Capítulo 1:

Introducción

Indice:

1.1- Generalidades de la Metodología TH

Una teoría *general* de Métodos de Elementos Finitos (**FEM**[1]) se debería formular utilizando funciones de base y de peso discontinuas definidas por tramos, de modo que éstas puedan ser *totalmente* discontinuas a través de las fronteras interiores que separan los elementos de la partición de un dominio [11].

Cuando se formula un problema de contorno en un espacio de ***funciones discontinuas definidas por tramos***, los problemas bien planteados consisten en ***problemas de contorno con saltos prescritos*** acompañados de ***condiciones de frontera*** y, además, de ***condiciones de saltos prescritos*** a través de las fronteras interiores de la partición de un dominio, que sean adecuadas.

Previamente, Herrera ha desarrollado una ***teoría algebraica para Métodos de Frontera***[2] [27] de una gran generalidad, fundamento de una metodología de descomposición de dominio que se ha llamado ***metodología-TH***, la cual se utiliza para resolver *ecuaciones* diferenciales parciales lineales en espacios lineales de funciones discontinuas definidas por tramos y que también se puede aplicar a *sistemas* de tales ecuaciones. Uno de sus principales resultados es una generalización de las fórmulas de Green, adecuadas para trabajar en dichos espacios, a las cuales se les ha llamado ***fórmulas de Green-Herrera*** [1 a 3]. Estas últimas permiten formular un problema de contorno con saltos prescritos de dos maneras: una ***formulación débil en***

[1] *Finite Element Methods*

[2] *Bounday methods*

términos de los datos del problema y otra ***formulación débil en términos de la información complementaria***.

De hecho, la ***metodología-TH*** constituye una forma sistemática de plantear la ***descomposición de dominio*** pero entendida en un sentido *amplio*. La connotación actual en la literatura es dividir un problema global en varios problemas locales para aplicar computación en paralelo. Sin embargo, la connotación en un ***sentido amplio*** se refiere a una forma sistemática de introducir una partición, de modo que se pueda definir funciones en cada uno de sus elementos independientemente, generando así un espacio lineal de funciones discontinuas definidas por tramos.

En particular, se desarrollan dos vertientes de la línea de investigación referente a los métodos de descomposición de dominio (**DDM**[1]): DDM orientados a la aplicación del cómputo en paralelo [25, 31 a 37, 58], y ***DDM orientados al desarrollo de nuevos métodos de discretización*** [7]. Es a esta última vertiente a la que pertenece esta tesis.

Se ha desarrollado dos versiones de la metodología-TH: los ***métodos directos*** (o métodos de *Steklov-Poincaré*) [8] y los ***métodos indirectos*** (o métodos de *Trefftz-Herrera*) [9]. Los primeros se plantean a partir de la formulación débil en términos de los datos del problema; mientras que los segundos, a partir de la formulación débil en términos de la información complementaria. Puesto que ambas formulaciones se relacionan por las fórmulas de Green-Herrera, existe una ***dualidad*** entre estos procedimientos, misma que será aprovechada para desarrollar esta tesis.

La diferencia principal entre unos y otros es que, en los métodos directos, se desarrollan soluciones locales de la ecuación diferencial (original) en cada elemento de la partición con el objetivo de construir funciones de base *especializadas* llamadas ***funciones óptimas de base***; mientras que en los métodos indirectos, se desarrollan soluciones de la ecuación diferencial adjunta para construir funciones de peso *especializadas* llamadas ***funciones óptimas de peso***.

[1] *Domain Decomposition Methods*

En la práctica, las funciones óptimas se aproximan utilizando *métodos numéricos* [45 a 49]. Aunque se puede utilizar cualquiera de ellos, se ha privilegiado el uso de los métodos de colocación ortogonal. Así, la metodología-TH desarrollada como un método de colocación ortogonal no convencional se le ha llamado ***colocación-TH***.

La ***colocación-TH*** constituye una nueva forma de aplicar colocación ortogonal, la cual ha mostrado tener claras ventajas sobre el método estándar de colocación ortogonal: *colocación ortogonal con polinomios cúbicos de clase C^1* (**OSC**[1]) [77 a 80]. Éstas ventajas son:

1) ***Matrices mejor estructuradas***. A diferencia de OSC, las matrices que resultan al aplicar colocación-TH, son simétricas y definidas positivas cuando el operador diferencial tiene estas propiedades.
2) ***Gran flexibilidad en la selección de los espacios polinomiales aproximantes.*** En colocación-TH, los grados de los polinomios que se utilizan en la frontera interior y en el interior de los elementos de la partición pueden ser diferentes.
3) ***El número de puntos de colocación utilizados se puede reducir.*** En colocación-TH, el grado de los polinomios que se utilizan en el interior de los elementos de la partición, se puede reducir. Incluso, se han propuesto procedimientos con un solo punto de colocación [14, 81 a 84].
4) ***Es fácilmente paralelizable.*** De hecho, cuando se trata con operadores diferenciales simétricos y definidos positivos, las matrices que se derivan con colocación-TH preservan estas propiedades, lo cual permite la aplicación inmediata del *método de gradiente conjugado* cuando se combina la colocación-TH con métodos de descomposición de dominio [10].
5) ***Gran generalidad.*** La colocación-TH se puede aplicar a prácticamente cualquier ecuación diferencial parcial lineal o sistemas de tales ecuaciones, que aparecen en diversas ciencias e ingeniería. Ya se ha aplicado a ecuaciones elípticas y parabólicas, incluyendo a la ecuación general elíptica de segundo orden y a la ecuación biarmónica [15, 22].

---

[1] *Orthogonal Spline Collocation*

Ahora bien, en esta tesis, las funciones óptimas se aproximan utilizando métodos de elementos finitos. Así, la metodología-TH desarrollada como un método de elementos finitos se le llamará ***Método de Elementos Finitos con Funciones Óptimas (FEM-OF)*** [16, 24]. De esta forma, se establecen las bases generales para una teoría de métodos de elementos finitos en espacios de funciones discontinuas definidas por tramos.

FEM-OF constituye una nueva forma de aplicar elementos finitos, la cual ha mostrado tener ventajas sobre el método estándar de elementos finitos, principalmente, en la ***reducción del número de grados de libertad***. Ciertamente preserva las mismas ventajas que la colocación-TH, pero además presenta otras ventajas; por ejemplo, los problemas de contorno con saltos prescritos tienen la misma dificultad que los problemas de contorno sin saltos cuando se resuelven con FEM-OF.

Además de caracterizar como métodos de elementos finitos con funciones óptimas los ya mencionados métodos directos y métodos indirectos, a los cuales se les llamará ***FEM-OF Steklov-Poincaré*** y ***FEM-OF Trefftz-Herrera*** respectivamente, se introduce una nueva formulación que combina ambos métodos.

En la teoría, cuando las funciones optimas son *exactas*, usar unas u otras es equivalente. Sin embargo, cuando se emplean métodos numéricos para calcular aproximaciones de las funciones óptimas, esta equivalencia ya no se cumple. Entonces, la utilización simultánea de funciones de base y de peso óptimas *aproximadas* es una opción que tiene características atractivas. En particular, un análisis del error muestra que esta práctica mejora la precisión de los algoritmos. En la literatura, el uso de espacios de funciones diferentes para las funciones de base y de peso se conoce como *métodos de Petrov-Galerkin*. Es por ello que en esta tesis se propone un procedimiento derivado del uso simultáneo de funciones de base y de peso óptimas que se llamará ***FEM-OF Petrov-Galerkin***.

Nótese que para aplicar *efectivamente* FEM-OF Petrov-Galerkin, se requiere que los espacios de funciones de base y de peso óptimas sean *diferentes*. Esto se logra solamente si el operador diferencial en cuestión no es auto-adjunto. Cuando se aplica a problemas que involucran ***operadores diferenciales no auto-adjuntos*** se puede reducir el grado de los polinomios aproximantes en el interior de los elementos de la partición, obteniendo el mismo orden de precisión que se lograría sin esta reducción. En estas circunstancias, se puede decir que FEM-OF Petrov-Galerkin exhibe propiedades de ***super-convergencia***.

Recapitulando, ***FEM-OF*** constituye una nueva forma de aplicar FEM, la cual ha mostrado tener claras ventajas sobre el método estándar de FEM. Además de las ya mencionadas en la *colocación TH*, éstas ventajas son:

1) Exhibe importante ***reducción en el número de grados de libertad***.
2) Los ***BVPJ con o sin saltos*** prescritos tienen la ***misma dificultad***. De hecho, se sigue trabajando con formulaciones débiles que aparecen en los planteamientos FEM estándares [38 a 41].
3) Presenta ***ventajas*** significativas ***de tipo numérico***. Por ejemplo: a) las cuadraturas locales coinciden con la cuadratura global, lo cual no ocurre en la colocación-TH; b) a pesar de resolver un problema elíptico de segundo orden, c) solamente se requiere calcular derivadas de primer orden; solamente se necesita realizar integrales en el interior de los subdominios de la partición; entre otros.
4) Se introduce una nueva formulación llamada ***FEM-OF Petrov-Galekin***, la cual utiliza tanto funciones óptimas de base como funciones óptimas de peso.
5) Muestra una ***super-convergencia*** con operadores diferenciales no auto-adjuntos, específicamente cuando se utiliza FEM-OF Petrov-Galerkin

1.2- Generalidades de FEM con Funciones Óptimas

Considérese un ***problema de contorno con saltos prescritos*** (BVPJ) formulado en un dominio Ω con una partición $\Pi = \{\Omega_1, ..., \Omega_E\}$.

El primer paso que se realiza para resolverlo con el ***Método de Elementos Finitos con Funciones Óptimas (FEM-OF)*** [16, 24], es ***localizar*** el problema. Por *localizar* el problema se entiende, al igual que en los métodos de Descomposición de Dominio, un procedimiento que permite construir la *solución global* definida en todo el dominio, resolviendo exclusivamente *problemas de contorno locales* formulados en cada uno de los subdominios de la partición. La estrategia general para alcanzar dicho propósito consiste en recabar *cierta* información de la solución pero únicamente en la frontera interior Σ de la partición, que sea la suficiente para definir problemas de contorno independientes y bien planteados en cada uno de los subdominios, cuyas soluciones individuales sean precisamente las restricciones correspondientes de la solución global. Para esto, se elige de antemano cierta información objetivo de la solución en Σ que posea esta propiedad, la cual se denota como ***información buscada***.

Existen dos grandes categorías de métodos para recabar dicha información buscada: los ***métodos directos*** y los ***métodos indirectos***. Los métodos directos utilizan soluciones locales del operador diferencial original para establecer las condiciones de compatibilidad que debe aportar la información buscada; mientras que los métodos indirectos utilizan para tal fin el operador diferencial adjunto. Entonces, a partir de estas condiciones de compatibilidad se deriva una matriz del sistema global asociada con el problema.

Los *métodos directos* se derivan de una forma muy general de las *condiciones de continuidad de Poincaré-Steklov* [32]; mientras que los *métodos indirectos* se derivan de una teoría desarrollada por Herrera, la cual se relaciona con la metodología Trefftz, llamada con frecuencia *teoría Trefftz-Herrera*. Existen diversas maneras de implementar cada uno de estos métodos. Una de ellas, se basa en el uso de una clase especial de funciones de base y de peso, llamadas genéricamente ***funciones óptimas***.

En los ***métodos de localización indirectos*** se desarrolla y se aplica un sistema de funciones de peso especializadas que tiene la propiedad de capturar la información buscada de la solución en la frontera interior exclusivamente. La idea de construir tales ***funciones óptimas de peso*** surge del hecho de que en el ***método de residuos pesados***, la información acerca de la solución exacta que contiene la solución aproximada, depende del sistema de funciones de peso que se aplica. Para utilizar esta dependencia en la construcción de las funciones óptimas de peso, se requiere de un procedimiento de análisis. Las herramientas básicas de este análisis son las ***fórmulas de Green-Herrera***, las cuales se pueden aplicar aún cuando las funciones de base y de peso son completamente discontinuas, cosa que no se puede hacer en los espacios de Sovolev estándares ni con los operadores definidos en ellos. Entonces, las fórmulas de Green-Herrera se aplican para diseñar las funciones óptimas de peso adecuadamente, las cuales tienen entre otras propiedades las de ser soluciones locales a la ecuación diferencial homogénea asociada con el ***operador diferencial adjunto***. Las funciones óptimas de peso se utilizan para derivar las condiciones de compatibilidad de las cuales se obtiene la información buscada.

Por otro lado, en los ***métodos de localización directos*** se introduce un espacio lineal cuyos elementos, llamados ***funciones óptimas de base***, tiene la siguiente propiedad: una función óptima de base satisface las ***condiciones de continuidad de Poincaré-Steklov*** si y solo si contienen la información buscada. Cuando se utiliza la aproximación directa, la obtención de la información buscada se transforma en la construcción de la función óptima de base que cumple con las condiciones de Poincaré-Steklov, de la cual se deriva la matriz del sistema global. Las funciones óptimas de base son soluciones locales de la ecuación diferencial homogénea asociada con el ***operador diferencial*** original del problema considerado.

Como se mencionó anteriormente, el término de ***funciones óptimas*** denota un conjunto de funciones que incluye tanto a las funciones óptimas de base como a las funciones óptimas de peso, de modo que el primero se compone de la suma directa de los dos últimos. Por otro lado, en vista de toda la explicación anterior, queda claro que existe una dualidad entre los métodos de localización directos e indirectos. En este trabajo, dicha relación se establece en términos de expresiones matemáticas precisas, específicamente por medio de una pareja de ***descomposiciones duales*** de los operadores valuados en funcionales, en términos de los cuales se formula el BVPJ. También, se desarrolla la teoría en ***espacios de funciones discontinuas definidas por tramos***. El uso sistemático de tales espacios en el tratamiento de ecuaciones diferenciales parciales requiere el planteamiento de ***problemas de contorno con saltos prescritos*** .

Además, la teoría básica se desarrolla como una teoría *exacta*. Por otro lado, la metodología FEM-OF es una ***metodología de discretización,*** que se puede aplicar a cualquier ecuación diferencial parcial lineal, o a sistemas de tales ecuaciones, y que como cualquier metodología de discretización es una teoría de *aproximación*. A partir de la teoría básica exacta se derivan tres aproximaciones: ***FEM-OF Steklov-Poincaré***, la cual utiliza funciones óptimas de base; ***FEM-OF Trefftz-Herrera***, la cual utiliza funciones óptimas de peso; y ***FEM-OF Petrov-Galerkin***, la cual utiliza funciones óptimas de base y funciones óptimas de peso simultáneamente. Estas tres aproximaciones FEM-OF se derivan de una teoría básica exacta introduciendo dos clases de aproximaciones cuando se implementan; éstas son:

1) El espacio de funciones óptimas, que generalmente es de dimensión infinita, se aproxima por medio de un ***espacio de dimensión finita***.
2) Las ecuaciones diferenciales locales que satisfacen las funciones óptimas, no se satisfacen exactamente.

Dependiendo de cuál método de ***aproximación numérica*** se utilice para resolver esas ecuaciones diferenciales locales, se puede obtener clases especiales de Métodos de Elementos Finitos, de Métodos de Colocación o de otros métodos. En sí mismo, FEM-OF se puede ver como una clase especial de *Método de Galerkin Discontinuo* [85 a 90], puesto que se formula en un espacio de funciones discontinuas. También, FEM-OF se pude ver como una clase especial de *Método FEM con Funciones Enriquecidas* [91 a 96], puesto que las funciones óptimas son funciones con un pre-procesamiento.

Nótese que por la manera en que se formulan los procedimientos FEM-OF, solamente se obtiene información de la solución en la frontera interior Σ. Sin embargo, una vez que esa información buscada se conoce, se puede resolver problemas de contorno locales para obtener la solución en cualquier parte del dominio Ω. Precisamente esto es lo que se hace en la aproximación FEM-OF Trefftz-Herrera. A este último paso se le conoce como ***interpolación óptima***. Sin embargo, cuando se utiliza la aproximación FEM-OF Steklov-Poincaré o FEM-OF Petrov-Galerkin, el procedimiento de interpolación óptima realmente no se necesita, puesto que se obtiene directamente la solución en todo el dominio Ω.