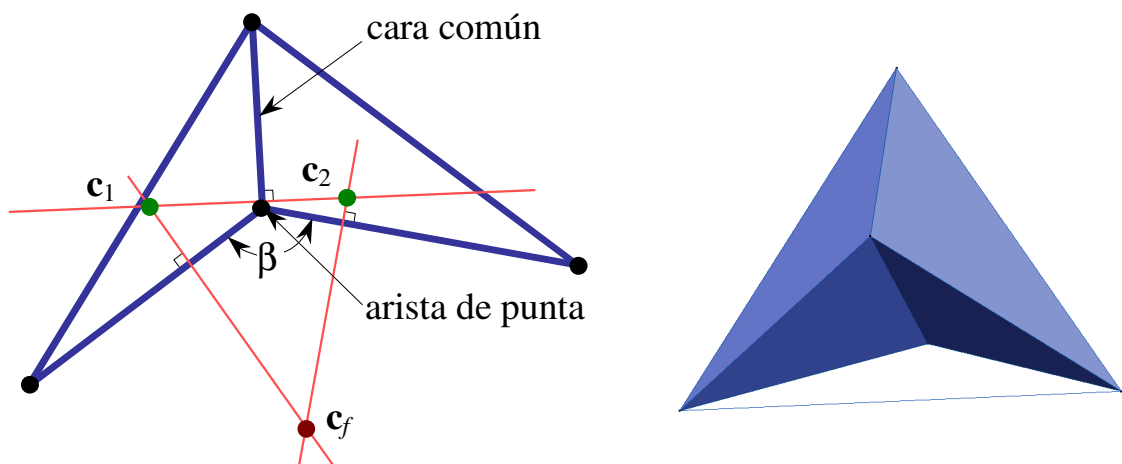


Figura 24: Concavidad formada al unir dos tetraedros

ⁱ La ubicación relativa del centro es opuesta al diedro más llano.

Cuando un tetraedro se proyecta sobre un plano perpendicular a una arista, la arista se ve como un punto y las caras que la contienen se ven como segmentos. En la parte izquierda de la figura se ven, así proyectados, dos tetraedros vecinos. La cara común se ve como un segmento casi vertical y una arista común se ve de punta, aproximadamente en el centro de la figura izquierda. Las dos caras no comunes que convergen en la arista de punta, forman un ángulo diedro β , que se aprecia en verdadera magnitud. Las mediatrices de las tres caras (vistas como líneas que unen los centros) son perpendiculares al plano del dibujo y a los respectivos segmentos.

Si ambos tetraedros se unen, será porque la distancia entre sus centros $\|c_1 - c_2\|$ es menor que δ multiplicado por el radio medio.

El diedro mencionado resultará una concavidad del poliedro, a menos que entre las dos caras que lo forman haya un tetraedro (faltante en el dibujo) cuyo centro debe estar en c_f . Si la esfera del tetraedro faltante es vacía, el tetraedro pertenece a la triangulación y el proceso de captura se encarga de unirlo al poliedro, rellenando así la concavidad. Si la esfera no es hueca como en la Figura 25, o el tetraedro se unió a otro poliedro, la concavidad quedará.

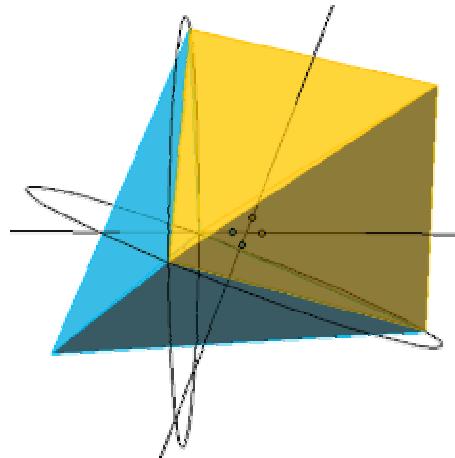


Figura 25: Concavidad muy pronunciada

El problema de la concavidad no es la existencia de Jacobianos negativos, como sería para los elementos estándar. El problema es numérico y aparecerá al calcular una función de forma en un punto interior del poliedro, pero muy cerca del plano de una cara.

Sólo se puede garantizar la inexistencia de grandes concavidades “explotando” los poliedros que posean tales concavidades, es decir dividiéndolos en sus tetraedros originales, pero se corre el riesgo de restaurar los *slivers* originales. También se podría hacer lo contrario: forzar la unión con el poliedro vecino, cuyo centro no debería estar muy

lejos, pero sin garantías de que la unión no genere nuevas concavidades en las aristas perimetrales de las caras comunes. La solución puede consistir en una combinación de ambas técnicas hasta adecuar el poliedro a las necesidades.

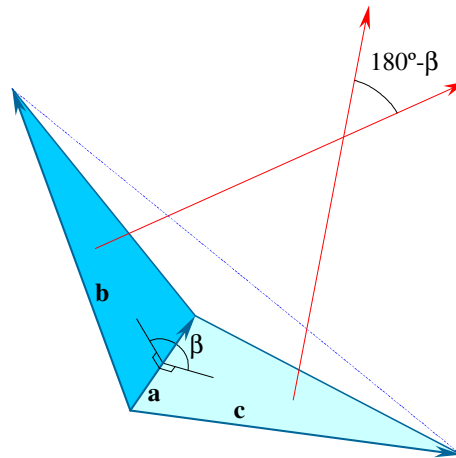


Figura 26: Ángulo Diedro entre dos caras de un tetraedro

El ángulo diedro β puede calcularse fácilmente a partir de las normales a las caras:

$$\sin(\beta) = \sin(180^\circ - \beta) = \frac{(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \times (\mathbf{c} \times \mathbf{a}) \cdot \mathbf{a}}{\|\mathbf{a} \times \mathbf{b}\| \|\mathbf{c} \times \mathbf{a}\| \|\mathbf{a}\|} = \frac{\|\mathbf{a}\| 6v}{\|\mathbf{a} \times \mathbf{b}\| \|\mathbf{c} \times \mathbf{a}\|} \quad (8)$$

Si las caras del poliedro están orientadas hacia fuera, el volumen v del tetraedro que corresponde al diedro (el tetraedro faltante) resultará negativo. De todos modos, el cálculo se realiza como en el penúltimo miembro.

5 Reconocimiento de la Frontera – *Alpha-Shapes*

La frontera de un conjunto de puntos no es algo matemáticamente bien definido. En la Figura 27 se muestra un conjunto de puntos a modo de ejemplo, en este caso es un paso de tiempo intermedio del problema de un chorro de líquido llenando un recipiente que también está representado por puntos, pero fijos. La única frontera bien definida para un conjunto arbitrario de puntos es el envoltorio convexo o *convex-hull* que se muestra arriba y a la derecha de la misma figura.

Una forma de reconocer la frontera (arbitraria, pero físicamente relevante) es a través del volumen de las celdas de Voronoï: A los nodos de frontera les corresponden poliedros de Voronoï más grandes que a los interiores. El cálculo del volumen de un poliedro es computacionalmente costoso; implica, como mínimo, la identificación de las caras, que es una operación bastante complicada.

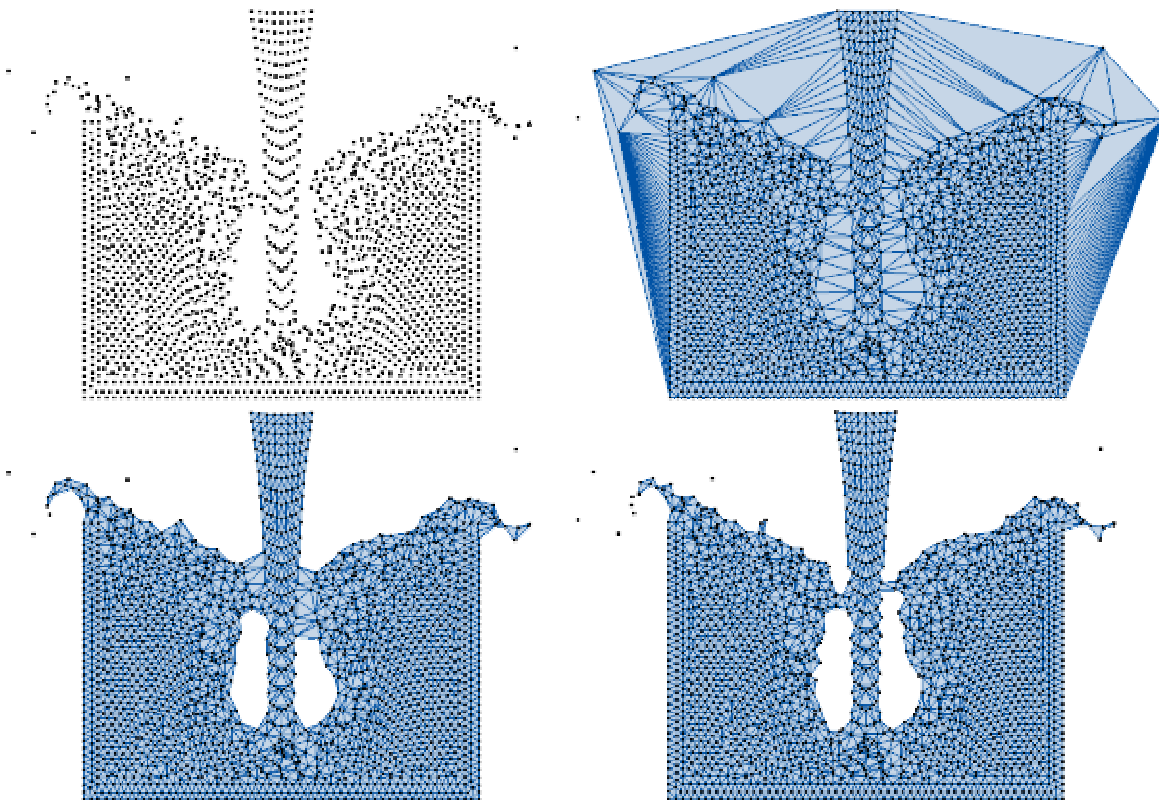


Figura 27: Fronteras posibles de una nube de puntos.

Un método mucho más sencillo consiste en utilizar *alpha-shapes*^[37]. Los elementos exteriores tienen esferas mayores que los interiores; si se eliminan todos los elementos cuya esfera tenga un radio mayor que cierto parámetro real α , se obtiene una malla (o *α -complex*), cuya frontera se denomina *α -shape* del conjunto de puntos dado. Además de

ser más sencillo que el cálculo del volumen de las celdas, los radios de las esferas ya vienen dados por el algoritmo de triangulación.

En la parte inferior de la figura se muestran los resultados obtenidos con dos valores de α distintos. Como se puede observar, algunos puntos quedan aislados y también aparecen huecos en el dominio. Cualitativamente, ambos resultados se corresponden en forma razonable con la física del problema.

El valor de α está íntimamente ligado a la densidad de puntos, el algoritmo de α -shapes captura variaciones de densidad y reconoce las zonas de alto gradiente como frontera. En la Figura 27 se puede ver que distintos valores de α generan fronteras distintas, pero aceptables en la medida en que los valores de α sean del orden de h , la distancia típica entre nodos vecinos. En la Figura 28 se puede observar la correcta identificación de algunas burbujas en el seno del líquido.

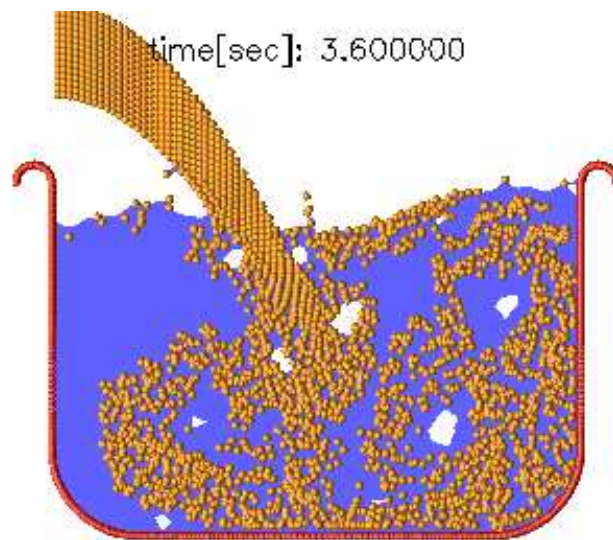


Figura 28: Burbujas en el α -Shape de un proceso de mezcla.

También ligada con α está la curvatura de la superficie, puesto que α mide el radio de la esfera más grande que admite el dominio. Con un valor infinito para α se obtiene, como frontera, el *convex-hull*ⁱ, con valores menores que h se generan muchos huecos (burbujas geométricas, no físicas) y con valores muy pequeños ($\sim 0.6h$) desaparecen todos los tetraedros.

En los métodos numéricos, en general, se requiere mayor precisión de cálculo en algunas zonas que en otras, pero sin aumentar uniformemente la densidad de puntos y con ella la

ⁱ En realidad el máximo α posible, con el método empleado para la triangulación, es la mitad de la distancia mínima entre nodos dados y nodos virtuales, valor que es mucho mayor que cualquier α utilizable con sentido técnico.

cantidad de incógnitas y la complejidad del problema. Cuando se tiene una densidad de puntos intencionalmente variable en el seno del dominio, la definición original de *alpha-shapes* no sirve. Un valor de α similar al h máximo cerraría artificialmente las concavidades de la geometría en las zonas de alta densidad y uno similar al h menor dejaría huecos artificiales en la zona con pocos puntos. Para poder trabajar sobre conjuntos de puntos con densidad no uniforme, α debe considerarse como un factor que multiplica al h variable.

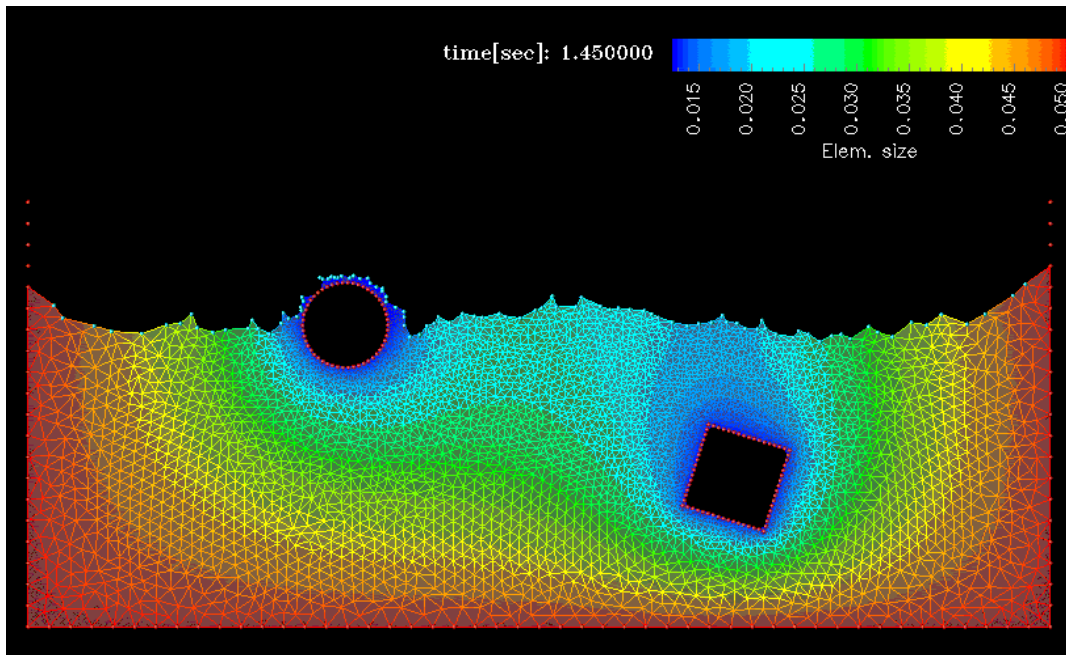


Figura 29: Superficie libre sobre una distribución de densidad variable.

Debe hacerse una consideración especial sobre el valor de h que se usa como comparador: No se toma el valor asociado a la posición del centro de la esfera, que puede estar arbitrariamente alejado de los nodos (al menos en los nodos de la frontera), tampoco conviene utilizar el mínimo o el máximo pues hay elementos aplastados en la frontera que son justamente los que deben eliminarse y unen nodos de zonas muy distantes. Utilizando el valor $\langle h \rangle$ promedio de los nodos del tetraedro y un valor de $\alpha \sim 1.2 - 1.4$ se obtienen resultados aceptables.

Las fronteras sólidas generalmente vienen dadas por un conjunto de puntos con “excesiva regularidad”, muchas veces en distribución rectangular, los cuatro nodos de un rectángulo son cocirculares y por lo tanto se genera una gran cantidad de *slivers* contra la frontera. Por ello, además del criterio de *alpha-shape*, los *slivers* de frontera son eliminados independientemente del radio de su esfera.

En resumen, el algoritmo de definición de la frontera consiste en un recorrido por la lista de esferas, cuando alguna tiene un radio mayor que $\alpha \cdot \langle h \rangle$, sus nodos se marcan como frontera, sus vecinos se marcan como vecinos de la frontera y el elemento se elimina de la malla. Luego se eliminan los *slivers* de frontera buscando entre las esferas vecinas de la frontera, aquellas que tengan un volumen mucho menor que $\langle h \rangle^3$, en la práctica utilizamos un factor fijo de 10^{-2} . Con esto se obtiene una frontera adecuada a la densidad de puntos aún cuando ésta sea variable.

6 Medida de la Calidad para elementos Poliédricos

Un elemento adecuado para el FEM debe tener el tamaño requerido $h(\mathbf{x})$ para satisfacer una cota local de error y no debe estar muy distorsionado para garantizar que el gradiente de las funciones de forma (en módulo y adimensionalizado con h) no resultará excesivamente grande. Para un generador de mallas deben considerarse ambos aspectos; pero para una triangulación o una poliedrización, cuando la distribución de nodos está prefijada, solo hay que analizar la distorsión del elemento.

La calidad de forma o métrica de distorsión de un elemento, puede ser definida directamente mediante los módulos de los gradientes de las funciones de forma^[38], es:

$$\text{Calidad} = \text{m\u00e1ximo gradiente} \frac{\text{esperado}}{\text{obtenido}} \text{ de las funciones de forma.} \quad (9)$$

Hay muchas medidas “geom\u00e9tricas” de la calidad de los elementos^[39], se basan en longitudes de aristas, radios de esfera circunscrita o inscrita o en invariantes del Jacobiano de la transformaci\u00f3n a un elemento patr\u00f3n o master. Las medidas geom\u00e9tricas son solamente una forma econ\u00f3mica de obtener un valor correlacionado con el que brinda la ecuaci\u00f3n (9). Se utilizan para realizar el c\u00e1lculo muchas veces, por ejemplo en los procesos de suavizado.

Las medidas geom\u00e9tricas se definen para cada tipo de elemento, pero para un poliedro en general es preferible el c\u00e1lculo directo; que puede ser m\u00e1s costoso, pues requiere del c\u00e1lculo de los gradientes de las funciones de forma, pero la EDT no requiere suavizado; la medida de la calidad s\u00f3lo se utiliza para hacer estad\u00edsticas en una malla, una sola vez y con fines acad\u00e9micos.

Para una dada distancia h_{min} , m\u00ednima local entre nodos vecinos, las funciones de forma ϕ var\u00edan entre 0 y 1 y el gradiente esperado es entonces del orden de h_{min}^{-1} independientemente del tipo y forma del poliedro.

En un tetraedro, el gradiente de la funci\u00f3n de forma lineal de un nodo es constante, apunta hacia el nodo y es perpendicular a la cara opuesta. En el centro geom\u00e9trico toman todas el mismo valor ($1/4$) y se anulan en las respectivas caras opuestas. El gradiente m\u00e1ximo resulta de dividir la variaci\u00f3n entre $1/4$ y 0 por la distancia del centroide a la cara m\u00e1s cercana. Para el tetraedro regular esa distancia es el radio de la esfera inscrita, la calidad definida seg\u00fan (9) resulta $\gamma = \sqrt{2/3} \approx 0.82$. Si el tetraedro es aplastado, las funciones de forma cambiar\u00e1n mucho m\u00e1s r\u00e1pido.

En un poliedro cualquiera, no hay una sola esfera inscrita y calcular la mínima puede ser costoso. Además los gradientes no son constantes ni perpendiculares a las caras. La ecuación (9) se puede aproximar midiendo el máximo gradiente en un punto interior preestablecido, el más adecuado parece ser el centro de volumenⁱ \mathbf{g} , definiendo la calidad γ según:

$$\gamma = (h_{min} \max(\|\nabla\phi(\mathbf{g})\|))^{-1} \quad (10)$$

Dependiendo del modo de obtener h_{min} se pueden tener variantes, en algunos casos el valor de h de cada nodo viene dado y en otros debe medirse la mínima longitud de las aristas.

Si bien esta medida es una aproximación a (9), la ventaja de la ecuación (10) estriba en que es una mejor aproximación a la necesidad real que otras medidas geométricas y, fundamentalmente, que es apta para todo tipo de poliedros.

ⁱ En un tetraedro el centro de volumen coincide con la posición promedio de los nodos, en un poliedro se calcula como promedio ponderado por volumen de los centroides de los símlices que lo componen.

7 Coordenadas Laplacianas Elementales

7.1 Interpolación - Funciones de Forma

Dado un conjunto de nodos $\mathbf{N} = \{\mathbf{p}_q\}$ y una variable o propiedad tensorial \mathbf{f}_q asignada a cada nodo, el proceso de interpolación asigna un valor $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ a cada punto \mathbf{x} del espacio. En sentido estricto, la interpolación requiere que $\mathbf{f}(\mathbf{p}_q) = \mathbf{f}_q$, en caso contrario se denomina regresión; también se debería restringir al interior del $H(\mathbf{N})$, pues fuera de él se denomina extrapolación.

Hay muchas formas de construir la función y sus propiedades dependerán del método. Un mecanismo muy versátil es la combinación lineal de los valores nodales:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) \approx \phi^q(\mathbf{x}) \mathbf{f}_q, \quad q \in \{1, \dots, n\}^i. \quad (11)$$

La función queda entonces definida por un conjunto de funciones reales $\{\phi^q(\mathbf{x})\}$ que son los pesos, interpolantes o funciones de forma de cada nodo en el punto. La función hereda las propiedades de suavidad y continuidad de las funciones de forma.

Algunas propiedades que suelen requerirse a los interpolantes son:

$$1) \quad \phi^q(\mathbf{p}_r) = \delta_r^q \quad (\text{delta de Kronecker}) \quad (12)$$

La propiedad de la delta de Kronecker implica que la función evaluada en un nodo resultará igual a la variable asignada al nodo:

$$\mathbf{f}(\mathbf{p}_r) \approx \mathbf{f}_q \delta_r^q = \mathbf{f}_r. \quad (13)$$

Para un interpolante propiamente dicho es una propiedad necesaria, no es así para problemas de regresión o *data-fitting*, cuando hay nodos supernumerarios y se requieren condiciones de suavidad.

$$2) \quad \sum_q \phi^q(\mathbf{x}) = 1 \quad (\text{partición de la unidad}) \quad (14)$$

$$3) \quad \mathbf{x} = \mathbf{p}_q \phi^q(\mathbf{x}) \quad (\text{coordenada local}) \quad (15)$$

La propiedad 3 implica a la 1 pues, siendo las posiciones nodales arbitrarias:

$$\mathbf{x} = \mathbf{p}_q \phi^q(\mathbf{x}) \Rightarrow \mathbf{p}_r = \mathbf{p}_q \phi^q(\mathbf{p}_r) \Rightarrow \phi^q(\mathbf{p}_r) = \delta_r^q \quad (16)$$

Las propiedades 2 y 3 (con la 1 implícita) garantizan que se pueda representar exactamente cualquier función lineal satisfecha por los nodos (*linear completeness*). Si \mathbf{t} es un tensor

ⁱ Como es usual, la sumatoria para el conjunto de nodos estará implícita siempre que haya un par índice-superíndice iguales y el símbolo de la sumatoria se omitirá.

constante, \cdot representa producto o contracción y tanto la constante \mathbf{c} como la función \mathbf{l} son tensores del orden adecuado, resulta entonces:

$$\mathbf{l}(\mathbf{x}) \approx \mathbf{l}_q \phi^q(\mathbf{x}) = \Sigma (\mathbf{t} \cdot \mathbf{p}_q + \mathbf{c}) \phi^q(\mathbf{x}) = \mathbf{t} \cdot (\mathbf{p}_q \phi^q(\mathbf{x})) + \mathbf{c} \Sigma \phi^q(\mathbf{x}) = \mathbf{t} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{c} = \mathbf{l}(\mathbf{x}) \quad (17)$$

Una propiedad más que puede exigirse es:

$$4) \quad \phi^q \geq 0 \quad (\text{semi definidas positivas}) \quad (18)$$

Las propiedades 2 y 4 implican que la función se mantendrá entre el mínimo y el máximo de los valores nodales (combinación convexa):

$$\begin{aligned} \mathbf{f}(\mathbf{x}) &\leq \Sigma_q \max(\mathbf{f}_r) \phi^q(\mathbf{x}) = \max(\mathbf{f}_r) \\ \mathbf{f}(\mathbf{x}) &\geq \Sigma_q \min(\mathbf{f}_r) \phi^q(\mathbf{x}) = \min(\mathbf{f}_r) \end{aligned} \quad (19)$$

Las funciones de forma suelen definirse con funciones polinómicas de las coordenadas y denominarse de acuerdo al grado o al tipo de polinomio. Otras veces son definidas a través de funciones geométricas que ligan el punto con el contexto. Para satisfacer la propiedad 4, suele recortarse el soporte de las funciones y definir las nulas fuera de él. Si las funciones de forma tienen soporte local (se anulan lejos del nodo) la combinación convexa resulta también local y garantiza que la función interpolada oscilara entre los valores nodales.

7.2 Coordenadas Laplacianas

Hay dos mecanismos básicos para construir interpolantes a partir del diagrama de Voronoï: el método de Sibson y las coordenadas Laplacianas^[40,41,42,43,44,45]. Ambos se basan en el diagrama de Voronoï de segundo orden, que consiste en una ampliación del diagrama original con la celda del punto variable. Aquí analizaremos las coordenadas Laplacianas que son más fáciles de implementar en 3D pues requieren cálculos de áreas en lugar de los volúmenes requeridos por las Sibsonianas.

Si se agrega el punto de cálculo variable \mathbf{x} , el diagrama de Voronoï $V(\mathbf{N} \cup \{\mathbf{x}\})$ es una alteración local de $V(\mathbf{N})$ con la región $V_{\mathbf{x}}$ del punto variable.

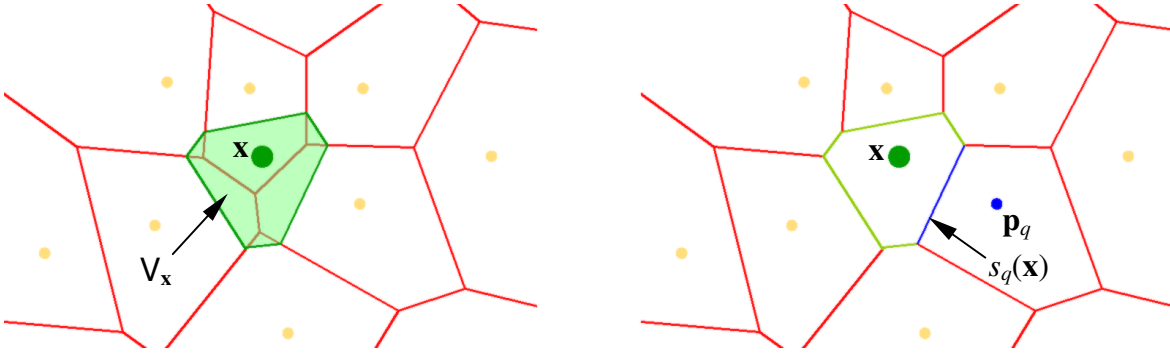


Figura 30: Diagrama de Voronoï ampliado con la celda del punto variable.

En 2D/3D, las coordenadas Sibsonianas se basan en las áreas/volúmenes de la intersección de las celdas, las Laplacianas en las longitudes/áreas de la frontera común y ambas se definen como el cociente de la medida correspondiente al nodo y la distancia al nodo normalizando para que la suma sea unitaria.

La medida de la frontera entre el poliedro del punto V_x y el poliedro del q -ésimo nodo V_q (longitud en 2D, área en 3Dⁱ) es $s_q(\mathbf{x})$. Las coordenadas Laplacianas de un punto (que no coincide con ningún nodo y no está en la superficie ∂H del *convex-hull*) se definen por:

$$\phi^q(\mathbf{x}) = \frac{\Phi^q(\mathbf{x})}{\sum \Phi^r(\mathbf{x})} = \frac{\frac{s_q(\mathbf{x})}{\|\mathbf{p}_q - \mathbf{x}\|}}{\sum \frac{s_r(\mathbf{x})}{\|\mathbf{p}_r - \mathbf{x}\|}} \quad (\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d - \{N \cup \partial H\}) \quad (20)$$

Los únicos valores no nulos de s_q y, por lo tanto de ϕ^q son aquellos en que el nodo \mathbf{p}_q es un vecino natural del punto. La sumatoria del denominador es el factor normalizador que garantiza la partición de la unidad.

7.3 Propiedades

Las funciones accesorias Φ^q están bien definidas en todo el espacio, excepto en los nodos pues la distancia resulta nula y en la frontera del *convex-hull*, donde el poliedro se hace ilimitado y tiene intersecciones de medida infinita con el diagrama.

Si el punto de calculo se acerca a un nodo, pero sin coincidir, entre ambos se reparten el poliedro que originalmente era del nodo, partiéndolo con la mediatriz del segmento que los une.

ⁱ En \mathbb{R}^d es siempre la medida (de Lebesgue) de la interfase $(d-1)$ -dimensional. En 3D por ejemplo, si dos poliedros tienen una sólo arista en común, la medida (bidimensional) es nula.

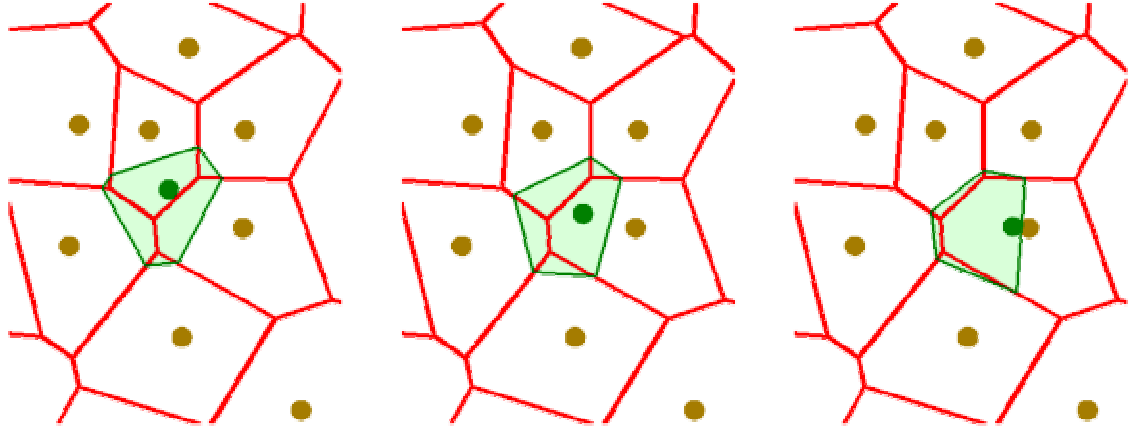


Figura 31: Secuencia de aproximación del punto móvil a un nodo.

La medida de la intersección permanece finita a medida que la distancia entre los nodos se reduce hasta anularse, de donde:

$$\lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{p}_q} \frac{s_q(\mathbf{x})}{\|\mathbf{p}_q - \mathbf{x}\|} = \infty \quad (21)$$

La suma del denominador en (20) tiene un solo término infinito, el correspondiente al nodo cuya distancia se anula:

$$\lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{p}_q} \sum \frac{s_r(\mathbf{x})}{\|\mathbf{p}_r - \mathbf{x}\|} = \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{p}_q} \frac{s_q(\mathbf{x})}{\|\mathbf{p}_q - \mathbf{x}\|} = \infty, \quad (22)$$

entonces:

$$\lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{p}_q} \phi^q(\mathbf{x}) = 1 \quad \text{y} \quad \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{p}_r} \phi^q(\mathbf{x}) = 0 \quad (23)$$

Dado que las discontinuidades en los nodos son evitables, para que la definición soporte a los nodos, se amplía poniendo:

$$\phi^q(\mathbf{p}_r) = \delta_q^r. \quad (24)$$

La discontinuidad en la frontera del *convex-hull* se resolverá (favorablemente) mas adelante, al tratar las coordenadas Laplacianas restringidas al poliedro. Por ahora la definición sólo vale en el interior, incluyendo ahora a los nodos.

Las coordenadas Laplacianas son coordenadas locales: Cuando el teorema de la divergencia de Gauss se aplica a la función identidad, se deduce que la integral de las áreas orientadas de una superficie cerrada es nula. La versión discreta, para poliedros, se conoce como teorema de Minkowski y establece que la suma de los vectores área de las caras de un poliedro es nula.

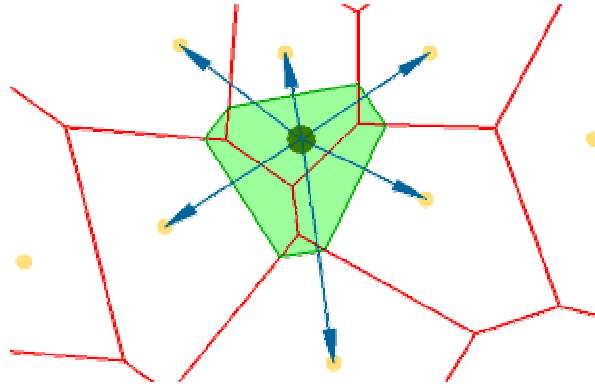


Figura 32: Teorema de Minkowski sobre la Celda del punto de cálculo

Aplicado a la celda del punto móvilⁱ, una cara es mediatriz perpendicular al segmento que une el punto con un nodo vecino y la normal es un versor en la dirección del segmento. Se obtiene entonces:

$$\mathbf{0} = \sum s_q \frac{(\mathbf{p}_q - \mathbf{x})}{\|\mathbf{p}_q - \mathbf{x}\|} = \sum \Phi^q (\mathbf{p}_q - \mathbf{x}) = \Phi^q \mathbf{p}_q - \mathbf{x} \sum \Phi^q \Rightarrow \mathbf{x} = \phi^q \mathbf{p}_q \quad (25)$$

La propiedad de ser definidas positivas se cumple pues las áreas y las distancias involucradas son todas positivas.

Para analizar la suavidad y la continuidad de las funciones de forma, se puede observar que una Φ^q no nula disminuye con suavidad C^∞ a medida que el punto se aleja del correspondiente nodo. Analizando la Figura 31, puede verse que alejando el punto de un nodo, la interfase se achica entre segmentos de Voronoi hasta anularse en un vértice del diagrama; en esa situación el nodo y el punto equidistan del vértice que es el centro de una esfera del nodo que contenía al punto, es decir que el punto ha llegado a la superficie de una esfera del nodo. En resumen: las coordenadas Laplacianas correspondientes a un nodo son positivas en el interior del entorno natural del nodo y nulas en la frontera y el exterior. Entre esferas varía con suavidad C^∞ y en la superficie de las esferas es continua.

7.4 Cálculo de las Funciones y sus Derivadas

El algoritmo de cálculo de las coordenadas Laplacianas se basa en la secuencia de caras adyacentes a cada nodo del poliedro de inserción del punto. Se construye una esfera con el punto variable \mathbf{x} y cada caraⁱⁱ de la cavidad, los centros son vértices de la región de Voronoi, $V_{\mathbf{x}}$, asociada al punto variable.

ⁱ Supuesta finita, es decir con el punto dentro del $H(N)$.

ⁱⁱ En tres dimensiones, aún cuando haya mas de tres nodos coplanares las esferas se definen entre el punto y las caras triangulares que provienen de los tetraedros que se unieron para formar el poliedro.

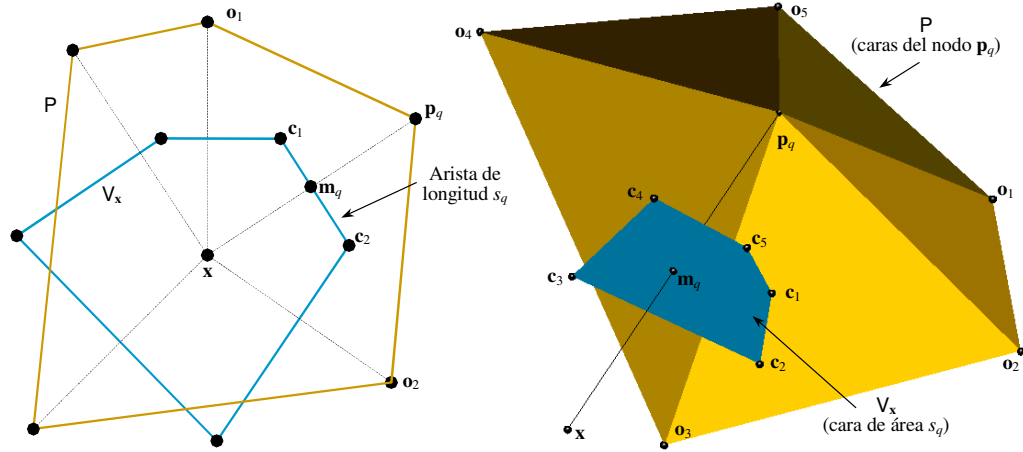


Figura 33: Elementos para el cálculo de las Coordenadas Laplacianas en 2 y en 3 dimensiones.

La figura muestra los elementos que se utilizan para calcularlas. A la izquierda, en 2D, se representan la cavidad P y la celda de Voronoi V_x correspondiente al punto variable. A la derecha, el poliedro tridimensional se ve desde el interior y sólo se muestran las caras adyacentes a un vértice y la correspondiente cara de V_x que parte por la mitad al segmento que une el punto x y el nodo p_q .

Para ahorrar términos en las ecuaciones siguientes, el origen de coordenadas se considerará en el punto x variable.

Por cada nodo p_q de P , con $q \in \{1, \dots, m\}$, hay una cara de V_x , de medida s_q , cuyo plano corta perpendicularmente y por la mitad al segmento (x, p_q) en el punto m_q .

$$\mathbf{m}_q = \mathbf{p}_q / 2. \quad (26)$$

El conjunto de e nodos \mathbf{o}_r ($r \in \{1, \dots, e\}$), que comparten aristas del poliedro con p_q , se puede poner en secuencia circular, al igual que los centros \mathbf{c}_r de las e esferas definidas por x, p_q y cada par contiguo $(\mathbf{o}_r, \mathbf{o}_{r \oplus 1})^i$ de nodos adyacentes. Con ello, la superficie s_q se puede calcular subdividiéndola en triángulos de área s_{qr} , definidos por cada arista $(\mathbf{c}_r, \mathbf{c}_{r \oplus 1})$ y el punto medio \mathbf{m}_q del segmento (x, p_q) :

$$s_q = \sum_r s_{qr}. \quad (27)$$

Las funciones accesorias que definen las coordenadas Laplacianas según (20) quedan como sigue:

$$\Phi^q = \frac{\sum_r s_{qr}}{\|\mathbf{p}_q\|} \quad (28)$$

ⁱ Con $r \oplus 1$ se indicará “el posterior al r -ésimo en orden circular”, el posterior al último es el primero.

Cada triángulo de área s_{qr} puede ser visto como la base de un tetraedro de volumen v_{qr} y altura $\|\mathbf{m}_q\|$, definido por los puntos $\{\mathbf{x}, \mathbf{m}_q, \mathbf{c}_r, \mathbf{c}_{r\oplus 1}\}$, dado que la base y la altura son perpendiculares entre sí:

$$s_{qr} = \frac{3 v_{qr}}{\|\mathbf{m}_q\|} = \frac{(\mathbf{c}_r, \mathbf{c}_{r\oplus 1}, \mathbf{m}_q)}{2\|\mathbf{m}_q\|} = \frac{(\mathbf{c}_r, \mathbf{c}_{r\oplus 1}, \mathbf{p}_q)}{2\|\mathbf{p}_q\|} \quad (29)$$

Omitiendo el factor 2 que se eliminará entre el numerador y el denominador de la ecuación (20), para calcular las coordenadas Laplacianas elementales se implementa la siguiente ecuación:

$$\Phi^q = \frac{\sum_r (\mathbf{c}_r, \mathbf{c}_{r\oplus 1}, \mathbf{p}_q)}{\mathbf{p}_q^2} = \sum_r (\mathbf{c}_r \times \mathbf{c}_{r\oplus 1}) \cdot \frac{\mathbf{p}_q}{\mathbf{p}_q^2} \quad (30)$$

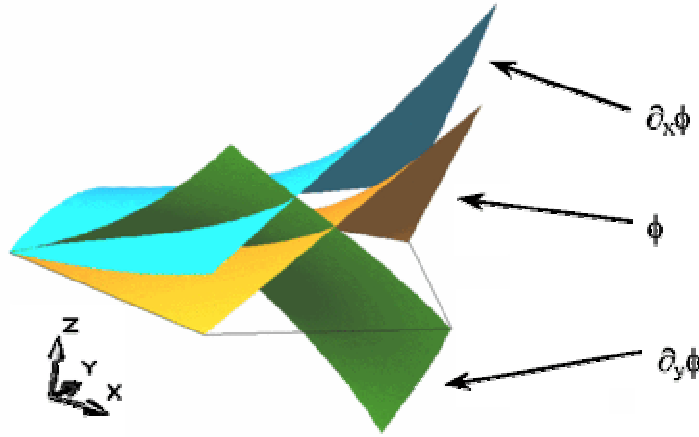


Figura 34: Función de Forma y sus derivadas en un pentágono.

Derivando respecto de \mathbf{x}^i ($i \in \{1, 2, 3\}$) que está implícitamente restado a todo vector y llamando \mathbf{e}_i a los versores de la base cartesiana:

$$\partial_i \mathbf{p}_q = -\mathbf{e}_i \quad (31)$$

$$\partial_i \mathbf{p}_q^2 = -2 \mathbf{p}_q \cdot \mathbf{e}_i = -2 p_q^i \quad (32)$$

$$\partial_i (\mathbf{p}_q / \mathbf{p}_q^2) = 2 \mathbf{p}_q (\mathbf{p}_q \cdot \mathbf{e}_i) / \mathbf{p}_q^4 - \mathbf{e}_i / \mathbf{p}_q^2 \quad (33)$$

$$\partial_i (\mathbf{c}_r \times \mathbf{c}_{r\oplus 1}) = \partial_i \mathbf{c}_r \times \mathbf{c}_{r\oplus 1} + \mathbf{c}_r \times \partial_i \mathbf{c}_{r\oplus 1} \quad (34)$$

Las derivadas del centro de la esfera respecto de un punto de definición se obtienen resolviendo el sistema de ecuaciones derivadas de la ecuación (2) que define el centro y radio:

$$\mathbf{p}_r \cdot \partial_i \mathbf{c} = (\mathbf{c} - \mathbf{p}_r) \cdot \mathbf{e}_i \quad (35)$$

donde el origen es \mathbf{x} y los otros tres puntos de definición son \mathbf{p}_q , \mathbf{o}_r y $\mathbf{o}_{r\oplus 1}$. El determinante de los coeficientes es el mismo que para el centro de la esfera y por tanto los

problemas numéricos también son los mismos. La rutina que calcula esferas (centro y radio), puede calcular, si se le pide, las derivadas al mismo tiempo.

Finalmente, las derivadas se calculan con las siguientes fórmulas:

$$\partial_i \Phi^q = \sum_r \left\{ \frac{(\partial_i \mathbf{c}_r \times \mathbf{c}_{r \oplus 1} + \mathbf{c}_r \times \partial_i \mathbf{c}_{r \oplus 1}) \cdot \mathbf{p}_q - (\mathbf{c}_r \times \mathbf{c}_{r \oplus 1})^i}{\mathbf{p}_q^2} + \frac{2 (\mathbf{c}_r, \mathbf{c}_{r \oplus 1}, \mathbf{p}_q) \mathbf{p}_q^i}{\mathbf{p}_q^4} \right\} \quad (36)$$

$$\partial_i \phi^q = (\partial_i \Phi^q \sum_r \Phi^r - \Phi^q \sum_r \partial_i \Phi^r) / (\sum_r \Phi^r)^2 \quad (37)$$

7.5 Coordenadas Laplacianas Elementales

En un elemento estándar del FEM, las funciones de forma se definen sobre un *master* o patrón, que es un poliedro o polígono del mismo tipo (idéntica cantidad y conectividad de nodos) pero de forma, tamaño y posición canónicas. Las funciones de forma de un punto en el interior del elemento requieren de una transformación del elemento al *master*, el Jacobiano de la transformación indica la distorsión y el tamaño del elemento.

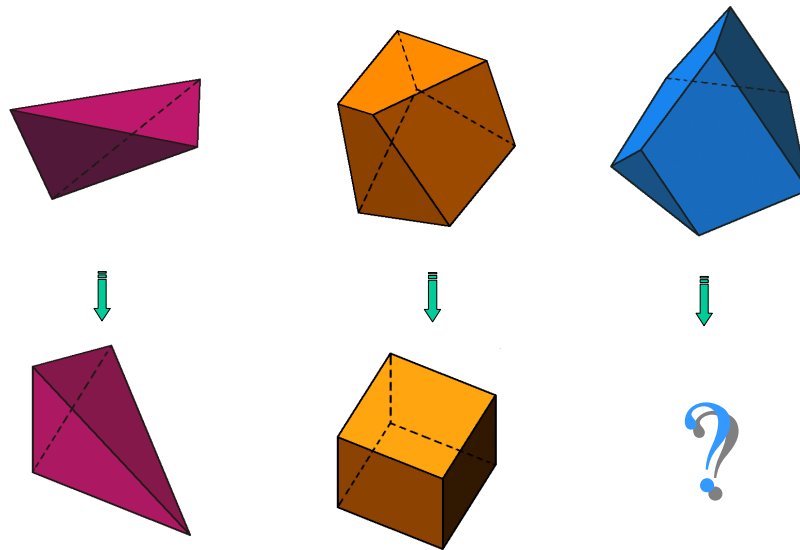


Figura 35: Imposibilidad de utilizar un *master* para cada tipo de elemento.

Para los poliedros en general, la serie de *masters* debería ser infinita y además no hay una forma analítica ni única de distribuir puntos en una superficie esférica y definir así el poliedro canónico. Resulta más natural definir y calcular las funciones de forma directamente en los poliedros y a través de las relaciones de proximidad que provee el diagrama de Voronoï. El uso de las coordenadas Laplacianas para tal fin queda entonces plenamente justificado.

Una característica de la formulación en el FEM es que las funciones de forma de un nodo solo son distintas de cero en el interior de los elementos del nodo. A la izquierda, en la

Figura 36 se muestra la gráfica de las funciones de forma lineales de los triángulos de un nodo, tal como resulta común en el FEM. La figura representa un arreglo cuadrado de pocos nodos y las funciones de forma están graficadas para el nodo central. Las coordenadas Laplacianas, como puede verse en el centro de la misma figura, no cumplen con esa condición, pues la función interpolada tiene valor no nulo en la unión de las esferas de Voronoï del nodo, fuera del *convex-hull* del grupo de nodos vecinos y peor aún, fuera de las concavidades de la malla.

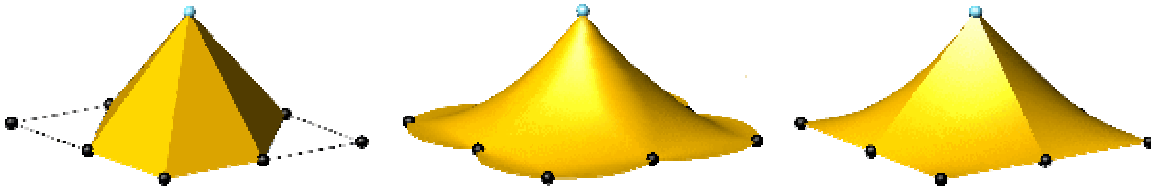


Figura 36: Función de Forma del nodo central en una disposición cuadrada.
Izq.: Triángulos de FEM. Ctro.: Coordenada Laplaciana. Der.: CL elemental.

La solución consiste en limitar el soporte de las coordenadas Laplacianas al interior del elemento. Para calcular las funciones de forma sólo se considerarán los nodos del elemento, aún cuando el punto de cálculo quede dentro de alguna esfera de un nodo externo. El resultado se muestra a la derecha en la misma figura.

La definición de la ecuación (20) y el cálculo desarrollado en 7.4 para las coordenadas Laplacianas se mantienen al restringirlas al poliedro, la diferencia es que se calculan según el diagrama de Voronoï del conjunto formado por el punto y los nodos del elemento, sin considerar ningún otro nodo.

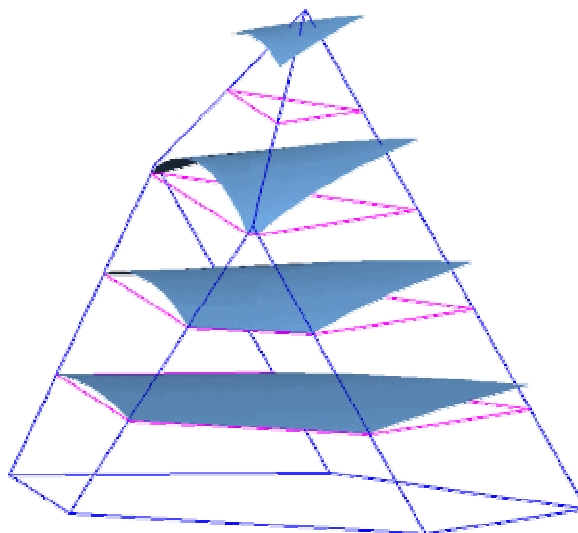


Figura 37: Coordenada Laplaciana Elemental en un Poliedro Esférico.

En la Figura 37 se muestran varios gráficos de la coordenada Laplaciana del nodo superior en un poliedro esférico para puntos que están en los distintos planos paralelos marcados. En las figuras puede notarse, aunque se demostrará mas adelante, que la coordenada es nula en todas las caras y aristas que no contienen al nodo.

7.5.1 Continuidad entre elementos

Las coordenadas Laplacianas estándar de un nodo se anulan en los límites de su entorno natural, en cambio las elementales se anulan en los límites del conjunto de poliedros del nodo, ambas presentan discontinuidades evitables en el *convex-hull* de sus respectivos dominios. El análisis que sigue es válido para las coordenadas Laplacianas elementales en la frontera del *convex-hull* del poliedro (que en general, es la misma frontera del poliedro) y a la vez para las estándar en los límites del *convex-hull* del conjunto de nodos (que en general no es la frontera de la malla).

Aquí se mostrará que cuando el punto de cálculo se aproxima por dentro a una cara del poliedro, (convexo o cóncavo), las funciones de forma de los nodos de esa cara tienden a las funciones de forma bidimensionales y las demás a cero.

Si el punto se acerca al plano C de la cara triangular $\{\mathbf{p}_q, \mathbf{p}_r, \mathbf{p}_s\}$, y a ningún otro plano de otra cara del poliedro, el centro de la esfera que forma el punto con la cara se aleja infinitamente mientras que permanecen finitas las distancias a los nodos y el resto de las esferas. El centro que se aleja es un vértice de la celda del punto y en él convergen las tres caras que dividen a los segmentos que unen el nodo y los tres puntos de C ; esas caras de la celda crecen infinitamente y las restantes permanecen acotadas:

$$\lim_{\mathbf{x} \rightarrow C} \frac{s_t(\mathbf{x})}{\|\mathbf{p}_t - \mathbf{x}\|} = \infty \Leftrightarrow t \in \{q, r, s\} \text{ y } \lim_{\mathbf{x} \rightarrow C} \frac{s_t(\mathbf{x})}{\|\mathbf{p}_t - \mathbf{x}\|} = 0 \Leftrightarrow t \notin \{q, r, s\} \quad (38)$$

La suma del denominador de la ecuación (20) resulta también infinita:

$$\lim_{\mathbf{x} \rightarrow C} \sum \frac{s_t(\mathbf{x})}{\|\mathbf{p}_t - \mathbf{x}\|} = \lim_{\mathbf{x} \rightarrow C} \left\{ \frac{s_q(\mathbf{x})}{\|\mathbf{p}_q - \mathbf{x}\|} + \frac{s_r(\mathbf{x})}{\|\mathbf{p}_r - \mathbf{x}\|} + \frac{s_s(\mathbf{x})}{\|\mathbf{p}_s - \mathbf{x}\|} \right\} = \infty, \quad (39)$$

ya se puede decir que el límite es nulo si el nodo no es de la cara.

El centro de la esfera infinitamente alejada es el vértice común de los triángulos de áreas s_q, s_r y s_s , cuyas bases l_q, l_r y l_s son distintas, pero las alturas son infinitas del mismo orden. El segmento $(\mathbf{x} \mathbf{p}_q)$ es perpendicular al triángulo s_q correspondiente y por lo tanto a cualquier línea del triángulo, en particular a la intersección del triángulo con el plano de la

cara que, en el límite, es l_q . Por lo tanto las tres líneas de intersección de los tres triángulos con el plano \mathbf{C} tienen por límite a la celda bidimensional del punto en la cara.

Haciendo el cociente entre (38) y (39) y eliminando la altura común, el límite es finito y es igual a la función de forma bidimensional del punto en la cara cuando el nodo corresponde a la misma.

$$\lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{C}} \frac{\frac{s_t(\mathbf{x})}{\|\mathbf{p}_q - \mathbf{x}\|}}{\frac{s_q(\mathbf{x})}{\|\mathbf{p}_q - \mathbf{x}\|} + \frac{s_r(\mathbf{x})}{\|\mathbf{p}_r - \mathbf{x}\|} + \frac{s_s(\mathbf{x})}{\|\mathbf{p}_s - \mathbf{x}\|}} = \frac{\frac{l_t(\mathbf{x})}{\|\mathbf{v}_q - \mathbf{x}\|}}{\frac{l_q(\mathbf{x})}{\|\mathbf{v}_q - \mathbf{x}\|} + \frac{l_r(\mathbf{x})}{\|\mathbf{v}_r - \mathbf{x}\|} + \frac{l_s(\mathbf{x})}{\|\mathbf{v}_s - \mathbf{x}\|}} \Leftrightarrow t \in \{q, r, s\} \quad (40)$$

La discontinuidad evitable se puede utilizar para ampliar la definición de las coordenadas Laplacianas a las caras del poliedro y, en general, a la frontera del *convex-hull*.

$$\phi_{3D}^t(\mathbf{x} \in \mathbf{C} \{\mathbf{p}_q, \mathbf{p}_r, \mathbf{p}_s\}) = \begin{cases} \phi_{2D}^t(\mathbf{x}) & \Leftrightarrow t \in \{q, r, s\} \\ 0 & \Leftrightarrow t \notin \{q, r, s\} \end{cases} \quad (41)$$

En dos dimensiones, como se muestra en la Figura 38, la función de forma en las intersecciones entre elementos, es la estándar unidimensional; y lo mismo sucede en las aristas de los poliedros.

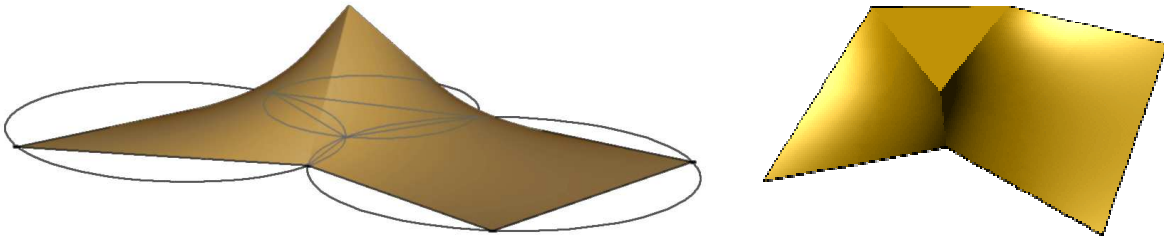


Figura 38: CLE del nodo común a tres polígonos circulares distintos.

Uno de los casos particulares se presenta cuando la cara no es triangular, una de las hipótesis fue que el punto se acercaba al plano de una sola cara. Con nodos razonablemente distribuidos dos o más caras serán coplanares sólo si forman un polígono no simplicial. Los triángulos tienen circunferencias que son intersección de las esferas de los tetraedros con el plano. Los centros de las circunferencias no están mas alejados que los centros de las esferas, de modo que si los tetraedros se unieron por tener esferas cercanas (y aun por captura), el polígono será aproximadamente circular.

Todos los centros de esferas correspondientes a las caras coplanares se alejan indefinidamente al unísono. En el límite, es fácil ver que sucede lo mismo que antes, solo se agregan más sumandos al denominador y la función de forma tiende a la bidimensional del punto en el polígono.

Para preparar la Figura 37, en la que el poliedro tiene caras cuadrangulares y pentagonales, se calcularon las funciones de forma en el interior del poliedro, llegando hasta muy cerca de las caras. Se ve allí que en las caras no triangulares (aún cuando están almacenadas como unión de triángulos) la función de forma no presenta ninguna discontinuidad ni cambio de pendiente, como sería de esperar si las caras estuviesen “naturalmente” divididas en triángulos.

El otro caso particular es cuando el punto de cálculo, dentro del poliedro, está en el plano de una cara que forma una concavidad. La situación se muestra en la Figura 41 y se explicará con más detenimiento después de analizar otras propiedades.

En resumen, de la ecuación (41) se obtienen dos conclusiones:

- El límite depende solamente de los nodos de la cara, por lo tanto tiene el mismo valor al aproximarse a la cara por cualquiera de los dos poliedros que la comparten. La continuidad entre elementos está garantizada.
- La función de forma de un nodo en una cara que no lo contiene es nula y posibilita el recorte del soporte de la función al interior del poliedro.

7.5.2 Coordenadas Locales

Las coordenadas Laplacianas interpolan el punto de cálculo, la limitación a los nodos del poliedro no altera esta condición.

Es más, analizando la ecuación (25) y la correspondiente Figura 32, se comprende que cualquier poliedro con caras ordenadamente perpendiculares a los “vecinos” del punto, sirve para definir coordenadas locales. Sólo hay que garantizar la partición de la unidad y utilizar el teorema de Minkowski. El poliedro puede no ser el de Voronoï, no encerrar al punto y no partir por la mitad a los segmentos que unen el punto y los nodos. Eso abre innumerables posibilidades para definir funciones de forma, pero aquí solo analizaremos el caso que nos compete y que implica que la ecuación (25) sigue siendo válida para cualquier poliedro cerrado que se arme con un conjunto de vecinos naturales, en particular el elemento que contiene al punto, sea o no un elemento dual del diagrama de Voronoï.

La utilización de la ecuación (30) (la implementación del cálculo de las CL) genera un problema cuando el poliedro no es dual del diagrama de Voronoï, el poliedro formado por la secuencia de centros no coincide con la ceda. Estos casos se analizarán en más detalle enseguida, pero aquí se verá que no se altera la propiedad de ser coordenadas locales.

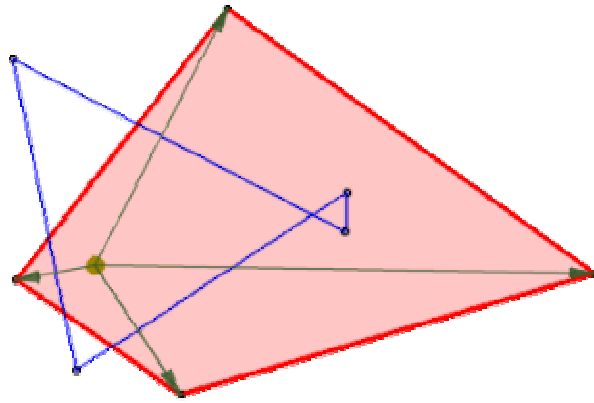


Figura 39: Secuencia de Centros formando un polígono invertido

En la Figura 39, hay un caso de inversión parcial del poliedro (no Voronoï) de centros. El cuadrilátero no es circular, el nodo de la derecha no es vecino natural del punto de cálculo y el polígono de centros se autointercepta.

El teorema de Minkowski se puede aplicar a cada una de las dos piezas triangulares que se unen en el punto de autointersección. Para la pieza mayor, a la izquierda, las normales quedan bien definidas; para la pequeña en cambio, los segmentos que van del punto a los nodos definen normales hacia adentro en las líneas que se interceptan y hacia fuera en el pequeño segmento vertical de la derecha. Para que el teorema sea válido todas las normales deberían tener la misma orientación. La solución consiste en utilizar un signo negativo en la función Φ del nodo de la derecha. La implementación según la ecuación (30) calcula la medida del segmento con el área de un triángulo que, en este caso, está invertido y por lo tanto la ecuación evalúa correctamente las funciones aún en este caso.

7.6 Problemas y alternativas en el cálculo de las funciones de forma

Las funciones de forma, calculadas según la secuencia de centros de esferas, sólo son realmente coordenadas Laplacianas dentro de la intersección de todas las esferas de Voronoï de los vértices y sólo si el poliedro es convexo.

En la Figura 40 se presenta un problema en un cuadrilátero con sus nodos muy alejados de la cocircularidad. El punto interior variable se mueve hacia la izquierda atravesando la esfera de los tres nodos de la derecha del cuadrilátero. En el interior de la esfera, el segmento del diagrama de Voronoï que corresponde al nodo más alejado disminuye, anulándose cuando el punto variable alcanza la esfera. Ya en el exterior, el segmento definido según la secuencia de centros se invierte. El polígono de centros, mostrado arriba a la derecha, ya no representa el diagrama de Voronoï. Lo mismo sucede también en tres dimensiones.

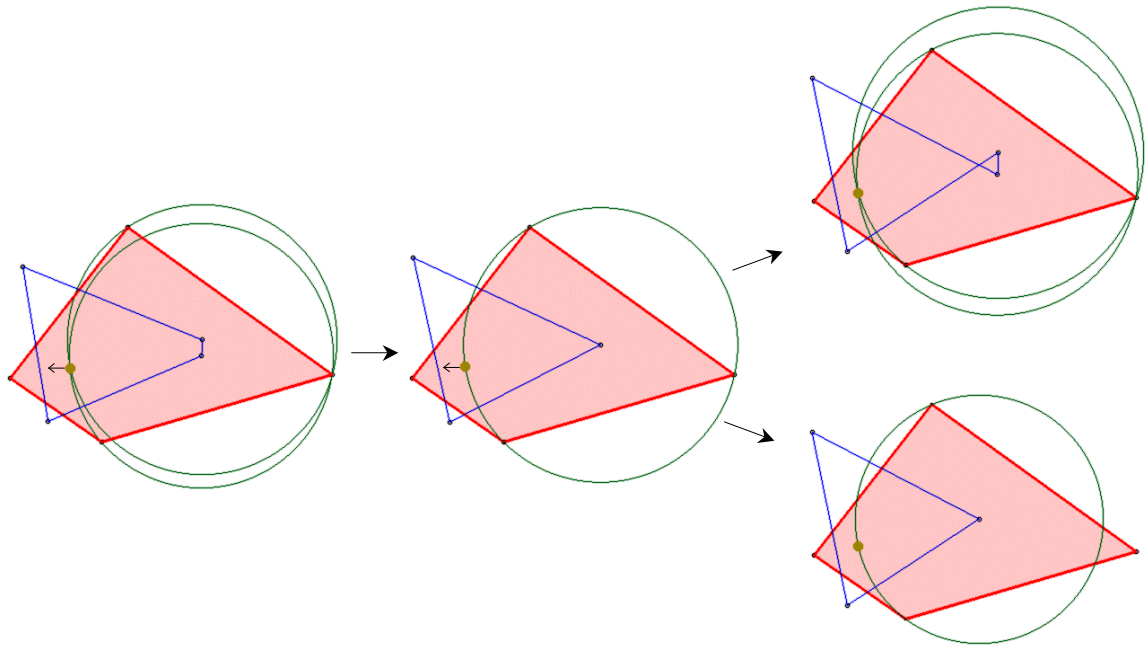


Figura 40: Punto variable saliendo de la intersección de las esferas en un polígono no circular.

Arriba: Polígono de centros. Abajo: Celda de Voronoï

En la parte superior de la figura, el triángulo grande del polígono de centros es la celda de Voronoï, pues el punto de autointersección equidista del punto de cálculo y de los nodos superior e inferior por ser la intersección de las correspondientes mediatrices. El triángulo pequeño, es el poliedro de centros invertido del punto de calculo respecto del triángulo formado por los tres nodos de la derecha del cuadrilátero.

Un problema distinto, pero asociado con esta implementación, se produce con los poliedros cóncavos. Los poliedros cóncavos siempre tienen cruzado el poliedro de centros aún cuando el punto de cálculo pertenece a la intersección de todas las esferas, con δ pequeño son todas las esferas prácticamente iguales y aún así puede haber poliedros cóncavos.

El problema es que la celda de Voronoï se forma según el *convex-hull* de los nodos, como si el tetraedro que rellena la concavidad fuese parte del poliedro.

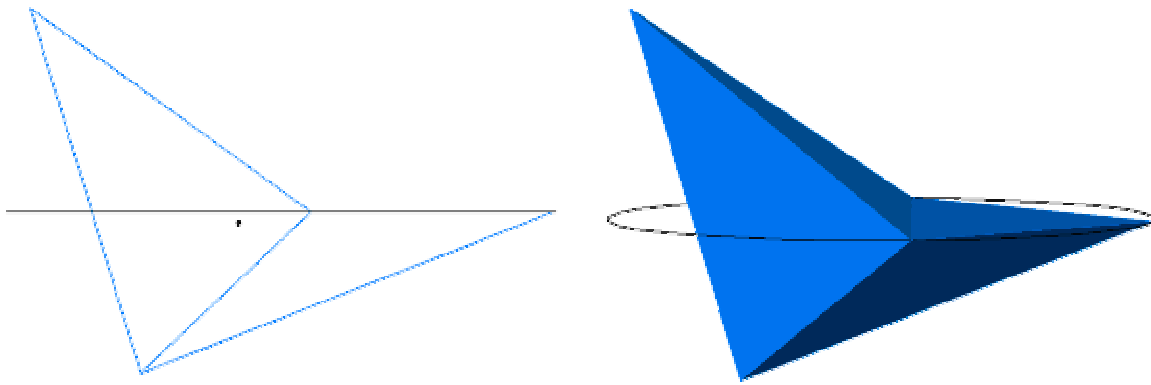


Figura 41: Punto de cálculo cerca del plano de una cara

En la Figura 41 se ilustra un poliedro cóncavo, cuyo centro geométrico (marcado en la figura) se encuentra bien en el interior del poliedro y de la intersección de las esferas, pero muy cerca del plano de una cara. La esfera que forma el punto con esa cara tiene radio muy grande y el centro muy alejado; el cálculo puede tener errores también muy grandes.

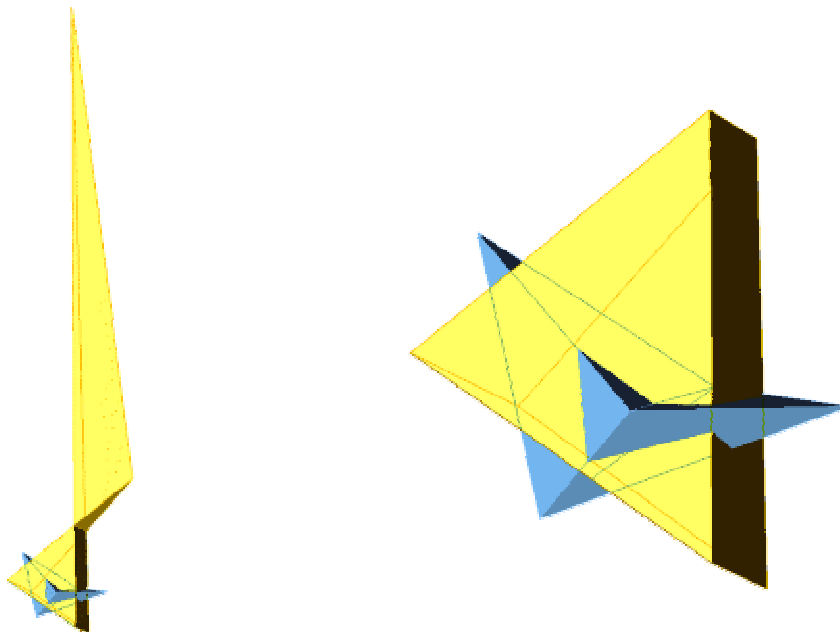


Figura 42: Punto de cálculo cerca del plano de una cara.
Izquierda: Poliedro de Centros. Derecha: Celda de Voronoï

En la Figura 42 se muestran el poliedro de centros y el de Voronoï. Se puede ver que los centros de las esferas que forma el punto móvil con las caras inexistentes del tetraedro faltante están en los puntos de cruce y los dos centros cruzados (el de la derecha y el de arriba, alejado) corresponden a las caras de la concavidad. El poliedro de centros esta formado por dos piezas: una es la celda de Voronoï y la otra el poliedro invertido del punto respecto al tetraedro faltante.

Como ya se explicó en 7.5.1, aparece una discontinuidad evitable en la función de forma cuando el punto atraviesa el plano de una cara. El punto, en el plano de la cara, pero fuera de ella, tendrá un polígono bidimensional invertido y las únicas funciones de forma no nulas serán las de los nodos de la cara.

Para definir y calcular las funciones de forma existen tres posibilidades:

- a) Respetar el diagrama de Voronoï.
- b) Respetar el poliedro de centros y utilizar medidas positivas.
- c) Respetar el poliedro de centros y utilizar medidas negativas para caras invertidas.

a) Utilizando el diagrama de Voronoï, deben anularse las funciones de forma de los nodos cuyas esferas no contienen al punto y el resto se calculará sin esos nodos. En los poliedros cóncavos, se considerarán existentes las caras del tetraedro de relleno de la concavidad.

Más allá de la complicada implementación, si se utiliza el diagrama de Voronoï en lugar del poliedro de centros se pierde la continuidad entre elementos, las funciones de forma de un nodo ajeno al tetraedro de relleno se anularán en el interior del poliedro vecino y no en la frontera común. Si bien podría ser un mecanismo útil para interpolar, el resultado es inconsistente con lo que se espera de las funciones de forma para el FEM y entonces, contrario a nuestro objetivo.

b) Se utiliza la secuencia de centros, pero con todas las distancias y áreas positivas. En este caso, y siguiendo la Figura 40, se puede ver que cuanto más se aleje el punto del nodo derecho, más crecerá la longitud del segmento invertido, y con ella crecerá también la correspondiente función de forma. La influencia del nodo aumenta mientras que el punto se aleja. Tal comportamiento es opuesto a lo que se pretende, con lo que este mecanismo se descarta.

c) Esta opción consiste en aplicar en forma irrestricta la ecuación (30) para el cálculo de las funciones de forma. La medida del segmento invertido resulta negativa pues deviene del área negativa de un triángulo invertido y lo mismo sucede para las áreas en 3D. De esta forma se respetan todos los requisitos fundamentales de las funciones de forma para el FEM, pero las funciones dejan de ser semidefinidas positivas y eso trae aparejado un problema: la extrapolación impide asegurar que la función a interpolar se mantendrá acotada entre el mínimo y el máximo de los valores nodales. Si los poliedros no distan mucho de la esfericidad ni son muy cóncavos, los valores negativos no serán altos y este problema no tiene consecuencias prácticas.

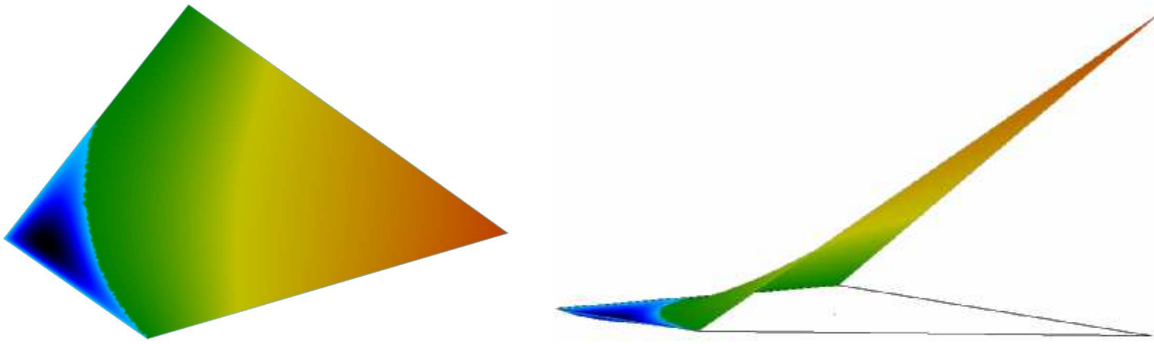


Figura 43: Función de Forma en un cuadrilátero no circular.

En la figura se muestra una gráfica de la función de forma del nodo de la derecha en el cuadrilátero de los ejemplos anteriores, calculada según este mecanismo. La gráfica se presenta vista desde arriba, con el cuadrilátero en verdadera magnitud y vista de costado para mostrar mejor los valores como alturas de la gráfica. Como se puede observar, aunque el cuadrilátero está bien alejado de la esfericidad, el valor negativo de la función de forma, fuera de las esferas del nodo, no es importante.

Tal como se mostró en 7.5.1 y 7.5.2, las funciones así calculadas conservan la continuidad entre elementos y la propiedad de coordenada local.

En la práctica, el problema de los poliedros cóncavos no es la inversión de la celda ni las funciones de forma negativas, sino el error numérico; aún cuando la discontinuidad es evitable. Con poliedros muy cóncavos, la probabilidad de que un punto de integración resulte casi coplanar con una cara no es baja y por lo tanto esta dificultad es invalidante: o se evitan las concavidades excesivas o se ubican los puntos de integración lejos de las caras, o no puede utilizarse este método.

En conclusión: Ninguno de los tres métodos de cálculo de las funciones de forma está exento de complicaciones, se decidió utilizar la secuencia de centros con signo y eliminando las concavidades que puedan comprometer a los puntos de integración. Las propiedades esenciales de las funciones de forma se mantienen intactas y la pequeña pérdida de la combinación convexa por la existencia de funciones de forma negativas no compromete el cálculo y es habitual en funciones de forma de orden superior.

8 Generación de Nodos

Disponiendo de las rutinas para hacer una poliedrización, para generar una malla sólo hace falta generar un conjunto de puntos adecuadamente distribuidos que rellene el dominio. El generador de puntos se puede utilizar también para definir el conjunto inicial de nodos en los métodos de puntos.

Los datos para el generador de nodos son: la frontera del dominio y una función $h(\mathbf{x})$ que es la distancia esperada entre nodos vecinos en cada lugar.

A grandes rasgos, el método consiste en hacer una triangulación de los nodos provistos por la frontera y luego agregar secuencialmente el centro de toda esfera interior “grande”, reconstruyendo localmente la triangulación con cada nodo agregado. Con este mecanismo, la malla que se obtiene no requiere ningún tratamiento posterior de suavizado.

8.1 Malla de Frontera

El dominio está definido por su superficie, que debe ser una malla cerrada.

Existen algoritmos capaces de reconocer una superficie a partir de un conjunto de puntos de la misma^[46,47,48,49,50] y, si bien hemos resuelto algunos casos de triangulación simple, el desarrollo de un método robusto para cualquier caso implica algunos trabajos de regresión e imposición de condiciones de suavidad, que aún no hemos realizado. Por lo tanto se requiere que la frontera esté mallada.

Cuando el dominio viene dado a través de dibujos en CAD, es más o menos sencillo obtener una malla de visualización del programa de CAD y modificarla, adaptándola como malla de elementos finitos. En una malla de visualización, la forma de los elementos (tamaño y relación de aspecto) está gobernada por las curvaturas del objeto mientras que para el FEM se requiere que el tamaño de los elementos esté relacionado con el error admisible en cada zona.

Los elementos de la malla de frontera pueden ser triángulos y/o polígonos no simpliciales, pero serán supuestos planos (normal única) aun cuando no lo sean.

En las presentes condiciones del programa, el dominio debe ser conexo, es decir que debe tener solo una superficie exterior. Puede tener varias superficies interiores cerradas (huecos) o abiertas (interfases) y varios agujeros atravesándolo. Cada pieza conexa de la frontera (la superficie exterior o cada superficie cerrada interior) debe ser homeomorfa a una variedad orientable cerrada -un *handlebody*- y las distintas piezas deben ser desconexas

entre sí. En términos prácticos, eso significa que la frontera no tiene uniones en “T”, intersecciones, autointersecciones, ni tangencias y se puede “inflar” hasta transformarla en una esfera o un toroide con uno o más agujeros.

La conexidad se requiere sólo para poder distinguir en forma sencilla el interior del dominio: la pieza conexas de la frontera que tenga el punto más alejado del origen será considerada exterior y todas las demás, interiores. Para reconocerla se puede usar el nodo que tenga mayor distancia al origen o sólo una coordenada, como subproducto del cálculo del *bounding-box*.

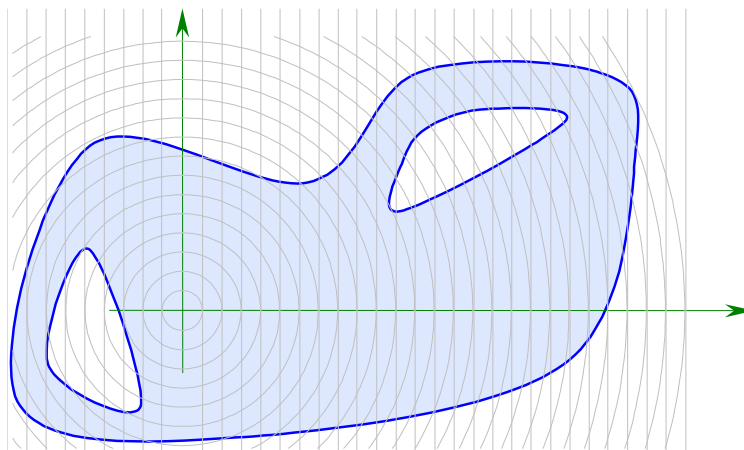


Figura 44: El nodo mas alejado del origen pertenece a la frontera exterior.

Los elementos de la malla de frontera son necesarios para tres operaciones, una es la identificación de piezas conexas de la superficie, otra es la definición de la función $h(\mathbf{x})$ a través del tamaño de sus elementos y por ultimo la asignación de normales para distinguir el interior y el exterior del dominio. Una vez realizadas estas operaciones los elementos de la malla de frontera se descartan.

El generador desarrollado no respeta las mallas de frontera (*unconstrained* Delaunay), es decir que la frontera de la malla de tetraedros que se obtenga no será la malla original. Los nodos originales sí permanecen y son los únicos que aparecen en la frontera final.

La generalización del criterio de Delaunay a mallas de superficie (no planas) en 3D no es Euclídea y por lo tanto no sirve para garantizar que la frontera de una malla Delaunay de tetraedros sea una malla Delaunay de triángulos. Una “*constrained Delaunay triangulation*”, que respete cualquier frontera original, no es Delaunay^[51].

La malla de frontera debería respetarse si se necesitara mallar por piezas, para que una pieza se pueda “pegar” con otra. Por ejemplo cuando se requieren subdominios con distintos tipos de mallado, como la capa límite en fluidodinámica, formada por capas de

elementos fuertemente anisotrópicos. En estos casos se requiere un generador que respete la interfase o puede usarse éste primero y extraer la frontera para servir como límite de la zona no Delaunay, que suele ser una serie de capas paralelas de elementos prismáticos.

Para utilizar los nodos como puntos de partida en métodos de partículas, la malla de superficie original tiene poco o ningún interés.

8.1.1 Orientación de la Frontera

En una misma rutina se unifica la orientación de los elementos de la superficie y se reconocen simultáneamente las piezas conexas de la frontera.

El dominio es convexo en los nodos del *convex-hull* y un nodo, con coordenada x máximaⁱ, pertenece al mismo. En ese nodo convergen varias caras, la más perpendicular al eje x debe tener una normal exterior con componente x positiva y se orienta para que cumpla con ese requisito. En la figura se muestra el caso en dos dimensiones.

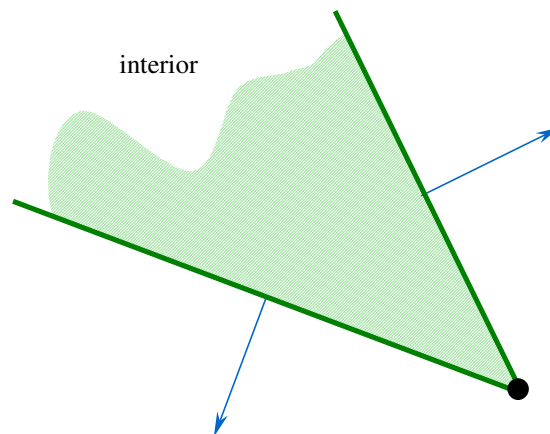


Figura 45: Aristas del nodo con coordenada x máxima.

El resto de las caras se orienta por comparación, sin operaciones vectoriales. Se recorren todas las caras por vecindades sabiendo que la interfase entre dos caras (la arista común) debe tener orientación opuesta en ambas caras; siendo una cara conocida y correcta, se corrige la opuesta.

Al finalizar el recorrido, si quedan caras sin visitar es porque pertenecen a las piezas conexas interiores (fronteras de los huecos). De las caras restantes se busca la de mayor coordenada x y se repite el proceso, pero con la orientación opuesta. Los elementos de las superficies interiores abiertas (interfaces) no se orientan.

ⁱ Cualquier coordenada o la distancia a cualquier punto.

8.1.2 Normales

El cálculo de un vector normal a cada elemento de frontera no ofrece ninguna dificultad mas allá de la no planaridad de elementos no triangulares; pero, en general, la discretización permite considerarlos planos. Por el contrario, no es sencillo asignar un vector “normal” a cada nodo de la frontera: un vector que apunte hacia afuera del dominio y cuyo opuesto apunte hacia adentro.

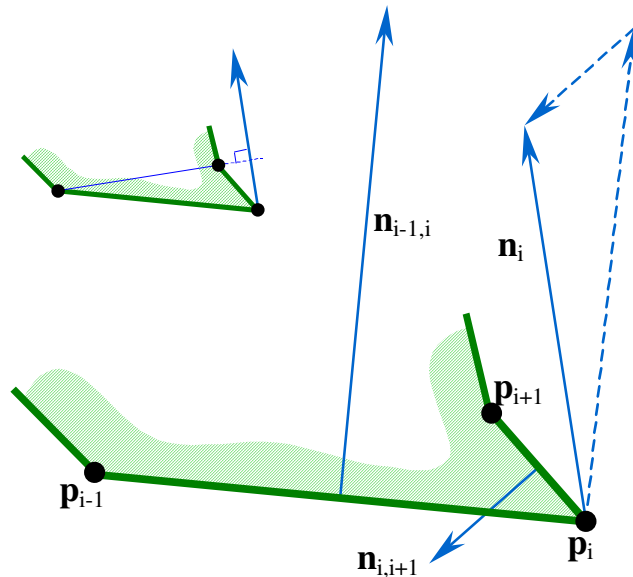


Figura 46: Error de la dirección promedio, ponderada por áreas.

En la figura se puede ver que al calcular el promedio, ponderado por áreas, de las normales a los elementos del nodo se puede producir un error en la normal o su opuesta. En el caso de la figura, la normal interior \mathbf{n}_i asignada al nodo \mathbf{p}_i es proporcional a la suma de las áreas de los elementos (planos) del nodo y no apunta correctamente hacia el interior del dominio.

Por el teorema de Minkowski, la suma de áreas es perpendicular a la “cara faltante”. En la figura sería el segmento que une \mathbf{p}_{i-1} con \mathbf{p}_{i+1} , que completaría el triángulo y que está indicado en la figura más pequeña. La solución es sumar normales sin ponderar: sumar versores normales de caras y renormalizar.

Esto bastaría en 2D, pero en 3D hay un problema adicional. La frontera de una malla plana en 2D tiene dos elementos (segmentos) por nodo; pero en una superficie curva, mallada en 3D, un nodo puede tener cualquier cantidad de elementos. Por ejemplo, en el nodo central, en la Figura 47, si se utiliza el esquema antedicho, se estarían promediando erróneamente cuatro normales verticales con dos horizontales.

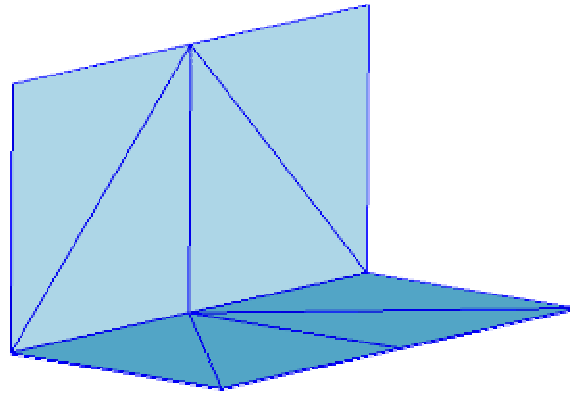


Figura 47: Error al promediar normales debido a la desigual distribución de caras de un nodo

Para solucionarlo, en los programas de visualización (donde las normales son vitales pues definen la reflexión de la luz), se suele definir un ángulo límite para considerar como “arista geométrica” a la interfaz entre dos elementos. Por ejemplo: si el ángulo diedro entre dos triángulos es de $180^\circ \pm 20^\circ$ se considerará como interfaz suave (que se mostrará curva) y en caso contrario será una arista marcada o arista geométrica, con más de una normal por nodo. A modo de ejemplo: si el límite fuese mayor que 90° , un cubo sería mostrado como una esfera.

En nuestras aplicaciones se puede usar ese método, pero provocará una casuística exagerada que puede simplificarse con sólo considerar una sola vez cada normal distinta. El potencial problema se traslada a la frontera angulosa entre varias superficies suaves no planas (como por ejemplo la punta de un cono cortado por un plano que pasa por el eje) pero tales casos son infrecuentes (nunca vimos uno real) y el problema potencial no es muy grave.

En resumen, el procedimiento que empleamos para asignar una normal a cada nodo consiste en hacer la suma de todos los versores normales distintos de las caras del nodo y renormalizar.

8.1.3 Función de Distribución (h) de los nodos

En general, la función $h(\mathbf{x})$ que define el tamaño deseado de los elementos o la distancia entre nodos vecinos, no viene dada en forma explícita. Se implementaron algunas alternativas que son, en esencia, asignaciones de un valor de h en algunos puntos o en algunos nodos e interpolación para los puntos intermedios. Cada vez que se incorpora un nodo, el generador de puntos debe interpolar el valor de h para el nuevo nodo.

Un método habitual (y que se implementó) consiste en utilizar una malla gruesa como fondo o *background-mesh* que cubra el dominio. La malla de fondo tiene pocos nodos con grandes elementos y cada nodo tiene un valor de h asignado, que no está relacionado con el tamaño de sus propios elementos sino que es el h requerido en su ubicación. El generador de puntos debe averiguar en que elemento de la malla de fondo está el nuevo nodo e interpolar con los valores nodales de dicho elemento. La rutina de búsqueda es parecida la que ya se explicó para la triangulación, utiliza un octree para una aproximación inicial y las funciones de forma lineales del símplice para saber cual es el nodo más alejado y así pasar al tetraedro opuesto a dicho nodo, para ir acercándose al punto. Cuando encuentra el tetraedro que contiene al punto, usa esas mismas funciones de forma para interpolar.

El otro método, que también se implementó y resultó ser más versátil, consiste en agregar “nodos de h ”. La malla de la frontera ya trae elementos cuyo tamaño se supone acorde con las necesidades (esto evita la riesgosa tarea de quitar o poner nodos en la frontera). De los elementos de frontera se extrae un valor de h que se asigna a cada nodo de frontera y es la distancia al nodo vecino más cercano. Para aumentar el control sobre la distribución, pueden incluirse mallas interiores (cerradas o abiertas) de cuyos elementos se extraerá el valor de h para cada nodo, o bien se incluyen nodos sueltos con un valor de h explícito.

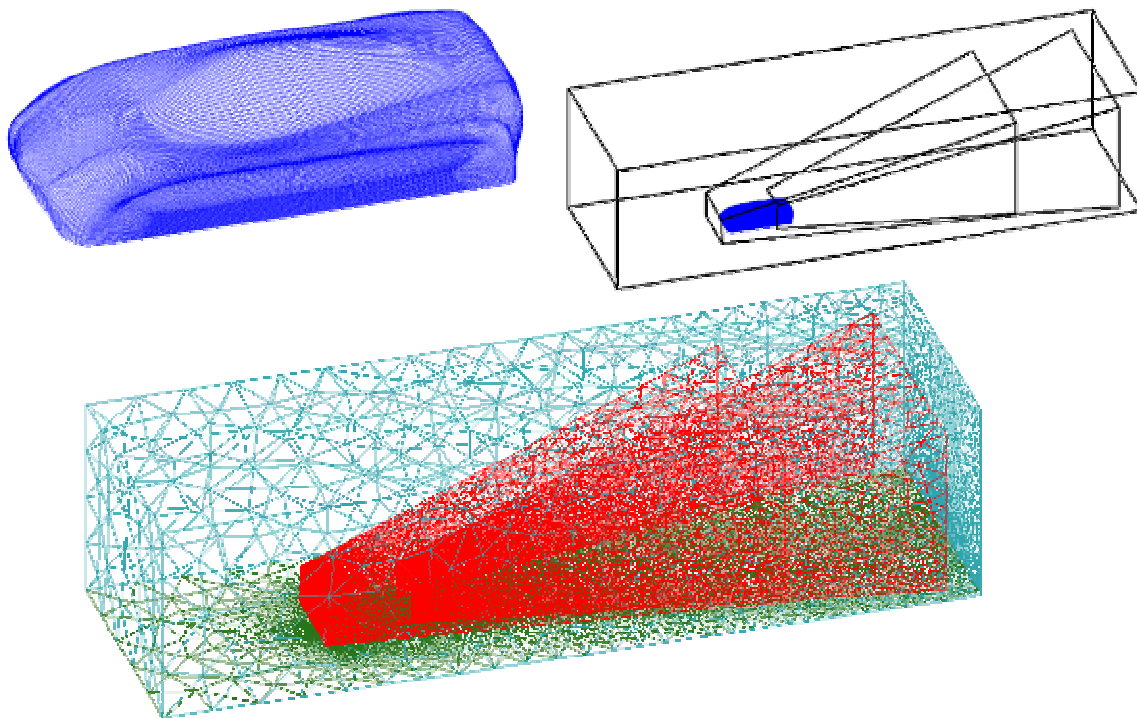


Figura 48: Mallas de frontera y de h alrededor de un vehículo.

En la figura se muestran, a modo de ejemplo, las mallas utilizadas para definir la generación de puntos en el espacio que rodea a un vehículo simplificado. Todas las mallas

planas fueron realizadas con el mismo generador de puntos; en el caso del piso se utilizaron mallas de h unidimensionales. La malla de la superficie curva del vehículo fue realizada con el programa GID^[52]. La superficie exterior del dominio es el paralelepípedo y la superficie del vehículo es la frontera de un hueco. Las mallas de h fueron puestas para reducir el tamaño de los elementos en zonas importantes (las cercanías del vehículo y de la estela) e impedir a la vez que la cantidad total de nodos se eleve por encima de la capacidad de cálculo. Los nodos y mallas de h “rompen” la linearidad de la interpolación del h entre los nodos de la frontera.

El problema potencial de conservar los nodos de h consiste en la alta probabilidad de que la malla de h (plana) provoque muchos *slivers* interiores. Si el fin no es una poliedrización con la EDT, deben evitarse los cuadriláteros en las mallas de h (y en la frontera). También podrían perturbarse fuertemente las posiciones de los nodos de h , evitando la coplanaridad.

8.2 Triangulación Inicial

Una vez que se cuenta con los nodos de frontera y de h , se procede a triangular el conjunto. Se realiza una triangulación Delaunay tal como se explicó en 3.6, exceptuando las rutinas de limpieza, los nodos perturbados para evitar la coesfericidad permanecen así hasta el final.

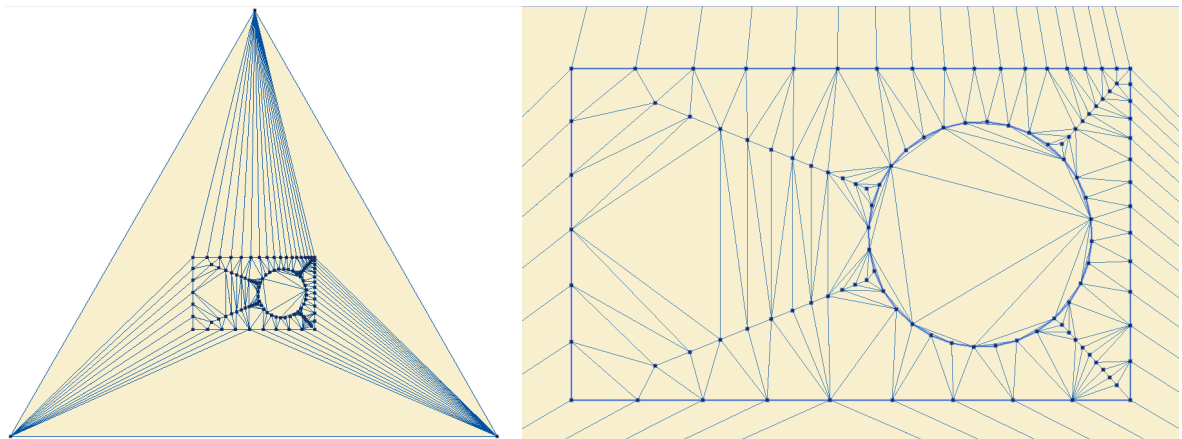


Figura 49: Malla inicial de los nodos de frontera y de h .

La Figura 49 ilustra, con un sencillo ejemplo bidimensional, la malla inicial de un rectángulo con un hueco circular y algunos nodos de h en las líneas diagonales. Se pueden observar los elementos del triángulo virtual.

8.3 Identificación del Interior del Dominio

Para averiguar si un tetraedro está en el interior o en el exterior del dominio, primero se descartan los tetraedros obvios: Serán exteriores los que tienen nodos virtuales e interiores los que tienen nodos de h o nodos en diferentes piezas conexas de la frontera. El resto es mucho más complicado.

Cuando la malla de frontera original no se respeta, la discriminación del resto de los tetraedros presenta una notable dificultad y existen varias posibilidades de solución pero todas con alguna limitación. Esta es la operación mas complicada e insegura de todo el proceso de generación de puntos.

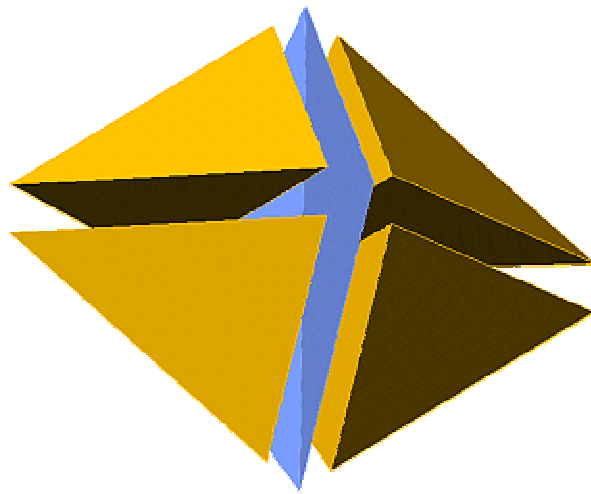


Figura 50: Caras de frontera original cruzadas respecto de los tetraedros Delaunay.

Si un par de caras de la frontera original se cruzan, como en la figura, con las caras de la malla de tetraedros, no hay una distinción estricta entre tetraedros interiores y exteriores, aunque tampoco es imposible encontrar una solución técnicamente adecuada.

En principio podría utilizarse el test del rayo: Se define una semirrecta que parte del centroide de un elemento, si ésta intercepta un número par de veces a la frontera es porque el punto de partida era exterior y viceversa si el número es impar. Existen implementaciones robustas para el test del rayo^[53], pero el principal problema es el costo computacional de buscar, para cada elemento, las intersecciones del rayo con todos los elementos de la superficie. Una organización de los datos podría ayudar a reducir el costo, pero se pueden encontrar otros métodos esencialmente lineales.

Puede pensarse alguna variante local del test: Si un tetraedro ya está ubicado (en el interior o en el exterior), se podrían ubicar los vecinos verificando si una línea que une un punto interior de cada uno intercepta alguna cara de frontera. Pero si el par de tetraedros formara

un conjunto cóncavo, la línea puede no atravesar la cara de interfase. Podría utilizarse una línea que atravesase forzosamente la interfase, pero la cara común puede estar cruzada con las caras de frontera y eso trae dos problemas: Uno es que la ubicación y longitud de la línea son de peligrosa elección y el otro es que podría no cortar ninguna de las caras de la frontera original de los nodos porque los tres nodos tienen sus triángulos originales cruzados.

En lugar de cometer un error potencialmente catastrófico se prefirió utilizar métodos locales que discriminen primero con gran tolerancia la mayoría de los tetraedros, que son de fácil ubicación y analizar luego, con distintas técnicas, los pocos elementos más difíciles hasta lograr un resultado técnicamente aceptable, que represente la frontera con la mayor precisión posible.

La implementación actual contiene una mezcla de métodos, cada test se realiza sobre el conjunto de elementos sin clasificar, que vaya quedando:

- 1) En un loop de elementos se discriminan los tetraedros obvios: aquellos con nodos virtuales, nodos de h o nodos en diferentes piezas conexas de la frontera.
- 2) Para cada nodo de frontera se analizan cada una de sus aristas contra “todas” las normales a las caras del nodo. Si los ángulos son todos del mismo signo y mayores que unos quince grados (0.25 de tolerancia en el coseno), entonces la arista y todos sus tetraedros se consideran exteriores o interiores dependiendo del signo.

Con este método quedan indeterminados los vértices de un solo elemento, que tiene todas sus aristas sobre la frontera. También, pero por la tolerancia, quedan indeterminados los elementos aplastados contra la frontera y aquellos que tienen sus nodos en alguna arista geométrica, de forma que no todas las caras ven a las aristas del mismo modo.

La Figura 51 es un ejemplo académico que se utilizó para probar fuertes concavidades adyacentes a fuertes convexidadesⁱ. En el ejemplo aparece (arriba) un gran tetraedro que queda sin clasificar en este paso.

ⁱ La interfase gráfica del generador está programada para mostrar en azul las caras exteriores y en gris las interiores. Algunos slivers de frontera se ven en color mezclado porque se solapan sus caras coplanares.

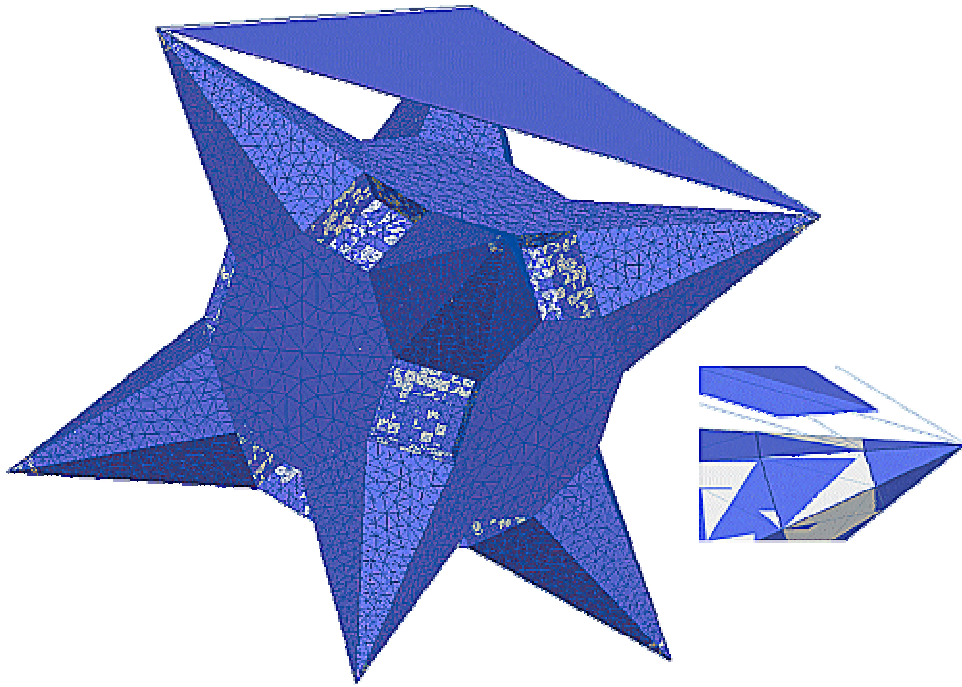


Figura 51: Elementos de difícil discriminación.

Los tetraedros se muestran contraídos en un 2% de su tamaño.

- 3) En un barrido sobre cada elemento indefinido, se discrimina sin tolerancia con los siguientes dos métodos en serie:
 - a) Se define un vector desde cada nodo al centroide, si todas las caras de frontera del nodo “ven” igual al vector se identifica el elemento.

Con esto se discriminan todos los vértices de un solo tetraedro y se convalida el test que sigue.
 - b) Tres vecinos definidos exteriores/interiores implican que el elemento es exterior/interior.
- 4) En otro barrido sobre los elementos indefinidos restantes, pero recurrente mientras cambie la cantidad, se discrimina por mayoría de vecinos definidos.

La recurrencia se debe a que existen grupos de elementos indefinidos vecinos entre sí, como los que se aprecian en el ejemplo de la Figura 52.

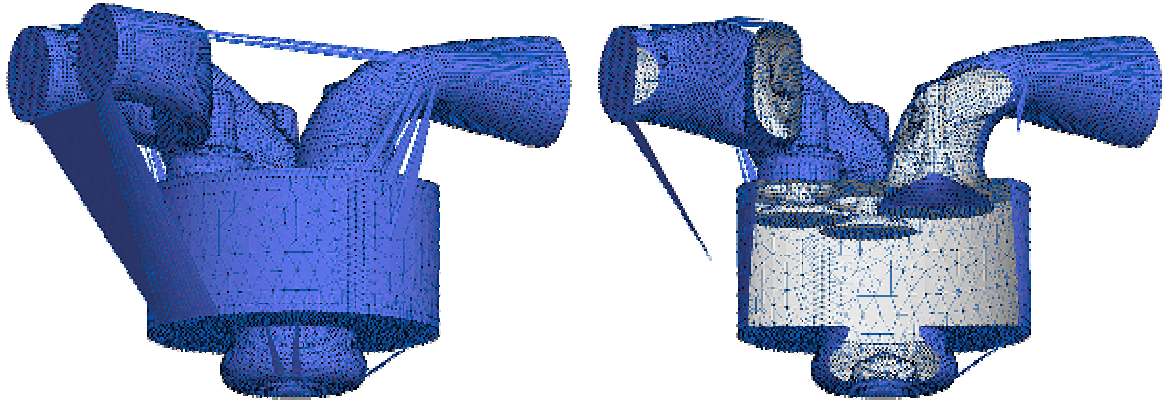


Figura 52: Cámara de combustión con grupos de elementos indefinidos.

El ejemplo corresponde al interior de una cámara de combustión y parte de los conductos de gases en un motor de combustión interna. Presenta casi todas las dificultades encontradas. La malla de frontera tiene alrededor de 23000 nodos y 47000 elementos bastante mal distribuidos; provino de un programa de CAD por modelado de sólidos. Algunos errores en las uniones de sólidos (rebarbas y ranuras) fueron retocados a mano y la malla fue mejorada con algunas rutinas propias muy simples que consisten en la partición de aristas muy largas y el filtrado de nodos muy cercanos. La malla de frontera sigue siendo de mala calidad, tiene grandes relaciones de aspecto y grandes transiciones de tamaño que “obligan” a una triangulación con frontera distinta de la originalⁱ; tiene pequeñas concavidades y convexidades que generan elementos aplastados superpuestos; hay muchos elementos casi tangentes a la frontera, algunos entre nodos de zonas muy alejadas y presenta interiores complicados, aunque no hubo problemas en el interior, quizás por la ayuda de las mallas de h utilizadas.

En la Figura 52 se muestra la frontera del conjunto de elementos considerados interiores hasta aquí. La recurrencia elimina los grupos de elementos indefinidos hasta dejar solo elementos con dos vecinos exteriores y dos interiores como muestra la siguiente figura.

ⁱ Una *constrained triangulation* no solo que no es necesaria aquí sino que sería contraproducente.

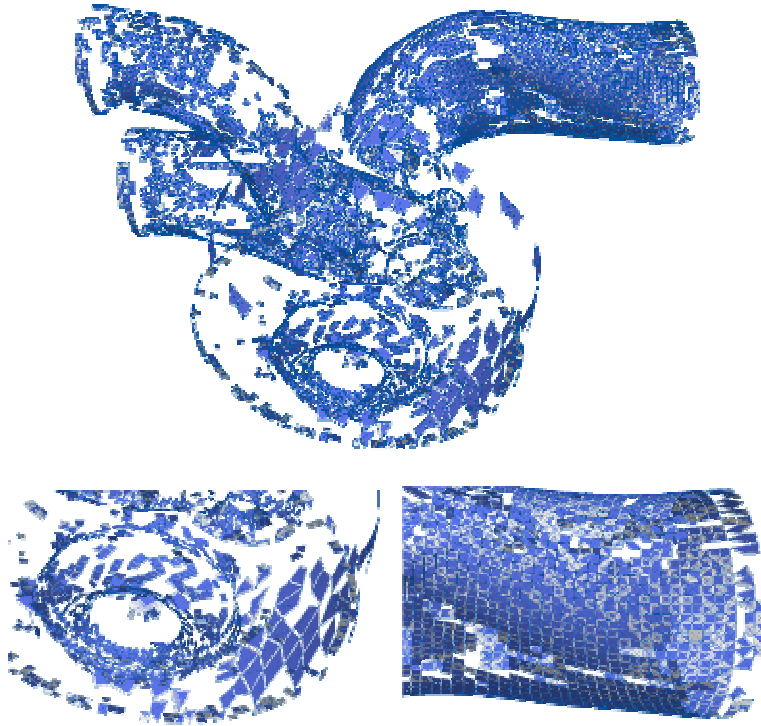


Figura 53: Elementos indefinidos aplastados contra la frontera.

- 5) Todos los elementos restantes se consideran interiores. Son elementos como los que se ven en la Figura 53 y que han pasado todos los tests.

Los *slivers* pueden considerarse interiores o exteriores. En general, los muy aplastados se pueden considerar exteriores, pero siempre que tengan dos vecinos definidos exteriores.

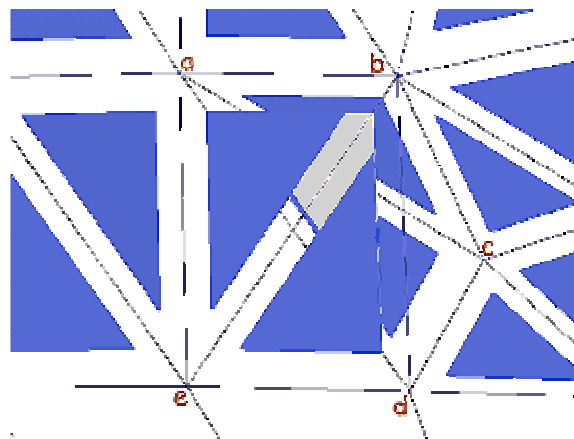


Figura 54: Error por *slivers* apilados.

La Figura 54 muestra un error al eliminar el *sliver* (abcd), con un solo vecino exterior y que se encontraba “debajo” de otro *sliver*, el (abde), que se consideró interior. Los *slivers* se forman a partir de cuatro nodos aproximadamente cocirculares; pero si hay mas de cuatro (en este caso hubo cinco), habrá *slivers* superpuestos.

En nuestra implementación los consideramos todos interiores para simplificar la generación de nodos; durante la misma desaparecerán aquellos *slivers* cuyas esferas contengan nuevos nodos. Los *slivers* que queden en la frontera, con dos vecinos exteriores, se eliminarán al final en forma recursiva.

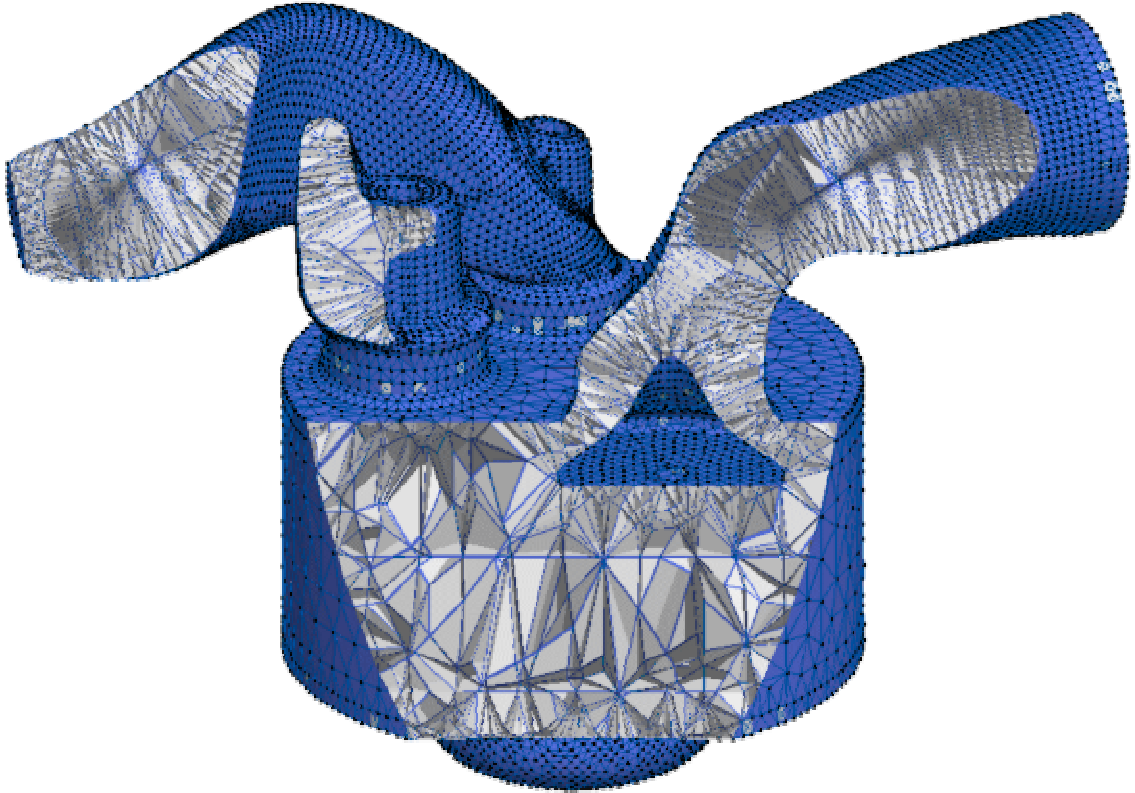


Figura 55 Corte de la malla de frontera

En la Figura 55 se muestra la malla de tetraedros de frontera, puede notarse el efecto de la malla de h en el cilindro y de las líneas h en los conductos.

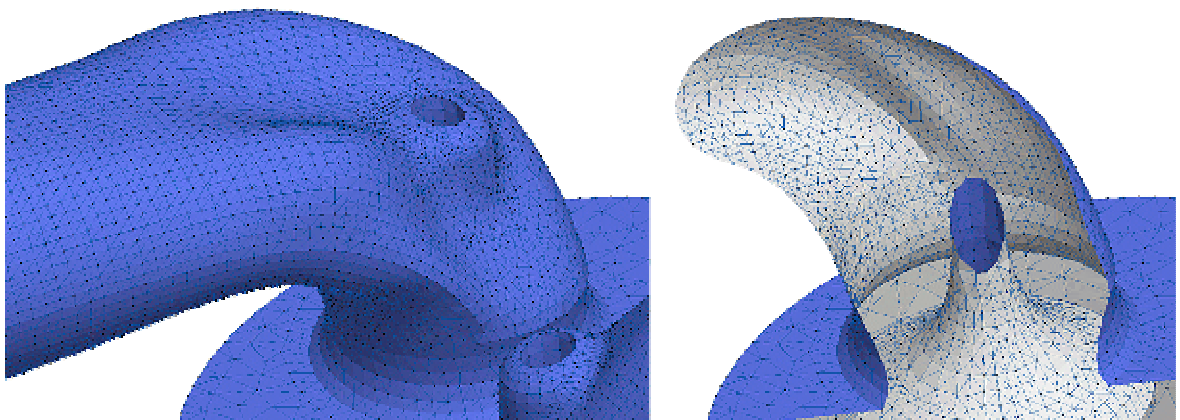


Figura 56: Detalle de la frontera resultante.

En la Figura 56 se puede observar la correcta resolución, interior y exterior, de una zona especialmente difícil y probablemente mal construida en el CAD original.

8.4 Generación de Nodos

El algoritmo de generación de nodos recorre la lista de esferas y agrega el centro de toda esfera que resulte grande en relación con el h promedio de sus nodos. Al agregar cada nodo se utiliza la rutina de identificación de la cavidad para mantener actualizada la triangulación Delaunay. Este método provee elementos de mejor calidad que la división de aristas largas^[26,54], aunque ambos producen *slivers*.

La primera dificultad con el algoritmo es que el centro de una esfera puede estar en el exterior del dominio o muy cerca de la frontera.

Para no incorporar puntos fuera del dominio, se barren solo las esferas de los tetraedros interiores y se intenta incorporar el centro sólo si esta dentro o muy cerca de algún tetraedro interior. La tolerancia (ínfima y sin peligro) es para aceptar puntos que puedan estar numéricamente en la cara de interfase entre dos tetraedros interiores. Para encontrar el tetraedro que contiene al nodo se pasa desde cada tetraedro al vecino opuesto al nodo con menor función de forma negativa; esta técnica converge por tratarse de una triangulación Delaunay^[55,23,34]. El tetraedro que contiene al centro se utiliza para asignar el valor de h interpolado al nuevo nodo.

Para identificar si el punto está cerca de la frontera no se puede utilizar la distancia a los nodos (que se sabe grande por ser el radio de una esfera grande) porque el h asignado a los nodos de frontera es la mínima distancia a los vecinos y puede haber mucha variabilidad, si fuese el promedio también sería peligroso. Tampoco pueden utilizarse las funciones de forma en el tetraedro que contiene al nodo porque todavía están presentes los *slivers* de frontera. Se realiza un test en la rutina que identifica la cavidad del punto: Cuando se incorpora un tetraedro a la cavidad, si tiene un vecino exterior, se mide la distancia a la cara de frontera y, si ésta es menor que $h/2$, el punto no se incorpora.

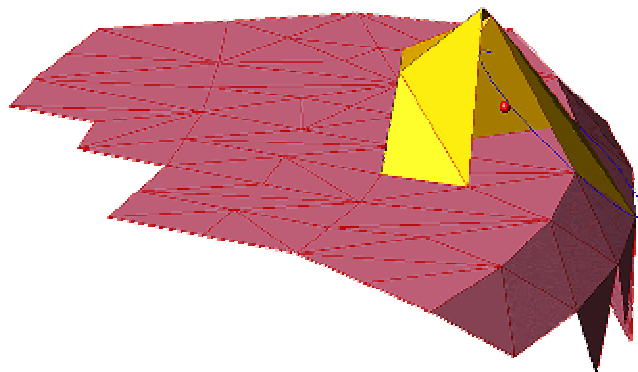


Figura 57: Posible formación de elementos invertidos.

En la Figura 57, que corresponde a la base de una válvula de la cámara de combustión (la imagen está invertida), se está por incorporar un punto (la esferita) en su cavidad. Si no se considerasen los tetraedros exteriores como parte de la cavidad, esta tendrá una cara que el punto no puede ver y dará elementos invertidos (con volumen negativo). Si se incluyen los tetraedros exteriores cuyas esferas contienen al punto, desaparecerá una arista de la frontera (en este caso una arista geométrica importante). En la imagen se han eliminado dos caras de la cavidad para hacer visible el punto interior y se muestra además la circunferencia de la cara problemática. El test anterior inhibe también la aparición de estos errores, pero el ejemplo muestra varias cosas más:

- Deben conservarse los elementos exteriores en todo el proceso de mantenimiento de la triangulación Delaunay, en caso contrario se formarán elementos invertidos. Los tetraedros con nodos virtuales sí pueden eliminarse en forma segura, pues tienen esferas grandes que penetran poco (mucho menos que $h/2$) en la malla.
- La malla de frontera debe “cuidar” de las aristas geométricas: no se deben poner ángulos obtusos (con centro exterior al triángulo) enfrentados a las aristas geométricas.
- El test impide la colocación del punto con lo cual pueden sobrevivir esferas grandes cerca de las concavidades, dejando elementos con un h mayor que el requerido. Conviene refinar la frontera en las concavidades un poco más que lo necesario.

Estos puntos muestran que un generador de mallas necesita un operador calificado. Aunque la simplicidad y la automatización son los objetivos declarados, en general no se obtiene una malla adecuada sin experiencia.

8.5 Limpieza final y Poliedrización

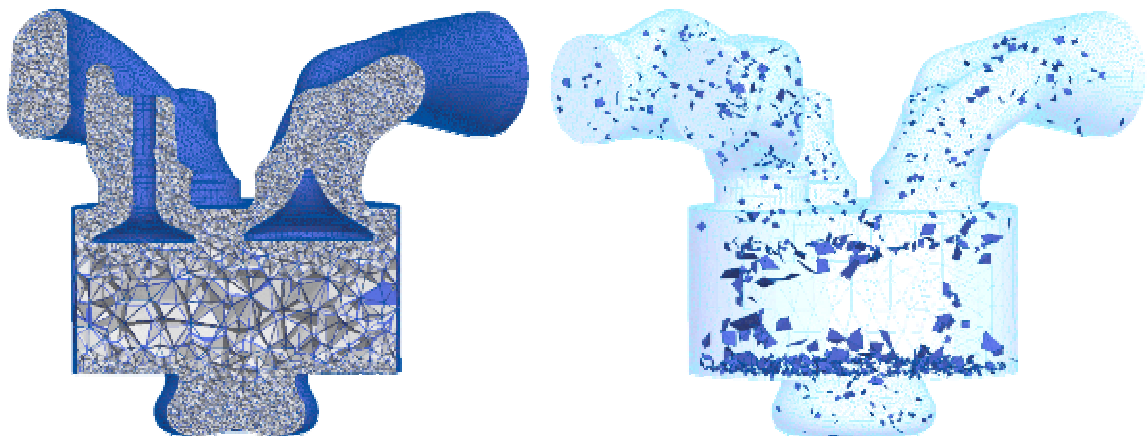


Figura 58: Corte de la malla de tetraedros y *slivers* interiores aislados.

Las últimas operaciones son la eliminación de los tetraedros exteriores y *slivers* de frontera y la restauración de las posiciones originales de los nodos. La malla de tetraedros del ejemplo anterior queda como se ilustra en la Figura 58, con unos cien mil nodos y quinientos sesenta mil elementos.

Un análisis de la calidad de los elementos revela que coexisten *slivers* con elementos de calidad aceptable y que la distribución de tamaños es acorde con la especificada. Los *slivers* que se muestran en la imagen de la derecha son los tienen volumen menor que un centésimo del $\langle h \rangle$ promedio de sus nodos elevado al cubo y son todos interiores, con menos de dos caras en la frontera.

¡Error! No se pueden crear objetos modificando códigos de campo.

Figura 59: Histogramas de distintos índices de calidad para el ejemplo de la cámara de combustión.

Izquierda malla de tetraedros (sin *slivers* de frontera). Derecha poliedros con $\delta=0.01$.

En ambos gráficos y de adelante hacia atrás: volumen del elemento, arista menor y arista mayor, adimensionalizados con el h promedio de los nodos, luego mínimo diedro en grados y atrás la calidad de forma definida en 6.

En los histogramas de la Figura 59, se observa que la poliedrización -realizada tal y como se explicó en el capítulo 4- mejora todos los índices de calidad y elimina los *slivers*. Esta es la principal ventaja de la EDT, la malla de poliedros no requiere ningún postratamiento cosmético de suavizado, mientras que la de tetraedros requiere de la eliminación de los *slivers* interiores por *swap* de diagonales o por inserción de puntos extra.

9 Topología de las Mallas de Cuadriláteros y Hexaedros

Cuando se pretende generar una malla compuesta solamente por hexaedros (cubos o ladrillos), los algoritmos anteriores no son utilizables. Obtener una malla de hexaedros por unión de tetraedros es una tarea harto difícil si es que puede lograrse. No hay ningún intento productivo que se haya realizado en tal dirección.

La estructura de interconexiónⁱ de los hexaedros, en una malla no estructurada, es muy difícil de visualizar; una persona sólo puede ver la superficie de las cosas tridimensionales, observar la estructura interna de una malla es muy parecido a ver en cuatro dimensiones. El dual de la malla en cambio, es muy sencillo; básicamente consiste en un conjunto de superficies mutuamente interceptadas. Con esa estructura dual en mente se han ideado todos los métodos de generación, corrección y suavizado de mallas no estructuradas, que han tenido cierto grado de éxito.

9.1 Construcción dual de una malla de cuadriláteros en el plano

Supóngase una malla de cuadriláteros en el plano. Se traza una línea, partiendo desde el exterior y que penetra en la malla atravesando el punto medio de una arista de frontera. La línea cruza un cuadrilátero saliendo por el medio de la arista opuesta y así continúa avanzando mientras atraviesa una serie de cuadriláteros mutuamente vecinos, entrando por una arista y saliendo por la opuesta. La malla tiene un número finito de cuadriláteros, entonces la línea deberá salir de la malla por el medio de alguna arista de frontera.

Si se aplica el procedimiento anterior a todas las aristas de frontera libres, algunas aristas interiores pueden haber quedado sin ser atravesadas por ninguna línea, en ese caso se traza una línea partiendo del medio de una arista libre cualquiera y se continua del mismo modo que antes. La línea es necesariamente cerrada por ser finita la cantidad de elementos que atraviesa.

En el interior de la malla las líneas se cruzan en medio de los cuadriláteros, algunas líneas pueden incluso cruzarse a sí mismas.

En la Figura 60 se muestra un ejemplo, la mayoría de las líneas entran y salen de la frontera sin particularidades, pero se destacan los dos casos especiales antes mencionados:

ⁱ La descripción de la estructura de interconexión o estructura combinatoria de cualquier malla se denomina comúnmente "topología". No tiene ninguna relación con los desarrollos modernos de la topología algebraica, es más bien una aplicación de algunos conceptos de la topología combinatoria de Poincaré y de la teoría de grafos 3-politopales.

una línea autocruzada y una línea cerrada, aunque ninguno de los dos tipos debe envolver necesariamente algún hueco.

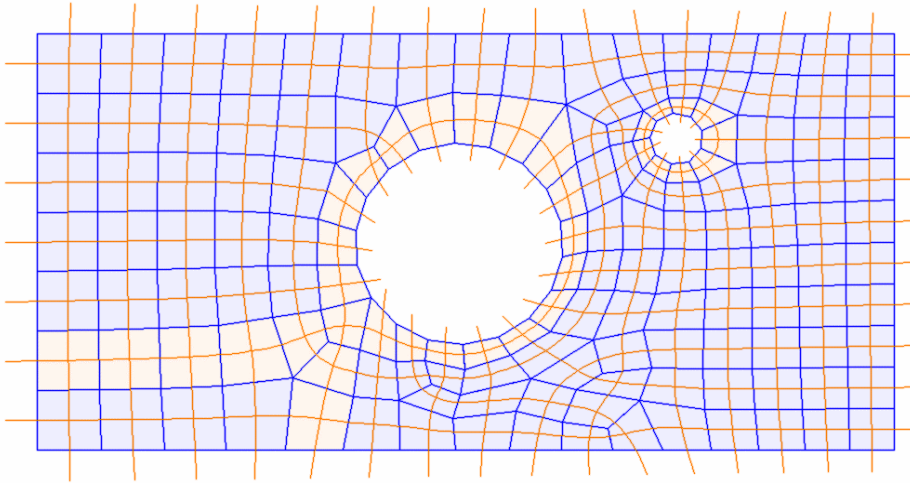


Figura 60: Construcción del Dual de una malla plana.

Se debe notar que las líneas son “largas”, a diferencia de las líneas duales de una malla de triángulos que son aristas de las celdas de Voronoï, aquí las líneas no son locales sino que atraviesan la malla sin bifurcarse. Las “líneas” son una abstracción, en realidad se trata de segmentos unidos de a dos “opuestos” formando poligonales extensas y se dibujaron suavizadas para resaltar la continuidad.

9.2 Construcción dual de una malla de hexaedros

Para extender la construcción anterior a tres dimensiones, supóngase una malla de hexaedros y en ella una arista interior rodeada por elementos o de una frontera parcialmente rodeada. La arista es cortada al medio por una superficie. En cada hexaedro de la arista, hay otras tres aristas “paralelas” a la cortada, con una cara “arriba” y otra “debajo”. La superficie de corte se propaga entre medio de las caras, cortando todo el grupo de aristas paralelas y continúa en la misma forma atravesando todos los vecinos.

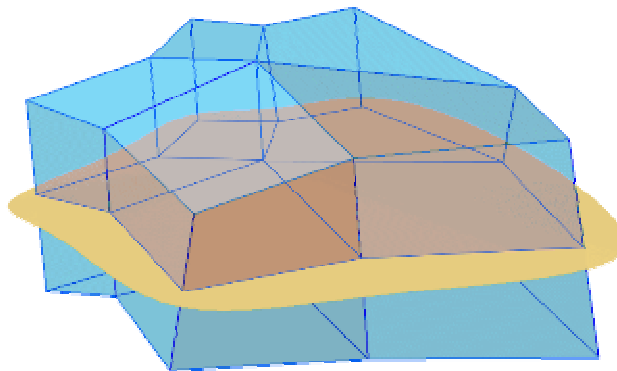


Figura 61: Corte de los hexaedros que comparten una arista.

La superficie se puede retorcer, autointerceptar, cerrar o alcanzar la frontera, pero no puede rasgarse en el interior. Esto es debido a que una arista interior está totalmente rodeada de hexaedros que comparten caras de a dos y entonces la superficie corta a todos esos hexaedros en la misma forma. En la Figura 62 se ilustra un caso sencillo con los hexaedros que son cortados por una misma superficie.

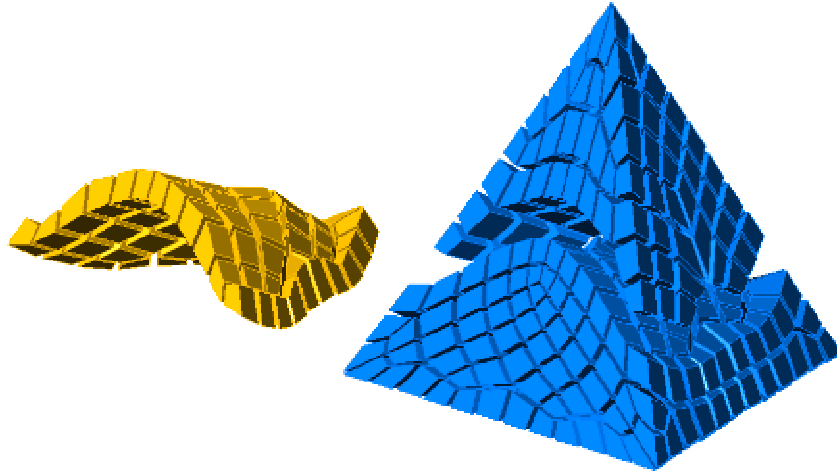


Figura 62: Conjunto de hexaedros cortados por una misma superficie.

La intersección de una superficie con la malla de hexaedros es una malla de cuadriláteros. Las líneas duales de esa malla de cuadriláteros cortan a la malla de hexaedros en una secuencia de elementos mutuamente vecinos.

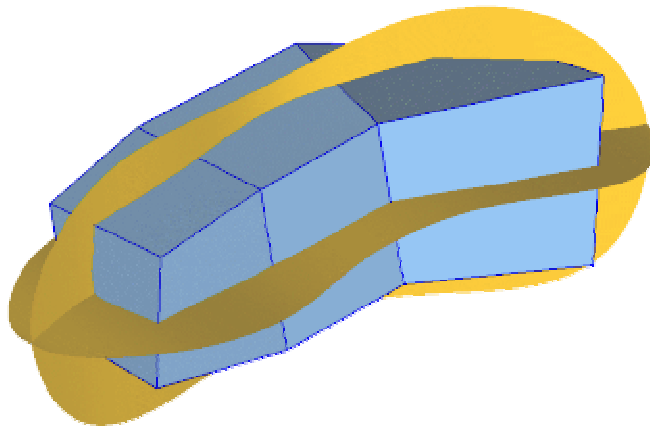


Figura 63: Intersección de dos superficies en una línea dual.

En un hexaedro, la intersección entre dos superficies que lo cortan es un segmento que atraviesa el elemento entrando y saliendo por dos caras opuestas. Por cada una de esas caras, el hexaedro limita (con la frontera o) con otro hexaedro, que también es cortado del mismo modo por ambas superficies. La línea sigue en el vecino y se propaga hasta cerrarse o hasta encontrar dos caras de la frontera. La intersección de dos superficies es entonces una línea que “enhebra” una secuencia de hexaedros y es dual común a las dos mallas de

cuadriláteros que forman las superficies al interceptarse con la malla de hexaedros. Lo mismo sucede con una autointersección: es una línea cerrada o que atraviesa la frontera en dos puntos.

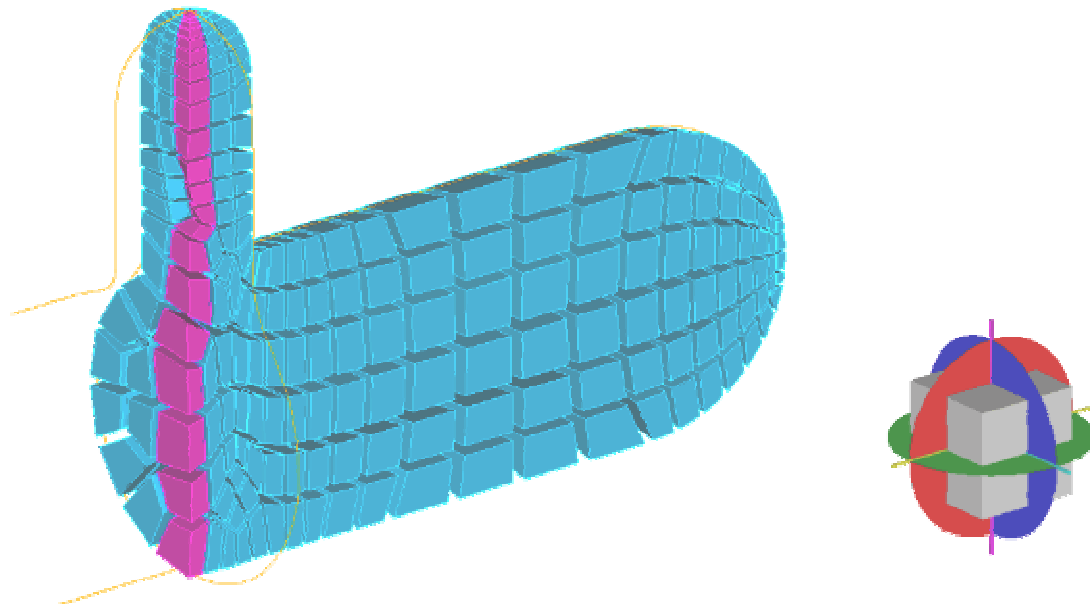


Figura 64: Intersección de superficies duales.

Izquierda: Corte con dos superficies mostrando los hexaedros de la intersección.

Derecha: Esquema de las intersecciones mutuas de tres superficies.

Considerando tres superficies mutuamente secantes, se concluye que las tres líneas que forman las intersecciones mutuas convergen en medio de un hexaedro. Un hexaedro define tres superficies, aquí intentaremos definir cada hexaedro por medio de tres superficies.

9.3 Análisis de la Dualidad en Mallas de Hexaedros

Entre las líneas duales, en dos dimensiones, quedan definidas regiones poligonales asociadas a los nodos de la malla. En tres dimensiones, las superficies forman poliedros que envuelven a los nodos y cuyas caras poligonales se asocian a las aristas de la malla. La correspondencia local es la misma que la que existe entre las celdas de Voronoï y los tetraedros Delaunay, pero aquí las componentes duales de la malla se pueden extender por uniones sucesivas formando redes extensas de líneas o superficies de modo que el análisis puede ser más global que en el caso simplicial.

Los nodos duales son los puntos donde se interceptan dos líneas en dos dimensiones o tres superficies y tres líneas en 3D. Las líneas y superficies que cruzan la frontera se pueden

considerar cerradas por fuera del dominioⁱ y así se puede concebir la existencia de nodos virtuales, en las intersecciones exteriores para poder asumir que todas las líneas y superficies son cerradas.

La construcción incluye una dualidad métrica además de la topológica: las distancias entre las líneas duales están gobernadas por la densidad de nodos o tamaño de elementos de la malla y los ángulos en ambas están también dualmente correlacionados.

4) Dualidad topológica:

- a) En 3 dimensiones, si $0 \leq k \leq 3$, cada elemento k -dimensional de la malla se asocia con un elemento $(3-k)$ -dimensional del dual.
- b) La cantidad y conexión de todas las piezas que forman un elemento está en correspondencia dual al igual que las conexiones mutuas entre distintos elementos vecinos: En el entorno cercano de cualquier nodo dual interior se cruzan tres superficies del mismo modo que los tres planos cartesianos en el origen. Los planos forman ocho octantes, cada uno con un poliedro, por lo que todos los poliedros tienen vértices triédricos, hay cuatro de esos poliedros compartiendo cada una de las seis aristas formadas por los planos. Visto desde la malla, el nodo dual se asocia con un hexaedro que tiene ocho nodos formando seis caras cuadriláteras. Los hexaedros que comparten un nodo se corresponden con un poliedro dual y los que comparten una arista se asocian a una cara del poliedro.
- c) La topología global también encuentra correspondencia dual: A una superficie dual se asocia una malla de cuadriláteros y a una línea dual, una malla de segmentos, la morfología es la misma para cada par dual: ambas son cerradas o abiertas o autointerceptadas de la misma manera. La intersección de dos superficies duales es una línea dual y la dualidad se mantiene con las correspondientes mallas interceptadas o en una autointersección.

5) Dualidad métrica:

- d) La densidad espacial de los componentes del dual resulta igual a la de la malla. Las distancias entre líneas o superficies tienen la misma distribución $h(\mathbf{x})$ que los nodos de la malla (excepto en la frontera, pero se puede generalizar considerando que

ⁱ Si el dominio tiene huecos impares, se cierran en una dimensión superior. De hecho, esa es la forma más simple de cerrar las superficies duales: una malla plana se puede unir por las fronteras con una copia paralela en 3D (formando la superficie de un *handlebody* tridimensional sin nudos); del mismo modo se pueden unir dos mallas idénticas de hexaedros en 4D.

fuera de la frontera, hay un nodo virtual a distancia h de cualquier vecino no virtual).

- e) Los ángulos planos y diedros se correlacionan entre los elementos de la malla y del dual. La correspondencia no es exacta pues las cuatro mediatrices de un cuadrilátero no se unen en el mismo puntoⁱ, pero los ángulos son aproximadamente suplementarios.

La dualidad es bidireccional, el dual del dual es la malla. Pero el dual de un conjunto cualquiera de superficies que se interceptan (de a dos por segmento y tres por punto), no es necesariamente una malla de hexaedros.

9.4 Conformidad y Unicidad de la Malla y el Dual

En el FEM, un hexaedro es un cubo deformado. La estructura combinatoria consiste en ocho nodos conectados por aristas y formando caras del mismo modo que en un cubo. Los nodos pueden llevarse a cualquier posición del espacio, las aristas y caras pueden curvarse, pero para que conserve su validez para el FEM se requieren algunas condiciones extra. En general las funciones de forma para los hexaedros se calculan en el cubo canónico y luego se mapean sobre el elemento real mediante una función trilineal, el mapeo debe cumplir ciertas condiciones para evitar errores numéricos y eso limita la deformación admisible de los elementos. Además, el tamaño deseado para cada elemento está especificado por una función $h(\mathbf{x})$ que se relaciona con el error admisible en cada punto \mathbf{x} del espacio, el tamaño posible del elemento entonces también está limitado.

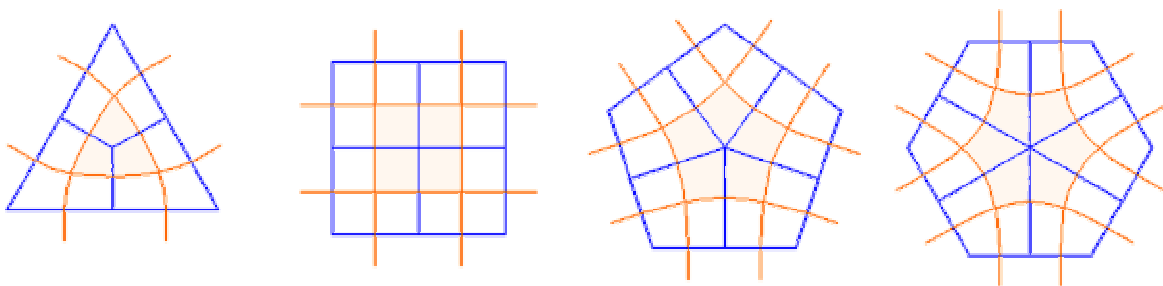


Figura 65: Distorsión provocada por la valencia de un nodo en los ángulos de los elementos y los polígonos duales.

La cantidad de vértices del poliedro dual se corresponde con la valencia o cantidad de hexaedros que comparten un nodo. En el caso ideal, los poliedros duales serán ocho cubos. Si las caras no son cuadriláteras, aparecerán desviaciones de la perpendicularidad que se

ⁱ En un poliedro esférico si, véase el capítulo 4.

verán reflejadas en la calidad de los elementos. La curvatura de las líneas y superficies duales debería ser la menor posible y los cruces lo más ortogonales posibles, todo esto se correlaciona con los ángulos de los elementos de la malla.

La base de la estructura dual de un hexaedro es la que está esquematizada a la derecha de la Figura 64 y es la intersección de tres superficies que separan ocho regiones distintas. Si por alguna razón, las regiones no fuesen distintas, los dos nodos de la malla quedarían identificados. La formación de un hexaedro no depende, entonces, sólo de las tres superficies, sino también del contexto inmediato, que debe encargarse de diferenciar las ocho regiones. El dual del conjunto de superficies debe ser un conjunto de hexaedros con subelementos y vecinos correctamente interconectados.

Al decir que las líneas no se bifurcan o que las superficies no se rasgan, se ha dado implícitamente por supuesto que la malla es conforme: dos elementos vecinos comparten un subelemento (cara, arista o vértice) completoⁱ.

Otro requisito, no siempre bien explicitado, es la unicidad de conexión: El subelemento compartido (de máxima dimensión) debe ser único.

Aquí se asumirá que en una malla, de poliedros en general, dos elementos conectados comparten completamente una única cara, o bien una única arista o sólo un vértice.

Desde el punto de vista dual, si dos hexaedros comparten una cara, habrá una arista dual compartida por los cuatro poliedros distintos que corresponden a los nodos de la cara cuadrilátera. En caso de haber n hexaedros compartiendo una arista, habrá una cara n -gonal compartida por los dos poliedros duales de los nodos de la arista. Un conjunto de hexaedros compartiendo un nodo se corresponde con el poliedro del nodo, cuyas caras y aristas surgen del análisis anterior. Se ve entonces que la unicidad de conexión en la malla implica la unicidad de conexión del dualⁱⁱ.

Para que un conjunto de poliedros sea dual de una malla de hexaedros ya se vio que sus vértices deben ser triédricos; y que en el interior debe haber exactamente cuatro poliedros compartiendo cada arista y ocho compartiendo cada nodo. El conjunto de poliedros debe ser además conforme y bien conectado en el mismo sentido que la malla.

ⁱ Las mallas no conformes, son también útiles en los métodos numéricos, pero aquí se tratará solo con mallas conformes.

ⁱⁱ La excepción se da en la frontera: un cuadrilátero o un hexaedro pueden tener más de una cara en la frontera; pero con los nodos virtuales y considerando a las superficies cerradas por el exterior el concepto puede seguir siendo general.

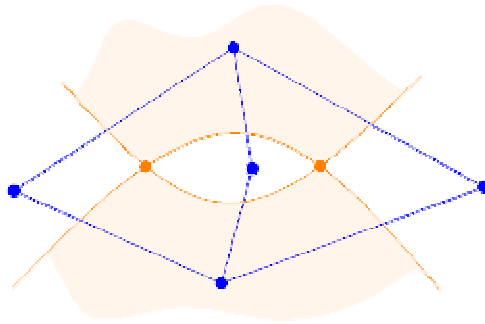


Figura 66: Dígono

El requisito de unicidad implica, en dos dimensiones, que la mínima cantidad de cuadriláteros compartidos por un nodo interior es tres y entonces el menor polígono dual es un triángulo. En la Figura 66 se puede ver un dígono, formado por dos vértices y dos aristasⁱ. Tiene dos vecinos (parcialmente sombreados) compartiendo entre sí los dos vértices sin compartir ninguna de las dos aristas. Esta construcción viola la unicidad requerida y su dual, que también viola la unicidad de conexión, consiste en un par de cuadriláteros vecinos por dos caras.

En tres dimensiones, esto se traslada a las aristas de los hexaedros y por lo tanto a las caras de los poliedros duales, no puede haber menos de tres hexaedros compartiendo una arista interior y la menor cara de un poliedro dual es un triángulo. En 3D, además, en el extremo de una arista compartida por exactamente tres hexaedros, las tres caras libres pueden pertenecer a un cuarto hexaedro vecino de todos los anteriores. La menor cantidad de hexaedros por nodo interior es entonces cuatro y el menor poliedro dual tiene la estructura de un tetraedro.

9.5 Propiedades de la Malla de Frontera.

Tanto para cuadriláteros como para hexaedros, la cantidad de caras de la frontera de una malla debe ser necesariamente par, pues cada línea dual que atraviesa la frontera tiene entrada y salida. Esta observación es independiente de la morfología de la frontera.

La frontera de una malla de hexaedros es una malla cerrada de cuadriláteros. Puede constar de varias partes separadas, cada pieza conexa de la frontera es una estructura bidimensional cerrada y orientable pues entre ellas encierran el dominio. Las distintas piezas de la frontera no pueden cruzarse, aunque podrían ser “tangentes”, compartiendo nodos o aristas (puede pensarse en el filo de una tenaza cerrada), pero no caras.

ⁱ En grafos, las dos aristas del dígono se denominan “aristas paralelas”, en referencia a que son dos caminos distintos que unen los mismos nodos.

Cualquiera que sea la topología de una pieza de la frontera, si se separan los cuadriláteros en dos grupos, se forma una frontera común (unidimensional, cerrada y posiblemente disconexa) que debe ser par pues limita mallas abiertas de cuadriláteros.

Cuando la frontera tiene topología esférica, cualquier línea simple (sin autointersecciones) la divide en dos casquetes. Si se elimina una línea simple, con sus cuadriláteros asociados, se obtienen dos mallas abiertas sobre discos con frontera circular par. Por lo tanto toda línea dual simple de la frontera tiene un número par de segmentos y corta un número par de cuadriláteros.

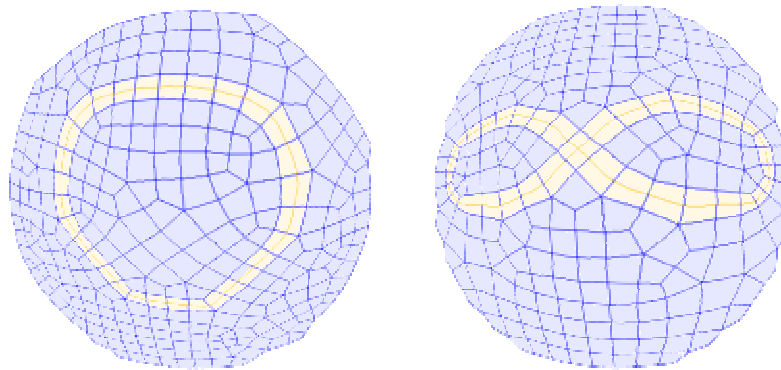


Figura 67: Círculo y Autocruce.

Si la línea tiene una sola autointersección, como un número ocho, separa la esfera en tres superficies, cada una con frontera par, entonces la línea corta un número par de cuadriláteros además del dual de la autointersección, un número impar en total. La línea tiene una cantidad par de segmentos, pero corta dos veces al cuadrilátero de la autointersección. Dado que cada autointersección cambia la paridad de cuadriláteros, en una frontera esférica única debe haber un número par de autocruces. Si la malla tiene exterior esférico y huecos esféricos, el total de autointersecciones debe ser par.

Del mismo análisis anterior se deducen inmediatamente dos corolarios: 1) una malla esférica de cuadriláteros solo puede ser impar si tiene un número impar de autocruces duales y 2) toda línea dual sobre una esfera (o en general, si encierra un disco o deja un disco en el exterior) es par y la cantidad de cuadriláteros que cruza tiene la misma paridad que la cantidad de autocruces.

Cuando la superficie es un *handlebody* (una superficie cerrada toroidal con cualquier cantidad de asas o tubos), una línea dual simple no siempre la divide en dos mallas con topología de disco y en tal caso, la paridad no queda definida. Pero si en el interior hay hexaedros, al “romper” un tubo sin huecos, la línea quebrada de aristas separadas encierra una malla de cuadriláteros formada por las caras expuestas de los hexaedros separados; la

La malla tiene topología de disco y por lo tanto debe ser par. Se deduce entonces que en una malla de hexaedros, los tubos macizos deben ser pares, es decir que una poligonal cerrada formada con aristas de frontera que envuelvan al tubo dando una sola vuelta debe ser necesariamente par. En particular, una línea dual que envuelve a un tubo macizo dando una sola vuelta, debe ser par.

La intersección de una superficie dual con alguna frontera de la malla es un conjunto de líneas cerradas, duales de la malla de frontera. Por los análisis anteriores, ya queda claro que si la superficie dual interior tiene la topología de un disco cortará a la frontera en una línea cerrada con topología circular y un número par de segmentos y si es cerrada como un cilindro interceptará a la superficie en dos líneas circulares con la misma paridad. También puede formar una superficie bifurcada, como un árbol de arterias, con una o más derivaciones, cortando a la frontera en tres o más líneas circulares con un número par de segmentos en total.

Como ya se analizó, tanto una autointersección como la intersección de dos superficies distintas, puede ser interior o cruzar la frontera en dos puntos.

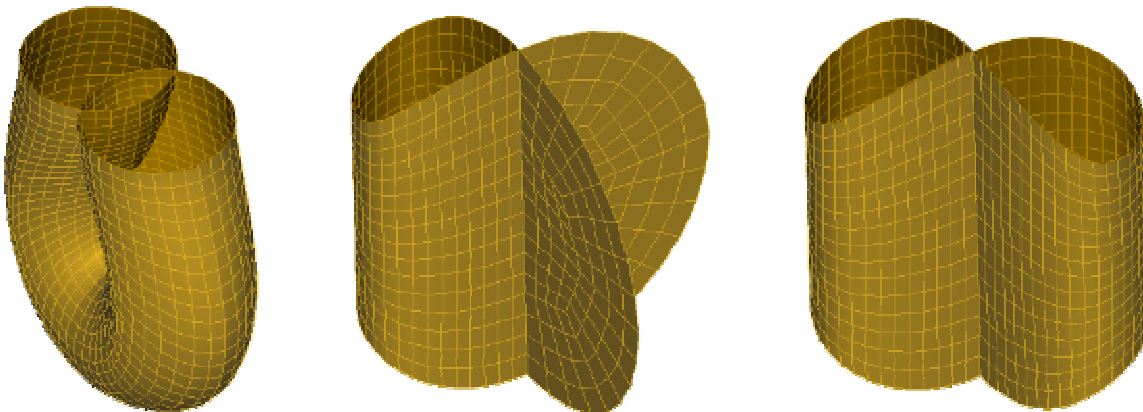


Figura 68: Superficies duales internas con una autointersección que llega a la frontera.
(Las líneas son sólo una ayuda para visualizar la forma, en el tubo no forman una malla válida.)

Si se trata de una autointersección, en esos dos puntos se pueden cruzar dos líneas distintas o bien son dos autocruces de una o dos líneas (Figura 68). De los dos últimos casos se deduce que la cantidad total de autointersecciones de líneas en la frontera debe ser par, pero ahora independientemente de la topología de la superficie, que puede no ser esférica.

10 Generación de hexaedros a partir del dual

Se analizarán distintas posibilidades para generar una malla hexaedros construyendo primero el dual, se buscarán métodos posibles y las restricciones para que el resultado sea una malla conforme de hexaedros. Uno de éstos métodos es el que hemos implementado y es el único que se ha probado hasta el presente.

10.1 Generación de una malla de poliedros duales

El método conceptualmente más sencillo consiste en generar (por avance frontal u otro mecanismo) una malla conforme de poliedros. Pero los requisitos de los poliedros duales de una malla de hexaedros son que haya cuatro por arista, ocho por nodo y que tengan vértices triédricos. Esos condicionantes son muy difíciles de satisfacer en la práctica y aún no se ha publicado ningún intento de realizar tal procedimiento. Es más, probablemente sea más sencillo generar hexaedros por avance frontal y eso sí se sabe que es extremadamente difícil y se abandonó ese camino.

10.2 Trazado de superficies con frontera libre

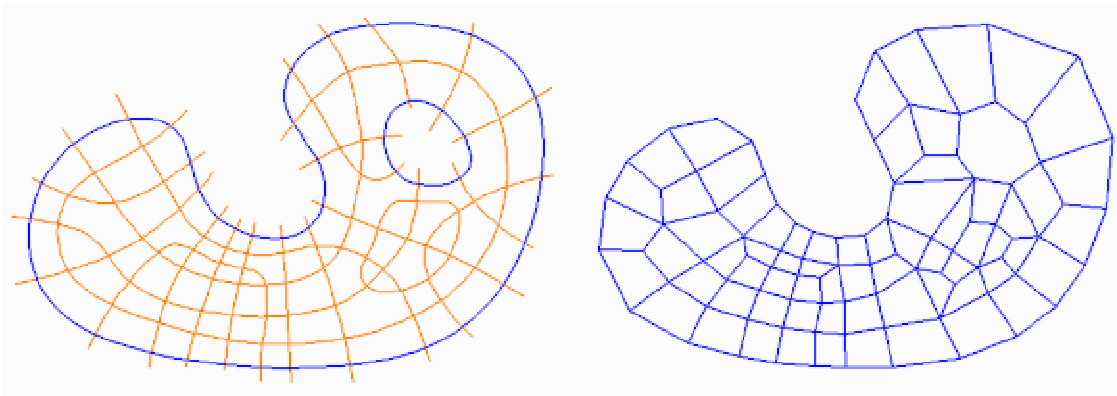


Figura 69: Mallado del interior de una región plana.

Otro método posible es la construcción de un grupo de superficies duales que subdividan el dominio con la densidad requerida y la menor curvatura posible. En la Figura 69 se ilustra el método en dos dimensiones. Con este método, el juego de intersecciones entre las superficies y la frontera crea la malla de la frontera.

En 2D no deben cruzarse más de dos líneas en cada punto y en 3D, tres superficies, sólo pueden cruzarse en puntos aislados y no pueden cruzarse cuatro en ningún punto. El requisito más difícil de cumplir es la unicidad de la conexión entre las regiones poliédricas

definidas por las superficies. Es más, la posible falta de unicidad en la frontera introduce algunas complicaciones que deben ser analizadas en forma especial.

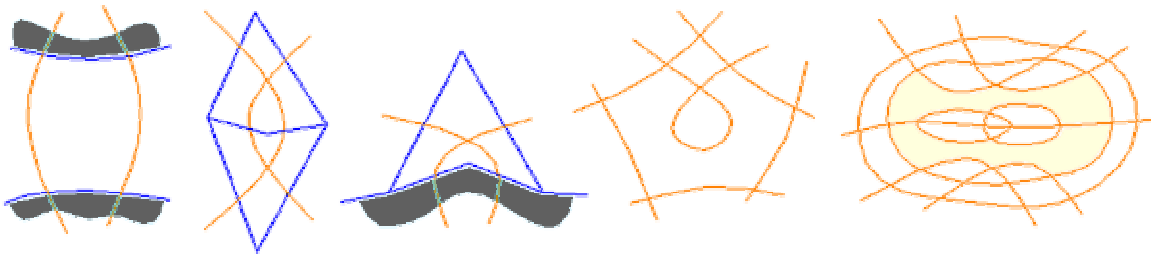


Figura 70: Algunas limitaciones al libre trazado de las líneas duales.
(El exterior del dominio se representa sombreado oscuro)

En la figura se ven algunos casos patológicos en dos dimensiones. Se pueden considerar también como cortes correspondientes a 3D; pero obviamente, en tres dimensiones, hay mas posibilidades de violar la unicidad.

Los tres primeros ejemplos son producto de la generación de dígonos. En la figura de la izquierda se forma un dígono entre dos puntos virtuales, unificando dos nodos de frontera. En la siguiente, entre dos puntos interiores, produciendo dos cuadriláteros que no pueden corregirse por suavizado. Luego aparece un dígono entre un punto virtual y uno interior, que en la frontera convexa no sería problema, pero en la cóncava provee elementos imposibles de arreglar. En la siguiente figura, una línea autointerceptada forma un “monógono”ⁱ, el vértice no es dual de un cuadrilátero y además es un vértice degenerado del poliedro que rodea al monógono. El error en la figura de la derecha es que las dos regiones sombreadas comparten dos aristas, fue provocado por los dos circuitos internos cerrados, pero no es fácil explicar por qué ni como evitar que se forme.

10.2.1 Manipulación de líneas y superficies internas

Todos los problemas especiales de la frontera se pueden solucionar con un método extremadamente sencillo que consiste en un *offset* de la frontera: rodear cada frontera, desde el interior, con una superficie cerrada paralela, haciendo que todas las superficies que atravesasen la frontera también atravesasen estas superficies paralelas.

La malla correspondiente a esta construcción dual tendrá un hexaedro interior por cada cara de frontera, habrá una capa de hexaedros rodeando cada superficie. De esa forma se restaura la unicidad en la superficie y es posible unificar los criterios en el interior y en la frontera dándoles el mismo tratamiento.

ⁱ En un grafo se denomina “loop”.

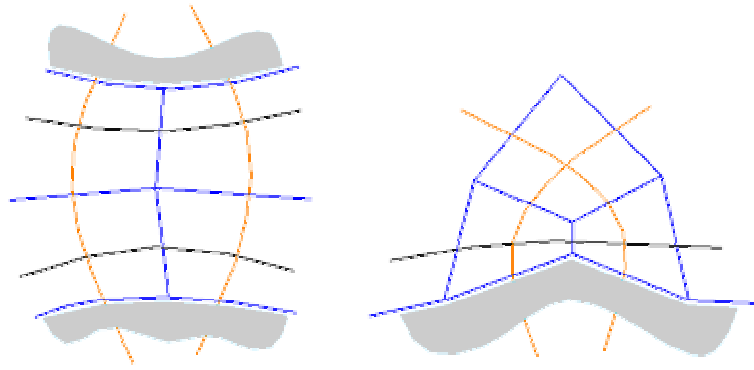


Figura 71: Solución de problemas con un "offset" de la frontera.

Los dígonos, monógonos y sus extensiones y equivalentes tridimensionales pueden evitarse (evitando producirlos) o bien corregirse localmente mediante la ubicación estratégica de superficies cerradas (que no produzcan nuevos problemas) o también pueden realizarse algunas transformaciones de las superficies.

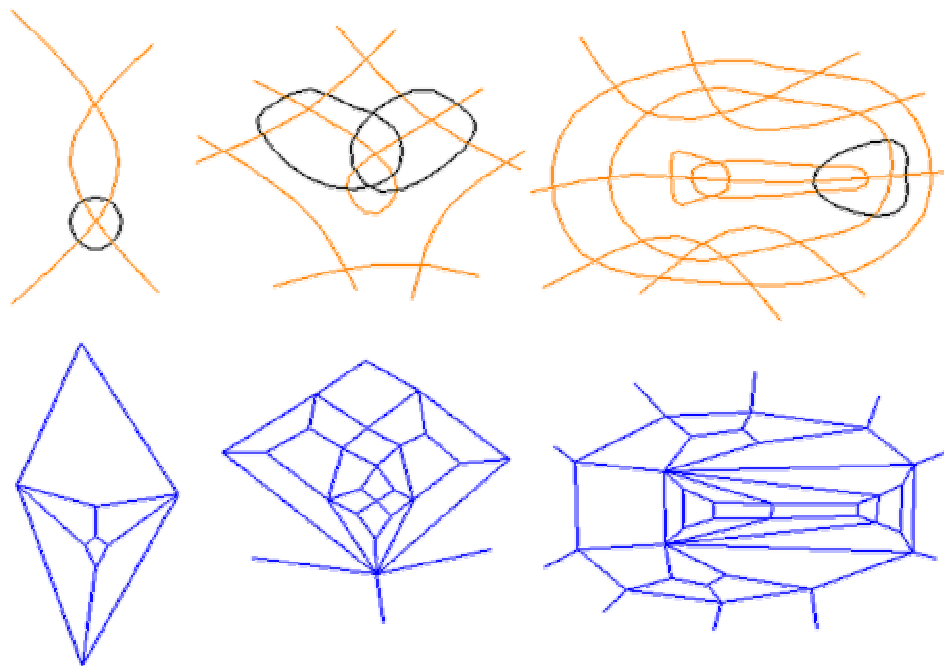


Figura 72: Reparación por agregado de superficies cerradas.

En la Figura 72 se muestra la segunda alternativa. Agregando superficies cerradas alrededor del subelemento mal compartido se repara el dual, dando una malla válida, pero quedan regiones de muchas caras, que equivalen a nodos de la malla con muchos elementos, deteriorando entonces la calidad de la malla.

Se pueden agregar o quitar superficies cerradas interiores, además se puede modificar la trayectoria, alterando el conjunto de intersecciones. Pero también es posible realizar transformaciones que combinen o separen superficies:

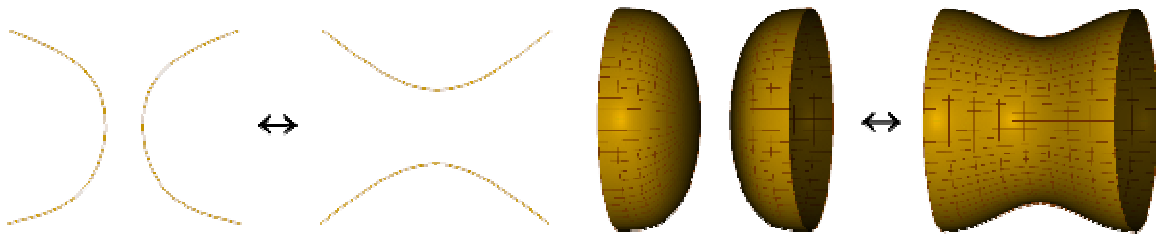


Figura 73: Izquierda: Intercambio de extremos. Derecha: Coalescencia y división.

- 1) Dos superficies “contiguas” pueden coalescer, uniéndose en una configuración localmente cilíndrica y viceversa, una superficie cilíndrica puede romperse en dos. En dos dimensiones, esta operación es un intercambio de extremos sin cruce.

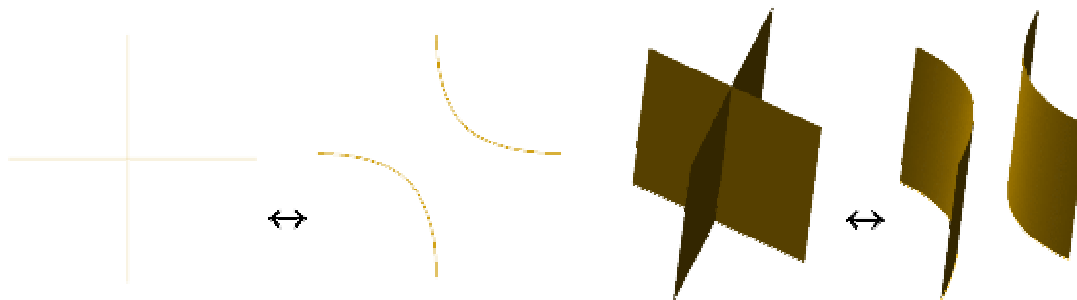


Figura 74: Construcción y destrucción de un cruce.

- 2) Dos superficies que se cruzan pueden intercambiar extremos para eliminar el cruce y viceversa.

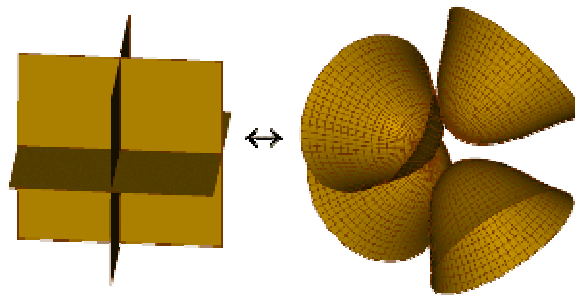


Figura 75: Construcción y destrucción de tres cruces.

- 3) En tres dimensiones además se puede crear o destruir un cruce de tres superficies.

Las operaciones, en dos dimensiones, son siempre locales. En cambio, en tres dimensiones, solo la coalescencia es más o menos local. Todas las operaciones tridimensionales que involucren cruces, crean o destruyen una intersección completa. La línea de cruce, si desaparece, desaparece por completo y si se crea, debe formar circuitos cerrados en las superficies o bien extenderse hasta el exterior del dominio.

Con el método de libre trazado se podrían realizar superficies sencillas que corten la malla con la densidad requerida y, en principio, podrían evitarse los problemas antes mencionados. La libre ubicación de las superficies permite esquivar o interceptar la frontera según la conveniencia. El gran desafío, por el cual este método no ha sido implementado, es que aún no hay ningún mecanismo computacional que permita la construcción y manipulación de superficies con las libertades y los condicionantes requeridos.

Si bien el método de generación no se implementó, estas técnicas de manipulación han servido como herramienta de reparación para los errores de los métodos que preservan la frontera. Es necesario aclarar que no está demostrado que logren arreglar un conjunto de superficies mal conectadas; de hecho, nadie ha logrado un algoritmo general en tal sentido. En 2D (en el plano) parece sencillo ver que sí (aun sin una demostración); pero en tres, ni siquiera se pueden visualizar fácilmente los posibles problemas.

10.3 Trazado de superficies con frontera mallada

El método que sí se ha implementado consiste en utilizar la malla de frontera para generar la estructura combinatoria del interior.

En este punto resulta necesaria una introducción histórica con algunos comentarios subjetivos.

Las primeras referencias a la generación previa del dual provienen de un importante grupo de investigadores que desarrollan el programa comercial CUBIT en *Sandia National Laboratories* de Estados Unidos; de entre ellos cabe destacar a Tim Tautges y a Scott Mitchell, quienes crearon e impulsaron el método entre 1994 y 2000. La técnica que implementaron fue denominada *Whiskers Weaving*^[56,57] (bigotes ondulados) en alusión a la construcción de líneas por avance frontal. Nuestros desarrollos (independientes y sin conocimiento de las actividades del grupo de Sandia) comienzan a implementarse en 1995 y se basan en la generación de superficies duales por medio de la subdivisión recurrente del dominio; a diferencia de los estadounidenses, que publicaron sus ideas, nuestra primera presentación se retrasó hasta tener un programa, aunque fuese limitado^[58]. Más tarde, y muy probablemente desconociendo nuestro trabajo, Matthias Müller-Hannemann, del *Institut für Mathematik - Technische Universität Berlin*, intentó un método equivalente al nuestro: la eliminación sucesiva de ciclos duales^[59], en sus trabajos hace uso extensivo de la teoría de grafos.

La primera pregunta que surge naturalmente es acerca de la factibilidad de construir una malla estructurada de hexaedros con una frontera (par) preestablecida. La pregunta tiene además un antiguo desafío, presentado por Robert Schneiders en la *web*^[60]; y que consiste en un simple

dominio piramidal, cuya solución aún se desconoce. Una conjetura por la respuesta positiva, provino de un consagrado geómetra matemático: William Thurston, y fue previa (1993)^[61] e ignorada por ambos grupos. La sencilla respuesta de Thurstonⁱ a esa pregunta, formulada en *sci.math*, un grupo de noticias (*newsgroup*) de matemáticas, contenía el germen de todos los desarrollos prácticos posteriores aunque en forma incompleta.

En 1996 Scott Mitchell presentó una serie de conjeturas razonables que fueron siempre referenciadas como demostración^[62,63]. Desgraciadamente dicho trabajo (y sus posteriores mejoras) contiene algunos presupuestos no demostrados y argumentablemente falsos: uno es sobre la orientabilidad de las superficies interiores y el otro es la posibilidad de resolución interna de la falta de unicidad y de cualquier otro problema de conexión por medio de algunos mecanismos como los expuestos en 10.2.1.

Mi impresión personal, es que los comentarios de Thurston son topológicamente válidos pero incompletos y poco útiles en la práctica, a un matemático no le preocupa si la malla sólo es realizable en cinco dimensiones (y creo que sus argumentos conducen exactamente a eso). De todos modos, para la generación de mallas para el FEM, no hace falta una demostración positiva, a menos que sea constructiva y el resultado contenga elementos utilizables. Una demostración negativa, por contrario, sería de alguna utilidad; aunque más no sea, para evitar la inútil persecución de una quimera y comenzar a idear métodos con las restricciones apropiadas.

En dos dimensiones, si la frontera es una malla unidimensional impuesta, la elección de las aristas de entrada y salida de las líneas duales es absolutamente libre. En cambio, en 3D, una línea dual de la frontera impone una frontera de alguna superficie interior. La única elección libre es la topología de las superficies internas, pueden construirse todas como discosⁱⁱ, con una sola línea de frontera, o pueden asociarse más líneas en cilindros o estructuras arteriales.

El método se divide en dos partes, una puramente topológica y una puramente métrica. La primera etapa genera la estructura conectiva de la malla sin utilizar la posición de los nodos existentes ni asignar una posición a los nuevos. Luego, en la etapa métrica, se ubican los nodos en el espacio y se procede al suavizado sin alterar la conectividad generada. De ser necesario, al final pueden agregarse superficies cerradas internas para aumentar la

ⁱ William Thurston, medalla Fields en 1982, hizo importantes contribuciones a la topología de las variedades tridimensionales. El tema de su tesis y los trabajos posteriores, hacían que en 1993 él fuese la persona más indicada para “comprender” la teoría subyacente a las técnicas duales de generación.

ⁱⁱ Más adecuado que “disco” sería decir aquí “superficie con frontera única”; así se puede incluir a la cinta de Möbius (no-orientable) que está limitada por cierto tipo de líneas autointerceptadas.

densidad de elementos en el interior y, si fuese posible, también podrían modificarse algunas trayectorias de las superficies para disminuir la cantidad de nodos.

Aún cuando el proceso topológico sea capaz de generar una estructura correcta y correctamente conectada (conformidad y unicidad de conexión), no dará siempre una malla que pueda ser corregida por suavizado. Para poner un simple ejemplo bidimensional, puede pensarse en un nodo interior conectado a dos nodos de frontera a ambos lados de una fuerte concavidad, no siempre será posible encontrar una ubicación para el nodo, dentro de la malla y sin que los elementos se retuerzan; necesariamente habrá que agregar más nodos y elementos. La capa de hexaedros paralela a la frontera es una gran ayuda, pero no necesariamente es la solución; más de una capa ayuda más. Al analizar las técnicas de suavizado se verá la posibilidad de agregar superficies cerradas para resolver este tipo de problemas.

Como primer intento se implementó un mallador dentro de superficies con topología esférica, es decir que la frontera es única, cerrada y sin huecosⁱ.

Para construir las superficies interiores se eligió la forma de disco simple, cada disco está limitado por una línea dual de frontera y eso impone, como condición extra, un número par de autointersecciones de cada línea.

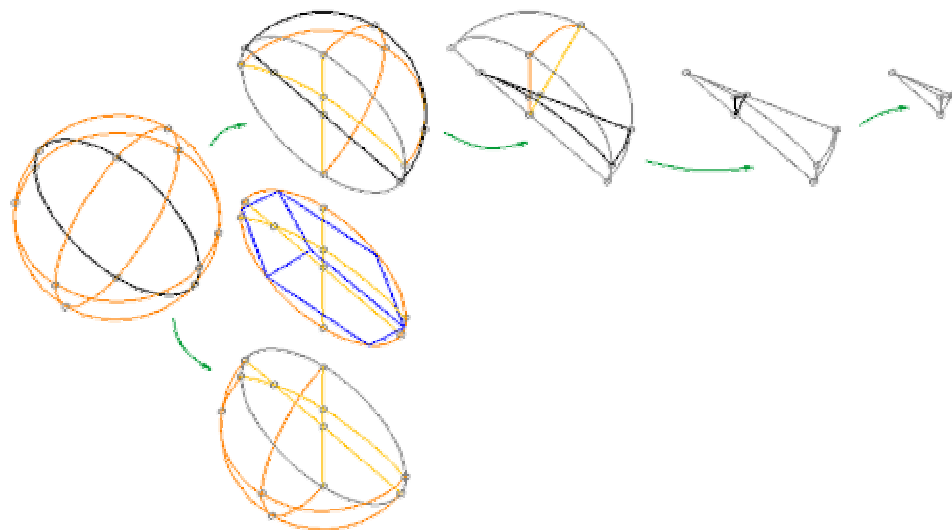


Figura 76: Subdivisión recurrente y proyección de un casquete en el corte.

El método consiste básicamente en dividir el dominio en dos casquetes utilizando una línea simple. La malla de cuadriláteros (o su dual) asociada al disco es una proyección o copia

ⁱ Si se debe mallar un dominio con frontera toroidal y cualquier cantidad de agujeros (un *handlebody* sin nudos ni monstruosidades), deberá proveerse un corte mallado para cada tubo y así convertirlo en una esfera. Si el dominio tuviese huecos, éstos deberían unirse entre sí y con la frontera exterior; formando una cadena, mediante tubos mallados, hasta lograr la esfericidad requerida.

topológica de uno de los casquetes. El proceso se repite en forma recurrente hasta obtener los poliedros duales indivisibles.

La Figura 76 muestra el esquema del método: Se elige una línea simple que se utiliza para dividir en dos el problema y se proyecta un casquete sobre el disco limitado por la línea divisoria. Para el primer paso se muestran los dos casquetes resultantes y entre medio se puede ver la malla asignada al corte. De los pasos subsiguientes se muestra arriba una sola rama hasta llegar a un “átomo” sin líneas cerradas libres, que es un poliedro dual de un nodo de la malla resultante. Los restos de las líneas de corte previas permanecen, pero no se proyectan y no son reutilizables para dividir, se subdividen por el corte con otras líneas hasta formar las aristas de los poliedros duales.

Al elegir una línea simple divisoria, se elige también el menor de los casquetes para ser proyectado y se verifica que no haya una línea cerrada paralela en el casquete; si la hubiese, se elige ésta última en su lugar. Eso garantiza que no se formaran superficies cerradas interiores en exceso, pues la línea cerrada y su homóloga proyectada no formarán un cilindro, la línea de frontera limitará un disco y la interna formará una esfera interior.

La malla que se asigna al disco, en el interior de la línea de corte, podría ser cualquiera que se pegue conforme a los casquetes, pero la proyección de un casquete garantiza que la cantidad de autointersecciones no aumentará y puede aún disminuir. Si se aprovecha mal la libertad de elección de los pares de nodos duales a unir con líneas interiores, pueden generarse autointersecciones a partir de líneas distintas que en el casquete ni siquiera se cruzan. La proyección exacta, en cambio, mapea los cruces en la misma forma en que aparecen en un casquete, dos líneas cruzadas se cruzan en la proyección y lo mismo sucede con los autocruces, manteniéndose siempre la paridad.

Respetando la unión de pares determinada por el casquete, lo que puede aprovecharse en forma benéfica es la libertad de las trayectorias de las líneas en el disco. De la proyección podría quedar solo la estructura de nodos duales que deben unirse con líneas internas y eliminar los cruces y autointersecciones innecesarias. La excepción es cuando el casquete tiene algún fragmento de línea con un número impar de autocruces, al menos uno debe quedar mapeado en el corte.

Estas operaciones (destinadas principalmente a reducir la cantidad de autointersecciones) sumadas a la ausencia de los restos de líneas de corte previos, provocan violaciones a la unicidad de conexión en el corte; en tal caso se agregan estratégicas líneas cerradas que formarán luego superficies totalmente interiores.

Los dígono de las líneas interiores del disco con la línea de corte se resuelven todos al finalizar el proceso, envolviéndolos con superficies cerradas. Si se evita que las superficies agregadas lleguen a la frontera exterior, no hay garantías de que la malla resulte válida; pero, en general, lo es.

10.3.1 Autointersecciones

La subdivisión no puede continuar cuando las únicas líneas que quedan tienen autointersecciones; y eso sucede prácticamente en todos los casos útiles. Una línea dual de una malla de frontera se enrolla sobre la superficie con muy poca probabilidad de cerrarse en una sola vuelta, normalmente se desvía para cerrarse después de varias autointersecciones.

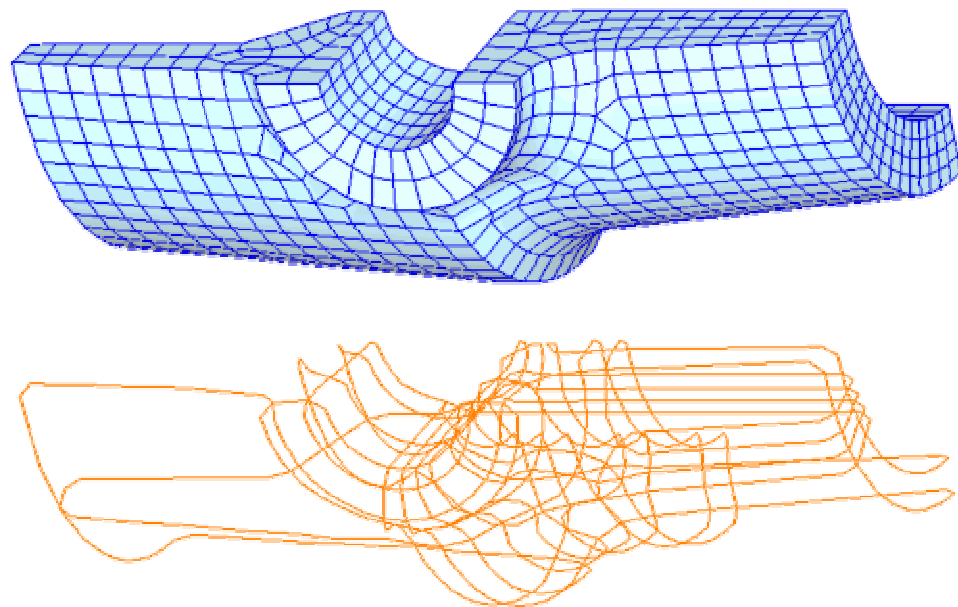


Figura 77: Línea con muchas autointersecciones.

La Figura 77 muestra una malla de superficie típica y debajo una línea dual que da gran cantidad de vueltas a la superficie antes de cerrarse. Esta situación, lejos de ser rara o patológica, es la habitual.

Aunque algunos autocruces se resuelven solos gracias al proceso de división, la gran mayoría subsiste y se requiere alguna técnica adicional para terminar el proceso.

Hay dos problemas que invitan a no elegir una línea con autocruces como frontera del corte, uno es la arbitraria elección de los pares terminales de cada línea de autointersección interior y el otro la proyección. Las líneas autointerceptadas no dividen a la esfera en dos casquetes, además normalmente poseen varias autointersecciones y queda indeterminada la forma de autointersección de la superficie interior.

Aun en el simple caso de un disco con una sola autointersección interior, como el del medio de la Figura 68, en el desarrollo de la superficie extendida sobre un plano la línea de autointersección aparece dos veces. En tal caso la asignación de la malla o el dual en el corte no se puede hacer con la sencilla proyección de un casquete.

10.3.1.1 Resolución interior de los autocruces

Se encontró que algunos autocruces se resuelven automáticamente al ser divididos, observando el patrón común a las líneas simples que resuelven autocruces, se ideó e implemento un método que consiste en rodear dos autocruces sucesivos con una línea cerrada y asignar una malla interior que garantice la resolución de ese par.

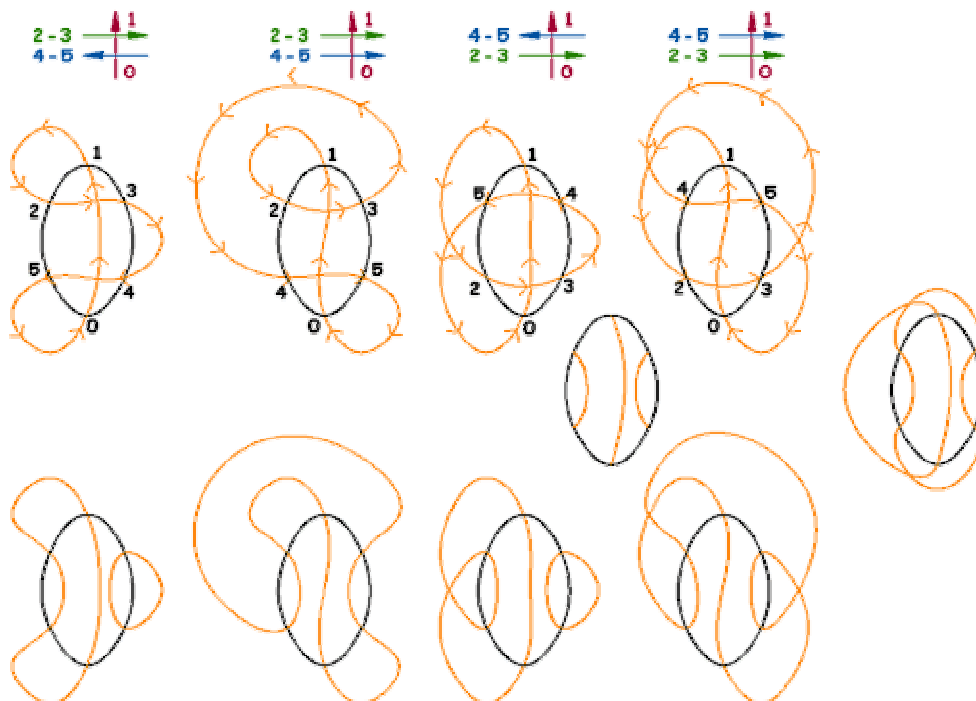


Figura 78: Eliminación de un par consecutivo de autocruces en todas las secuencias posibles.

Todas las posibles formas de aparición de dos autocruces sucesivos se muestran en la parte superior de la Figura 78, exceptuando las formas simétricas. Allí se muestra la línea autointerceptada atravesando de distintas maneras una línea de corte impuesta (inexistente en la superficie), el recorrido exterior de la línea autocruzada es esquemático (el tercer caso debe tener al menos una cuarta autointersección en alguno de los tres lóbulos externos) y no se muestran las otras líneas que atraviesan la línea de corte entremedio de los dos autocruces internos. Descontando las simetrías, hay solo cuatro posibilidades esencialmente distintas gobernadas por el esquema superior de la figura. En lugar de proyectar un casquete, se impone a todos los casos la misma configuración de líneas

interiores al disco; la configuración impuesta se muestra en el medio de la figura. Abajo se puede observar el resultado, con el autocruce interior resuelto y a la derecha se muestra el casquete opuesto, común a todos los casos.

Parece sorprendente que se resuelva asignando la misma configuración a todos los casos, pero lo que sucede es que en el casquete opuesto se produce la unión de los autocruces formando la línea dual interior totalmente contenida en dicho casqueteⁱ. En la figura de la derecha, las dos autointersecciones se transformaron en las dos intersecciones simples que se ven fuera del disco.

En toda subdivisión hay que evitar que la separación deje dos líneas con un número impar de autocruces en cada unaⁱⁱ. Para saber si es posible lograrlo en cualquier caso hace falta un mayor estudio de la topología de las líneas con autointersecciones; pero de todos modos, el método falla aún en casos simples; nuestros algoritmos fueron incapaces de corregir algunas violaciones a la unicidad de conexión que se produjeron como efecto adverso de éste método.

10.3.1.2 Resolución de los autocruces en la frontera

El problema topológico es el principal pero no es el único y para poder resolver otros problemas (mientras se esperaba la solución, propia o ajena), se decidió relajar parcialmente la imposición de la frontera y resolver allí los autocruces con los métodos de edición que se analizaron en 10.2.1, pero evitando alterar las aristas geométricas de la frontera.

10.3.1.2.1 Intercambio de extremos positivo y negativo

Cuando se trata de una autointersección, la eliminación del cruce puede producir dos resultados distintos que se han denominado positivo y negativo, debido a la orientación de las líneas resultantes.

ⁱ El método está relacionado, sin saberlo *a priori*, con la solución propuesta por Thurston.

ⁱⁱ Por ejemplo, en el tercer caso la autointersección faltante no podría estar a la derecha, entre 3 y 4, porque se crearían dos líneas con una autointersección cada una.

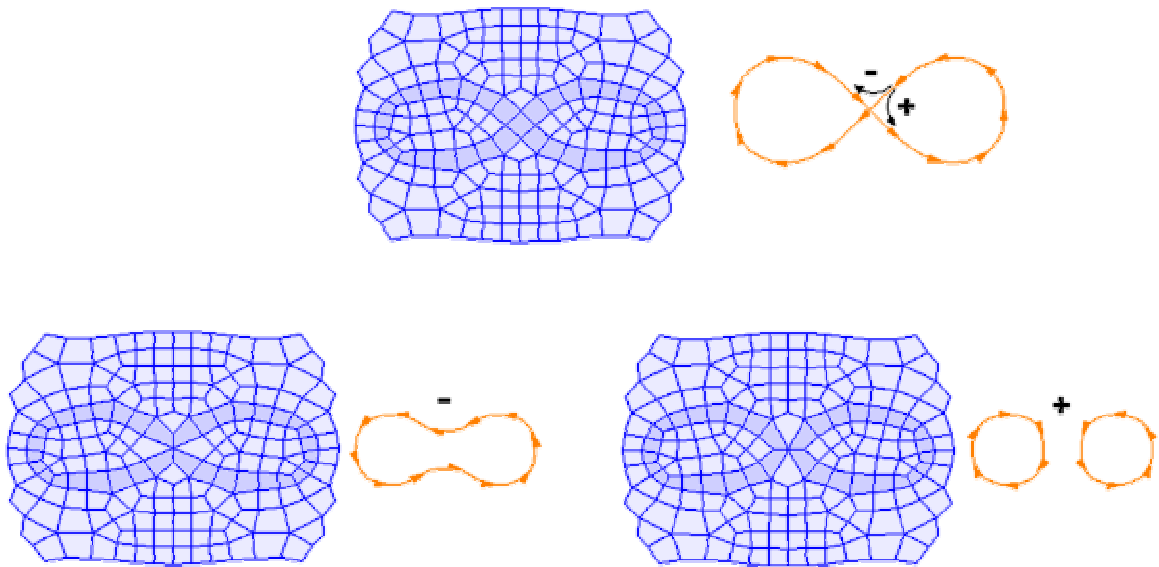


Figura 79: Dos formas de intercambio de extremos en un autocruce.

El intercambio de extremos negativo deja como resultado una línea con un autocruce menos y el positivo la divide en dos. En la malla, el cruce es un cuadrilátero, la eliminación de un nodo dual es la eliminación de dicho cuadrilátero, uniendo dos nodos diagonalmente opuestos. La diferencia estriba en cual de las dos diagonales se utiliza, pero el resultado es siempre que dos nodos diagonales se identifican como un nodo con la valencia sumada de los originales menos uno, mientras que los otros dos quedan pero con su valencia reducida en uno.

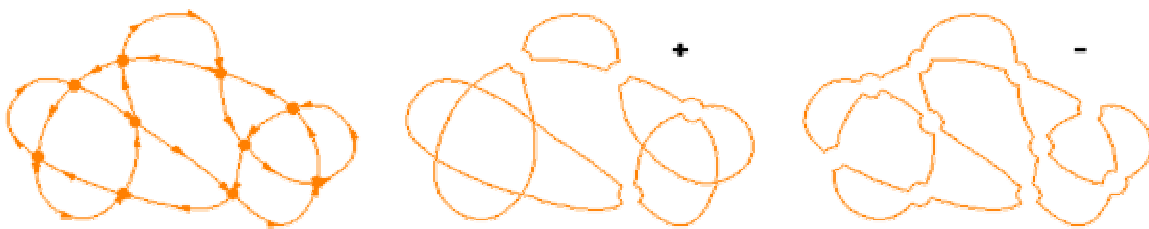


Figura 80: Eliminación de todos los autocruces de una línea.

Como puede verse en la figura, el intercambio negativo requiere la eliminación de todos los cruces, mientras que el positivo resuelve la situación con una menor cantidad de eliminaciones, por lo que se adoptó este último mecanismo.

10.3.1.2.2 Diagrama Circular

Para analizar las eliminaciones se desarrolló un gráfico circular donde se mapean las autointersecciones en orden de aparición.

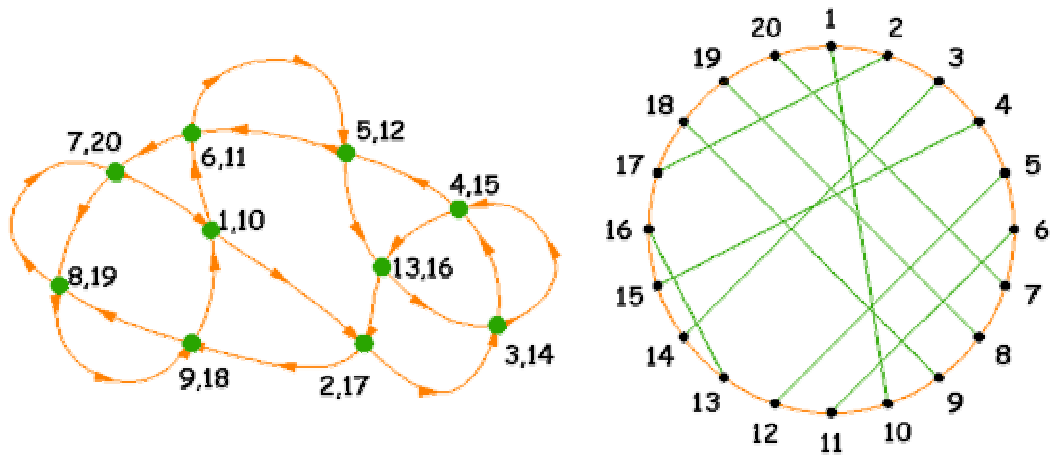


Figura 81: Numeración de autocruces y diagrama circular.

A la izquierda de la figura se muestra la línea con las autointersecciones numeradas en forma consecutivaⁱ. A la derecha, la línea es representada por medio de una circunferencia igualmente numerada donde se han conectado internamente los números correspondientes a cada cruce.

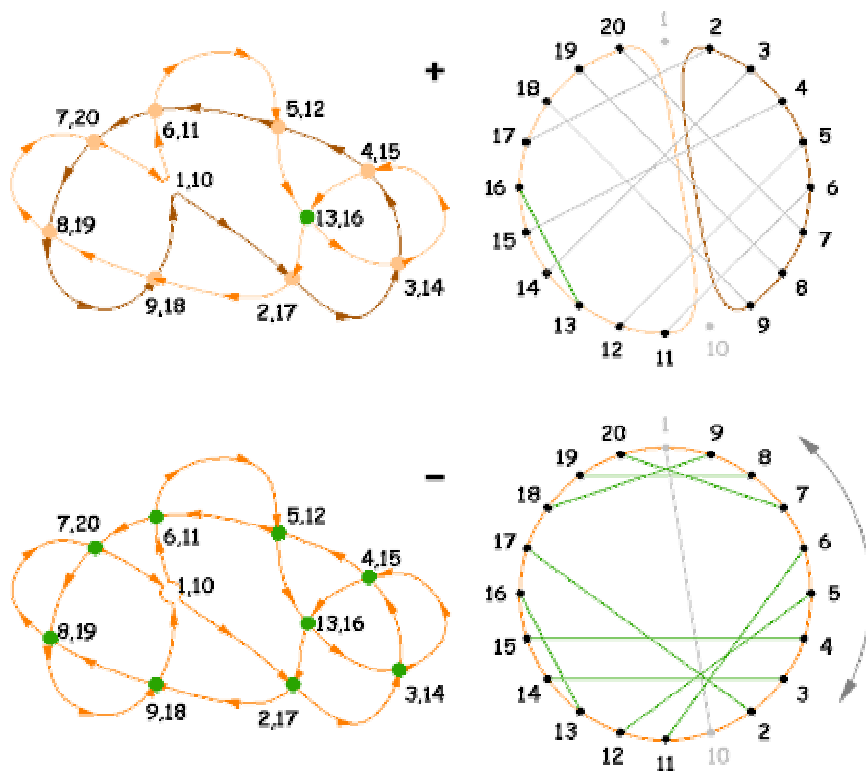


Figura 82: Diagrama de una eliminación.

Arriba: Eliminación positiva dejando una autointersección.

Abajo: Eliminación negativa dejando nueve autointersecciones

ⁱ El hecho de que a cada punto le corresponde un número par y uno impar, se conoce como “Teorema de los puntos dobles de Gauss”

En la Figura 82 puede verse el resultado de una eliminación positiva y una negativa en el mismo cruce. La eliminación positiva divide la línea en dos piezas disjuntas, convirtiendo algunas autointersecciones en simples cruces de dos líneas distintas. En el diagrama circular se puede ver que los autocruces desaparecidos corresponden a las líneas de conexión que atraviesan a la eliminada uniendo los dos arcos disjuntos; sobrevive la única línea que no es cortada, dejando una autointersección en una de las partes. La eliminación negativa es una inversión de uno de los arcos que no elimina ningún otro autocruce.

Para minimizar la cantidad de modificaciones se implementó un algoritmo “ávido” (*greedy*), que elige la línea del diagrama con mayor número de cruces. Cada línea con autointersecciones se recorre para armar una estructura de datos equivalente al diagrama circular. Para cada autointersección, se almacenan las otras que se encuentran en el camino hasta volver a encontrar la de partida, si un autocruce ya estaba en la lista se borra (línea paralela). Finalmente se elimina el autocruce que más elementos contenga en la lista y se repite el proceso con cada línea resultante.

Si bien es muy simple, el algoritmo ávido no es óptimo. El contraejemplo más sencillo que se encontró se muestra en la siguiente figura.

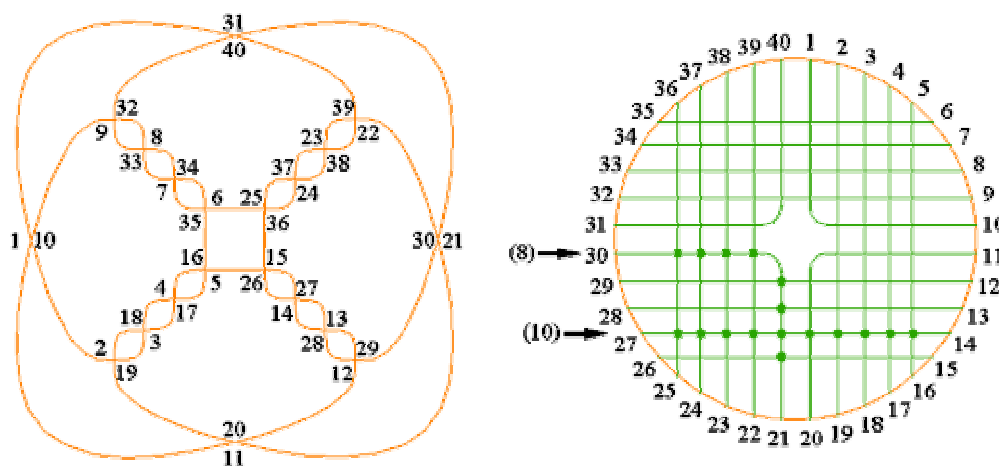


Figura 83: Contraejemplo que muestra que el algoritmo voraz no es óptimo.

Cuatro líneas se dibujaron acodadas solo para facilitar el conteo de intersecciones. Todas las líneas rectas cruzan diez líneas, mientras que las acodadas cruzan ocho. Siguiendo el algoritmo, se utilizaría primero una línea recta, digamos una horizontal, eliminando todas las verticales y dos acodadas; luego las que más cortan son las dos acodadas restantes que eliminan el grupo opuesto de horizontales y para terminar hay que utilizar las tres horizontales remanentes. Se eliminaron seis líneas en total, cuando lo óptimo hubiese sido utilizar las cuatro acodadas.

10.3.1.2.3 Resguardo de las Aristas Geométricas

Al eliminar el autocruce que se presenta en el elemento central de la Figura 84 a), la malla queda como se muestra al lado en b), provoca una modificación de las aristas potencialmente perjudicial. Si alguna arista es importante en la malla, una arista geométrica, como en a'), la eliminación provoca el defecto mostrado en b'). Un método, que se muestra en c) y ampliado en c'), consiste en hacer los cambios dentro del elemento, éste mecanismo preserva las aristas pero genera elementos muy deformados. Con el criterio de minimizar la curvatura de las líneas duales se implementó el método mostrado en d) que consiste en envolver, con dos líneas cerradas, los polígonos duales de los nodos a identificar. En e) se puede ver una porción de malla con valencia irregular y en f) y g) se puede ver el resultado según la elección de los nodos a identificar.

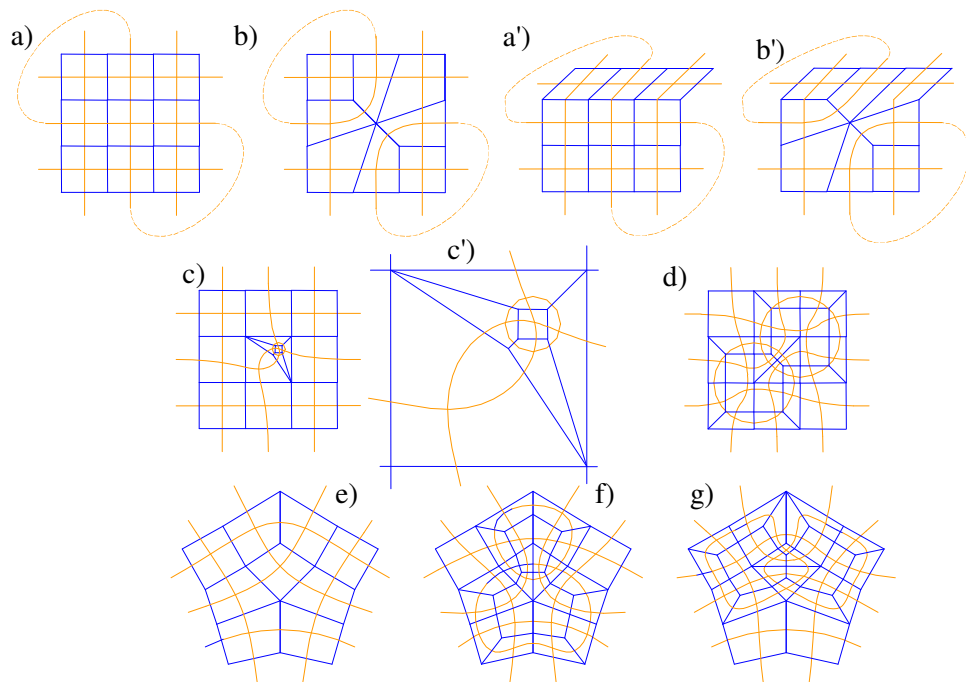


Figura 84: Efecto de la eliminación y métodos de preservación de las aristas.

Con éstas transformaciones de la superficie se pudo revertir la relación de éxitos / fracasos, y se obtuvieron varias mallas con la topología adecuada y factibles de ser arregladas por suavizado.

La Figura 85 muestra el resultado de la eliminación de autointersecciones en dos piezas mecánicas.

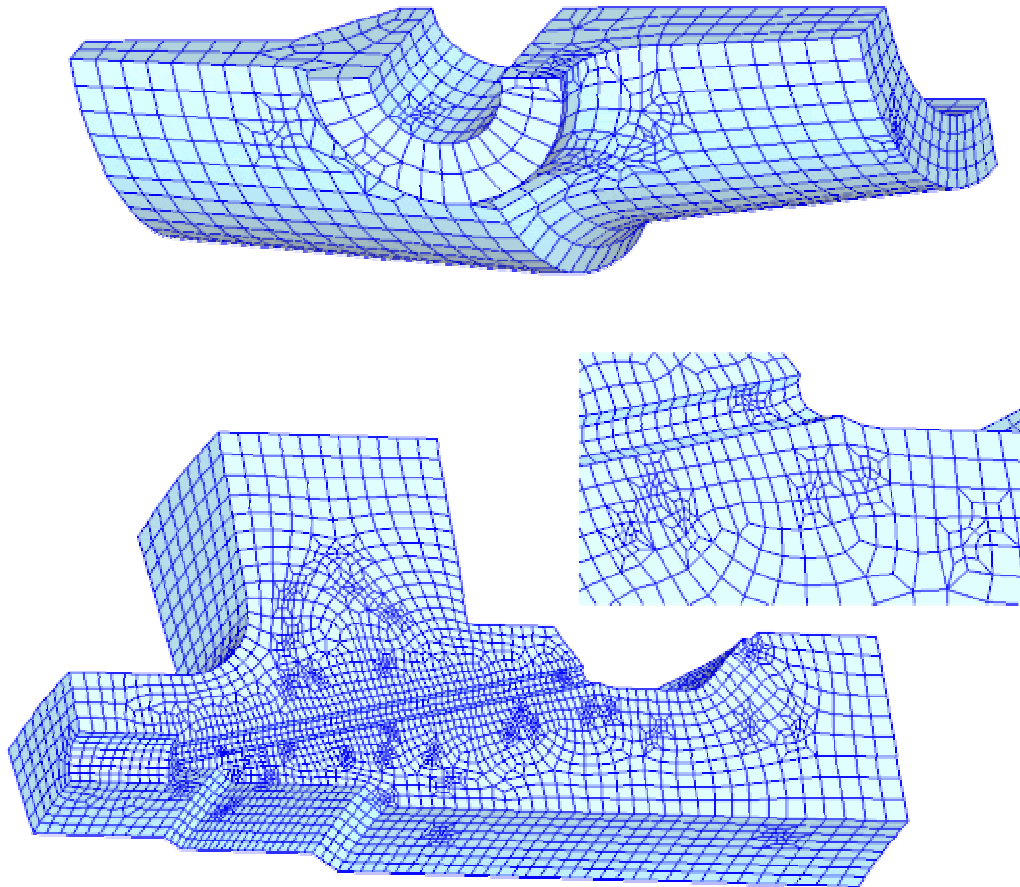


Figura 85: Resultado de la eliminación de autocruces

Una posible mejora del método consiste en elegir autointersecciones para eliminar que no estén muy próximas unas a otras, para evitar excesivas malformaciones de la frontera. También podrían obviarse los círculos duales impuestos, cuando las aristas comprometidas no sean geoméricamente importantes, eso se puede hacer teniendo en cuenta la magnitud de cada ángulo diedro.

Como se evidencia en las imágenes, el resultado empobrece sensiblemente la calidad de la frontera; aún si se reduce la cantidad de círculos impuestos. La adopción de este mecanismo fue un éxito tras dos renuncias importantes: la calidad y el respeto de la frontera. Como se aclaró al principio esto fue realizado con la única intención de seguir adelante con otros problemas de la generación y el suavizado, a la espera de una solución de los problemas topológicos o de un método alternativo nuevo; ninguna de esas expectativas se ha cumplido, ni por nuestra parte, ni se ha publicado alguna ajena todavía.

11 Suavizado de mallas de hexaedros

Contando ya con la estructura combinatoria de la malla, falta asignar a los nodos un conjunto de puntos en el espacio de modo que la malla sea aceptable para el FEM. El proceso se dividió en tres pasos, de los cuales sólo los dos primeros, los estrictamente necesarios, están implementados. Primero se asigna una posición cualquiera en el espacio, obteniendo una malla retorcida y con elementos invertidos, pero bien conectada. Luego se aplica el proceso de suavizado que modifica la posición de los nodos para encontrar la “mejor” ubicación. Al final deberían realizarse operaciones de manipulación dual para cumplir con la densidad o tamaño deseado para los elementos en cada porción del dominio, pero esta operación no se ha implementado.

A su vez, el suavizado intermedio consta de dos pasos con particularidades distintas. En el primero, y más complicado, debe destrabarse la malla retorcida para obtener una mínima calidad, solo se exige que los diedros estén comprendidos entre 0° y 180° en las aristas de los elementos. El segundo paso es un suavizado global tratando de maximizar la calidad.

11.1 Preposicionamiento

El preposicionamiento podría, en principio, asignar a todos los nodos la misma ubicación espacial, pero se puede aprovechar de algún modo la información brindada por las normales de la frontera y por las líneas del dual para facilitar el trabajo posterior.

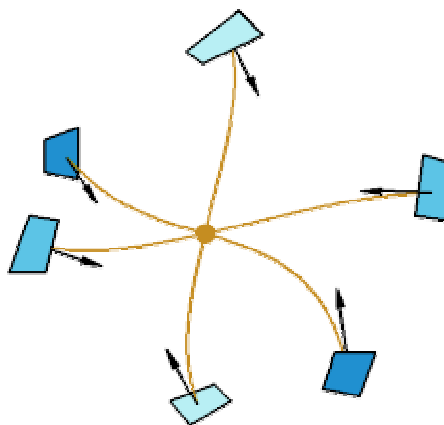


Figura 86: Esquema del preposicionamiento.

A cada nodo dual se le asigna una posición que proviene de un promedio de las posiciones que le asignarían las normales de las caras de frontera, ponderado según las distancias contadas como cantidad de segmentos duales que separan la cara del nodo. Dado que hay líneas totalmente interiores el promedio se realiza primero en cada línea abierta.

Una línea dual que alcanza la frontera tiene l segmentos, contando un nodo virtual en cada extremo, y se quiere asignar una posición \mathbf{x} al i -ésimo nodo, siendo 0 y l los índices de los virtuales. Al centro \mathbf{g}_0 de la cara inicial, dual del primer segmento, se asigna una normal interior \mathbf{n}_0 cuyo módulo (h_0) es la raíz cuadrada del área, del mismo modo \mathbf{g}_l y \mathbf{n}_l son el centro y normal en la cara de salida.

El primer y el último nodo dual interior (el 1 y el $l - 1$, correspondientes al offset de la frontera), se ubican a distancia $h/2$ de cada cara en la dirección que indica la normal interior.

Para el resto se calcula:

$$\mathbf{x} = \frac{[\mathbf{g}_0 + \mathbf{n}_0 (i - 1/2)] (l - i - 1/2) + [\mathbf{g}_l + \mathbf{n}_l (l - i - 1/2)] (i - 1/2)}{(l - 1)}, \quad (42)$$

y ese valor se promedia entre las líneas que alcanzan la frontera.

Para las líneas interiores se corrige luego la posición, promediando los valores almacenados anteriores con el punto medio del nodo anterior y el posterior en la línea cerrada. Un nodo puede tener tres líneas interiores, pero la superficie debe estar cruzada por otras y finalmente alguna tiene nodos con líneas que alcanzan la frontera, de modo que todos los nodos llegan finalmente a adquirir una posición espacial.

Los nodos de la malla se colocan en los centroides de los poliedros duales ya ubicados. El resultado es una malla retorcida que debe someterse al proceso de suavizado.

11.2 Suavizado

Se denomina “suavizado” al procedimiento que mejora la calidad de una malla dada. En primer lugar debe definirse que se entiende por calidad, un concepto que no es claro ni estándar, pero siempre es una función de la posición y la conectividad de los nodos que debe optimizarse.

Como ya se trató en el capítulo 6, en el FEM, la calidad es una medida de la adecuación de la malla al método y a los requerimientos del usuario para un problema en particular. Se puede dividir en dos partes: tamaño y forma de los elementos.

Para un dado problema, en el FEM, se requiere que el tamaño de los elementos sea pequeño en aquellos lugares en donde el error admisible sea también pequeño; pero no se debe llenar toda la malla con pequeños elementos, pues el número excedería los límites de la capacidad de cálculo disponible. Para ajustarse a los requisitos se utilizan las mallas no

estructuradas y se define una función $h(\mathbf{x})$ que establece el tamaño deseado de los elementos en cada punto del dominio. El número que mida este aspecto de la calidad es una simple relación entre el tamaño obtenido y el requerido; el tamaño obtenido puede medirse de muchas maneras, pero normalmente es una medida imprecisa que incluye alguna forma de promediación, la magnitud de los desvíos individuales es absorbida por el valor de la calidad de forma.

La calidad de forma es independiente del tamaño y la posición del elemento en el espacio, pero sí depende de la posición relativa de los nodos de cada elemento. La calidad de forma, para hexaedros, se suele definir de tal modo que el elemento perfecto sea un cubo; el problema es la dificultad de medir con un solo número todas las desviaciones: Si la calidad es 1 entonces es un cubo, pero ¿qué forma tiene un elemento cuya calidad es 0.5 o 10^{-2} ? El problema está en los límites admisibles de la calidad y no es la forma del elemento en sí, sino como una medida indirecta del potencial perjuicio en la solución numérica del problema.

Para calcular las funciones de forma y sus derivadas en los puntos de integración, en el interior del elemento, se requiere que el mapeo entre el elemento y el cubo canónico o master no provoque errores numéricos. Hay una miríada de medidas más o menos razonables de la forma^[64], algunas tienen que ver con invariantes del mapeo entre el elemento y el cubo canónico. También hay otras medidas específicas, como la relación de aspecto, que mide cuan estirado resulta el elemento en una dirección frente a otra, pero la forma de medirla no es estándar; otra es la no planaridad de las caras, más fácil de medir, pero tampoco provee mucha información.

Una posibilidad es utilizar la medida que se definió en el capítulo 6 para poliedros en general, pero el objetivo aquí es más dinámico que en aquel caso; en éste caso, la calidad debe calcularse muchas veces pues es la función objetivo de un largo y costoso proceso de optimización.

Para “enderezar” los hexaedros se utilizará aquí una medida o métrica cuyo principal énfasis es la ortogonalidad en cada triedro. Puesto que se moverán los nodos, en lugar de asignar una calidad a cada elemento asignaremos una a cada nodo, la calidad de un nodo será la medida de la ortogonalidad del peor de sus triedros adyacentes, la calidad de un elemento o de la malla será la calidad del peor de sus nodos. Cuando todos los triedros son aceptablemente ortogonales el elemento resulta aceptable y basta que un triedro esté

aplastado o allanado para que la calidad del elemento se vea comprometida y con el toda la malla.

Un solo numero no puede proveer mucha información, si bien se utiliza como medida al peor, no por ello es aceptable que el resto también tenga la misma mala calidad. El proceso que se implemento, trata de mejorar la calidad, nodo a nodo, pero sin empeorar a los vecinos. El énfasis se pone en los peores, pero es necesario que el contexto esté más o menos acomodado para poder arreglar los peores.

Como ya se explicó, el suavizado consta de dos etapas, en la primera se destraban los elementos retorcidos y se requiere solamente que los triedros de cada nodo definan un volumen positivo. Pero, por lo antedicho, también deben mejorarse al mismo tiempo todos los elementos. En la primera etapa no se tiene en cuenta el tamaño de los elementos, todo el esfuerzo se concentra en la forma.

La técnica de suavizado implementada reposiciona los nodos existentes sin cambiar sus conectividades, no crea ni elimina nodos ni hexaedros.

11.2.1 Métrica de la ortogonalidad

Los nodos en cada hexaedro están numerados en concordancia con la orientación de la frontera, de modo que puede reconocerse el signo del volumen de un triedro, aún cuando el elemento esté totalmente retorcido.

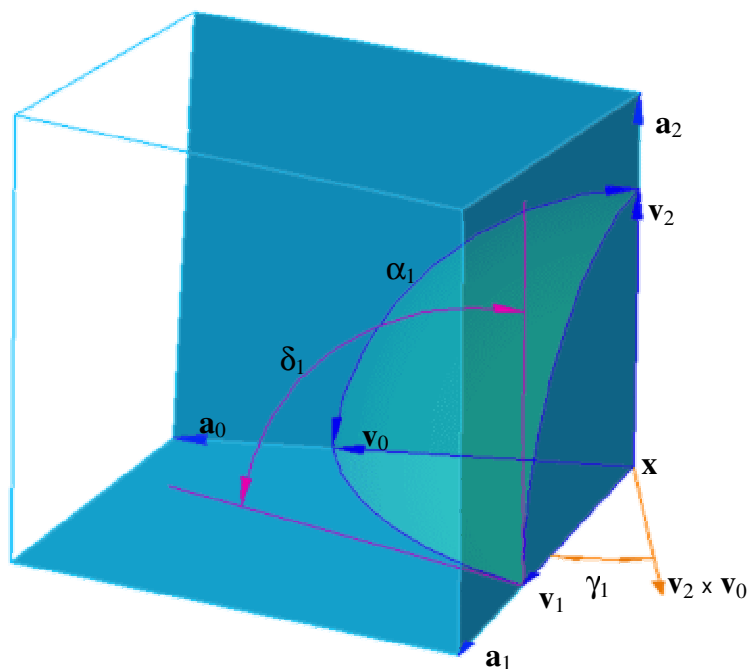


Figura 87: Nomenclatura de ángulos y vectores en un triedro.

En la Figura 87, se muestra un triedro adyacente al nodo en posición \mathbf{x} , que se pretende mover. Los vectores y ángulos del triedro están sub-indicados de tal forma que las aristas y sus caras complementarias tengan los mismos índices. Están indicadas las aristas adyacentes \mathbf{a} , sus versores \mathbf{v} , los ángulos de las caras α , los diedros δ y los vectores normales a las caras, formando ángulos γ con las aristas complementarias.

Para cada nodo de cada hexaedro se calculan los versores de las aristas y ellos definen el volumen que debe hacerse positivo. El triple producto de los versores \mathbf{v} se ha llamado Jacobiano normalizado en referencia al mapeo del tetraedro de aristas en el tetraedro canónico. El Jacobiano normalizado mide la ortogonalidad de las caras y aristas, el valor es uno cuando los ángulos son de 90° , cero cuando las tres aristas son coplanares y es negativo si el elemento está invertido.

El Jacobiano J y el Jacobiano normalizado j , se definen según los productos triples:

$$J = (\mathbf{a}_0, \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2) \quad (43)$$

$$j = (\mathbf{v}_0, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) \quad (44)$$

Donde los \mathbf{v}_i son vectores unitarios en dirección de las aristas \mathbf{a}_i :

$$\mathbf{v}_i = \frac{\mathbf{a}_i}{\|\mathbf{a}_i\|} \quad (45)$$

El valor del Jacobiano depende del tamaño del elemento; el normalizado, en cambio, sólo mide la ortogonalidad.

Para “ver” los ángulos entre aristas, con su signo, hay que hacerlo desde un punto de vista perpendicular al plano de las aristas, desde el lado al que apunta arista complementaria. Un vector \mathbf{p}_i con esas condiciones se obtiene según¹:

$$\mathbf{p}_i = [(\mathbf{v}_{i\oplus 1} \times \mathbf{v}_{i\oplus 2}) \cdot \mathbf{v}_i] (\mathbf{v}_{i\oplus 1} \times \mathbf{v}_{i\oplus 2}) = j (\mathbf{v}_{i\oplus 1} \times \mathbf{v}_{i\oplus 2}) \quad (46)$$

El seno del ángulo, pero con signo que indique si el vértice está invertido, resulta entonces del producto vectorial de los versores de las aristas de la cara multiplicado escalarmente por un versor en la dirección de \mathbf{p}_i :

$$\text{sen}(\alpha_i) = (\mathbf{v}_{i\oplus 1} \times \mathbf{v}_{i\oplus 2}) \cdot \left[\frac{j}{\|j\|} \frac{\mathbf{v}_{i\oplus 1} \times \mathbf{v}_{i\oplus 2}}{\|\mathbf{v}_{i\oplus 1} \times \mathbf{v}_{i\oplus 2}\|} \right] = \|\mathbf{v}_{i\oplus 1} \times \mathbf{v}_{i\oplus 2}\| \frac{j}{\|j\|} \quad (47)$$

¹ El símbolo \oplus indica aquí suma cíclica en módulo tres, $(a \oplus b)$ es el resto de la división entera $(a + b)/3$.

El valor absoluto del ángulo es el módulo del producto vectorial y el signo está determinado por el signo del Jacobiano. Pero además, el valor absoluto del Jacobiano normalizado provee una cota inferior al del seno de los ángulos entre aristas.

$$\| \sin(\alpha_i) \| = \| \mathbf{v}_{i\oplus 1} \times \mathbf{v}_{i\oplus 2} \| \geq \| \mathbf{v}_{i\oplus 1} \times \mathbf{v}_{i\oplus 2} \| \| \cos(\gamma_i) \| = \| (\mathbf{v}_{i\oplus 1} \times \mathbf{v}_{i\oplus 2}) \cdot \mathbf{v}_i \| \quad (48)$$

$$\Rightarrow \| \sin(\alpha_i) \| \geq \| j \| \quad (49)$$

Los ángulos diedros son los ángulos entre las normales a las caras y, dado que ambos vectores normales son perpendiculares a la arista común, ésta ofrece un buen “punto de vista” para el producto escalar:

$$\text{sen}(\delta_i) = \frac{\mathbf{v}_i \times \mathbf{v}_{i\oplus 1}}{\| \mathbf{v}_i \times \mathbf{v}_{i\oplus 1} \|} \times \frac{\mathbf{v}_{i\oplus 2} \times \mathbf{v}_i}{\| \mathbf{v}_{i\oplus 2} \times \mathbf{v}_i \|} \cdot \mathbf{v}_i \quad (50)$$

Por una simple manipulación algebraica la ecuación anterior se convierte en:

$$\text{sen}(\delta_i) = \frac{(\mathbf{v}_{i\oplus 1} \times \mathbf{v}_{i\oplus 2}) \cdot \mathbf{v}_i}{\| \mathbf{v}_i \times \mathbf{v}_{i\oplus 1} \| \| \mathbf{v}_{i\oplus 2} \times \mathbf{v}_i \|} = \frac{j}{\| \sin(\alpha_{i\oplus 2}) \| \| \sin(\alpha_{i\oplus 1}) \|} \quad (51)$$

En valor absoluto, entonces, $\| j \|$ también es una cota inferior para el ángulo entre caras:

$$\| \text{sen}(\delta_i) \| \geq \| j \| \quad (52)$$

En síntesis, el Jacobiano normalizado mide y acota la ortogonalidad del triedro; los ángulos diedros y los ángulos entre aristas estarán más cerca de 90° que el $\arcsen(\| j \|)$.

11.2.2 Métrica combinada

Un problema del Jacobiano normalizado, para utilizarlo en un programa de optimización, que mejore nodo a nodo la calidad de la malla, es que su gradiente no siempre mueve al nodo en la dirección adecuada. El valor puede mejorarse pero alejándose del objetivo y la optimización no converge. En todo proceso de optimización, se pretende una función cuyo gradiente apunte siempre hacia el objetivo y con una pendiente adecuada para que el proceso sea rápido. Resulta bastante complicado analizar la situación en tres dimensiones, pero por suerte en dos dimensiones ya pueden verse los problemas y su solución.

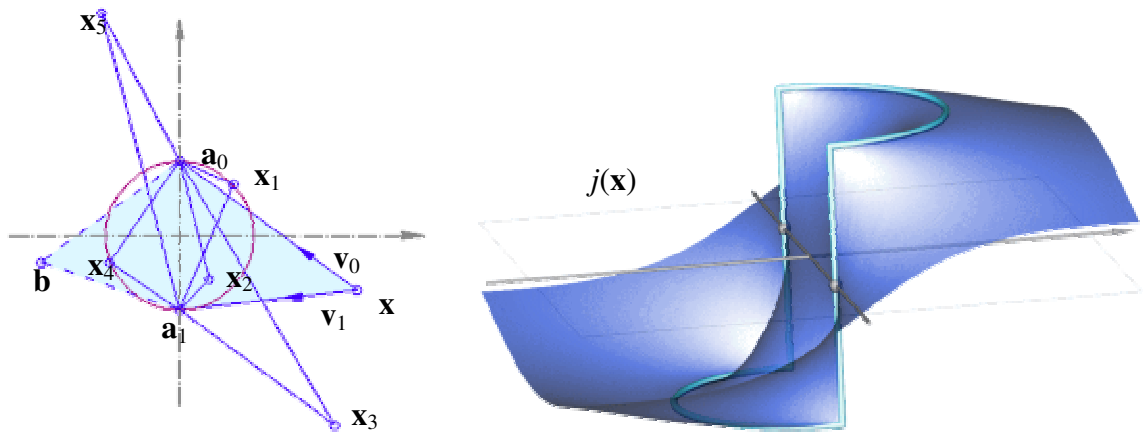


Figura 88: Gráfico de j bidimensional para un vértice móvil de dos aristas unidas a nodos fijos.

A la izquierda de la figura se muestra un cuadrilátero formado por los nodos x , a_0 , b y a_1 ; el punto x se considera variable y solamente interesa medir la ortogonalidad del ángulo formado por los versores v_0 y v_1 . En 2D, j es la componente del producto vectorial entre v_0 y v_1 que sale del plano. El nodo b no importa en lo absoluto, su calidad es independiente de la posición del nodo x móvil y viceversa, solo se indicó para mostrar el cuadrilátero. Los nodos a_0 y a_1 se consideran fijos. El nodo x es libre de moverse en el plano y se ha dibujado en varias posiciones alternativas, indicadas con x_1 hasta x_5 ; algunas, como x_5 , dan lugar a un cuadrilátero invertido, con calidad negativa en esa posición.

El Jacobiano se anula cuando el nodo móvil resulta colineal con los nodos fijos adyacentes, es positivo a la derecha y negativo a la izquierda de la línea de dichos nodos. Cuando se ubica en cualquier punto de la circunferencia indicada, que tiene por diagonales a los nodos adyacentes, el ángulo es de 90° y el Jacobiano normalizado tiene valor absoluto uno; por fuera forma ángulos agudos y dentro del círculo forma ángulos obtusos, pero en ambos casos con módulo menor que uno. A la derecha de la figura se muestra la gráfica de j en función de la posición del nodo móvil.

Para evitar la indefinición que se presenta cuando el nodo coincide con alguno de los adyacentes, simplemente se impide esa situación, los nodos no pueden acercarse a menos de una distancia ínfima prefijada.

El Jacobiano normalizado mide bien la ortogonalidad, pero no sirve para revertir un elemento invertido. El problema puede verse en la gráfica de j : Si el punto está en el semiplano izquierdo y fuera del círculo, el gradiente empuja al punto cada vez más a la izquierda, alejándolo hasta el infinito; el gradiente hace que j crezca, el ángulo se hace cada vez menos negativo, pero es para el lado equivocado, nunca llegará a anularse y

hacerse positivo. Lo correcto sería que el nodo se mueva hacia la línea de los fijos y la atravesase hacia la derecha, pero para ello el nodo debería disminuir j aún más. Del lado positivo ese problema no existe.

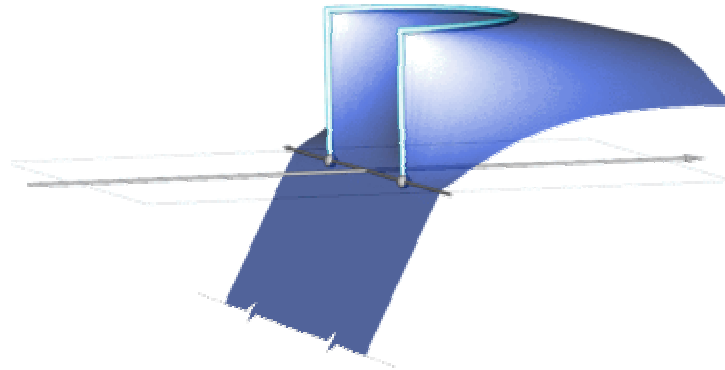


Figura 89: Gráfico combinando el Jacobiano negativo y el normalizado positivo.

Para corregir esa situación, cuando el Jacobiano es negativo, simplemente no se normaliza, la gráfica del Jacobiano bidimensional (sin normalizar) es un plano, puede verse como el área de un triángulo de base fija (el segmento formado por los nodos adyacentes fijos) y que depende sólo de la altura. La gráfica resultante se ilustra en la Figura 89, donde puede verse que el gradiente apunta siempre en la dirección correcta. Para destrabar la malla esta métrica es adecuada y simple, garantiza que todos los triedros van a tender a posicionarse de modo que el Jacobiano normalizado sea positivo.

Del lado positivo, el Jacobiano normalizado tiene otro problema y que también se ve en la gráfica bidimensional. El ángulo resulta perfecto con sólo ser de 90° , independientemente del punto de la circunferencia en que se encuentra el vértice móvil, puede ser muy cerca de alguno de los nodos adyacentes. Algunos elementos quedarán con relaciones de aspecto monstruosas, medidas como la relación entre la menor y la mayor arista del triedro.

Como ya se mencionó, existe una miríada de métricas propuestas, algunas de las cuales pueden entenderse como normas o invariantes de la matriz de transformación entre el triedro y uno canónico. Un problema de todas y de sus combinaciones es evitar que el gradiente apunte en la dirección incorrecta o que la gráfica se aplane demasiado, haciendo muy lenta la convergencia al punto óptimo.

En la Figura 90 se ilustra la solución que hemos adoptado y que consiste en multiplicar la parte positiva de la gráfica por una función que mide, entre cero y uno, el peor desvío del h requerido.

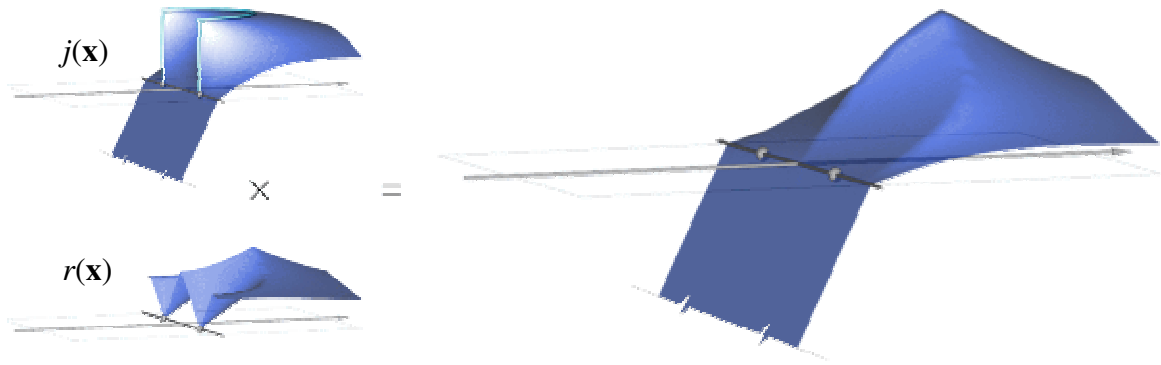


Figura 90: Métrica combinando ortogonalidad, tamaño y relación de aspecto.

$$r(\mathbf{x}) = \min\left(\frac{\min(\|\mathbf{a}_i\|)}{h(\mathbf{x})}, \frac{h(\mathbf{x})}{\max(\|\mathbf{a}_i\|)}\right) \quad (53)$$

La función se ilustra en la figura de abajo y a la derecha se puede ver el producto: la métrica combinada. La función r corrige también la relación de aspecto, aunque no esté explícitamente incorporada en las ecuaciones, porque tiende a emparejar las longitudes de aristas con el h local requerido.

Si no se contara con la función $h(\mathbf{x})$ se puede utilizar la distancia entre los nodos fijos como $\sqrt{2}h$, pero evitando que una medida excesivamente pequeña (en un paso temprano de la optimización) dificulte la convergencia. Para ello se deben medir *a priori* los límites de h de toda la malla, valores que siempre pueden obtenerse a partir del tamaño de los elementos de frontera. En síntesis: si se carece de la función explícita se utiliza:

$$h(\mathbf{x}) = \min\left(\max\left(\frac{\|\mathbf{a}_0 - \mathbf{a}_1\|}{\sqrt{2}}, h_{\min}\right), h_{\max}\right)$$

donde h_{\min} y h_{\max} se obtienen de las aristas de los nodos de frontera.

El Jacobiano normalizado acotaba los senos de los ángulos y tanto el ángulo como su seno son magnitudes que sabemos “ver” numéricamente, pero la combinación hace perder la idea inmediata de que es lo que indica un dado valor de la calidad, aquí aparece el problema que se comentó anteriormente de comprender que significa una calidad de 0.5 o 10^{-2} . La Figura 91 se incluye como ayuda para ver como son los ángulos y longitudes representados por la métrica combinada, la gráfica de la izquierda muestra algunas isolíneas de calidad en una de las mitades (simétricas) de la parte positiva y a la derecha se muestran algunas posiciones del nodo móvil para un valor fijo de 0.33 en la métrica combinada. Aun siendo bidimensional, esta figura da una idea bastante adecuada; pues en 3D, el valor será menor que el del peor ángulo de caras.

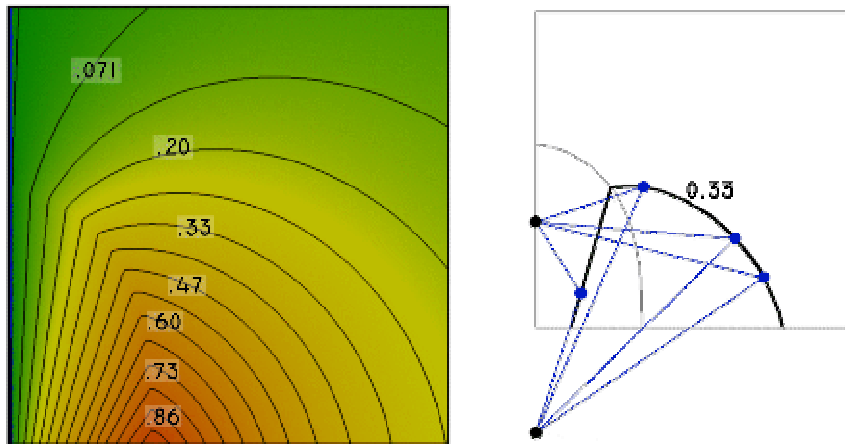


Figura 91: Isolineas y algunas posiciones del nodo móvil con la misma calidad.

Como puede verse en las gráficas, el gradiente de la función resultante lleva rápidamente al nodo a la posición preferencial, pero se ha presupuesto que tal posición existe y que los nodos fijos estaban bien ubicados; esa presunción es falsa.

En dos dimensiones, cada elemento adyacente al nodo móvil aporta un ángulo, la calidad del nodo es la correspondiente al peor ángulo. Es como si se viese desde abajo al conjunto de gráficas superpuestas de la métrica, la calidad es el envoltorio inferior (*lower envelope*) de todas ellas. Muy posiblemente, en los primeros pasos, cuando la malla está aún muy retorcida, el mejor valor sea negativo.

En tres dimensiones el problema es peor aún y más difícil de visualizar. Cada hexaedro adyacente al nodo aporta un triedro con tres nodos fijos, el plano de los tres nodos separa el semiespacio positivo del negativo. Cada par de nodos adyacentes define los polos diametrales de una esfera que cumple el rol del círculo en 3D. Cuando el nodo está en la esfera forma un ángulo recto con los dos nodos adyacentes porque se puede definir un círculo máximo de la esfera, por los polos y el nodo móvil. La intersección de las tres esferas (triedro ortogonal) sólo existe si el triángulo formado por los tres nodos adyacentes es acutángulo, es decir que no siempre existe.

11.3 Influencia de los nodos adyacentes

Aún cuando el contexto del nodo sea un conjunto de nodos de calidad positiva, el nodo móvil tiene una zona limitada para moverse con calidad positiva y sin perjudicar a los vecinos. Esa zona, como ya se explicó, puede no existir.

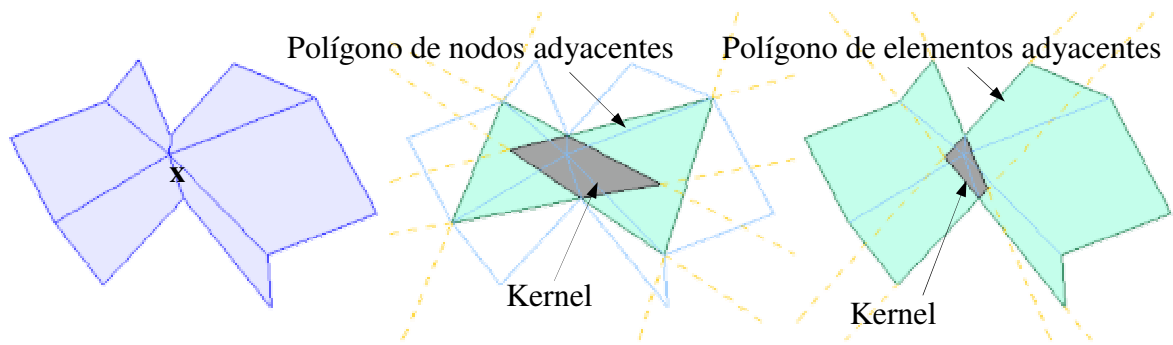


Figura 92: Kernel de los polígonos donde la calidad es positiva.

El kernel de un poliedro es la intersección de todos los ángulos sólidos internos, el conjunto de puntos que tienen visibilidad sobre toda la frontera del poliedro.

En la figura de la izquierda se muestra un conjunto de elementos adyacentes al nodo móvil. El nodo sólo tendrá calidad positiva si se ubica en el interior del kernel del poliedro formado por los nodos adyacentes. Si el nodo se mueve fuera de dicho kernel, formará un ángulo invertido con los nodos de la arista que ya no puede ver. Si el poliedro es cóncavo, el kernel puede ser vacío y en tal caso, no hay ubicación posible para el nodo en la cual la calidad sea positiva.

Además, cuando el nodo se mueve altera la calidad de los nodos adyacentes. Si el nodo se mueve dentro del kernel del poliedro de nodos, pero fuera del kernel del poliedro formado por los elementos adyacentes, todos sus triedros serán positivos pero alguno de los nodos adyacentes tendrá calidad negativa. Dado que los nodos diagonales aportan más ángulos para la intersección común, el poliedro de elementos adyacentes tiene un kernel más reducido, además es razonable que los límites de la región adecuada para todos los nodos adyacentes sean más estrechos que los de la región adecuada solo para el nodo móvil.

En tres dimensiones hay más ángulos sólidos aportando restricciones y es mucho más probable que el kernel resulte vacío.

11.4 Estrategia de optimización

Con la métrica utilizada se hace imposible utilizar una técnica de optimización global, que asigne a cada nodo la posición óptima (temporal) mediante la solución de un gran sistema de ecuaciones. Ni siquiera es posible hacerlo por aproximaciones sucesivas. La posición óptima de cada nodo simplemente no existe y ni siquiera el gradiente es absolutamente confiable pues endereza el peor triedro pero en el camino puede empeorar otro.

La técnica que se utiliza consiste en hacer un histograma de calidades y armar una lista con los peores nodos y sus vecinos. Los vecinos se incluyen porque puede suceder que un nodo no logre siquiera llegar a tener calidad positiva, a menos que el vecino, de buena calidad, se reacomode para permitirse.

La estrategia de optimización puede ser “egoísta” o “solidaria”. Cuando el nodo se ubica en la posición que mejora su propia calidad, el proceso converge mucho más lentamente que si se mueve el nodo de modo de mejorar la peor calidad del conjunto formado por él mismo y sus adyacentes. Pero suele suceder que la calidad del peor nodo del conjunto sea mala por un triedro que no involucra al nodo móvil, con lo que permanecerá invariable por más que el nodo móvil cambie de posición. La estrategia es entonces mejorar el nodo evitando que empeoren los triedros propios y vecinos. De los nodos adyacentes no se considera el peor triedro sino el peor triedro conectado al nodo móvil.

La primera etapa, es una serie de movimientos para destrabar la malla que puede requerir que algunos nodos con calidad positiva se inviertan para mejorar la calidad del conjunto local.

No se puede lograr ninguna mejora moviendo un nodo rodeado de elementos invertidos, por ejemplo, en una concavidad, una parte de la malla completa puede estar invertida y saliendo fuera del dominio, por mas que se mueva, la calidad de un nodo intermedio no podrá nunca hacerse positiva. Los nodos a mover deben estar conectados al menos a un nodo con calidad positiva. La capa paralela a la superficie (el *offset* que se realizó para resolver algunos problemas topológicos) se preubica de modo que sus nodos tengan calidad positiva, garantizando que siempre haya nodos móviles, pues se les impide algorítmicamente hacerse negativos.

Es muy probable que un nodo invertido llegue a una intersección entre las gráficas en el *lower envelope* de la calidad de dos o tres triedros. En tal caso, si mejora una, se empobrece otra y así quedaría inmóvil. Hay dos estrategias para evitarlo: movimientos finitos y *simulated annealing*.

El gradiente efectivo del *lower envelope* de la métrica combinada se calcula en forma numérica, rodeando al nodo con un octaedro canónico de tamaño ínfimo y menor que la distancia al nodo más cercano. Si ninguno de los vértices del octaedro mejora la calidad el nodo no se mueve. Si alguno mejora, se calcula la mejor dirección y se busca el mayor movimiento benéfico en esa dirección. El mayor movimiento se ubica por una búsqueda

binaria entre el ínfimo y la longitud media de aristas del nodo, ocho pasos dan un mínimo movimiento que es $1/256$ de la arista media.

Cuando el nodo falló (quedó inmóvil) sucesivamente en un número significativo de barridos (~ 50), se mueve sin analizar la calidad resultante. El movimiento forzado se produce en dirección aleatoria y a una distancia que es fracción aleatoria de la longitud media de las aristas del nodo. Esta acción (*simulated annealing*) empeora de a saltos la calidad, pero finalmente resulta efectiva.

Cuando todos los nodos adquieren calidad positiva se procede a ampliar cada vez mas la lista de nodos a mover hasta que contenga a todos los nodos interiores de la malla.

Esta técnica es excesivamente lenta pero logra enderezar la malla retorcida y acomodar la calidad de la malla en la gran mayoría de los casos. De hecho es tan confiable que algunos errores topológicos antes mencionados fueron identificados porque el suavizador no podía revertir los elementos; antes de implementar el suavizado no se había previsto su existencia. Aun con conexiones topológicamente correctas, hay unos pocos casos de concavidades que no pueden mejorarse por un simple reposicionamiento de los nodos, simplemente hay pocos elementos en las líneas duales entre elementos fijos de la frontera y cualquier posición de los nodos interiores resulta pobre o directamente invertida; para solucionar estos pocos casos deberían agregarse elementos, aunque la solución de emergencia consiste en refinar la frontera cerca de las concavidades.

11.5 Corrección del tamaño de elementos y refinamiento

La distribución espacial de los nodos está en correlación con el tamaño deseado de los elementos pero no necesariamente la cumple, una línea dual tiene una determinada cantidad de segmentos que se distribuyen proporcionalmente a lo indicado por la función $h(\mathbf{x})$, pero probablemente se requieran más o menos segmentos para cumplir en forma adecuada con el tamaño requerido.

Si bien estas técnicas no han sido implementadas, se puede ver que las únicas alternativas para modificar la densidad de elementos son las presentadas en 10.2.1 (coalescencia, intercambio de extremos y formación/destrucción de cruces) junto con el agregado o eliminación de superficies cerradas internas.

La malla generada por subdivisión y proyección del casquete es en cierto modo mínima, las superficies duales generadas son las mínimas necesarias y el juego de intersecciones

interiores también es reducido, algunas superficies cerradas internas se agregaron pero solo para “romper” los dígonos y restablecer la unicidad de conexión.

Al ser la malla “mínima”, no se puede “desrefinar” demasiado, es decir que no se puede reducir (sin gran riesgo y complicación) la cantidad de segmentos en cada línea, pero siempre se puede refinar, agregando superficies cerradas interiores, para aumentar la cantidad de segmentos y así disminuir el tamaño de elementos.

El problema es que una necesidad de refinamiento local se propaga por toda una superficie cerrada, hay que encontrar una secuencia adecuada de segmentos “largos” que merezcan ser atravesados por la superficie. En contraposición la superficie debe tener la menor curvatura posible, por la dualidad métrica de ángulos, eso implica que debe extenderse, perjudicando aún mas la localidad de la intervención.

La razón principal por la cual no implementamos (y nadie lo hizo) estas técnicas son las mismas por las cuales no se ha implementado la generación basada en la creación de superficies, tal y como se explicó en 10.2, no se dispone de los algoritmos adecuados para definir esas superficies.

CONCLUSIONES

En esta tesis se han presentado distintas técnicas duales para la poliedrización y la generación de mallas tridimensionales, también se han explicado los algoritmos implementados para el reconocimiento de la superficie libre de un conjunto de puntos, para rellenar un dominio con nodos, el cálculo de las funciones de forma en poliedros y el suavizado de mallas tridimensionales de hexaedros. Los avances y mejoras sobre los métodos preestablecidos son los siguientes:

- EDT: La Teselación Delaunay Extendida es una aproximación al dual del diagrama de Voronoï, permite poliedrizar un conjunto dado de puntos con elementos de excelente calidad. La triangulación Delaunay en tres dimensiones produce elementos de pobre calidad, que la poliedrización no simplicial junta, para dar lugar a una malla de poliedros esféricos que se adaptan muy bien al FEM y soportan las deformaciones mucho mejor que los tetraedros, pues admiten la coplanaridad de algunos nodos y aun cierto grado de concavidad.
- Coordenadas Laplacianas Elementales: Las coordenadas Laplacianas ya habían sido exitosamente utilizadas en métodos de partículas para interpolar en el entorno natural de los nodos. En esta tesis se presentaron los procedimientos que desarrollamos para utilizarlas en el FEM con elementos poliédricos: la limitación del soporte al elemento y el cálculo basado en el poliedro de centros. El resultado, las Coordenadas Laplacianas Elementales, son funciones de forma de sencilla implementación, tanto para ellas como para sus derivadas. Cumplen con todos los requisitos del FEM y si bien fueron específicamente desarrolladas para poliedros esféricos, resultan tan versátiles que bien pueden utilizarse en cualquier elemento finito, estándar o no.
- Frontera de un conjunto de nodos: La técnica de *Alpha-Shape* provee una superficie técnicamente adecuada para los métodos de puntos con superficie libre. Nosotros la adoptamos principalmente porque ya contábamos con la información requerida del radio de las esferas vacías. La mejora que realizamos sobre el procedimiento estándar consiste en una generalización que permite utilizarlas en distribuciones de puntos de densidad variable, esto nos permite mejorar las técnicas de cálculo con métodos de puntos, graduando la densidad de acuerdo al error admisible en cada región.
- Generación de mallas de poliedros: El generador de nodos desarrollado provee tanto la distribución inicial para métodos de puntos como el conjunto de nodos interiores para

generar una malla. El método basado en la inserción de centros de esferas grandes y seguido por la EDT provee elementos de muy buena calidad sin necesidad de ningún proceso de suavizado posterior. La técnica utilizada en la generación de nodos es un método conocido, nuestro aporte se concentra en los mecanismos de reconocimiento del interior del dominio.

- Generación de mallas de hexaedros: Nuestro método de subdivisión y proyección es una técnica original que ha contribuido a la comprensión de los problemas topológicos en la generación de hexaedros. No hemos sido capaces de sobrellevar el problema de las superficies autointerceptadas, y nadie ha podido aún. Las técnicas implementadas de eliminación automática de autocruces duales en la frontera de la malla, han dado como resultado mallas útiles, pero a costa de una sensible reducción en la calidad de los elementos de frontera.
- Suavizado de mallas de hexaedros: La métrica que desarrollamos, combinando ortogonalidad y relación de aspecto ha sido exitosa en la difícil tarea de enderezar una malla de hexaedros retorcida y con elementos invertidos. También hemos desarrollado nuestras propias rutinas para la optimización global de la malla combinando métodos analíticos y estocásticos.

El conjunto de rutinas geométricas implementadas, constituye de por sí una importante biblioteca de *software* que el grupo posee; puede utilizar y extender a voluntad. Dicha biblioteca contiene mucho más que los temas aquí tratados, pues hay procedimientos que, si bien no constituyen ninguna innovación, son muy útiles como herramientas para resolver distintos problemas de índole geométrica.

REFERENCIAS

- ¹ Lo, S. H. "Generating Quadrilateral Elements on Plane and Over Curved Surfaces" Computers & Structures, Vol 31, Num 3, pp.421-426, 1989
- ² Steven J. Owen, Matthew L. Staten, Scott A. Canann and Sunil Saigal. "Advancing Front Quad Meshing Using Local Triangle Transformations". 7th International Meshing Roundtable. (1998)
- ³ N. Calvo y S. Idelsohn. "Cosmética de mallas de cuadriláteros". ENIEF (Asociación Argentina de Mecánica Computacional), Mar del Plata, 1995.
- ⁴ T. D. Blacker and M. B. Stephenson. "Seams and wedges in plastering: A 3D hexahedral mesh generation algorithm". Engineering with Computers, 9:83-93, 21 1993.
- ⁵ Antonio Filippone. <http://www.aerodyn.org/CFD/Grid/grid.html>
- ⁶ J. Thompson, Z. Warsi, and C. Mastin. "Numerical Grid Generation". Online book: <http://www.erc.msstate.edu/publications/gridbook/>
- ⁷ Joe F. Thompson. "A Reflection on Grid generation in the 90s: Trends Needs and Influences", 5th International Conference on Numerical Grid Generation in Computational Field Simulations, Mississippi State University, April 1996. pp.1029-1110
- ⁸ Mingwu, Lai, Steven E. Benzley, Greg Sjaardema and Tim Tautges. "A Multiple Source and Target Sweeping Method for Generating All-Hexahedral Finite Element Meshes", 5th International Meshing Roundtable, (1998), pp.217-228.
- ⁹ K. Miyoshi and T. Blacker. "Hexahedral Mesh Generation Using Multi-Axis Cooper Algorithm", 10th International Meshing Roundtable, Sandia National Laboratories, New Orleans, LA., Sep. 2000, pp. 89-100.
- ¹⁰ Knupp, P. M., "Next-Generation Sweep Tool: A Method for Generating All-Hex Meshes on Two-and-One-Half Dimensional Geometries", p 505-514, 7th Int. Meshing Roundtable, 1998.
- ¹¹ Staten, M. L., Canann, S. A., Owen, S. J. "BMSweep: Locating Nodes During Sweeping", p 7-17, Proc. 7th Int. Meshing Roundtable, 1998.
- ¹² Steven J. Owen. <http://www.andrew.cmu.edu/user/sowen/survey/hexsurv.html>
- ¹³ Blacker, Ted. "Meeting the Challenge for Automated Conformal Hexahedral Meshing". 9th International Meshing Roundtable, Sandia National Laboratories, pp.11-19, October 2000
- ¹⁴ 11 Intl. Meshing Rountable: <http://www.imr.sandia.gov/11imr/bofnotes.htm#vol>
- ¹⁵ N. Calvo y S. Idelsohn. "All-hexahedral element meshing: Generation of the dual mesh by recurrent subdivision" Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 182 (3-4) (2000) pp. 371-378.
- ¹⁶ N. A. Calvo y S. R. Idelsohn. "All-hexahedral mesh smoothing with a node based measure of quality". International Journal for Numerical Methods in Engineering 2001; 50: 1957-1967.
- ¹⁷ Nestor A. Calvo and Sergio R. Idelsohn. "All-hexahedral element meshing: Automatic elimination of self-intersecting dual lines". International Journal for Numerical Methods in Engineering 2002; 55(12), 1439-1449.
- ¹⁸ Idelsohn, S. Calvo, N. and Oñate E.. "Polyhedrization of an arbitrary 3D point set". Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering vol 192/22-24 pp 2649 - 2667 (2003)
- ¹⁹ D'Arcy Thompson. "On Growth And Form".Cambridge University Press, 1917

- ²⁰ Zdravko Jeremic. Howard Hughes Young Scholar Research Program at Beloit College. http://biology.beloit.edu/students/zdravko/vor_gallery_bio.html
- ²¹ Zoológico de San Diego. <http://www.sandiegozoo.org/animalbytes/t-turtle.html>
- ²² Scott Snibbe. “Boundary Functions” 1998, <http://www.snibbe.com/scott/bf>
- ²³ Herbert Edelsbrunner. “Geometry and Topology for Mesh Generation”. Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics, Cambridge Univ. Press, 2001.
- ²⁴ M. Bern, L.P. Chew, D. Eppstein, and J. Ruppert. “Dihedral bounds for mesh generation in high dimensions”. 6th ACM-SIAM Symp. Discrete Algorithms, San Francisco, 1995, pp. 189-196. Imágenes en <http://www.ics.uci.edu/~eppstein/junkyard/tetraqual.html>
- ²⁵ H. Edelsbrunner and D. Guoy. “Sink Insertion for Mesh Improvement”. International Journal of Foundations of Computer Science, Vol. 13 No. 2, April 2002, 223—242. Imágenes en <http://www.cse.uiuc.edu/~guoy/sink/bad.html>
- ²⁶ Chew, L. P. “Guaranteed-quality Delaunay meshing in 3d (short version)”. In 13th ACM Sym. on Comp. Geometry (1997)
- ²⁷ Cheng, S. W., Dey, T. K., Edelsbrunner, H., Facello, M. A., and Teng, S. H. Silver exudation. In Proc. 15th ACM Symposium on Computational Geometry (1999)
- ²⁸ Edelsbrunner, H., Li, X. Y., Miller, G., Stathopoulos, A., Talmor, D., Teng, S. H., Üngör, A., and Walkington, N. “Smoothing and cleaning up slivers”. ACM Symposium on Theory of Computing (STOC00) (2000).
- ²⁹ Freitag, L., and Ollivier-Gooch, C. “Tetrahedral mesh improvement using swapping and smoothing. International Journal of Numerical Methods in Engineering 40, 3979-4002. (1997)
- ³⁰ Xiang-Yang Li., “Generating well-shaped d -dimensional Delaunay meshes” Theoretical Computer Science, v.296 n.1, p.145-165, 4 March 2003
- ³¹ Adrian Bowyer. “Computing Dirichlet Tessellations”. Computer Journal, 24(2): 162-166, 1981
- ³² David F. Watsonm. “Computing the n -dimensional Delaunay Tessellation with application to Voronoï Polytopes”. Computer Journal, 24(2): 167-172, 1981
- ³³ Jonathan R. Shewchuk. “Lecture Notes on Delaunay Mesh Generation”. Department of Electrical Engineering and Computer Science, University of California at Bekeley, 1999. <http://www.cs.berkeley.edu/~jrs/mesh/>
- ³⁴ Olivier Devillers, Sylvain Pion, Monique Teillaud. “Walking in a triangulation”. INRIA Rapport de recherche N°4120 Feb. 2001.
- ³⁵ H. Edelsbrunner and E.P. Mücke, “Simulation of Simplicity: A Technique to Cope with Degenerate Cases in Geometric Algorithms”, ACM Trans. Graphics, Vol. 9, No. 1, pp. 67-104, 1990.
- ³⁶ Nestor Calvo, Sergio R. Idelsohn and Eugenio Oñate. “The extended Delaunay tessellation” Engineering Computations: Int J for Computer-Aided Engineering, vol. 20, no. 5-6, pp. 583-600 (2003)
- ³⁷ H. Edelsbrunner and E.P. Mücke, “Three-dimensional alpha shapes”, ACM Trans. Graph. 13, 43-72 (1994).
- ³⁸ Idelsohn S, Oñate E, Calvo N and Del Pin F. “The meshless finite element method”. Int. J. Numer. Meth. Engng. 2003; 58(6), 893-912.
- ³⁹ P. Knupp. “Achieving finite element mesh quality via optimization of the Jacobian matrix norm and associated quantities”, Parts I and II. Technical Report SAND 99-0709J, Sandia National Laboratories, 1999

- ⁴⁰ V.V. Belikov, V.D. Ivanov, V.K. Kontorovich, S.A. Korytnik, A.Yu Semenov. "The non-Sibsonian interpolation: A new method of interpolation of the values of a function on an arbitrary set of points". *Comput. Maths Math. Phys.*, 37(1): 9-15 (1997).
- ⁴¹ V. V. Belikov, A. Yu. Semenov. "Non-Sibsonian interpolation on arbitrary system of points in Euclidean space and adaptive isolines generation". *Appl. Numer. Math.*, 32(4), 371-387 (2000).
- ⁴² H. Hiyoshi. "Study on interpolation based on Voronoi diagrams". Ph.D. Thesis, Dept. Mathematical Engineering and Information Physics, Univ. Tokyo, 2000.
- ⁴³ N. Sukumar. "Voronoi cell finite difference method for the diffusion operator on arbitrary unstructured grids". *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 2003; 57: 1-34.
- ⁴⁴ Sugihara, K. "Surface interpolation based on new local coordinates". *Computer-Aided Design* 1999; 31:51-58
- ⁴⁵ Sukumar N., Moran B., Semenov A.Yu., Belikov V.V. "Natural neighbour Galerkin methods", *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, Vol.50, No.1, 1-27. (2001)
- ⁴⁶ Rainald Löhner. "Surface Reconstruction from Clouds of Points". Publication CIMNE N° 87, feb. 1996.
- ⁴⁷ Nina Amenta, Marshall Bern, Manolis Kamvysselis. "A new Voronoi-based surface reconstruction algorithm". *Proc. 25th annual conference on Computer graphics and interactive techniques.* (1998)
- ⁴⁸ Adamson A., Alexa M.: Approximating and intersecting surfaces from points. *Proc. Eurographics Symp. on Geometry Processing* (2003), pp. 230--239.
- ⁴⁹ T. K. Dey, J. Giesen and J. Hudson. "A Delaunay based shape reconstruction from large data". *Proc. IEEE Sympos. in Parallel and Large Data Visualization and Graphics*, (2001)
- ⁵⁰ Jan Hrádek. "Methods of surface reconstruction from scattered data. State of the art and concept of doctoral thesis". Technical Report No. DCSE/TR-2003-02. March, 2003
- ⁵¹ J.R. Shewchuk, "Constrained Delaunay Tetrahedralizations and Provably Good Boundary Recovery." 11th International Meshing Roundtable (Ithaca, New York), pages 193-204, Sandia National Laboratories, September 2002.
- ⁵² <http://gid.cimne.upc.es>
- ⁵³ Enzo A. Dari. "Contribuciones a la triangulación automática de dominios tridimensionales" Tesis de Doctorado. Institututo Balseiro. 1994.
- ⁵⁴ J. R. Shewchuck. "Delaunay Refinement Mesh Generation". PhD Thesis, Carnegie Mellon University, May 1997
- ⁵⁵ Herbert Edelsbrunner. "An acyclicity theorem for cell complexes in d dimensions" *Combinatorica* 10, 251-260, (1990)
- ⁵⁶ T. J. Tautges, S. A. Mitchell, "The Wisker Weaving Algorithm for Constructing All-Hexahedral Finite Element Meshes", 3rd International Meshing Roundtable, Oct 24-25, 1994, Albuquerque, NM.
- ⁵⁷ Peter Murdoch, and Steven E. Benzley, "The Spatial Twist Continuum", 4th International Meshing Roundtable, Sandia National Laboratories, pp.243-251, (1995).
- ⁵⁸ N. Calvo y S. Idelsohn. "Generador automático de mallas de hexaedros" *Mecánica Computacional*, Vol. XVI, 1996.
- ⁵⁹ Matthias Müller-Hannemann "Hexahedral Mesh Generation by Successive Dual Cycle Elimination" *Engineering with Computers* 15, pp. 269-279, 1999
- ⁶⁰ Robert Schneiders: <http://www-users.informatik.rwth-aachen.de/~roberts/open.html>

⁶¹ Willam Thurston. 1993 sci.math., <http://www.ics.uci.edu/~eppstein/gina/Thurston-hexahedra.html>

⁶² Scott A. Mitchell, “A Characterization of the Quadrilateral Meshes of a Surface Which Admit a Compatible Hexahedral Mesh of the Enclosed Volume.” 13th Annual Symposium on Theoretical Aspects of Computer Science (STACS `96), Lecture Notes in Computer Science 1046, pages 465-476, 1996.

⁶³ “Connectivity-based, all-hexahedral mesh generation method and apparatus” US Patent 5,768,156, June 16, 1998.

⁶⁴ P. Knupp. “Achieving finite element mesh quality via optimization of the Jacobian matrix norm and associated quantities”, Parts I and II. Technical Report SAND 99-0709J, Sandia National Laboratories, 1999