

UTILIDADES E INUTILIDADES DEL DIAGRAMA DE VORONOÏ INTERPOLACIÓN CON COORDENADAS LAPLACIANAS

Nestor Calvo

Centro Internacional de Métodos Computacionales en Ingeniería (CIMEC)
Güemes 3450, (3000) Santa Fe, Argentina.
e-mail: ncalvo@ceride.gov.ar, web page: <http://venus.arcrude.edu.ar/CIMEC>

Key words: Delaunay, Voronoï, Laplace coordinates, Natural Neighbor, Interpolation.

Abstract. *Dado un conjunto de nodos con datos, el diagrama de Voronoï captura las relaciones de proximidad de cualquier punto del espacio en relación con los nodos “vecinos”. La tendencia actual es realizar interpolaciones geométricas locales o de corto alcance (tipo splines), donde solo unos pocos vecinos intervienen en la asignación de un valor interpolado para un punto cualquiera.*

En este trabajo se muestra como conseguir una interpolación basada en el Diagrama de Voronoï utilizando las Coordenadas Laplacianas, se presentan algunas de sus propiedades y los algoritmos necesarios para su programación. El énfasis está puesto en conseguir un método que sirva para utilizar los interpolantes como funciones de forma para el método de elementos finitos en mallas de poliedros no simpliciales.

1 INTRODUCCIÓN

La interpolación basada en el diagrama de Voronoï ha demostrado ser una herramienta muy fructífera^{1,2,3}. En el contexto del modelado numérico del continuo, ya sea con el método de elementos finitos (FEM) o con métodos sin mallas, se utilizan exitosamente las funciones de forma no-Sibsonianas o coordenadas Laplacianas^{4,5}, que son funciones interpolantes geométricas de muy sencilla implementación.

El soporte de la coordenada Laplaciana (función de forma) de un nodo es el entorno natural del mismo, que se expande por fuera del conjunto de elementos del nodo y por fuera del dominio. En el FEM es preferible restringir el soporte al conjunto de elementos de cada nodo. Tal restricción tiene algunas consecuencias, cuyo análisis es objeto del presente trabajo.

La presentación incluye una primera etapa con definiciones y propiedades correspondientes al diagrama de Voronoï y a las coordenadas Laplacianas en los capítulos 2 y 3. Luego, el capítulo 4 está completamente dedicado al análisis de su utilización como funciones de forma en mallas de poliedros para el FEM.

2 DIAGRAMA DE VORONOÏ Y TRIANGULACIÓN DELAUNAY

Dado un conjunto \mathbf{N} de puntos aislados o nodos $\{\mathbf{n}_q\}$, $q \in \{1, \dots, n\}$, el **diagrama de Voronoï** $\mathbf{V}(\mathbf{N})$ asigna a cada nodo la región del espacio cuyos puntos no son más cercanos a ningún otro nodo¹.

$$\mathbf{V}_q = \mathbf{V}_q(\mathbf{n}_q) = \{\mathbf{x} \in \mathbf{R}^3: \|\mathbf{x} - \mathbf{n}_q\| \leq \|\mathbf{x} - \mathbf{n}_r\|\} \quad (\{\mathbf{n}_q, \mathbf{n}_r\} \subset \mathbf{N}) \Rightarrow \bigcup \mathbf{V}_q = \mathbf{R}^3 \quad (1)$$

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}(\mathbf{N}) = \{ \mathbf{V}_q, q \in \{1,2,\dots,n\} \} \quad (2)$$

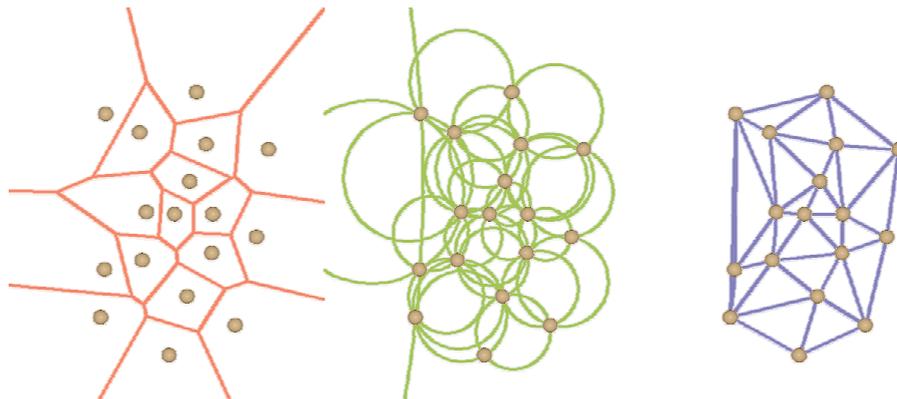


Figura 1: diagrama de Voronoï, esferas de Voronoï y triangulación Delaunay.

ⁱ Nos ocuparemos solamente del caso tridimensional con n finito, pero ambos presupuestos son innecesarios.

Así definidaⁱⁱ, cada región o **celda de Voronoï** es cerrada, incluye su frontera. Un punto de la frontera de una región equidista de dos o más nodos.

El conjunto de los puntos del espacio que equidistan de dos nodos es un plano que corta por la mitad al segmento que une los nodos. La celda de un nodo es entonces un poliedroⁱⁱⁱ convexo por ser la intersección de varios semiespacios que contienen al nodo, cada uno limitado por el plano medio entre del nodo y algún vecino.

El diagrama de Voronoï captura los conceptos de entorno y de vecindad. Tanto es así que es frecuente encontrarlo en la naturaleza. 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. Ese efecto puede verse en el crecimiento del caparazón de una tortuga o de las semillas del maíz y, en general, en todo proceso natural de crecimiento radial y simultaneo a partir de “semillas” o puntos aislados.

Supóngase una esfera de radio infinitesimal, centrada en un punto cualquiera, 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 ambos y está en la cara del diagrama que separa las celdas d ambos nodos. Con el mismo razonamiento, si alcanza tres, el centro está en una arista y son cuatro está en un vértice.

Cada esfera centrada en un vértice del diagrama de Voronoï y cuyo radio es la distancia común a los (al menos) cuatro nodos más próximos, se denomina **esfera vacía** o **esfera de Voronoï**.

Se define como **entorno natural** de un punto cualquiera del espacio es la unión de las esferas de Voronoï que lo contienen, sus nodos son los vecinos naturales del punto. Dos nodos son **vecinos naturales** si sus correspondientes poliedros de Voronoï tienen una cara común.

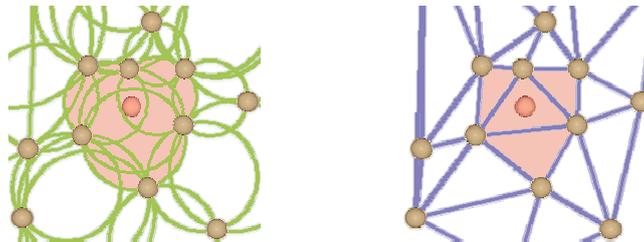


Figura 2: entorno natural y cavidad de un punto

El **envoltorio convexo** o **convex-hull $H(N)$** de un conjunto de nodos es la intersección de todas las regiones convexas que contienen a los puntos.

ⁱⁱ Se pueden definir por regiones abiertas y además se pueden definir en distintos espacios, con diferentes métricas o aún para conjuntos continuos de puntos.

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

La forma estándar de interconectar un conjunto de nodos es mediante una triangulación^{iv}. Una **triangulación** de un conjunto de nodos es una partición de su convex-hull mediante tetraedros cuyos vértices son los nodos y que además cumplen las siguientes premisas:

- 1) La unión de todos los tetraedros es el convex-hull del conjunto de nodos.
- 2) La intersección de dos tetraedros sólo puede ser un elemento común de ambos: una cara, una arista o un vértice o bien el conjunto vacío.

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 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 de Voronoï.

La **triangulación de Delaunay $D(N)$** es aquella en la que las circunferas de los tetraedros no contienen ningún nodo en su interior. Para una distribución general, la triangulación de Delaunay es dual^v del diagrama de Voronoï. Los tetraedros Delaunay están definidos por los cuatro nodos de las esferas vacías.

En el caso degenerado, si hay alguna esfera de Voronoï supernumeraria (con más de cuatro nodos en la superficie) habrá mas 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.

La unión de los tetraedros cuyas esferas contienen al punto, se denomina **poliedro de inserción** o **cavidad** del punto y es clave en algunas implementaciones de la triangulación Delaunay.

3 INTERPOLACIÓN CON COORDENADAS LAPLACIANAS

Cada nodo del conjunto discreto **N** tiene asociada una propiedad cuantitativa f_q y se pretende encontrar una función de la posición que asigne la misma propiedad a cualquier punto del espacio.

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, la función queda entonces definida por el conjunto de funciones reales $\{\phi^q(\mathbf{x})\}$ que son los **pesos**, **interpolantes** o **funciones de forma** de cada nodo en el punto.

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) \approx \phi^q(\mathbf{x}) \mathbf{f}_q, \quad q \in \{1, \dots, n\}^{\text{vi}}. \quad (3)$$

^{iv} 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.

^v En d dimensiones, a cada elemento k -dimensional ($k \leq d$) de una, le corresponde un elemento $(d-k)$ -dimensional de la otra.

^{vi} 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.

La función hereda las propiedades de suavidad y continuidad de los interpolantes.

El diagrama de Voronoï puede proveer funciones de forma locales con sentido geométrico: el valor en un punto estará relacionado solamente con los valores en los nodos cercanos.

Hay dos mecanismos básicos para construir interpolantes a partir del diagrama: el método de Sibson y las coordenadas Laplacianas^{1,2}. 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.

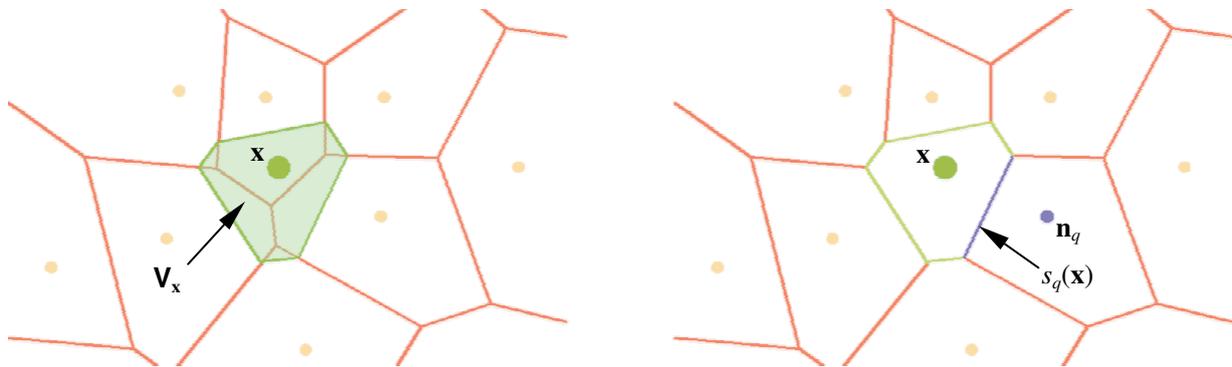


Figura 3: diagrama de Voronoï de los nodos y el punto de cálculo de las coordenadas Laplacianas.

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

La medida de la intersección del poliedro del punto \mathbf{V}_x y el poliedro del q -ésimo nodo \mathbf{V}_q (longitud en 2D, área en 3D^{vii}) es $s_q(\mathbf{x})$. Las coordenadas Laplacianas de un punto (que no coincide con ningún nodo y no está en la superficie del convex-hull) se definen por:

$$\phi^q(\mathbf{x}) = \frac{\Phi^q(\mathbf{x})}{\sum \Phi^r(\mathbf{x})} = \frac{\frac{s_q(\mathbf{x})}{\|\mathbf{n}_q - \mathbf{x}\|}}{\sum \frac{s_r(\mathbf{x})}{\|\mathbf{n}_r - \mathbf{x}\|}} \quad (\mathbf{x} \in \mathbf{R}^d - \{\mathbf{P} \cup \partial\mathbf{H}\}) \quad (4)$$

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

3.1 Propiedades

a) Delta de Kronecker

Las funciones accesorias Φ^q están bien definidas en todo el espacio, excepto en los nodos y

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

en la frontera del convex-hull. Si el punto de calculo es infinitamente próximo a un nodo, entre ambos se reparten el poliedro que originalmente era del nodo, partiéndolo con la mediatriz del segmento infinitesimal que los une. La medida de la intersección permanece finita a medida que la distancia entre los nodos se anula:

$$\lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{n}_q} \frac{s_q(\mathbf{x})}{\|\mathbf{n}_q - \mathbf{x}\|} = \infty \quad (5)$$

La suma del denominador en (4) tiene un solo término infinito, el correspondiente al nodo:

$$\lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{n}_q} \sum \frac{s_r(\mathbf{x})}{\|\mathbf{n}_r - \mathbf{x}\|} = \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{n}_q} \frac{s_q(\mathbf{x})}{\|\mathbf{n}_q - \mathbf{x}\|} = \infty \quad (6)$$

Entonces:

$$\begin{aligned} \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{n}_q} \phi^q(\mathbf{x}) &= 1 \\ \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{n}_r} \phi^q(\mathbf{x}) &= 0 \end{aligned} \quad (7)$$

Para que la definición soporte a los nodos, se puede ampliar poniendo:

$$\phi^q(\mathbf{n}_r) = \delta_q^r \quad (8)$$

En cualquier interpolante, la propiedad de la delta de Kronecker implica que la función evaluada en un nodo resultará igual a la variable asignada al nodo^{viii}:

$$\mathbf{f}(\mathbf{n}_r) \approx \mathbf{f}_q \delta_r^q = \mathbf{f}_r. \quad (9)$$

b) Partición de la unidad.

Como ya se explicó que está garantizada por la definición.

$$\sum_q \phi^q(\mathbf{x}) = 1 \quad (10)$$

c) Coordenada local.

$$\mathbf{x} = \mathbf{n}_q \phi^q(\mathbf{x}) \quad (11)$$

Por el teorema de la divergencia de Gauss, la integral de las áreas orientadas de una superficie cerrada es nula; la versión discreta, para poliedros, se conoce como teorema de Minkowski.

^{viii} 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.

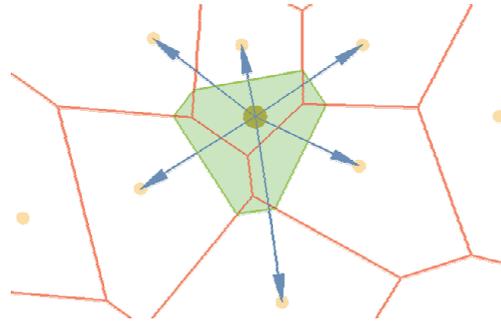


Figura 4: teorema de Minkowski sobre el polígono de Voronoi del punto de cálculo

Aplicado al poliedro del punto móvil^{ix}, una cara es mediatriz perpendicular al segmento que une el punto con un nodo vecino, la normal es un versor definido por el segmento:

$$\mathbf{0} = \sum s_q \frac{(\mathbf{n}_q - \mathbf{x})}{\|\mathbf{n}_q - \mathbf{x}\|} = \sum \Phi^q (\mathbf{n}_q - \mathbf{x}) = \Phi^q \mathbf{n}_q - \mathbf{x} \sum \Phi^q \Rightarrow \mathbf{x} = \phi^q \mathbf{n}_q \quad (12)$$

La denominación de “coordenadas” se puede explicar ahora, considerando al punto variable como un vector en un espacio n -dimensional cuya base es el conjunto \mathbf{P} , de n nodos y sus coordenadas son las funciones de forma.

Las propiedades a), b) y c) juntas (linear completeness) garantizan que se pueda representar exactamente cualquier función lineal. Si \mathbf{t} es un tensor constante, (\cdot) representa producto o contracción y tanto la constante \mathbf{c} como la función \mathbf{l} son tensores del orden adecuado, resulta entonces:

$$\mathbf{l}(\mathbf{x}) \approx \mathbf{l}_q \phi^q(\mathbf{x}) = \sum (\mathbf{t} \cdot \mathbf{n}_q + \mathbf{c}) \phi^q(\mathbf{x}) = \mathbf{t} \cdot (\mathbf{n}_q \phi^q(\mathbf{x})) + \mathbf{c} \sum \phi^q(\mathbf{x}) = \mathbf{t} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{c} = \mathbf{l}(\mathbf{x}) \quad (13)$$

Esto es: la función lineal interpolada en un punto es idéntica a la función en el punto.

d) Semi-definidas positivas:

La definición, basada en áreas y distancias positivas, garantiza que:

$$\phi^q \geq 0 \quad (14)$$

Las propiedades b) y d) implican que la función se mantendrá entre el mínimo y el máximo de los valores nodales:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}(\mathbf{x}) &\leq \sum_q \max(\mathbf{f}_r) \phi^q(\mathbf{x}) = \max(\mathbf{f}_r) \\ \mathbf{f}(\mathbf{x}) &\geq \sum_q \min(\mathbf{f}_r) \phi^q(\mathbf{x}) = \min(\mathbf{f}_r) \end{aligned} \quad (15)$$

e) Continuidad.

Una Φ^q no nula disminuye con suavidad C^∞ a medida que el punto se aleja del correspondiente nodo. Analizando la Figura 3, puede verse que alejando el punto de un nodo,

^{ix} Supuesto finito, es decir con el punto dentro del \mathbf{H} de los nodos.

la interfase se achica entre segmentos de Voronoï 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 de un nodo son positivas en el interior del entorno natural del nodo y nulas en la frontera y fuera de él. Entre esferas varía con suavidad C^∞ y en la superficie de las esferas es continua.

4 FUNCIONES DE FORMA EN MALLAS POLIEDROS

Una poliedrización de un conjunto de nodos es una partición de su convex-hull en poliedros con las mismas condiciones impuestas a la triangulación. En el método de elementos finitos (FEM) se suelen utilizar diversos elementos poliédricos que no necesariamente son tetraedros Delaunay ni **poliedros esféricos** (donde todos los nodos están en la misma esfera vacía).

Existen muchas causas que justifican el uso de poliedros no Delaunay o no esféricos:

- Una malla de tetraedros Delaunay presenta algunos elementos aplastados llamados “slivers”, que si no se tratan de forma especial invalidan la calidad de la malla. Además, la mayoría de los generadores de mallas respetan la frontera del dominio que viene dada por medio de una triangulación. Ambos procesos de corrección implican que la malla resultante no será Delaunay.
- En fluidodinámica (CFD) se requieren mallas anisotrópicas sobre las superficies sólidas donde se quiere capturar el comportamiento de la capa límite.
- Por supuesto, no serán esféricos los elementos que provee un generador de prismas o de hexaedros o los así llamados “almost-all hexahedral mesh generators”, que proveen una mezcla de cubos, pirámides y, a veces, elementos llamados “knives” que son cubos con una cara aplastada por una diagonal.
- En la EDT⁶, con grandes tolerancias para unir esferas parecidas, se producirán poliedros no esféricos.

En un elemento estándar, las funciones de forma se definen en un master o patrón, que es un poliedro o polígono del mismo tipo (idéntica conectividad entre los 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 del 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 punto solo son distintas de cero en el interior del elemento que contiene al punto. Las coordenadas Laplacianas no cumplen con esa condición; lo cual dificulta, entre otras cosas, la imposición

de condiciones de borde, pues la función interpolada tiene valor no nulo en la unión de las esferas de Voronoï del nodo, fuera del convex-hull del elemento y fuera de la malla.

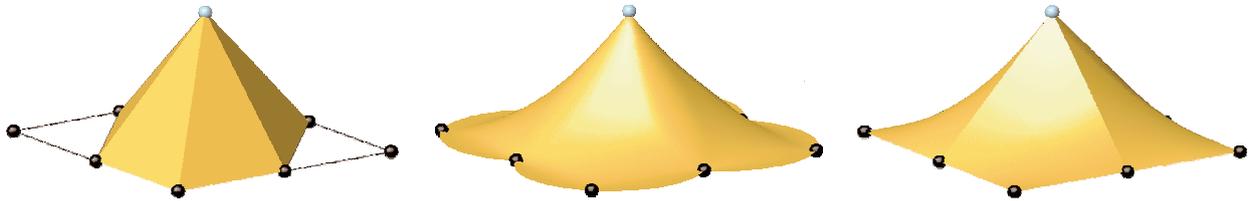


Figura 5: función de forma en el nodo central de una disposición cuadrada
Izquierda: elementos finitos triangulares. Centro: coordenadas Laplacianas. Derecha: CL limitadas al elemento.

La solución consiste en limitar 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.

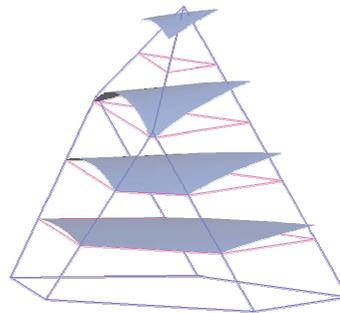


Figura 6: función de forma del nodo superior de un poliedro.

La definición de las funciones de forma es la misma que se utilizó para las coordenadas Laplacianas. Las coordenadas Laplacianas se calculan como antes, pero según el diagrama de Voronoï del conjunto formado por el punto y los nodos del elemento, sin considerar ningún nodo externo.

4.1 Cálculo de las funciones de forma y sus derivadas

Para mostrar las ecuaciones se supondrá siempre el origen de coordenadas en el punto variable:

$$\mathbf{v} = (\mathbf{v} - \mathbf{x}) \tag{16}$$

Al derivar respecto de \mathbf{x}^i ($i \in \{1, 2, 3\}$) debe tenerse en cuenta que el punto está restado implícitamente a todo vector:

$$\partial_i \mathbf{v} = -\mathbf{e}_i \tag{17}$$

4.1.1 Cálculo de la esfera

Dados cuatro puntos en tres dimensiones $\{\mathbf{x}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3\}$, si \mathbf{x} se considera origen de coordenadas, la ecuación de un punto cualquiera \mathbf{p} de la superficie de la esfera que definen es:

$$(\mathbf{p} - \mathbf{c})^2 = r^2 = \mathbf{c}^2 \quad (18)$$

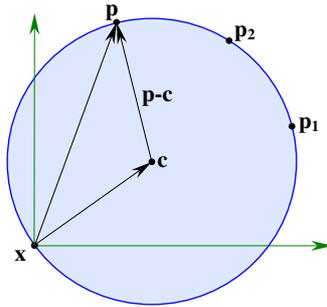


Figura 7: definición de una circunferencia por tres puntos

La ecuación (18) se puede expandir para obtener un sistema de tres ecuaciones:

$$\mathbf{p}_q \cdot \mathbf{c} = \mathbf{p}_q^2 / 2 \quad (q \in \{1, 2, 3\}) \Rightarrow \mathbf{c} \Rightarrow r = \|\mathbf{c}\| = \sqrt{\mathbf{c} \cdot \mathbf{c}} \quad (19)$$

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

Las derivadas del centro de la esfera respecto de un punto de definición se obtienen resolviendo el sistema de ecuaciones derivadas de la ecuación (19):

$$\mathbf{p}_q \cdot \partial_i \mathbf{c} = (\mathbf{c} - \mathbf{p}_q) \cdot \mathbf{e}_i = (\mathbf{c} - \mathbf{p}_q)^i \quad (20)$$

La misma rutina que calcula los centros, calcula al mismo tiempo las derivadas.

El determinante de los coeficientes es, en ambos casos, el producto triple de los tres vectores (seis veces el volumen del tetraedro), habrá entonces indeterminación numérica cuando los puntos sean casi coplanares o cuando haya puntos demasiado cerca.

4.1.2 Cálculo de las funciones de forma

El cálculo se basa en la secuencia circular de caras del poliedro que inciden sobre cada nodo del mismo. Se construye una esfera con el punto variable \mathbf{x} y cada cara^x del poliedro, los centros son vértices de la región de Voronoi, \mathbf{V}_x , asociada al punto variable.

^x 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.

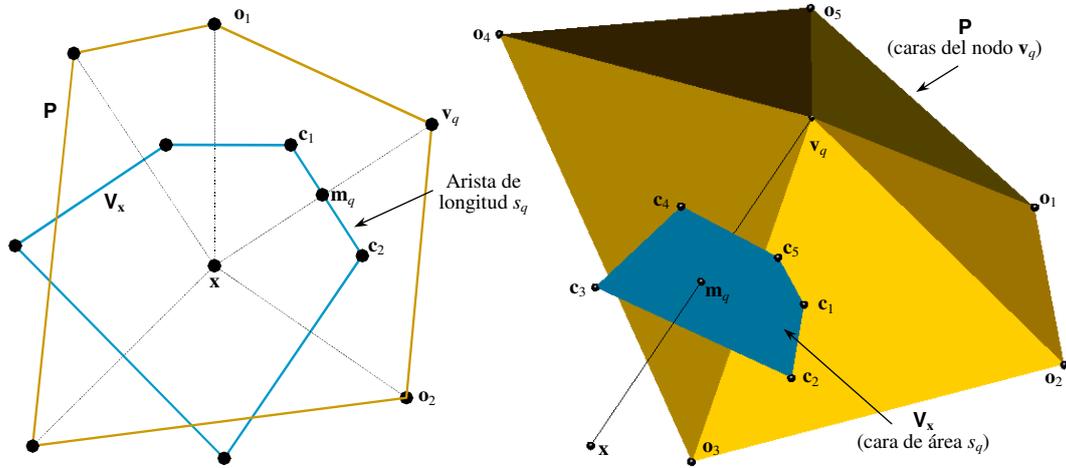


Figura 8: elementos para la definición de función de forma en 2 y 3 dimensiones.

La figura muestra los elementos que se utilizan para calcular las funciones de forma. A la izquierda, en 2D, se representan el polígono \mathbf{P} y la región de Voronoï \mathbf{V}_x correspondiente al punto. A la derecha el poliedro se ve desde el interior y sólo se muestran las caras que contienen a un vértice y la correspondiente cara de \mathbf{V}_x que parte por la mitad al segmento que une el punto y el nodo.

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

Por cada nodo, vértice \mathbf{v}_q del poliedro \mathbf{P} , con $q \in \{1, \dots, m\}$, hay una cara de \mathbf{V}_x , de medida s_q , cuyo plano corta perpendicularmente y por la mitad al segmento $(\mathbf{x}, \mathbf{v}_q)$ en el punto \mathbf{m}_q .

$$\mathbf{m}_q = \mathbf{v}_q / 2. \tag{21}$$

El conjunto de e vértices \mathbf{o}_p ($p \in \{1, \dots, e\}$), incidentes sobre \mathbf{v}_q , se puede poner en secuencia circular al igual que los centros \mathbf{c}_p de las e esferas definidas por \mathbf{x} , \mathbf{v}_q y cada par contiguo $(\mathbf{o}_p, \mathbf{o}_{p \oplus 1})^{\text{xi}}$ de nodos adyacentes. Con ello, la superficie s_q se puede calcular subdividiéndola en triángulos de área s_{qp} , definidos por cada arista $(\mathbf{c}_p, \mathbf{c}_{p \oplus 1})$ y el punto medio \mathbf{m}_q del segmento $(\mathbf{x}, \mathbf{v}_q)$:

$$s_q = \sum_p s_{qp}. \tag{22}$$

Las funciones que definen las coordenadas Laplacianas quedan como sigue:

$$\Phi^q = \frac{\sum_p s_{pq}}{\|\mathbf{v}_q\|} \tag{23}$$

Cada triángulo de área s_{pq} puede ser visto como la base de un tetraedro de volumen v_{pq} y

^{xi} Las sumas \oplus ciclan entre los índices en el orden circular antes mencionado, de modo que $\mathbf{o}_{p \oplus 1}$ es el vértice posterior a \mathbf{o}_p y, si $p = e$ (el último), entonces $\mathbf{o}_{p \oplus 1}$ es \mathbf{o}_1 .

altura $\|\mathbf{m}_q\|$, definido por los puntos $\{\mathbf{x}, \mathbf{m}_q, \mathbf{c}_p, \mathbf{c}_{p\oplus 1}\}$:

$$s_{pq} = \frac{3 v_{pq}}{\|\mathbf{m}_q\|} = \frac{(\mathbf{c}_p, \mathbf{c}_{p\oplus 1}, \mathbf{m}_q)}{2\|\mathbf{m}_q\|} = \frac{(\mathbf{c}_p, \mathbf{c}_{p\oplus 1}, \mathbf{v}_q)}{2\|\mathbf{v}_q\|} \quad (24)$$

Omitiendo el factor 2 que se eliminará entre el numerador y el denominador de la ecuación (4), para calcular las funciones de formas se implementa la siguiente ecuación:

$$\Phi^q = \frac{\sum_p (\mathbf{c}_p, \mathbf{c}_{p\oplus 1}, \mathbf{v}_q)}{\mathbf{v}_q^2} = \sum_p (\mathbf{c}_p \times \mathbf{c}_{p\oplus 1}) \cdot \frac{\mathbf{v}_q}{\mathbf{v}_q^2} \quad (25)$$

Para calcular las derivadas se necesitan las del centro de las esferas definidas por el punto variable \mathbf{x} , y por $\mathbf{v}_q, \mathbf{o}_p$ y $\mathbf{o}_{p\oplus 1}$, que se obtienen de la ecuación (20). Finalmente, las derivadas de las funciones de forma se calculan con las siguientes fórmulas:

$$\partial_i \Phi^q = \frac{\sum_p (\partial_i \mathbf{c}_p \times \mathbf{c}_{p\oplus 1} + \mathbf{c}_p \times \partial_i \mathbf{c}_{p\oplus 1}) \cdot \mathbf{v}_q - (\mathbf{c}_p \times \mathbf{c}_{p\oplus 1})^i}{\mathbf{v}_q^2} + \frac{2 (\mathbf{c}_p, \mathbf{c}_{p\oplus 1}, \mathbf{v}_q) \mathbf{v}_q^i}{\mathbf{v}_q^4} \quad (26)$$

$$\partial_i \phi^q = (\partial_i \Phi^q \sum_r \Phi^r - \Phi^q \sum_r \partial_i \Phi^r) / (\sum_r \Phi^r)^2 \quad (27)$$

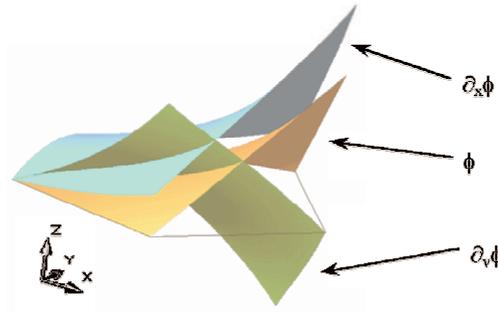


Figura 9: función de forma y derivadas en un pentágono.

4.2 Propiedades

La definición y las propiedades de las funciones de forma son las que se presentaron en el capítulo en 3, permanecen inalteradas. Pero la limitación a los nodos del poliedro implica que el convex-hull del conjunto está muy cerca y debemos analizar las propiedades de los interpolantes cuando el nodo se aproxima a una interfase entre elementos. Además se analizarán las implicancias de utilizar “a ciegas” la expresión (25) para el cálculo de las funciones.

4.2.1 Continuidad entre elementos

Las coordenadas Laplacianas estándar se anulan en los límites del entorno natural del nodo,

las restringidas se anulan en los límites del poliedro, ambas presentan discontinuidades evitables en el convex-hull de sus respectivos dominios. El análisis que sigue es válido, tanto para las funciones de forma en la frontera del poliedro, como para las coordenadas Laplacianas estándar en los límites del convex-hull del conjunto completo de nodos.

Cuando el punto de cálculo se aproxima a una cara del poliedro, las funciones de forma de los nodos de esa cara tienden a las funciones de forma bidimensionales. Si el punto se acerca al plano \mathbf{C} de la cara $\{\mathbf{v}_q, \mathbf{v}_r, \mathbf{v}_s\}$, 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:

$$\lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{C}} \frac{s_t(\mathbf{x})}{\|\mathbf{v}_t - \mathbf{x}\|} = \infty \Leftrightarrow t \in \{q, r, s\} \quad (28)$$

La suma del denominador de la ecuación (4) resulta también infinita:

$$\lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{C}} \sum \frac{s_t(\mathbf{x})}{\|\mathbf{v}_t - \mathbf{x}\|} = \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{C}} \left(\frac{s_q(\mathbf{x})}{\|\mathbf{v}_q - \mathbf{x}\|} + \frac{s_r(\mathbf{x})}{\|\mathbf{v}_r - \mathbf{x}\|} + \frac{s_s(\mathbf{x})}{\|\mathbf{v}_s - \mathbf{x}\|} \right) = \infty, \quad (29)$$

por lo tanto, se define:

$$\phi^t(\mathbf{x} \in \mathbf{C}) = \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{C}} \frac{\frac{s_t(\mathbf{x})}{\|\mathbf{v}_q - \mathbf{x}\|}}{\frac{s_q(\mathbf{x})}{\|\mathbf{v}_q - \mathbf{x}\|} + \frac{s_r(\mathbf{x})}{\|\mathbf{v}_r - \mathbf{x}\|} + \frac{s_s(\mathbf{x})}{\|\mathbf{v}_s - \mathbf{x}\|}} \Leftrightarrow t \in \{q, r, s\}, \quad (30)$$

$$\phi^t(\mathbf{x} \in \mathbf{C}) = 0 \Leftrightarrow t \notin \{q, r, s\} \quad (31)$$

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 en la medida en que ese límite sea finito.

El centro de la esfera infinitamente alejada es un vértice 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 $(\mathbf{x}, \mathbf{v}_q)$ es perpendicular al triángulo 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 tienen por límite a la región de Voronoï bidimensional del punto en la cara:

$$\phi^q_{3D}(\mathbf{x} \in \mathbf{C}) = \frac{\frac{l_q(\mathbf{x})}{\|\mathbf{v}_q - \mathbf{x}\|}}{\frac{l_q(\mathbf{x})}{\|\mathbf{v}_q - \mathbf{x}\|} + \frac{l_r(\mathbf{x})}{\|\mathbf{v}_r - \mathbf{x}\|} + \frac{l_s(\mathbf{x})}{\|\mathbf{v}_s - \mathbf{x}\|}} = \phi^q_{2D}(\mathbf{x}), \text{ bidimensional en } \mathbf{C} \quad (32)$$

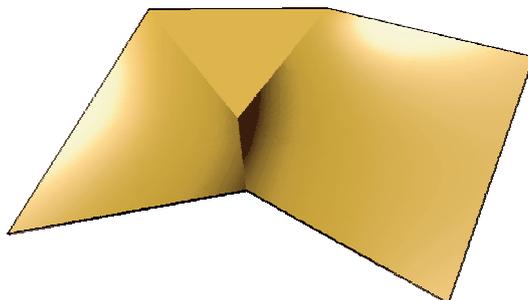


Figura 10: función de forma del nodo común a un triángulo, un cuadrilátero y un pentágono.

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

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. 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: la función de forma tiende a la bidimensional del punto en el polígono.

Para preparar la Figura 6 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 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 13 y se explicará con más detenimiento después de analizar otras propiedades.

4.2.2 Coordenadas locales

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

Revisando la ecuación (12) y la Figura 4, se puede deducir que cualquier poliedro cerrado, con caras ordenadamente perpendiculares a los “vecinos” del punto, sirve para definir coordenadas locales con esos vecinos. 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.

Aquí solo analizaremos el caso que nos compete: la utilización de los nodos del poliedro que contiene al punto (sea o no un elemento dual del diagrama de Voronoï) no altera la propiedad de ser coordenadas locales.

Otro aspecto a analizar es la posible inversión de la secuencia de centros. En la Figura 11 se ve un caso de inversión parcial del **poliedro de centros**: el poliedro (no-Voronoï) formado por la secuencia circular de centros que utiliza la ecuación (25). El polígono se autointercepta,

en este caso, porque el nodo de la derecha del cuadrilátero no es vecino natural del punto de cálculo.

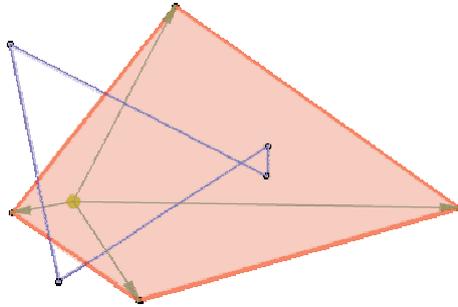


Figura 11: secuencia de centros formando un polígono invertido

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 de la función según la ecuación (25) calculará la medida del segmento según el área de un triángulo que en este caso está invertido, por lo tanto la ecuación evalúa correctamente las funciones aún en este caso.

4.3 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 Voronoi de los vértices y sólo si el poliedro es convexo.

En la Figura 12 se presenta un problema en un cuadrilátero con sus nodos bien alejados de la coesfericidad y un punto interior variable, en el cual se calcularán las funciones de forma. El punto se mueve hacia la izquierda atravesando la esfera de los tres nodos de la derecha del cuadrilátero. En el interior, al acercarse a la esfera, el segmento del diagrama de Voronoi que corresponde al nodo más alejado disminuye, anulándose cuando el punto variable alcanza la esfera. Ya en el exterior de la esfera, 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 Voronoi. Lo mismo sucede también en tres dimensiones.

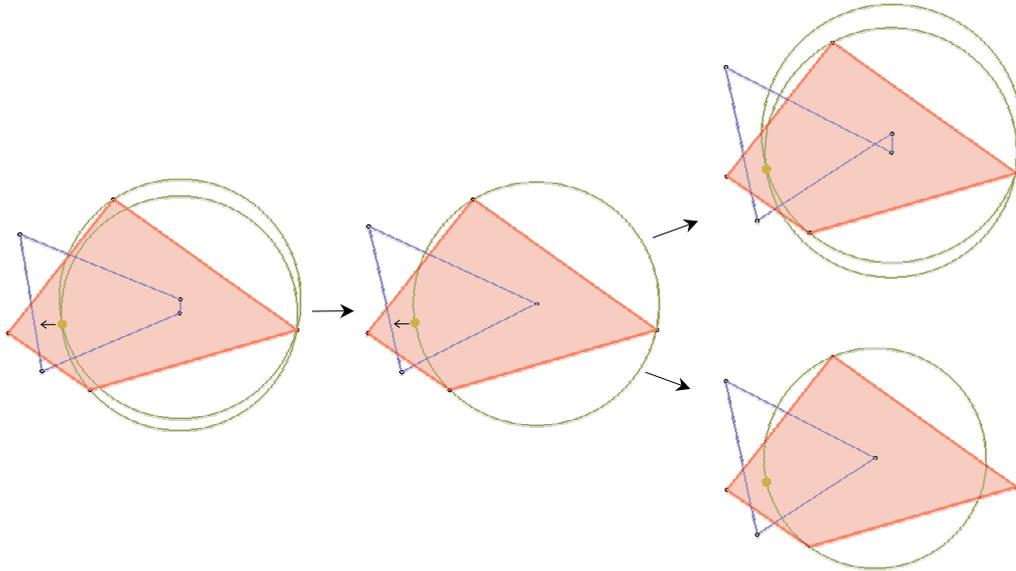


Figura 12: polígono no esférico con punto de cálculo saliendo de la intersección de todas las esferas.
Arriba: polígono de centros. Abajo: poliedro de voronoï

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

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

a) Al primer caso le corresponde la figura de arriba con todas las distancias positivas. Cuanto más se aleje el punto del nodo derecho, más crecerá la medida 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.

b) La segunda opción consiste en aplicar la ecuación (25) para el cálculo de las funciones de forma. La medida del segmento invertido resulta negativa pues deviene del área negativa de un triángulo invertido. La correspondiente función de forma también resulta negativa y eso trae aparejado un problema: Las funciones de forma ya no son definidas positivas y la extrapolación impide asegurar que la función se mantendrá acotada entre el mínimo y el máximo de los valores nodales. Pero si los poliedros no distan mucho de la esfericidad, los valores negativos no serán altos y este problema no tendrá grandes consecuencias prácticas. Por otra parte, y tal como se mostró en 4.2.2, las funciones así calculadas conservan la propiedad de coordenada local.

En la Figura 12, arriba, el triángulo grande del polígono de centros es el de Voronoï, pues el punto de autointersección equidista del punto de cálculo y de los nodos superior e inferior. El triángulo pequeño, es el poliedro de centros invertido del punto de calculo en el triángulo formado por los tres nodos de la derecha del cuadrilátero.

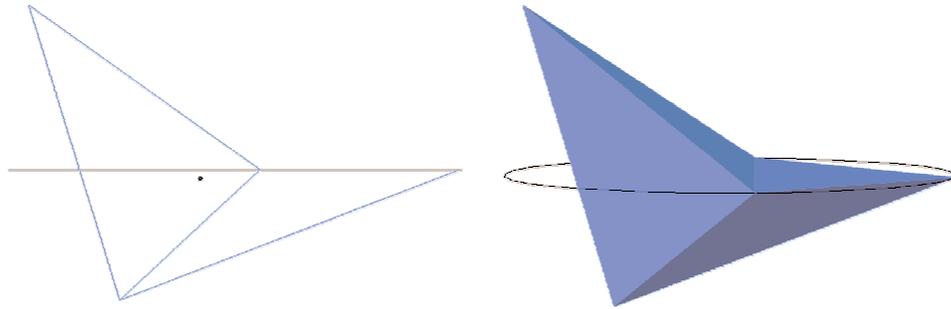


Figura 13: punto de cálculo cerca del plano de una cara

Un problema distinto, pero asociado con esta implementación, se produce con los poliedros cóncavos. Los poliedros cóncavos siempre tienen cruzado el poliedro de centros. La causa no es la falta de coesfericidad de los nodos, que pueden formar un poliedro cóncavo aún siendo coesféricos. El poliedro de Voronoï se forma como si existiese el tetraedro que rellena la concavidad, ese tetraedro debería estar en una correcta triangulación Delaunay de los nodos del poliedro.

En la Figura 13 se ilustra un poliedro esférico cóncavo, cuyo centro geométrico se encuentra en el interior del poliedro y en el interior 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 tiene errores también muy grandes. En la Figura 14, se muestran el poliedro de centros y el de Voronoï.

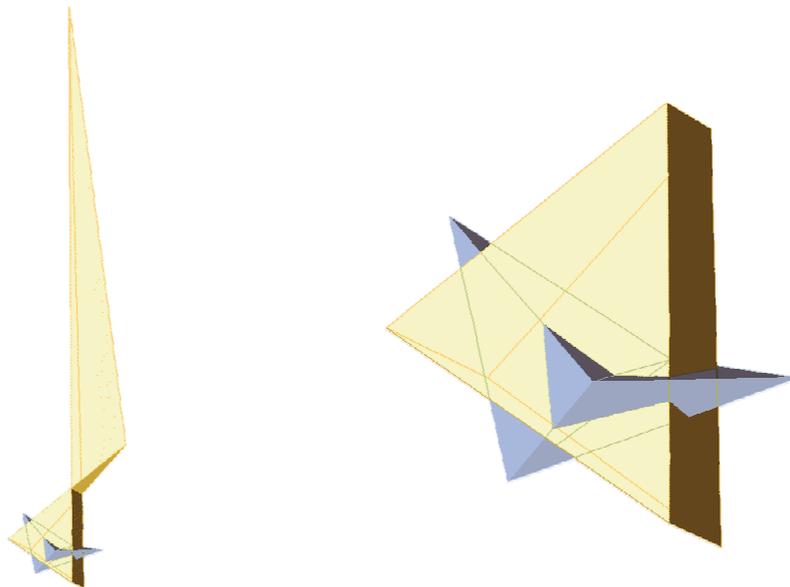


Figura 14: punto de cálculo cerca del plano de una cara (ver Figura 13).
Izquierda: poliedro de centros. Derecha: poliedro de Voronoï

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 corresponden a las caras de la concavidad. El poliedro de centros esta formado por dos piezas: una es el poliedro de Voronoï y la otra el poliedro invertido del punto respecto al tetraedro faltante.

Como ya se explicó en 4.2.1, aparece una discontinuidad evitable en la función de forma cuando el punto atraviesa el plano de una cara. Ya se puede asegurar que 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.

En la práctica, el problema no es la inversión 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.

c) La tercera opción consiste en utilizar el diagrama de Voronoï. Fuera de la intersección del conjunto de esferas, se debe anular la función de forma de los nodos cuyas esferas no contienen al punto y calcular el resto de las funciones 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. Tal comportamiento es inconsistente con lo que se espera de las funciones de forma para el FEM.

4.4 Conclusión:

Ninguno de los tres métodos de cálculo de las funciones de forma está exento de complicaciones. En la implementación de la EDT que realizamos se utiliza la segunda opción después de eliminar las grandes concavidades que puedan comprometer a los puntos de integración. Las propiedades esenciales de las funciones de forma se mantienen intactas.

Ese mecanismo hace posible utilizar las misma rutinas de cálculo geométrico para cualquier malla, siempre que los poliedros no sean excesivamente cóncavos o previendo la ubicación de los puntos de integración lejos de las caras.

5 REFERENCIAS

- [1] H. Hiyoshi, *Study on interpolation based on Voronoi diagrams*, Ph.D. Thesis, Dept. Mathematical Engineering and Information Physics, Univ. Tokyo, 2000.
- [2] 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).
- [3] 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).

- [4] N. Sukumar, B. Moran, A. Yu. Semenov, V.V. Belikov, *Natural neighbour Galerkin methods*, Int. J. Numer. Meth. Eng., **50(1)**, 1-27 (2001).
- [5] S. Idelsohn, E. Oñate, N. Calvo and F. Del Pin, *The meshless finite element method*, Int. J. Numer. Meth. Eng. **58(6)**, 893-912 (2003).
- [6] N. Calvo, S. R. Idelsohn and E. Oñate, *The extended Delaunay tessellation*, Eng. Comp. **20(5/6)**, 583-600 (2003).