100cias@uned
Facultad de Ciencias

Nuestra Facultad

N.º 10 (2017)
ISSN: 1989-7189

TESIS DOCTORALES

TRANSFORMATION METHODS FOR THE INTEGRATION OF SINGULAR AND NEAR-SINGULAR FUNCTIONS IN XFEM. MÉTODOS DE TRANSFORMACIÓN PARA LA INTEGRACIÓN DE FUNCIONES SINGULARES Y CASI-SINGULARES EN XFEM

INTRODUCCIÓN

Las fórmulas de integración de tipo gausiano tienen como propósito aproximar el valor numérico de la integral de una función en un determinado intervalo [a,b]. La integral se calcula como combinación lineal de evaluaciones del integrando en puntos adecuados del intervalo

$$\int_a^b f(x) \approx \sum_{i=1}^{k} w_i f(x_i)$$

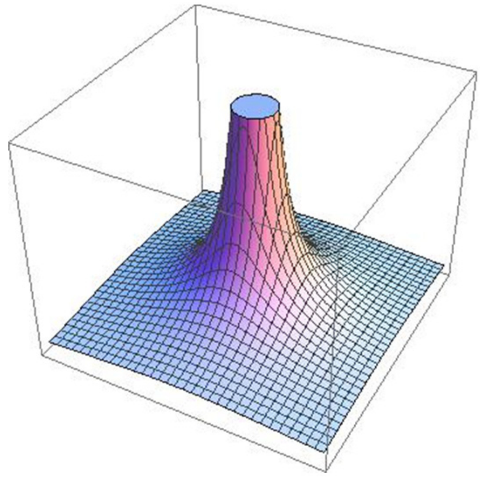
donde k es el orden de la fórmula, los coeficientes w_i son los pesos y los puntos x_i son los nodos. El error cometido al aproximar por una fórmula de orden k está acotado por el valor máximo de la derivada de orden 2k del integrando:

$$E(f) = e_{2k} \sup\left|f^{(2k)}(x)\right|$$

En el Método de Elementos Finitos (FEM), resulta necesario extender la integración a funciones de varias variables, normalmente dos y tres variables. Esto significa que los dominios de integración ya no son intervalos de la recta, sino recintos más generales, tales como triángulos y cuadriláteros en 2D, y tetraedros, pirámides o paralelepípedos en 3D. Esto plantea un primer problema geométrico, en caso de que estos recintos tengan formas distorsionadas, muy alargadas o deformadas, que dificulten su integración numérica.

Asimismo, en el ámbito del Método de Elementos Finitos eXtendidos (XFEM), y del Método de Elementos de Frontera (BEM), resulta necesario calcular integrales de funciones singulares (que toman valores infinitos en uno o varios puntos del recinto) o funciones casi-singulares (que toman valores arbitrariamente grandes, aunque finitos) en dicho recinto.

A



B

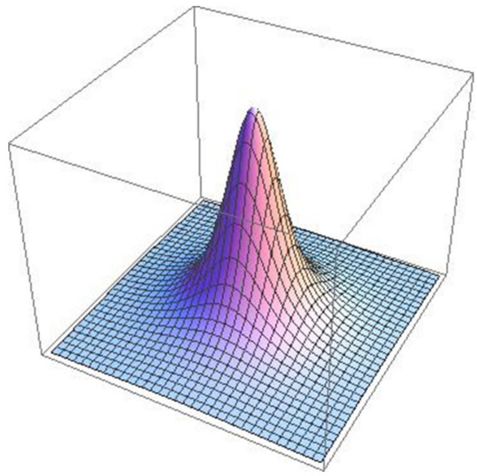


Figura 1. (A) *Función singular.* (B) *Función casi-singular.*

Para estos integrandos, tanto la función como sus derivadas sucesivas presentan crecimientos descontrolados, o comportamientos altamente oscilatorios, tomando valores arbitrariamente grandes. En consecuencia, la cota de error aumenta y las técnicas convencionales de integración no son capaces de producir resultados con la precisión deseada.

El estudio de técnicas eficientes de integración numérica en estos casos desfavorables, con recintos de integración deformados e integrandos no suaves, resulta del máximo interés, puesto que las aplicaciones de XFEM y BEM se extienden a numerosos campos como el cálculo de grietas en sólidos, dinámica de fluidos, cálcu-

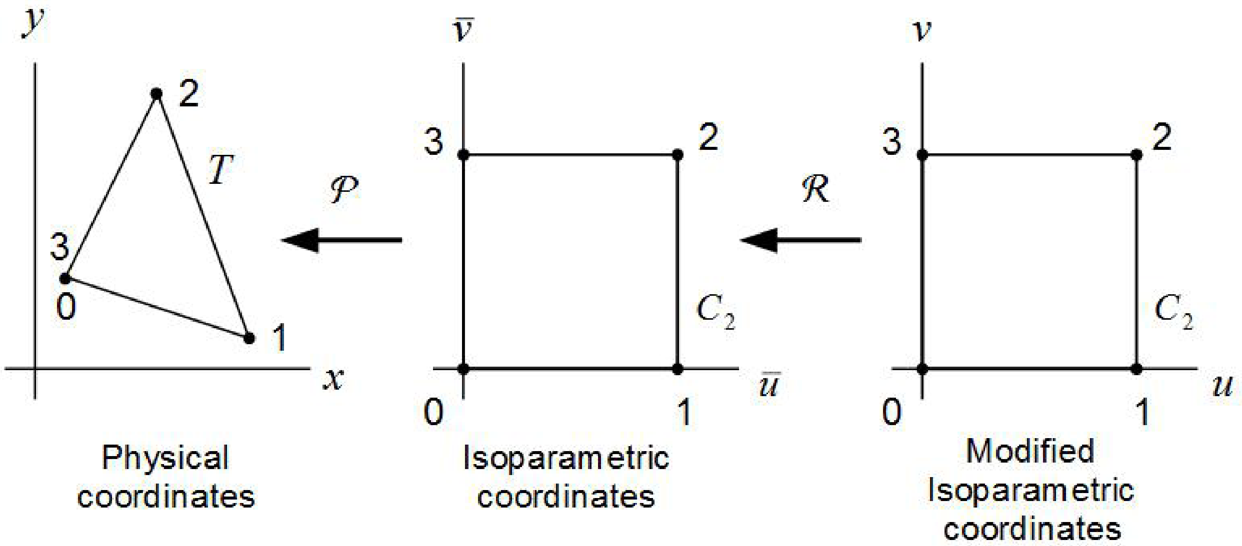


Figura 2. Transformaciones de regularización geométrica y algebraica.

lo del potencial y el flujo en Física aplicada, resolución de problemas en antenas, aplicaciones aeronáuticas, etc.

El propósito de esta tesis es el planteamiento de métodos de transformación de variables que lleven a cabo una doble regularización:

- Geométrica, expresando las integrales sobre recintos estándar (cuadrados en 2D y cubos en 3D)
- Algebraica, suavizando las (casi-)singularidades que puedan permanecer en el integrando después de la regularización geométrica.

Para la regularización geométrica se propone la forma más general del cambio de coordenadas que transforma cuadrados en triángulos (2D) y cubos en pirámides (3D). Por ello, este cambio de coordenadas recibe el nombre de transformación piramidal, $\mathcal{P}$.

Con respecto a la transformación de suavizado algebraico, se estudian las transformaciones ya conocidas en la literatura especializada, proponiendo nuevas transformaciones en algunos casos, y encontrando sus formas óptimas en otros. Esta transformación de regularizado, $\mathcal{R}$, mantiene invariante el recinto de integración estándar (cuadrados y cubos unitarios) obtenido con la transformación $\mathcal{P}$. El hecho de mantener invariante el recinto estándar ha permitido identificar situaciones en que la misma transformación ha sido propuesta por diferentes autores bajo formas aparentemente distintas.

LA REGULARIZACIÓN GEOMÉTRICA

En la tesis se parte de la bien conocida transformación isoparamétrica, que convierte cuadriláteros en cuadrados y hexaedros de caras curvas en cubos. Se consideran casos particulares, degenerados de esta transformación, con la condición de que sean homogéneos en una de las variables. La razón para ello es que si los integrandos son ellos mismos funciones homogéneas de las coordenadas, p.ej. los basados en la distancia euclídea, entonces el integrando transformado tiene sus variables separadas (al menos parcialmente), y su tratamiento posterior resulta más sencillo.

Se han propuesto transformaciones de este estilo desde los años 60 del siglo XX, incluso para el caso n-dimensional. En la mayoría de los casos su propósito es transformar símplices (tetraedros en n dimensiones) o n-pirámides de base plana en el n-cubo de lado unidad. En la tesis se prueba que el sólido más general sobre el que se puede plantear una transformación con la propiedad de homogeneidad en una variable es la n-pirámide con base isoparamétrica, que tiene como casos particulares a las pirámides y símplices de base plana. La Figura 3 ilustra los casos en dos y tres dimensiones.

Para el caso bidimensional se prueba la equivalencia entre la transformación piramidal y la transformación polar, de uso muy extendido en la integración (casi-)singular. Para el caso tridimensional se proporciona una fórmula explícita para el jacobiano de la transformación, que permite obtener condiciones necesarias y suficientes para la invertibilidad local de este cambio de coordenadas. Estas condiciones son de naturaleza algebraica, no iterativa, por lo que su verificación en las aplicaciones prácticas es inmediata.

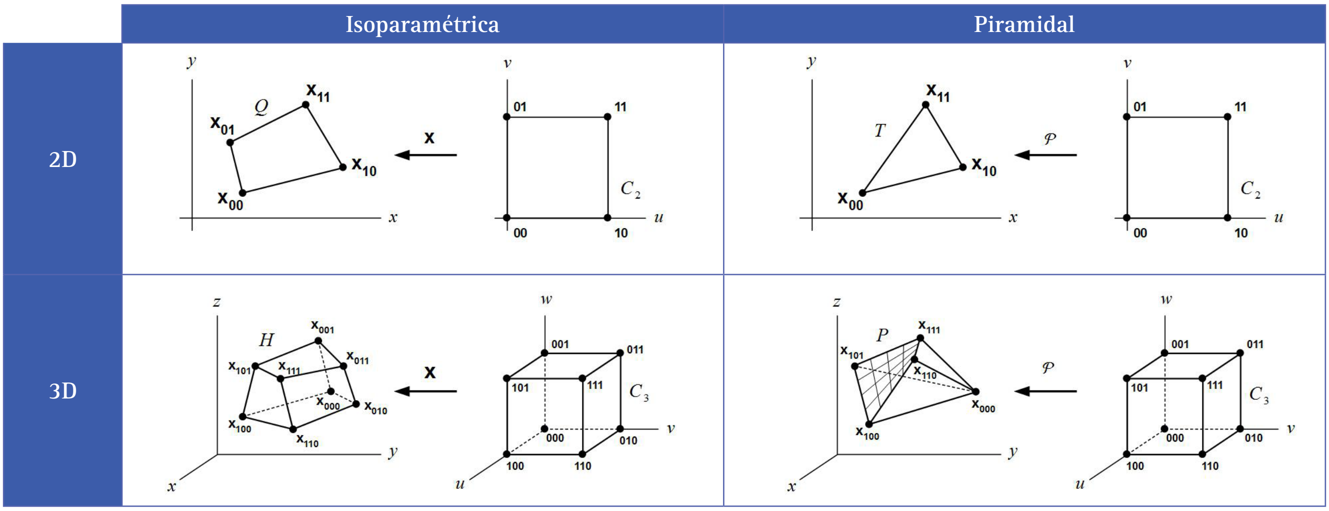


Figura 3. Transformaciones isoparamétrica y piramidal en 2 y 3 dimensiones.

LA REGULARIZACIÓN ALGEBRAICA

Como ya se ha mencionado, la transformación piramidal permite una regularización geométrica en el sentido de que las integrales en coordenadas x,y (en 2D) o x,y,z (en 3D), quedan expresadas sobre recintos estándar (cubo unitario) en coordenadas maestras $\bar{u},\bar{v}$ (en 2D) o $\bar{u},\bar{v},\bar{w}$ (en 3D). Además, el integrando queda, al menos parcialmente, factorizado en una parte radial y otra angular, que admiten tratamientos separados. El propio jacobiano de la transformación piramidal tiene las variables separadas, en un factor radial que sólo depende de la variable radial $\bar{u}$, y un factor angular que sólo depende de la variable angular $\bar{v}$ (en 2D) o $\bar{v},\bar{w}$ (en 3D).

En todo caso, las transformaciones de regularización se aplican por separado a las partes radial y angular del integrando transformado. Toman la forma de ecuaciones diferenciales ordinarias donde $\bar{u},\bar{v},\bar{w}$ son las variables dependientes y u,v,w las variables independientes. En la tesis se abordan tres problemas distintos:

1. Integral singular en 2D
2. Integral casi-singular en 2D
3. Integral singular en 3D

En el caso de las integrales singulares en 2D y 3D la transformación del factor radial (estrictamente singular) da lugar a un término polinómico en la variable independiente u, que resulta óptimo desde el punto de vista de la integración numérica ya que, como es sabido, todo polinomio se integra de forma exacta por una fórmula gausiana con el número adecuado de nodos.

En el caso de la integral casi-singular en 2D, la separación de variables no es completa. Más concretamente, el factor radial depende tanto de la variable radial $\bar{u}$ como de la variable angular $\bar{v}$. Por ello es necesario proceder primero al tratamiento del factor angular del integrando. Esta es una función casi-singular de $\bar{v}$ que ha sido objeto de un amplio estudio por parte de diferentes autores a lo largo de las últimas décadas. Se han propuesto diversas transformaciones, entre las que destacan la transformación cúbica, la de seno hiperbólico y la sigmoidal. Es posible caracterizar todas estas transformaciones en función del efecto que producen sobre los polos complejos del factor angular. Más concretamente, el efecto regularizador de una transformación es tanto mayor cuanto más se alejen los polos complejos del intervalo de integración.

Además de las transformaciones ya mencionadas, se propone una nueva transformación que produce una regularización completa del factor angular, haciendo que el mismo adopte una forma polinómica adecuada.

Una de las principales conclusiones de la tesis es que el factor angular en la integral singular en 2D tiene la misma forma que el correspondiente factor en la integral casi-singular en 2D. Se trata de una función con un pico muy pronunciado, cuya casi-singularidad es inducida por una forma desfavorable del recinto de integración (un triángulo distorsionado). Esto significa que el mismo conjunto de transformaciones ya propuestas para la integral casi-singular (principalmente cúbica y seno hiperbólico) se pueden usar también con la parte angular de la integral singular.

Respecto al factor radial de la integral casi-singular, se trata formalmente de la misma función que el factor

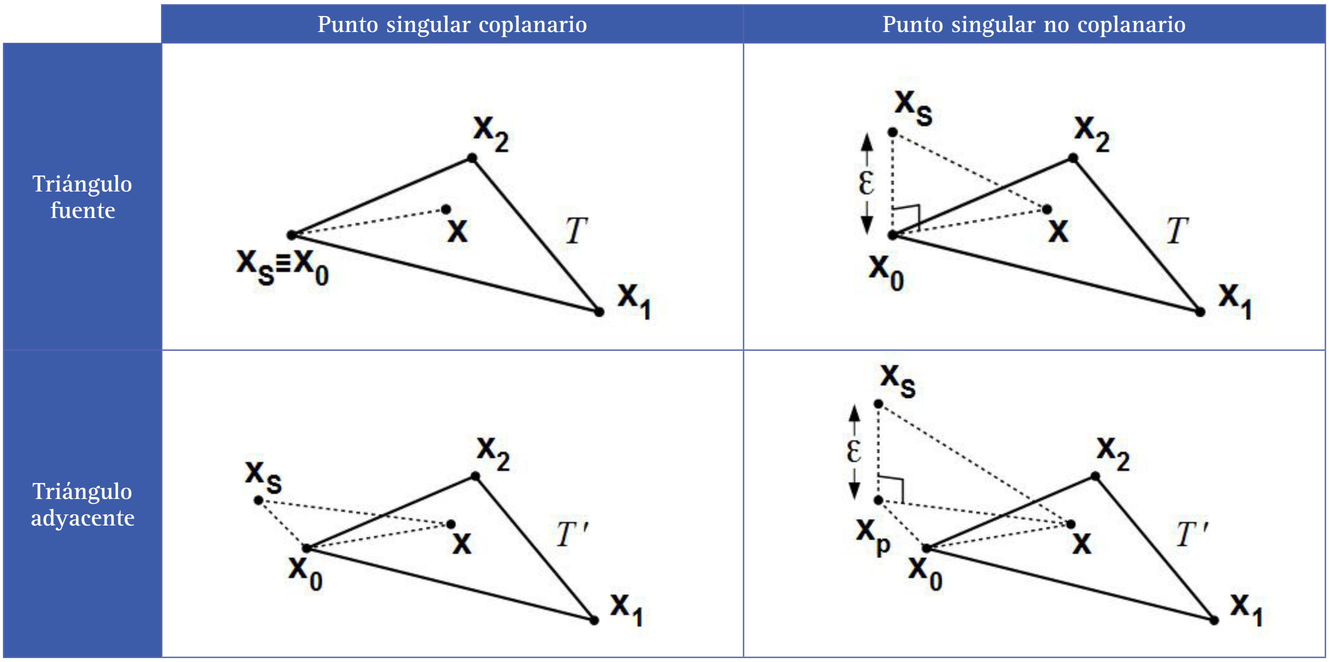


Figura 4. Geometría de los problemas singulares y casi-singulares.

angular, pero multiplicado por un factor lineal $\bar{u}$ que proviene del jacobiano de la transformación geométrica. En caso de no incluir este factor lineal, se pueden aplicar en este caso las mismas transformaciones usadas para el factor angular, más en concreto las transformaciones cúbica y seno hiperbólico, además de otra transformación basada en tangente. Si se incluye el factor lineal, también existen transformaciones sobre el integrando radial que han sido objeto de estudio detallado durante los últimos años. En la tesis se indican diversas modificaciones de estas transformaciones con las que se consigue mejorar la precisión de la integración numérica, y también se propone un nuevo esquema iterativo que da lugar a transformaciones con un rendimiento superior al de las transformaciones mencionadas.

Es interesante mencionar que las técnicas descritas para la integral casi-singular se pueden extender tanto a triángulos fuente, uno de cuyos vértices coincide con la proyección del punto singular, o triángulos adyacentes, en los cuales la proyección del punto singular es cercano, pero no coincide, con uno de esos vértices, tal como se ilustra en la Figura 4.

En el caso de la integral singular en 3D, el factor angular es una función de las dos variables angulares $\bar{v},\bar{w}$. El tratamiento completo de este factor parece quedar fuera del alcance de las técnicas desarrolladas en la tesis. Sin embargo, la restricción de este factor a la frontera del recinto de integración (borde del cuadrado unitario) está muy estrechamente relacionada con el mismo factor casi-singular descrito para las integrales anteriores. Por tanto, las mismas transformaciones ya conocidas (cúbica y seno hiperbólico) son aplicables también a la restricción a la frontera del factor angular bidimensional.

LA FORMA ÓPTIMA DE LA TRANSFORMACIÓN CÚBICA

La transformación cúbica fue propuesta inicialmente en 1987, pero no se disponía de una expresión analítica (exacta) para su forma óptima. Distintos autores han propuesto aproximaciones empíricas a dicha forma exacta, constatando el hecho de que una pequeña desviación sobre el valor óptimo da lugar a errores considerables en la integración numérica.

En el capítulo final de la tesis se proporciona la demostración de la expresión exacta de la forma óptima de la transformación cúbica, considerada como aquella que es capaz de alejar al máximo los polos complejos del factor angular casi-singular.

SIMULACIONES NUMÉRICAS

Todas las técnicas propuestas han sido sometidas a simulaciones numéricas exhaustivas, para cuantificar la mejora en rendimiento con respecto a los métodos existentes. En todos los casos se han considerado recintos de integración estándar, donde la mayoría de reglas de in-

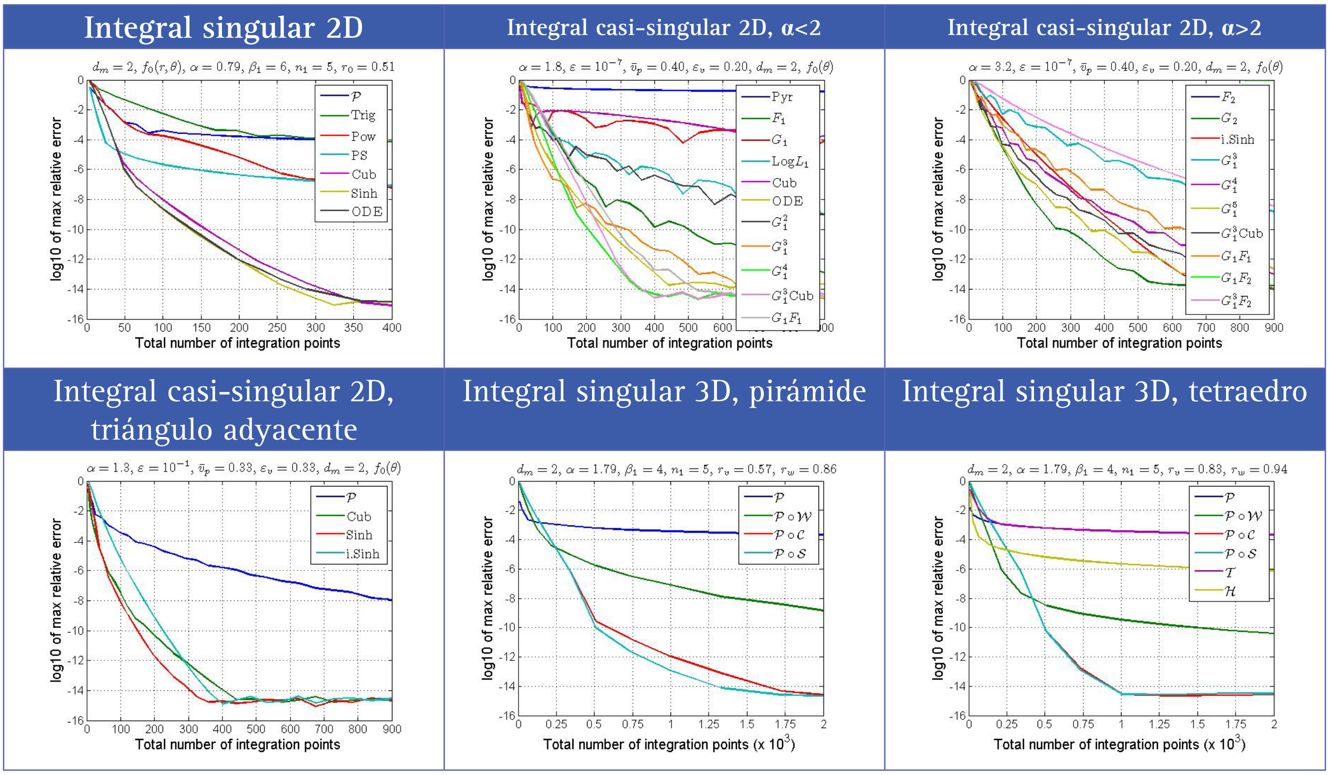


Figura 5. Simulaciones numéricas.

tegración presentan un buen comportamiento, junto con recintos más deformados, en los que se experimenta una degradación en el rendimiento ofrecido por los distintos algoritmos. También se han ensayado distintos tipos de integrando, comúnmente utilizados en las aplicaciones.

Estas simulaciones han permitido constatar que las técnicas propuestas en la tesis son capaces de superar en rendimiento, para la mayor parte de situaciones significativas, a las técnicas existentes desarrolladas previamente en la literatura.

Alfredo Cano Cancela
Dpto. de Estadística, Investigación Operativa y Cálculo Numérico