

AVANCES EN LA IMPLEMENTACIÓN DE LAS CONDICIONES DE CONTORNO NATURALES EN EL MÉTODO SIN MALLA DE PUNTOS FINITOS.

Perazzo F. y Marchant F.

*Departamento de Ingeniería Mecánica, Universidad Técnica Federico Santa María, Aula
UTFSM-CIMNE, Avenida España 1680, Valparaíso, Chile, franco.perazzo@usm.cl,
<http://www.mec.ut fsm.cl>*

Palabras Clave: Métodos sin Malla, Método de Puntos Finitos, Colocación, Condiciones de Contorno Naturales.

Resumen. El Método de Puntos Finitos (MPF) se enmarca dentro de los métodos libres de malla basados en una formulación fuerte del problema, los cuales presentan como principal ventaja el hecho de que no requieren subdividir un dominio en elementos más pequeños. El MPF usa partículas o puntos para discretizar un cuerpo los cuales pueden estar distribuidos sobre el dominio de manera libre. Una de las principales dificultades presentes en el uso de un método sin malla, basado en un esquema de colocación como el MPF, corresponde a la imposición de las condiciones naturales en el borde. Cuando no se utilizan técnicas apropiadas para implementar este tipo de condiciones, el método resultante presentará ciertas inestabilidades, conocidas como "Tensile Instability". El presente trabajo tiene por objetivo analizar las diferentes alternativas existentes para imponer la derivada en el contorno cuando se utiliza el MPF. Para esto se implementarán diversos test con solución analítica conocida, de modo que sea posible comparar la calidad de la aproximación que se obtiene cuando se utiliza una norma del error.

1. INTRODUCCIÓN

Diversos trabajos de investigación desarrollados durante la última década permiten comprender el importante avance en la aplicación de un nuevo tipo de técnicas numéricas que a diferencia de los métodos tradicionales, como el de elementos finitos (MEF) o volúmenes finitos (MVF), no requieren de una subdivisión o malla del dominio. Se ha denominado naturalmente a estas técnicas métodos sin malla o libres de malla (MFree). Estas comprenden un conjunto de métodos numéricos utilizados para resolver ecuaciones diferenciales parciales con condiciones de contorno, a partir de distribuciones de puntos regulares o irregulares. Mayores detalles acerca de estas técnicas y sus ventajas se pueden encontrar en [Liu \(2003\)](#); [Li y Liu \(2004\)](#); [Liu y Gu \(2005\)](#); [Chen et al. \(2006\)](#). Las principales características presentes en toda formulación mediante MFree son básicamente: el tipo de interpolación o aproximación utilizada para obtener la función incógnita, la forma de realizar el proceso de discretización para obtener el sistema de ecuaciones, y la implementación de las condiciones de contorno prescristas. Se debe tener presente al hablar de MFree que existen técnicas en las cuales la función incógnita se aproxima mediante interpolación (es decir se reproducen en forma exacta los valores nodales), a diferencia de otras en donde es posible utilizar simplemente una aproximación de los valores nodales. En este último caso la función aproximada pierde el carácter de ser un verdadero interpolante en los nodos. Además, dependiendo del procedimiento que se utilice para la discretización del sistema de ecuaciones, es posible distinguir dos familias de MFree: aquellos basados en una formulación débil del problema (WF) y los basados en una formulación fuerte o colocación (SF). De entre los MFree más representativos basados en una WF vale la pena mencionar a: Diffuse Element (DE) ([Nayroles et al., 1992](#)), Element Free Galerkin (EFG) ([Belytschko et al., 1994b](#)), Reproducing Kernel Particle Method (RKPM) ([Liu et al., 1995](#)), Point Interpolation Method (PIM) ([Liu y Gu, 2001](#)), Local Radial Point Interpolation Method (LR-PIM) ([Liu y Gu, 2001b](#)), HP Clouds Method ([Duarte y Oden, 1996](#)) y Partition of Unity Finite Element Method (PUFEM) ([Babuska y Melenk, 1996](#)). En la categoría de MFree en los cuales se utiliza un esquema de colocación es posible mencionar a: Generalized Finite Difference (GFD), Finite Points Method (FPM) ó Método de Puntos Finitos (MPF) [Oñate et al. \(1996\)](#); [Oñate y Idelsohn \(1998\)](#); [Oñate et al. \(2001\)](#); [Perazzo et al. \(2008\)](#), The HP-Meshless Cloud Method ([Liszka et al., 1996](#)) y The Meshfree Collocation Method ([Zhang et al., 2001](#)). El avance en la investigación de los MFree ha permitido distinguir a través del tiempo algunas oportunidades cuando se aplican estas en técnicas para resolver problemas del ámbito de la Mecánica Computacional ([Chen et al., 2006](#)). Por ejemplo, en el caso de los MFree basados en SF, hoy en día se reconocen las siguientes ventajas ([Liu y Gu, 2005](#)): son una técnica totalmente libre de malla, las ecuaciones discretas se obtienen directamente a partir de las ecuaciones en derivadas parciales que gobiernan la física del problema y su implementación computacional es rápida y sencilla. Sin embargo, de cara a obtener resultados satisfactorios, existen dos aspectos importantes que se deben tener presente al aplicar estas técnicas. El primero de ellos está relacionado con la calidad de la función de forma y el segundo con la imposición de las condiciones de contorno que contienen las derivadas de la función incógnita (condiciones de Neumann o Naturales). Por ejemplo, en el caso del MPF, se ha utilizado una técnica de estabilización basada en el procedimiento del Cálculo Finitesimal ([Perazzo et al., 2003](#)), para imponer las condiciones en derivadas. Si bien esta técnica ha demostrado ser eficiente en la mayoría de los casos [Perazzo et al. \(2008\)](#); [Pérez-Pozo et al. \(2009\)](#); [Angulo et al. \(2009\)](#), el uso de la misma supone la presencia de ciertos términos adicionales en las ecuaciones del contorno, los cuales, dependiendo de la discretización del problema pueden llegar a ser despreciables o muy pequeños.

Por consiguiente, en estos casos, no siempre se logra el efecto deseado de estabilización de la solución. En el presente trabajo se analizan nuevas formas para imponer las ecuaciones en contornos de Neumann en el MPF, en particular se comparan los resultados que se obtienen cuando se utilizan estas técnicas para diversos test con solución analítica conocida. Si bien estas técnicas presentan diferentes comportamientos, queda de manifiesto que cuando no se las utiliza, el método resultante presenta problemas de estabilidad con una pobre exactitud en la solución, sobre todo en discretizaciones irregulares de puntos.

2. APROXIMACIÓN SIN MALLA EN EL MÉTODO DE PUNTOS FINITOS.

Considérese un dominio local Ω_I de aproximación para una función $u(\mathbf{x})$ y un conjunto de puntos n_i con $i = 1, 2, \dots, n$ cuyas coordenadas $\mathbf{x}_i \in \Omega_I$. Estos dominios locales en el contexto de los MFree se conocen como nubes de aproximación de un nodo estrella n_I , donde el índice I indica el punto en donde se debe realizar la aproximación. Teniendo esto en consideración, es posible plantear una aproximación de la función incógnita $u(\mathbf{x})$ en el interior de Ω_I según

$$u(\mathbf{x}) \cong \hat{u}(\mathbf{x}) = \sum_{g=1}^m p_g(\mathbf{x})\alpha_g = \mathbf{p}^T(\mathbf{x})\alpha \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_I, \quad \forall \mathbf{x}_I \in \Omega, \quad (1)$$

$$\alpha^T = [\alpha_1 \quad \alpha_2 \quad \dots \quad \alpha_m] \quad (2)$$

El vector $\mathbf{p}(\mathbf{x})$ se conoce como "base de interpolación", y esta constituido la mayor parte de las veces por monomios que aseguren una reproducción completa del espacio estudiado. Si se considera como ejemplo la situación en un espacio bidimensional, con un polinomio cuadrático ($m = 6$), se tendrá

$$\mathbf{p}^T(\mathbf{x}) = [1 \quad x \quad y \quad x^2 \quad xy \quad y^2] \quad (3)$$

La función incógnita $u(\mathbf{x})$, entonces, puede ser evaluada en los n puntos correspondientes a una nube Ω_I , obteniendo

$$\mathbf{u}^h = \begin{pmatrix} u_1^h \\ u_2^h \\ \vdots \\ u_n^h \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} \hat{u}_1^h \\ \hat{u}_2^h \\ \vdots \\ \hat{u}_n^h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{p}_1^T \\ \mathbf{p}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{p}_n^T \end{pmatrix} \alpha = \mathbf{P}\alpha \quad (4)$$

donde $u_j^h = u(\mathbf{x}_j)$ corresponden a los valores que desconocidos, $\hat{u}_j^h = \hat{u}(\mathbf{x})_j$ los valores aproximados y finalmente el polinomio base $\mathbf{p}_j = \mathbf{p}(\mathbf{x})$.

En lo referente al número de puntos que constituyen una nube se debe señalar que en el MPF se cumple $n > m$, ya que en caso de una igualdad se tendría un procedimiento similar al del MEF para el cálculo de funciones de forma. Con esta consideración se observa que la matriz \mathbf{P} en (4) no es cuadrada, por lo que no será posible obtener directamente los valores de u_j^h . Este problema se resuelve al determinar los valores de \hat{u}^h , tal que minimicen la suma ponderada del error cuadrático cometido en la aproximación, método conocido como Weight Least Square

(WLS). Esto corresponde precisamente a plantear

$$\min\{J_I\} = \min \left\{ \sum_{j=1}^m w(\mathbf{x}_I - \mathbf{x}_j) (u_j^h - \hat{u}(\mathbf{x}_j))^2 \right\} \quad (5)$$

La función de ponderación w considerada en el presente trabajo ha sido la función de Gauss. Para mayores antecedentes referentes a esta función, como también otras alternativas planteadas en MFree, se puede consultar (Perazzo et al., 2003) y (Ortega, 2004).

Reemplazando la ecuación (1) en (5) y minimizando con respecto a los coeficientes α , se obtiene

$$\alpha = \mathbf{P}_I^{-1} \mathbf{u}^h, \quad (6)$$

donde

$$\mathbf{P}_I^{-1} = \mathbf{A}_I^{-1} \mathbf{B}_I \quad (7)$$

La matriz $\mathbf{A}(\mathbf{x}_I)$ se conoce como matriz de momentos, donde, se tiene respectivamente

$$\mathbf{A} = \mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P} \quad (8a)$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{P}^T \mathbf{W} \quad (8b)$$

Substituyendo el valor de α de la ecuación (6) en (1), se obtiene una aproximación de la siguiente forma

$$\hat{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T(\mathbf{x}) \mathbf{P}_I^{-1} \mathbf{u}^h \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_I \quad (9)$$

donde se designará a las funciones de forma según

$$\phi_I^i = \mathbf{p}^T(\mathbf{x}) \mathbf{P}_I^{-1} \quad i = 1, \dots, n \quad (10)$$

Se debe notar que de acuerdo con el carácter de mínimos cuadrados de la aproximación

$$u(\mathbf{x}_j) \approx \hat{u}(\mathbf{x}_j) \neq u_j^h \quad (11)$$

Esto significa que los valores locales de la función aproximada no coinciden con los valores nodales de la función incógnita. De esta forma se obtiene finalmente un método de aproximación según

$$u(\mathbf{x}) \approx \sum_{j=1}^N \phi_j(\mathbf{x}) u_j^h \quad (12)$$

Las aproximaciones del tipo WLS dependen tanto de la forma como de la manera en que se implementa la función de ponderación $w(\mathbf{x}_I - \mathbf{x}_j)$. Esta función de ponderación tiene por finalidad otorgar un carácter local a la aproximación, situación que se refleja en que esta solo

toma valores dentro de la nube de influencia de cada nodo estrella y se anula fuera de esta. Es así como se puede plantear

$$\mathbf{W}(\mathbf{x}_I - \mathbf{x}) = \begin{cases} w(\mathbf{x}_I - \mathbf{x}) = 1, & \mathbf{x} = \mathbf{x}_I \\ w(\mathbf{x}_I - \mathbf{x}) > 1, & \forall \mathbf{x} \in \Omega_I \\ w(\mathbf{x}_I - \mathbf{x}) = 0, & \forall \mathbf{x} \notin \Omega_I \end{cases} \quad (13)$$

En los casos en que la función de ponderación es móvil, el método resultante se conoce como Moving Least Squares (MLS), sin embargo, en el caso del MPF se utiliza una función de ponderación fija, procedimiento denominado como Fixed Least Squares (FLS). En el presente trabajo se ha utilizado como función de ponderación la función de Gauss, la cual se define como

$$w_i(\mathbf{x}_j) = \frac{e^{-\left(\frac{d_j}{\gamma}\right)} - e^{-\left(\frac{\beta}{\gamma}\right)}}{1 - e^{-\left(\frac{\beta}{\gamma}\right)}} \quad (14)$$

donde d_j es la distancia existente entre un nodo \mathbf{x}_j cualquiera de la nube Ω_i y el nodo estrella \mathbf{x}_i , $\beta = \kappa d_{mx}$ siendo d_{mx} la distancia entre el nodo estrella y el nodo más alejado del subdominio. El factor κ es una constante que debe ser ligeramente mayor a la unidad, con el propósito de asegurar que la función de ponderación no se anule en los puntos extremos del subdominio. Finalmente se define $\gamma = \beta/\omega$ con ω un parámetro de control de la ponderación asignada a los puntos que componen la nube. Su rango se recomienda entre 1.5 a 3.5. La gráfica de esta función se observa en la figura 1

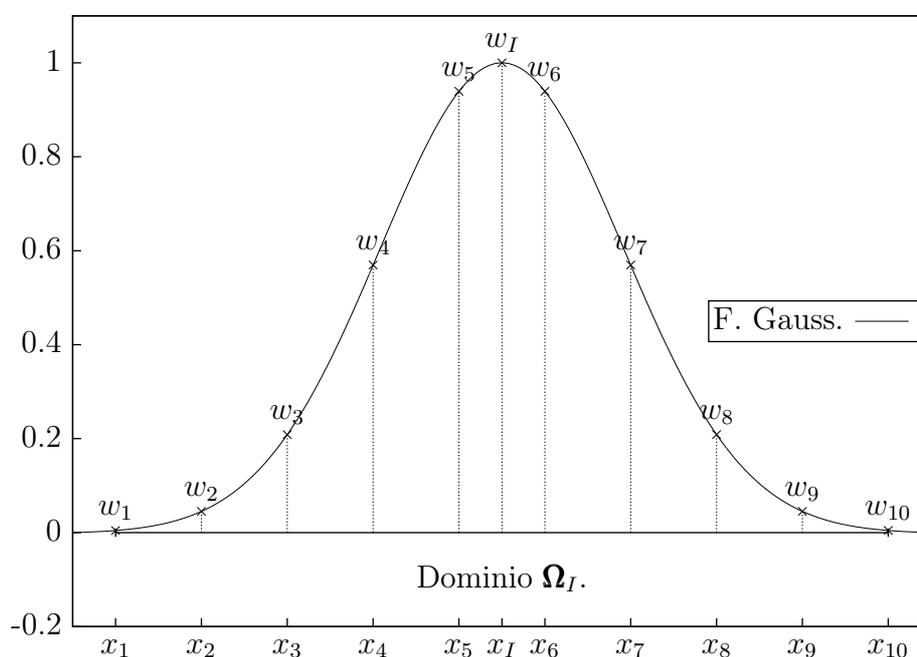


Figura 1: Función de Gauss en una Interpolación 1-D mediante Mínimos Cuadrados Ponderados.

3. TÉCNICAS PARA IMPONER CONDICIONES DERIVADAS DE BORDE.

Como se mencionó, en el presente trabajo se busca analizar el comportamiento de algunas estrategias propuestas a la fecha para imponer Condiciones Naturales de Borde (DBC) en el MPF (Liu y Gu, 2005). La principal motivación de esto, corresponde al hecho de que en trabajos

anteriores se ha demostrado que al imponer condiciones de tipo Dirichlet es posible encontrar soluciones de gran exactitud, situación que no se replica cuando se tienen condiciones de Neumann, ya que pequeños cambios en la configuración del problema, pueden conducir a grandes cambios en la solución (Oñate et al., 2001), (Perazzo et al., 2004), (Perazzo et al., 2008). En lo sucesivo, para el desarrollo de esta sección, se considerarán las ecuaciones unidimensionales (15) y (16) correspondientes a la ecuación del dominio y en el contorno donde se prescriben derivadas, respectivamente. El problema así definido es de segundo orden en un determinado dominio Ω , donde u corresponde al campo escalar desconocido, mientras que F_0 , F_1 , F_2 , G_0 y G_1 son coeficientes dependientes del dominio. Por otro lado tanto t_a como t_b corresponden a un término fuente que pueden ser también función del dominio estudiado.

$$F_2(x)u''(x) + F_1(x)u'(x) + F_0(x)u + t_a(x) = 0 \quad (15)$$

$$G_1(x)u'(x) + G_0(x)u(x) + t_b(x) = 0 \quad (16)$$

Se considerará un dominio lineal consistente de N puntos, por consiguiente habrá $N - 2$ puntos internos. De los puntos en el contorno se tomará el punto x_N como un nodo de borde con condición prescrita en derivadas. Considerando la aproximación mediante el MPF definida en el punto 2 (recordar ecuación (12)), es posible plantear la función escalar u , su primera y segunda derivada en un punto x_i según

$$u_i^h = \Phi^T \mathbf{u} \quad (17)$$

$$\frac{du_i^h}{dx} = \frac{d\Phi^T}{dx} \mathbf{u} \quad (18)$$

$$\frac{d^2u_i^h}{dx^2} = \frac{d^2\Phi^T}{dx^2} \mathbf{u} \quad (19)$$

donde Φ corresponde al vector que contiene los valores de las funciones de forma, y \mathbf{u} a un vector que agrupa los valores nodales calculados para aproximar la función desconocida.

La discretización de los nodos internos x_i , según un esquema de colocación, se lleva a cabo reemplazando las ecuaciones (17), (18) y (19) en la ecuación (15). De esta forma se obtiene:

$$F_2(x_i) \frac{d^2\Phi^T}{dx^2} \mathbf{u} + F_1(x_i) \frac{d\Phi^T}{dx} \mathbf{u} + F_0(x_i) \Phi^T \mathbf{u} = -t_a(x_i) \quad (20)$$

Utilizando notación vectorial es posible obtener de forma compacta la ecuación (20) como:

$$\mathbf{K}_i \mathbf{u} = f_i \quad (21)$$

Finalmente, cuando en el sistema anterior se agregan las condiciones de contorno, se obtiene un sistema lineal dado por:

$$\mathbf{K}_{NxN} \mathbf{u}_{Nx1} = f_{Nx1} \quad (22)$$

A continuación se presentarán cuatro alternativas para imponer las ecuaciones de contorno de Neumann en la solución de (22). En cuanto a la manera de imponer las ecuaciones de contorno de Dirichlet, esta no se abordará en el presente trabajo pudiendo ser consultada en (Liu y Gu, 2005).

3.1. Colocación Directa.

En el caso de la Colocación Directa (DC), las DBC serán discretizadas mediante el MPF haciendo uso de la derivada de la función de forma (18). Esto se traduce en que no existirá un tratamiento especial, sino que serán impuestas de la forma convencional tal como se presenta en la ecuación (23).

$$\left(G_1(x_i) \frac{d\Phi^T}{dx} \mathbf{u} + G_0(x_i) \Phi^T \right) \mathbf{u} = -t_b(x_i) \quad (23)$$

la cual puede ser escrita en notación matricial compacta como

$$\mathbf{K}_N = \left[G_1(x_N) \frac{\partial \phi_1}{\partial x} + G_0(x_N) \phi_1 \quad \dots \quad G_1(x_N) \frac{\partial \phi_n}{\partial x} + G_0(x_N) \phi_n \right] \quad (24)$$

obteniéndose la siguiente matriz de rigidez \mathbf{K}

$$\mathbf{K}_{NxN} = \begin{bmatrix} K_{11} & K_{12} & \dots & K_{1(N-1)} & K_{1N} \\ K_{21} & K_{22} & \dots & K_{2(N-1)} & K_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ K_{N1} & K_{N2} & \dots & K_{(N-1)(N-1)} & K_{(N-1)N} \\ K_{N1} & K_{N2} & \dots & K_{N(N-1)} & K_{NN} \end{bmatrix} \quad (25)$$

Por otro lado el vector \mathbf{F} quedará definido por

$$\mathbf{F}_{Nx1} = \left[\bar{u} \quad -t_a(x_2) \quad \dots \quad -t_a(x_{N-1}) \quad -t_b(x_N) \right]^T \quad (26)$$

con lo cual se obtiene el siguiente sistema lineal

$$\mathbf{K}_{NxN} \mathbf{U}_{Nx1} = \mathbf{F}_{Nx1} \quad (27)$$

3.2. Puntos Ficticios.

En este caso se utiliza un conjunto de puntos que no forman parte del dominio del problema (ficticios), en aquellos bordes donde se encuentren nodos con condiciones en derivadas. Con esto se busca imponer dos ecuaciones en vez de solo una, por un lado la ecuación correspondiente a la DBC y por otro la ecuación que gobierna el problema dentro del dominio. Para un caso unidimensional la coordenada del punto ficticio adscrito al nodo N será

$$x_{N+1} = x_N + d_c \quad (28)$$

donde d_c es el espacio entre nodos dado por

$$d_c = x_N - x_{N-1} \quad (29)$$

Por tanto, cuando se impongan condiciones de Neumann en el nodo N se obtendrá un sistema global con un grado de libertad adicional u_{N+1} de la forma:

$$\mathbf{K}_{(N+1)(N+1)}^{\text{FP}} \mathbf{U}_{(N+1)1}^{\text{FP}} = \mathbf{F}_{(N+1)1}^{\text{FP}} \quad (30)$$

donde la matriz de rigidez \mathbf{K}^{FP} será

$$\mathbf{K}_{(N+1)(N+1)}^{\text{FP}} = \begin{bmatrix} K_{11} & K_{12} & \cdots & K_{1N} & K_{1(N+1)} \\ K_{21} & K_{22} & \cdots & K_{2N} & K_{2(N+1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ K_{N1} & K_{N2} & \cdots & K_{NN} & K_{N(N+1)} \\ K_{(N+1)1} & K_{(N+1)2} & \cdots & K_{(N+1)N} & K_{(N+1)(N+1)} \end{bmatrix} \quad (31)$$

Se debe notar que las filas N y $N+1$ en la matriz anterior \mathbf{K}^{FP} , corresponden a las ecuaciones en el dominio y a la condición de Neumann respectivamente, ambas para el nodo N . Además, el vector global \mathbf{F}^{FP} queda determinado por:

$$\mathbf{F}_{(N+1)1}^{\text{FP}} = \left[\bar{u} \quad -t_a(x_2) \quad \dots \quad -t_a(x_N) \quad -t_b(x_N) \right]^T \quad (32)$$

donde \bar{u} es la condición impuesta de Dirichlet en el nodo 1. Al resolver el sistema lineal se obtendrán los $N+1$ valores nodales de la función u agrupados en el vector \mathbf{U}^{FP} tal como se presenta en (33) (Notar que también se obtiene la aproximación para el nodo ficticio impuesto en el problema).

$$\mathbf{U}_{(N+1)1}^{\text{FP}} = \left[u_1 \quad u_2 \quad \dots \quad u_N \quad u_{N+1} \right]^T \quad (33)$$

3.3. Aproximación por Mínimos Cuadrados Ponderados Tipo Hermite.

Al utilizar colocación de tipo Hermite se impondrá una incógnita adicional al problema a resolver, la cual corresponderá a la derivada de la función incógnita en el nodo del contorno con DBC (Zhang et al., 2000). La aproximación por WLS tipo Hermite, funciona del mismo modo que en el caso del MPF para todos aquellos sub-dominios o nubes en donde no se ve involucrado algún nodo con DBC. Por esto se pueden utilizar las mismas expresiones de la sección (2). La diferencia está en la forma como se construye la aproximación para aquellas nubes en las cuales se incluyen nodos con DBC, en estos casos se requiere un tratamiento distinto tal como se detalla a continuación.

Sea la ecuación (34) la aproximación de una función U donde la matriz de \mathbf{P}_m contiene las funciones base de interpolación y \mathbf{U} es el vector de valores nodales tal como se presenta en la ecuación (35)

$$\mathbf{U} = \mathbf{P}_m \boldsymbol{\alpha} \quad (34)$$

$$\mathbf{U}^T = \left[u_1 \quad u_2 \quad u_3 \quad \dots \quad u_n \right] \quad (35)$$

Suponiendo un caso bidimensional, para obtener la derivada de la función incógnita en la dirección de la normal a la superficie en una cierta cantidad n_{DB} de nodos, se impone en dichos nodos una condición de Neumann utilizando (36). Como se puede apreciar \mathbf{n} corresponde a la normal exterior a la superficie, y por tanto las derivadas quedan en función de los cosenos directores.

$$\frac{\partial u(\mathbf{x}_i^{DB})}{\partial \mathbf{n}} = \cos \theta_{\mathbf{x}_k} \frac{\partial u(\mathbf{x}_i^{DB})}{\partial \mathbf{x}_k} \quad (36)$$

Teniendo esto en consideración es posible establecer un nuevo sistema de ecuaciones como el que se presenta en (37), donde se define el vector de valores nodales adicionales \mathbf{U}' , y la \mathbf{P}_D según las ecuaciones (38) y (39) respectivamente. La dimensión de \mathbf{P}_D será $(n_{DB} \times m)$.

$$\mathbf{U}' = \mathbf{P}_D \boldsymbol{\alpha} \quad (37)$$

$$\mathbf{U}'^T = \left[\frac{\partial u(\mathbf{x}_1^{DB})}{\partial \mathbf{n}} \quad \frac{\partial u(\mathbf{x}_2^{DB})}{\partial \mathbf{n}} \quad \dots \quad \frac{\partial u(\mathbf{x}_{n_{DB}}^{DB})}{\partial \mathbf{n}} \right] \quad (38)$$

$$\mathbf{P}_D = \begin{pmatrix} 0 & \cos \theta_{\mathbf{x}_1} & \cos \theta_{\mathbf{y}_1} & \dots & \cos \theta_{\mathbf{x}_1} \frac{\partial p_m(\mathbf{x}_1^{DB})}{\partial x} + \cos \theta_{\mathbf{y}_1} \frac{\partial p_m(\mathbf{x}_1^{DB})}{\partial y} \\ 0 & \cos \theta_{\mathbf{x}_2} & \cos \theta_{\mathbf{y}_2} & \dots & \cos \theta_{\mathbf{x}_2} \frac{\partial p_m(\mathbf{x}_2^{DB})}{\partial x} + \cos \theta_{\mathbf{y}_2} \frac{\partial p_m(\mathbf{x}_2^{DB})}{\partial y} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & \cos \theta_{\mathbf{x}_{n_{DB}}} & \cos \theta_{\mathbf{y}_{n_{DB}}} & \dots & \cos \theta_{\mathbf{x}_{n_{DB}}} \frac{\partial p_m(\mathbf{x}_{n_{DB}}^{DB})}{\partial x} + \cos \theta_{\mathbf{y}_{n_{DB}}} \frac{\partial p_m(\mathbf{x}_{n_{DB}}^{DB})}{\partial y} \end{pmatrix} \quad (39)$$

Al combinar las ecuaciones (34) y (37) se obtiene el sistema final (40), donde en el vector \mathbf{U}^D se almacenarán los n valores nodales de la función, como también los n_{DB} valores nodales de la derivada normal en los nodos con dicha prescripción (ecuación (41)).

$$\mathbf{U}^D = \mathbf{P} \boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \mathbf{P}_m \\ \mathbf{P}_D \end{pmatrix} \boldsymbol{\alpha} \quad (40)$$

$$\mathbf{U}^D = \left[u(\mathbf{x}_1) \quad \dots \quad u(\mathbf{x}_n) \quad \frac{\partial u(\mathbf{x}_1^{DB})}{\partial \mathbf{n}} \quad \dots \quad \frac{\partial u(\mathbf{x}_{n_{DB}}^{DB})}{\partial \mathbf{n}} \right] \quad (41)$$

En este caso es posible observar nuevamente que en cada sub-dominio se tendrá $n + n_{DB} > m$ lo que implica el uso de un funcional J para calcular las incógnitas mediante el método estándar WLS (recordar ecuación (5)). Sin embargo, esta vez el funcional viene definido por (42) en donde w_j y w_j^{DB} corresponden a los coeficientes de ponderación.

$$\text{mín}\{J\} = \text{mín} \left\{ \sum_{j=1}^m w_j (u^h(\mathbf{x}_j) - u(\mathbf{x}_j))^2 + \sum_{k=1}^{n_{DB}} w_k^{DB} \left(\frac{\partial u^h(\mathbf{x}_k^{DB})}{\partial \mathbf{n}} - \frac{\partial u(\mathbf{x}_k^{DB})}{\partial \mathbf{n}} \right)^2 \right\} \quad (42)$$

Al resolver el sistema anterior en cada nube, es posible encontrar una relación lineal entre los vectores $\boldsymbol{\alpha}$ y \mathbf{U}^D como:

$$\mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P} \boldsymbol{\alpha} = \mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{U}^D \quad (43)$$

y en donde la nueva matriz diagonal de ponderación \mathbf{W} quedará definida por (44). En este caso se utiliza la misma función de ponderación del MPF, tal como se establece en (14).

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \mathbf{W} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{W}_D \end{pmatrix} \quad (44)$$

En la ecuación (44) se debe entender que la matriz \mathbf{W} es la misma que la definida en (13), mientras que \mathbf{W}_D corresponde al caso de los nodos con condiciones de Neumann. Por simplicidad W_j^{BD} se considera igual a W_j dividida en un factor ξ que se determina antes de llevar a cabo el análisis. En el caso de los ejemplos desarrollados en este trabajo se ha utilizado $\xi = 1.0$.

$$W_j^{DB} = \frac{W_j}{\xi} \quad (45)$$

Considerando lo anterior se obtienen las matrices A y B como

$$\mathbf{A} = \mathbf{P}^T \mathbf{W} \mathbf{P} = \mathbf{P}_m^T \mathbf{W} \mathbf{P}_m + \mathbf{P}_D^T \mathbf{W}_D \mathbf{P}_D \quad (46a)$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{P}^T \mathbf{W} = \mathbf{P}_m^T \mathbf{W} + \mathbf{P}_D^T \mathbf{W}_D \quad (46b)$$

con lo que finalmente se establece

$$\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B} \mathbf{U}^D \quad (47)$$

Al substituir (47) en (1) se obtiene la aproximación por mínimos cuadrados ponderados tipo Hermite de la función u según

$$u^h(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T \boldsymbol{\alpha} = \mathbf{p}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B} \mathbf{U}^D = \boldsymbol{\Phi}^T \mathbf{U}^D \quad (48)$$

El vector función de forma es posible entonces establecerlo como

$$\boldsymbol{\Phi}^T = \mathbf{p}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B} = [\phi_1 \quad \phi_2 \quad \dots \quad \phi_n \quad \phi_1^H \quad \phi_2^H \quad \dots \quad \phi_{n_{DB}}^H] \quad (49)$$

donde ϕ_i pertenece a $[i = 1, 2, \dots, n]$ correspondiente a los nodos del dominio mientras, que ϕ_i^H corresponde a los n_{DB} nodos con imposición de derivada.

3.4. Distribución Regular Cercana al Borde.

En este método lo que se busca es aproximar la derivada en los nodos mediante la utilización de un esquema estándar de diferencias finitas (FDM) de segundo orden. Por lo anterior se hace necesario una distribución regular de puntos en las cercanías de los bordes. Al considerar el caso unidimensional, por ejemplo con condiciones de Neumann en ambos extremos del problema, se requeriría que los nodos x_1 , x_2 y x_3 como también x_{N-2} , x_{N-1} y x_N se encuentren distribuidos de manera regular. A modo de ejemplo en (50) se presenta la aproximación de la derivada de la función u en el nodos 1 y N.

$$\frac{\partial u(x_1)}{\partial x} = \frac{-3u_1 + 4u_2 - u_3}{x_3 - x_1} \quad (50a)$$

$$\frac{\partial u(x_N)}{\partial x} = \frac{3u_N - 4u_{N-1} + u_{N-2}}{x_N - x_{N-2}} \quad (50b)$$

De esta forma, al igual como en los casos anteriores y luego de reemplazar (50) en (16), se conformará un sistema lineal del cual es posible obtener los valores nodales de la función incógnita. El método resultante es idéntico a lo realizado en el MPF estándar, salvo que la derivada se aproxima mediante un esquema de diferencias finitas en los nodos donde se imponga Neumann.

4. EJEMPLOS NUMÉRICOS.

Para verificar el comportamiento de las distintas técnicas presentadas para imponer la condición de Neumann, se entregan a continuación los resultados numéricos para diversos test 1D. En todos los ejemplos se han considerado sub-dominios de $n = 5$ puntos por nube para llevar a cabo el cálculo de la función de ponderación w (ecuación (14)). Con el objeto de poder realizar una comparación, se calculan los indicadores para el error global de la solución numérica y su derivada, e_0 y e_x respectivamente. Estos indicadores se definen como:

$$e_0 = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (u_i^{exacta} - u_i^{numérica})^2}{\sum_{i=1}^N (u_i^{exacta})^2}} \quad (51)$$

$$e_x = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (u_{x,i}^{exacta} - u_{x,i}^{numérica})^2}{\sum_{i=1}^N (u_{x,i}^{exacta})^2}} \quad (52)$$

donde $u_{x,i}^{exacta}$ y $u_{x,i}^{numérica}$ corresponden a la solución teórica y a la solución numérica mediante el MPF, respectivamente.

4.1. Problema con Curva poco Suave.

Con la finalidad de validar las metodologías propuestas se presenta en primer lugar un test unidimensional. Este problema fue propuesto originalmente por (Rachford y Wheeler, 1974) para probar la convergencia del Método H1-Galerkin, fue usado nuevamente por (Babuska et al., 1977) para probar el Método Mixed-Hybrid Finite Element (MHFEM), como también por (Liu et al., 1997) en el método sin malla Reproducing Kernel Particle (RKPM). El problema y sus condiciones de frontera (ambas del tipo Neumann) son,

$$-u'' + u = f(x), \quad x \in (0, 1), \quad (53)$$

$$u'(0) = \frac{\alpha}{1 + \alpha^2 \bar{x}^2}, \quad (54)$$

$$u'(1) = [\arctan(\alpha(1 - \bar{x}) + \arctan(\alpha\bar{x})]. \quad (55)$$

La solución exacta de este problema es

$$u(x) = (1 - x)[\arctan(\alpha(x - \bar{x})) + \arctan(\alpha\bar{x})]. \quad (56)$$

El parámetro α se utiliza para controlar la suavidad de la curva. A medida que disminuye el valor de α , la solución se suaviza. En el caso de que α sea de un valor elevado, en \bar{x} la solución tendrá un salto y tomará una forma similar a una rodilla. En el caso del ejemplo numérico se considera un valor de α igual 50.0 y de \bar{x} 0.40. El problema se resuelve para una discretización

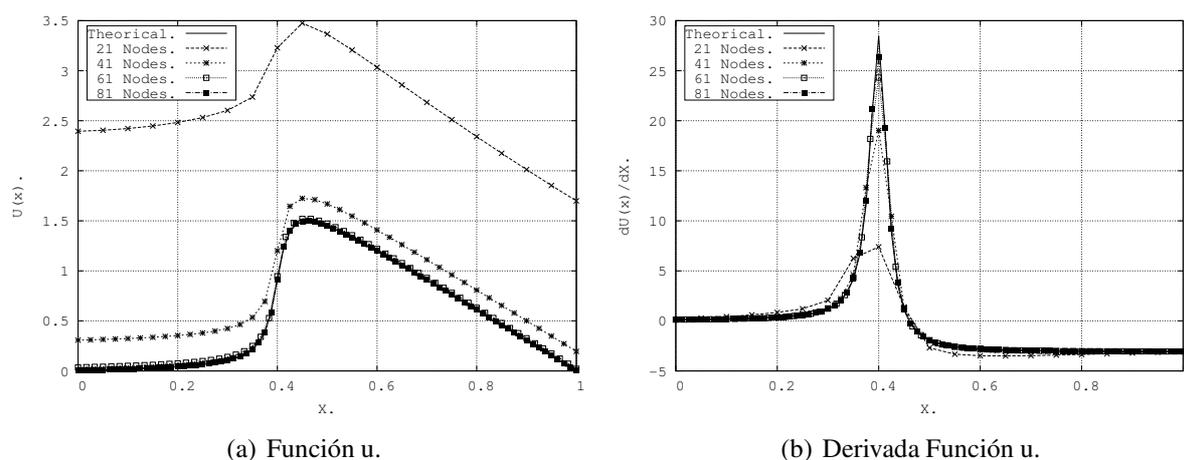


Figura 2: Convergencia del MPF 1-D con condiciones de borde en derivadas.

regular e irregular de puntos.

En la figura 2 se observa la convergencia del MPF en su forma tradicional, con una tendencia a la solución real. Sin embargo, con baja discretización de puntos, la solución se encuentra desplazada en plenitud lo que genera errores globales.

A continuación se presenta la solución para la función y su derivada con una discretización regular de 61 puntos (ver figura 3). En ambas gráficas no es posible visualizar un cambio aparente en las soluciones calculadas mediante las distintas técnicas presentadas, situación que se repite tanto para la derivada como para la función. Además se observa un comportamiento convergente al visualizar los comportamientos de los errores tal como se muestra en la figura 4.

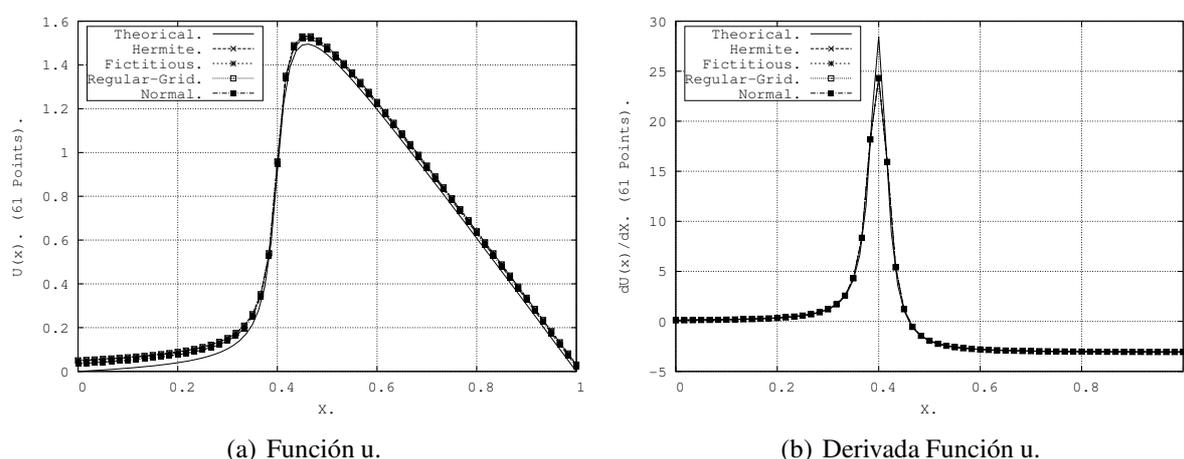


Figura 3: Solución numérica para distintas técnicas de imposición de la condición de Neumann. Distribución regular de 61 puntos.

Al observar la tabla 1 se puede constatar precisamente lo observado en las gráficas anteriores, mostrando una solución similar para todas las formas de imposición de la condición de borde en derivada. En este caso se observa también el hecho de que para una discretización regular, el menor error que se comete en la aproximación se obtiene con la técnica de Hermite.

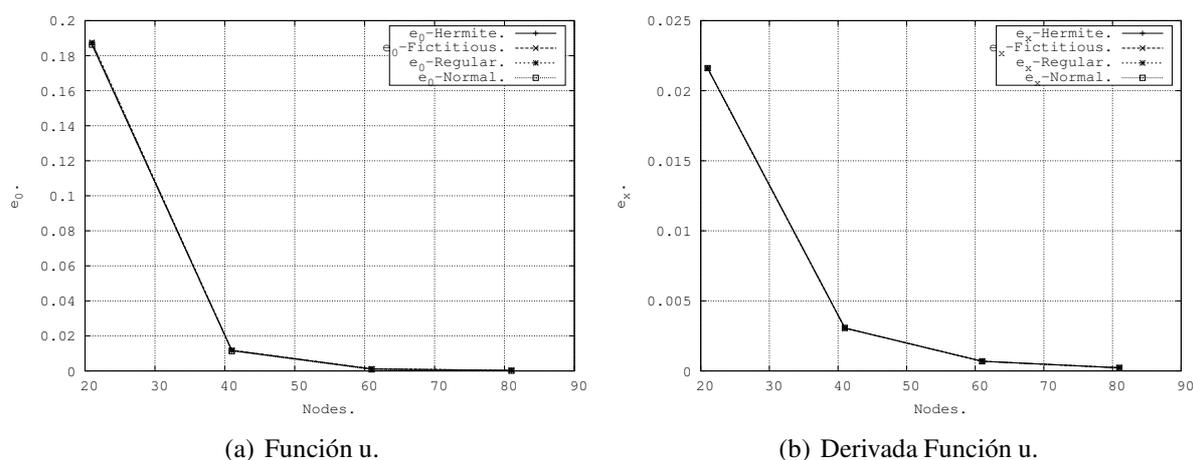


Figura 4: Convergencia del error para una discretización regular.

Tipo DBC.	e_0	e_x
D. Collocation.	8.516784e-004	6.882504e-004
Fictitious Point.	1.200744e-003	6.876696e-004
Regular Grid.	1.193410e-003	6.873473e-004
Hermite.	1.151896e-003	6.860392e-004

Tabla 1: Errores globales en la aproximación de la función u y en su derivada, para una distribución regular de 61 puntos.

Para este mismo test, el comportamiento de la solución y su derivada, cuando se utiliza una distribución irregular de 61 puntos, se pueden ver en figura 5. En estas, nuevamente, no es posible visualizar un cambio aparente en las soluciones numéricas calculadas mediante las distintas técnicas. Sin embargo, y a diferencia del caso de una discretización regular, esta vez no se observa un correcto comportamiento de la solución y su derivada (figura 5.a), esto a pesar de que si existe una disminución del error global (ver figura 6).

Al observar la tabla 2 es posible establecer que las distintas aproximaciones entregan prácticamente el mismo resultado en cuanto a orden de magnitud, pero aún así la imposición de Hermite presenta un comportamiento levemente mejor en lo que respecta a la aproximación de la función. Además se debe señalar que la solución se ha deteriorado globalmente, al menos en un orden de magnitud, con respecto a la discretización regular para igual número de puntos.

Tipo DBC.	e_0	e_x
D. Collocation.	5.679369e-003	6.427324e-003
Fictitious Point.	5.683742e-003	6.426196e-003
Regular Grid.	5.680101e-003	6.427125e-003
Hermite.	5.654365e-003	6.432031e-003

Tabla 2: Errores globales en la aproximación de la función u y en su derivada, para una distribución irregular de 61 puntos.

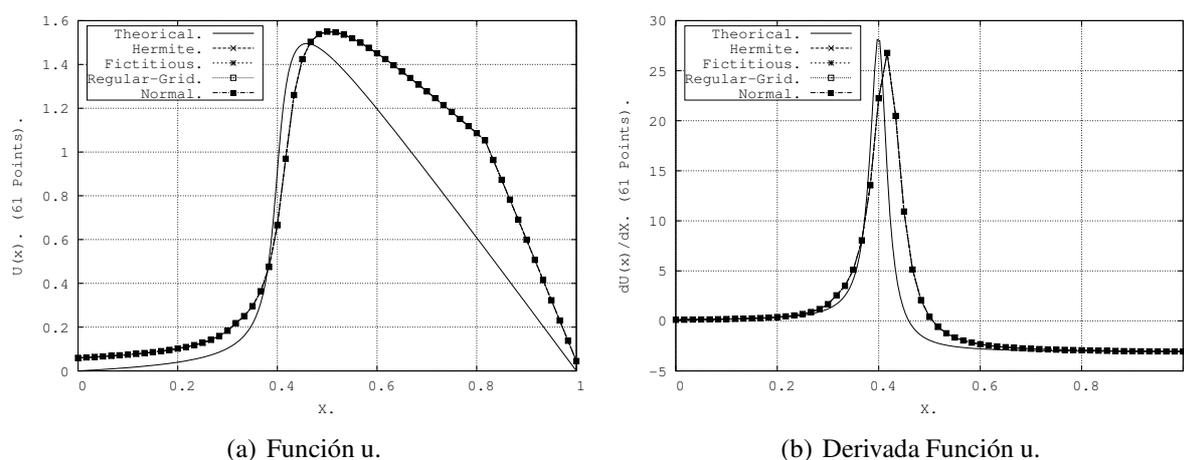


Figura 5: Solución numérica para distintas técnicas de imposición de la condición de Neumann. Distribución irregular de 61 puntos.

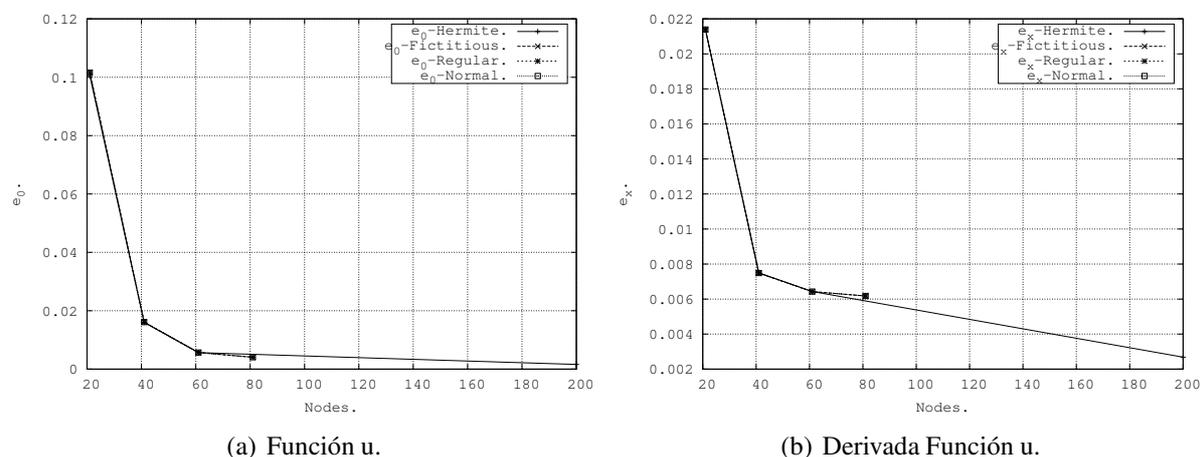


Figura 6: Convergencia del error para una discretización irregular.

4.2. Problema de Poisson de Altos Gradientes.

Se plantea a continuación el uso de un problema unidimensional de Poisson, en el cual es posible generar cambios pronunciados tanto en la solución teórica como en su derivada en un determinado punto del dominio. Este test, al igual que en el caso anterior, supone un desafío para los métodos numéricos. El problema, con condiciones de Neumann en ambos extremos del dominio, consiste en resolver

$$-u''(x) = f(x), \quad x \in (-1, 1), \quad (57)$$

La solución exacta del problema es

$$u(x) = 1 - x^3 + e^{-100x^2} \quad (58)$$

En la figura 7.b es posible observar la convergencia que presenta el MPF en su forma tradicional, donde se observa una aproximación para la derivada claramente convergente. Sin embargo, tal como se aprecia en 7.a, la aproximación de la función es deficiente sin una clara muestra de convergencia.

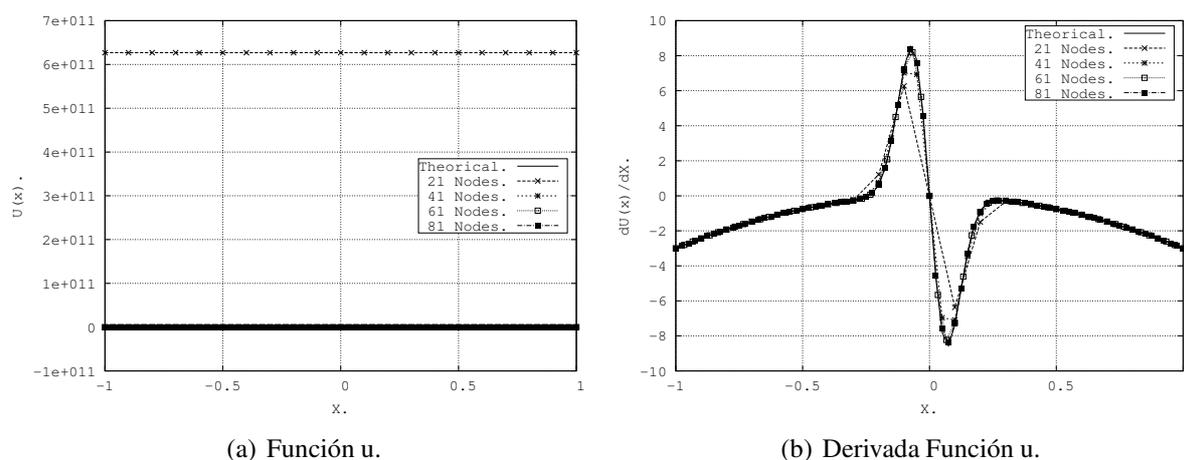


Figura 7: Convergencia del MPF 1-D con condiciones de borde en derivadas.

En la figura 8 se compara la solución que se obtiene para una discretización regular de 61 puntos. Se observa que en el caso de la derivada la solución que se obtiene mediante las distintas técnicas de imposición son igualmente satisfactorias. Esta situación no se replica eso sí en la aproximación de la función. Al respecto, la imposición de Hermite es la que presenta el mejor comportamiento, aun cuando la solución se encuentre desplazada con respecto a la real. La aproximación tal como lo muestra la figura 9 presenta un comportamiento convergente solo en el caso de las derivadas.

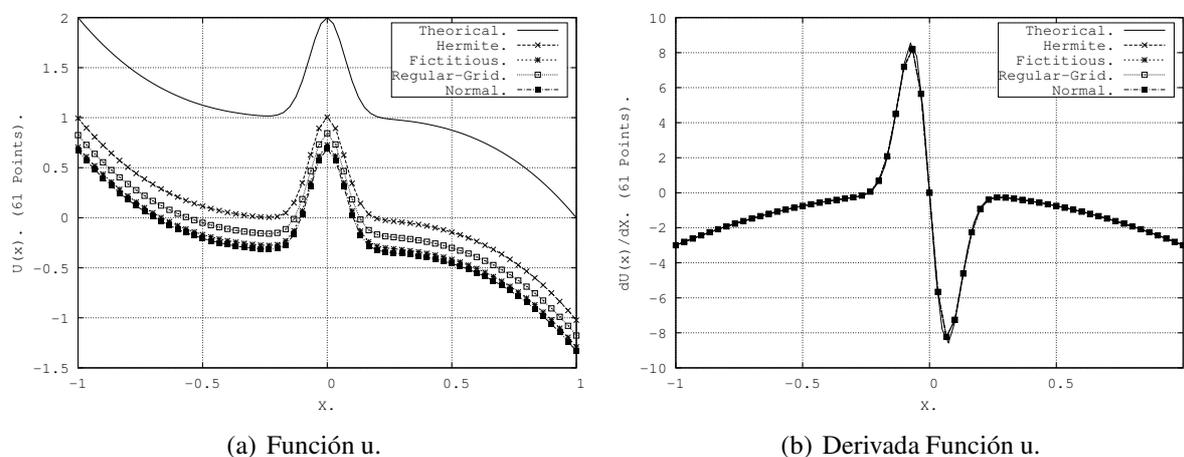


Figura 8: Solución numérica para distintas técnicas de imposición de la condición de Neumann. Distribución regular de 61 puntos.

Si se observa la tabla 3, se aprecia claramente que la aproximación de la derivada posee una tasa de convergencia mayor respecto a la de la función. Además queda de manifiesto que la aproximación de la función presenta su peor comportamiento en el caso de la imposición de Neumann mediante el procedimiento tradicional, mientras que el mejor resultado se obtiene mediante la aproximación de tipo Hermite.

En las figura 10 es posible encontrar la solución correspondiente a una discretización irregular de 61 puntos. Los resultados en este caso no son nada alentadores, ya que ni la derivada

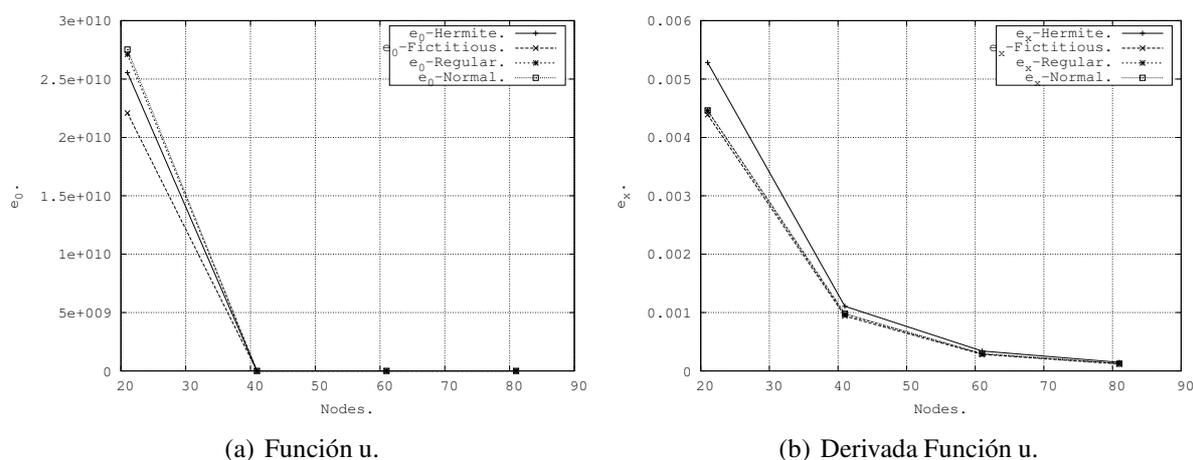


Figura 9: Convergencia del error para una discretización regular.

Tipo DBC.	e_0	e_x
D. Collocation.	2.008689e-002	2.960438e-004
Fictitious Point.	1.948507e-002	2.846584e-004
Regular Grid.	1.772570e-002	2.936563e-004
Hermite.	1.529467e-002	3.411353e-004

Tabla 3: Errores globales en la aproximación de la función u y en su derivada, para una distribución regular de 61 puntos.

ni la función presentan un comportamiento aceptable. En el caso de la derivada se un observa un desplazamiento horizontal de la solución aproximada con respecto a la teórica, en la sección de alto gradiente, lo que lleva a una gran distorsión en el error global. Por otro lado, respecto de la aproximación de la función incógnita, se aprecia que el peor comportamiento lo presenta la imposición mediante colocación directa, siendo al técnica de Hermite la de mejor resultado, aun cuando todas presentan valores lejanos respecto de la solución teórica.

En la tabla 4 queda de manifiesto la importante diferencia que presenta la solución numérica, con errores globales de un orden de magnitud de 10^8 en todos los casos.

Tipo DBC.	e_0	e_x
D. Collocation.	5.840761e+008	2.589197e-002
Fictitious Point.	7.828432e+008	1.591256e-002
Regular Grid.	5.875777e+008	1.589738e-002
Hermite.	1.704648e+008	1.584096e-002

Tabla 4: Errores globales en la aproximación de la función u y en su derivada, para una distribución irregular de 61 puntos.

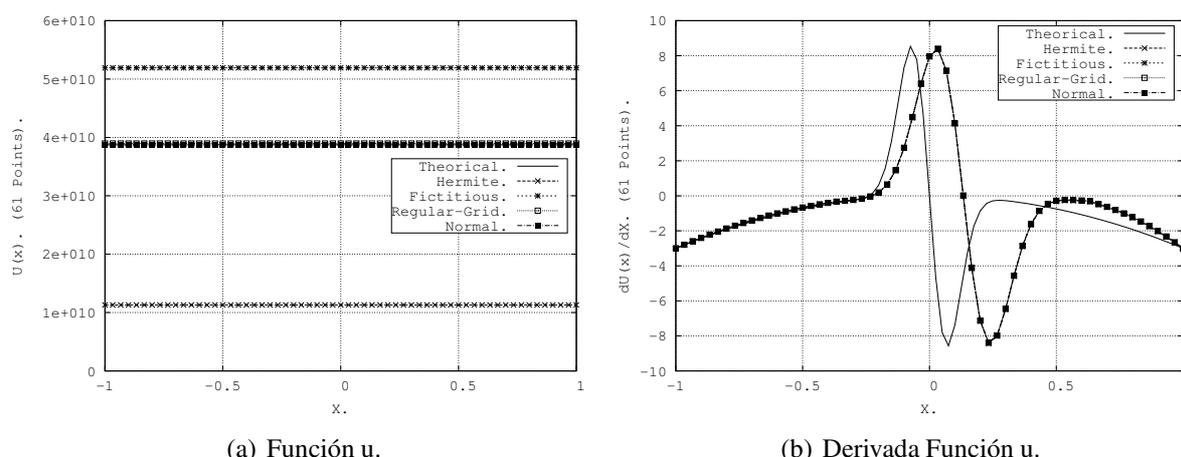


Figura 10: Solución numérica para distintas técnicas de imposición de la condición de Neumann. Distribución irregular de 61 puntos.

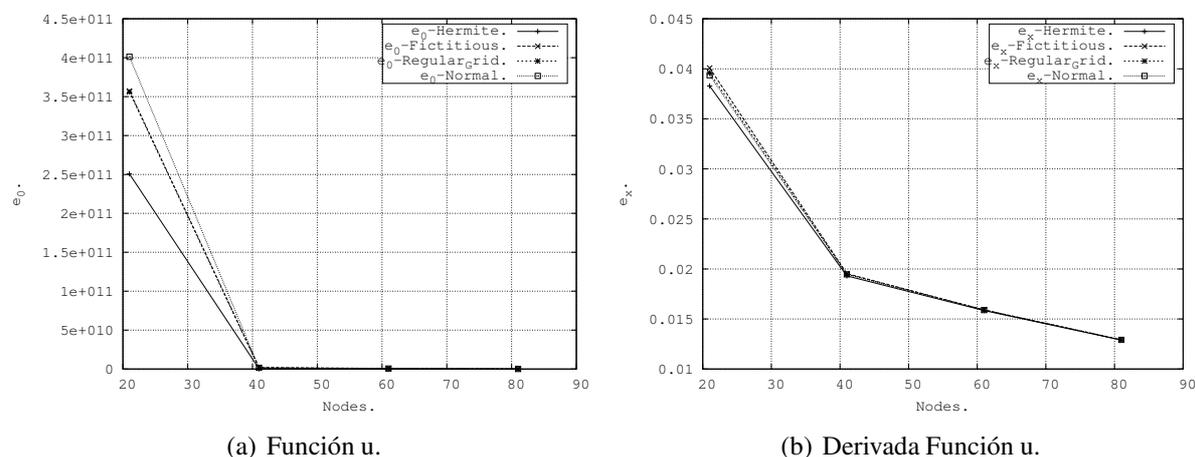


Figura 11: Convergencia del error para una discretización irregular.

5. ANÁLISIS DE RESULTADOS

De acuerdo a los resultados que se presentan en el problema 4.1, se observa un comportamiento correcto de la derivada de la función incógnita cuando se utiliza una discretización regular de puntos (ver figuras 2 y 3), pero la solución de la función muestra un desplazamiento respecto de la solución teórica, originado por el problema de estabilidad del método de aproximación. Esta característica del procedimiento de colocación puntual también ha sido analizada y descrita en la formulación de otras técnicas sin malla, como por ejemplo en el SPH (Dyka y Ingel (1995); Bonet y Kulasegaram (2000)), en el método EFG con integración nodal (Beissel y Belytschko, 1996), el método *hp cloud* (Liszka et al., 1996), en el método DEM (Breitkopf et al., 2000), en *least-squares collocation meshless method* (Zhang et al., 2001) y en el Método de Puntos Finitos (Perazzo et al., 2003).

Al observar la figura 5 queda de manifiesto la sensibilidad del método utilizado frente a una discretización aleatoria de puntos para llevar a cabo la aproximación de la función objetivo, ya que tanto la función como su derivada muestran un resultado erróneo en una zona de transición entre una puntos de paso regular a paso irregular.

Los resultados del problema 4.2 al igual que en el problema 4.1 presentan una buena aproximación en lo referente a la derivada del método, pero en cuanto a lo que se relaciona con la aproximación de la función, está sufre un desplazamiento que para una discretización baja de puntos se acrecienta de manera drámatica llegando a varios órdenes de magnitud sobre los valores reales de la solución. En este punto debe quedar claro que esto es solo desplazamiento de la solución ya que la forma de esta curva se ajusta bastante a la teórica, tal como es posible observar en la figura 3.

6. CONCLUSIONES

En el presente trabajo se han presentado diferentes propuestas para la imposición de condiciones de borde naturales en un método sin malla, basado en una formulación fuerte del problema como el MPF. En vista de los resultados obtenidos es posible establecer la existencia de otras fuentes de errores en la solución por razones inherentes al método utilizado, como pueden ser la calidad de la función de forma y la sensibilidad del método ante distintas discretizaciones. Debido a lo anterior y aún cuando se implementaron diferentes técnicas para imponer la condición de Neumann, no es posible establecer un análisis comparativo de manera concluyente entre ellas, cuando se utilizan en el MPF. Es deseable continuar con la investigación para obtener un conocimiento más acabado de las propiedades de la función de forma del MPF, buscando las fuentes de error que esta induce en la solución.

7. AGRADECIMIENTOS

Los autores desean agradecer el apoyo en la realización del presente trabajo al Departamento de Ingeniería Mecánica de la Universidad Técnica Federico Santa María, de Valparaíso, Chile, y al Centro Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería CIMNE, de Barcelona, España, a través del AULA UTFSM-CIMNE.

REFERENCIAS

- Angulo A., Perez L., y Perazzo F. A posteriori error estimator and an adaptive technique in meshless finite points method. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 33:1322–1338, 2009.
- Babuska I. y Melenk J. The partition of unity finite element method: basic theory and applications. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 139:289–314, 1996.
- Babuska I., Oden J., y Lee J. Mixed-hybrid finite element approximations of second-order elliptic boundary-value problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 11:175–206, 1977.
- Beissel S. y Belytschko T. Nodal integration of the element-free galerkin method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 139:49–74, 1996.
- Belytschko T., Lu Y., y Gu L. Element free galerkin methods. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 37:229–256, 1994b.
- Bonet J. y Kulasegaram S. Correction and stabilization of smooth particle hydrodynamics method with applications in metal forming simulations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 47:1189–1214, 2000.
- Breitkopf P., Touzot G., y Villon P. Double grid diffuse collocation method. *Computational Mechanics*, 25:199–206, 2000.
- Chen Y., Lee J., y Eskandarian A. *Meshless Methods in Solid Mechanics*. Springer+Business

- Media, 2006.
- Duarte C. y Oden J. An hp adaptive method using clouds. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 139:237–262, 1996.
- Dyka C. y Ingel R. An approach for tension instability in smoothed particle hydrodynamics. *Computers and Structures*, 57:573–580, 1995.
- Li S. y Liu W. *MeshFree Particle Method*, volumen I. Springer-Verlag, 2004.
- Liszka T., Duarte C., y Tworzydło W. Hp-meshless cloud method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 139:263–288, 1996.
- Liu G. *MeshFree Methods: Moving Beyond the Finite Element Method*, volumen I. CRC Press LLC, 2003.
- Liu G. y Gu Y. A point interpolation method for two-dimensional solids. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 50:937–951, 2001.
- Liu G. y Gu Y. A local radial point interpolation method (lr-pim) for free vibration analyses of 2-d solids. *Journal of Sound Vibration*, 246-1:29–46, 2001b.
- Liu G. y Gu Y. *An Introduction to Meshfree Methods and Their Programming*. Springer, 2005.
- Liu G. y Liu M. *Smoothed Particle Hydrodynamics: A Meshfree Particle Method*. World Scientific, 2003.
- Liu W., Jun S., y Zhang Y. Reproducing kernel particle methods. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 20:1081–1106, 1995.
- Liu W., Li S., y Belytschko T. Moving least square reproducing kernel method. part i: Methodology and convergence. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 143:422–453, 1997.
- Nayroles B., Touzot G., y Villon P. Generalizing the fem: diffuse approximation and diffuse elements. *Computational Mechanics*, 10:307–318, 1992.
- Oñate E. y Idelsohn S. A meshfree finite point method for advective-diffusive transport and fluid flow problems. *Computational Mechanics*, 21:283–292, 1998.
- Oñate E., Idelsohn S., Zienkiewicz O., Taylor R., y Sacco C. A finite point method in computational mechanics. applications to convective transport and fluid flow. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 39:3839–3866, 1996.
- Oñate E., Perazzo F., y Miquel J. A finite point method for elasticity problems. *Computers and Structures*, 79:2151–2163, 2001.
- Ortega E. Un análisis sobre el efecto de los parámetros que definen las nubes en aproximaciones de segundo y cuarto orden. *Mecánica Computacional*, XXIII:3273–3291, 2004.
- Perazzo F., Lohner R., y Pérez-Pozo L. Adaptive methodology for meshless finite point method. *Advances in Engineering Software*, 39:156–166, 2008.
- Perazzo F., Miquel J., y Oñate E. *Una metodología numérica sin malla para la resolución de las ecuaciones de elasticidad mediante el método de puntos finitos*. Centro Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería, 2003.
- Perazzo F., Miquel J., y Oñate E. El método de puntos finitos para problemas de la dinámica de sólidos. *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería*, 20:235–246, 2004.
- Pérez-Pozo L., Perazzo F., y Angulo A. A meshless fpm model for solving nonlinear material problems with proportional loading based on deformation theory. *Advances in Engineering Software*, 40:1148–1154, 2009.
- Rachford H. y Wheeler M. An h^{-1} - galerkin procedure for the two-point boundary value problem. *Carl de Boor (Ed.) Mathematical Aspects of Finite Elements in Partial Differential Equations*, Academic Press, páginas 353–382, 1974.

- Zhang X., Liu X., Song K., y Lu M. Least-squares collocation meshless method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 51:1089–1100, 2001.
- Zhang X., Song K., Lu M., y Liu X. Meshless methods based on collocation with radial basis functions. *Computational Mechanics*, 26:333–343, 2000.