Mejora de la calidad de mallas para elementos finitos

Abel Coll Sans

11 de julio de 2003

Agradecimientos

En primer lloc vull agrair al meu tutor Josep Sarrate la dedicació que ha tingut en aquesta tesina. Ha estat un plaer passar tantes tardes amb ell davant l'ordinador. El tracte amb ell ha estat el d'un amic més que el d'un tutor.

També m'agradaría fer una menció especial als amics que he fet durant la carrera. Se'm fa impossible imaginar haver-la fet sense ells. L'amistat que tenim és el millor que m'emporto d'aquests anys. Son moltes hores de biblioteca, de classe, de bar... de vida. En especial vull agrair a l'Àlvar, l'Asti, l'Albert i a la Núria els moments tan especials que hem viscut.

Per últim, he d'agrair a la meva família el seu suport incondicional i el seu interès en la meva educació i formació.

Resumen

En el método de los elementos finitos (MEF) la generación de mallas es una tarea básica y con frecuencia extraordinariamente laboriosa. La geometría de la malla es uno de los factores que influyen en la precisión del resultado. Por un lado, el error de las soluciones obtenidas mediante el MEF depende del tamaño de los elementos. Por otro lado, para la mayoría de problemas la presencia de elementos distorsionados disminuye la precisión de la solución. Se define la distorsión de un elemento como el grado de desviación de dicho elemento respecto al elemento regular de referencia (por ejemplo, el cuadrado en mallas de cuadriláteros).

Por lo tanto, en la generación de mallas es necesario considerar la distorsión de los elementos. La relación entre el error y la distorsión depende fuertemente del problema que se analiza. Sin embargo, a nivel de generación de mallas es preciso definir una medida de la distorsión aplicable a cualquier tipo de problema. En consecuencia, una de las prioridades de todos los generadores de mallas es obtener elementos poco distorsionados. Desafortunadamente, la mayoría de generadores de mallas inicialmente obtienen elementos bastante distorsionados. Por lo tanto, es necesario "suavizar" la forma de los mismos mediante un algoritmo que disminuya su distorsión. Es en este aspecto de la generación de mallas para el MEF donde se enmarca el trabajo aquí desarrollado.

Esta tesina tiene dos objetivos. El primer objetivo es analizar el comportamiento de la medida de distorsión desarrollado por Oddy *et al.*[6] para mallas de cuadriláteros y de hexaedros e identificar los posibles problemas que puede presentar dicha medida cuando es minimizada mediante un método estándar de minimización.

El segundo objetivo es diseñar un método de suavizado basado en la minimización contínua de la distorsión de Oddy. Para ello, y de acuerdo con los resultados obtenidos en el primer objetivo, se deberá modificar la definición de la distorsión de Oddy cuando los elementos (cuadriláteros o hexaedros) presenten concavidades. La modificación de la función es diferente para el caso de cuadriláteros y para el de hexaedros, pero el procedimiento

seguido es análogo en ambos casos.

La primera tarea realizada ha sido el análisis de la medida de la distorsión desarrollada por Oddy *et al.*[6]. Aunque esta medida ha sido ampliamente utilizada presenta una serie de inconvenientes. No es posible emplear directamente la distorsión de Oddy en un programa de suavizado ya que esta medida no evalúa correctamente la distorsión de elementos degenerados. Por lo tanto, la segunda tarea ha consistido en modificar la distorsión de Oddy para que se pueda evaluar la distorsión de este tipo de elementos y se han conseguido solventar estos inconvenientes.

A partir de las modificaciones introducidas en la distorsión de Oddy se ha empleado una técnica de suavizado global tipo *Newton-Raphson*, mediante la cual se obtienen valores medios de distorsión menores que los obtenidos con otras técnicas de suavizado (Giuliani [4] y Giuliani modificado [9]).

Finalmente se presentan unos ejemplos numéricos que ponen de manifiesto la robustez y la eficacia del algoritmo desarrollado.

Índice general

1. Introducción **1**

1.1. Calidad geométrica de los elementos de una malla en el MEF . 2

1.2. Elementos estudiados 4

1.3. Objetivos 4

2. Medidas de calidad geométrica en mallas de cuadriláteros **7**

2.1. Introducción a las medidas de calidad de las mallas de cuadriláteros 7

2.1.1. Tipología de cuadriláteros distorsionados 8

2.1.2. Características mínimas a exigir a una medida de la calidad geométrica de cuadriláteros 10

2.2. Medida de la calidad geométrica de Oddy 11

2.3. Reinterpretación de la distorsión de Oddy 15

2.3.1. Distorsión de Oddy en el caso de paralelogramos 17

2.4. Definición de la distorsión de Oddy de un cuadrilátero 18

2.4.1. Cálculo geométrico de la distorsión de Oddy en un punto cualquiera de un cuadrilátero 18

2.4.2. Puntos de evaluación de la distorsión 19

2.4.3. Definición de la distorsión elemental 22

2.5. Limitaciones de la distorsión de Oddy 24

3. Medidas de calidad geométrica en mallas de hexaedros **35**

3.1. Introducción a las medidas de calidad de las mallas de hexaedros 35

3.1.1. Tipología de hexaedros distorsionados 35

3.1.2. Características mínimas a exigir a una medida de calidad geométrica de hexaedros 36

3.2. Reinterpretación de la distorsión de Oddy 37

3.2.1. Distorsión de Oddy en el caso de paralepípedos 37

3.3. Definición de la distorsión de Oddy de un hexaedro 38

3.3.1. Cálculo geométrico de la distorsión de Oddy en un punto cualquiera de un hexaedro 38

3.3.2. Puntos de evaluación de la distorsión 39
3.3.3. Definición de la distorsión elemental 44
3.4. Limitaciones de la distorsión de Oddy 44

4. Aplicación de la distorsión de Oddy como medida de calidad en el suavizado de mallas de cuadriláteros y de hexaedros 49
4.1. Concepto de suavizado. Técnicas actuales de suavizado 49
4.2. Suavizado de una malla a partir de la minimización de una medida de calidad geométrica global 52
4.3. Elección de la función a minimizar 53
4.3.1. Definiciones generales 53
4.3.2. Modificación de la distorsión de Oddy para cuadriláteros 54
4.3.3. Modificación de la distorsión de Oddy para hexaedros . 67
4.4. Método de minimización empleado 78
4.4.1. Método de *Newton-Raphson* 78
4.4.2. Modificaciones al método de *Newton-Raphson* 80
4.5. Programación del método de minimización 87
4.5.1. Analogía de la estructura del programa con la de un programa estándar de elementos finitos 87
4.5.2. Evaluación de los gradientes y hessianas elementales . . 89

5. Ejemplos 103
5.1. Ejemplos en mallas de cuadriláteros 103
5.2. Ejemplos en mallas de hexaedros 117

6. Conclusiones 129

A. Demostración de una propiedad de la Distorsión de Oddy 133

B. Demostración de una propiedad de la distorsión de Oddy en hexaedros 137

C. Matrices utilizadas en el problema tridimensional 142

Capítulo 1

Introducción

El método de los elementos finitos (MEF) es una potente herramienta de cálculo de amplia y contrastada aplicación en muchos ámbitos de la ingeniería. En el análisis mediante el MEF la generación de una discretización adecuada del dominio es una tarea básica y con frecuencia extraordinariamente laboriosa (sobretodo si se discretizan dominios tridimensionales). En consecuencia, este proceso se debe automatizar puesto que en la mayoría de aplicaciones de interés industrial, la generación de la malla requiere mayor tiempo y más interacción humana que el propio cálculo. Durante las dos últimas décadas se han desarrollado diferentes algoritmos de generación automática de mallas.

Una malla adecuada es aquélla que proporciona resultados suficientemente precisos con un coste razonable. Sin embargo, el error en los cálculos es función de diversos factores, entre otros:

1. la geometría del dominio
2. las condiciones de contorno
3. las ecuaciones diferenciales que gobiernan el problema
4. la geometría de la malla de elementos finitos
5. la técnica numérica utilizada para solucionar el problema

Luego, la geometría de la malla de elementos finitos es tan sólo uno de los factores que influyen en la precisión. A su vez, existen dos factores que determinan cómo la geometría de la malla puede afectar al error:

- La distribución de tamaños de los elementos de la malla
- La forma de los elementos de la malla: su distorsión

Existen estimadores del error mediante los cuáles se obtienen las zonas del dominio donde éste se concentra. Puesto que el error de las soluciones obtenidas mediante el método de los elementos finitos depende de una cierta potencia positiva del tamaño de los elementos, en un refinamiento tipo h, es usual concentrar los elementos en las zonas del dominio donde los resultados obtenidos tienen mayor error. No obstante, la geometría de la malla de elementos finitos contribuye al error del MEF en función de la forma de sus elementos, además de la distribución de los tamaños de los mismos. En consecuencia, en la generación de mallas es necesario considerar esta contribución al error de la solución del MEF.

1.1. Calidad geométrica de los elementos de una malla en el MEF

Se define la distorsión de un elemento como el grado de desviación de dicho elemento respecto del elemento regular de referencia. Para cada tipo de elemento, el elemento regular de referencia es distinto:

- triángulo equilátero en mallas de triángulos
- cuadrado en mallas de cuadriláteros
- tetraedro regular en mallas de tetraedros
- cubo en mallas de hexaedros

Análogamente se define la calidad geométrica de un elemento como el grado de aproximación del elemento al elemento de referencia, al cuál se le asigna calidad geométrica óptima.

Para la mayoría de problemas, la presencia de elementos distorsionados disminuye la precisión de la solución. Sin embargo, ocasionalmente, elementos distorsionados producen un rendimiento superior en problemas particulares (por ejemplo, en problemas marcadamente anisótropos). En realidad, la precisión depende de todos los factores que se han mencionado anteriormente y no existe una única relación entre la distorsión y el error. La distorsión elemental es solamente uno de los factores que influyen en la precisión.

Una de las conclusiones de Oddy *et al.*[6] es que no es posible relacionar un valor dado de distorsión con un cierto nivel de error *a priori*. Esto se debe al hecho que cualquier análisis del error depende fuertemente del problema que se analiza.

Babuska y Aziz [1] justifican que deben evitarse ángulos internos grandes (elementos distorsionados) en elementos finitos planos triangulares. En particular, prueban que los ángulos grandes afectan negativamente a estimadores del error en el MEF. Perronet [7] confirma que la forma de los triángulos debe tenerse en cuenta. Perronet atribuye a Ciarlet, Raviart y June un teorema que da una cota del error del MEF en problemas lineales. Esquemáticamente, la cota del error se divide en tres partes:

$$E_{MEF} \leq C_f \frac{l_{max}}{q} \tag{1.1}$$

donde E_{MEF} es una determinada forma de expresar el error del MEF y C_f es una constante asociada a la contribución del error por parte de todos aquellos factores que no dependen de la geometría de la malla (condiciones de contorno, ecuaciones diferenciales del problema, geometría del dominio). l_{max} es el tamaño máximo del elemento y q es una medida de la calidad geométrica de los elementos de la malla.

Aunque la expresión (1.1) es válida en unas condiciones muy particulares (elementos triangulares planos con interpolación lineal), da unas indicaciones claras de cómo debería ser una medida de la calidad geométrica o una medida de la distorsión. El objetivo de una medida de la calidad geométrica debería ser medir la contribución al error del MEF que proviene de la distorsión de los elementos de la malla.

Desafortunadamente, no es posible que una medida de calidad geométrica cumpla este objetivo para todos los problemas, como se ha justificado anteriormente. Nótese que en la ecuación (1.1) no se da explícitamente ninguna expresión concreta de q.

La estrategia usual es definir medidas de calidad geométrica *a priori*, independientemente del problema de elementos finitos al que se apliquen. Otra estrategia, que en principio sería más rigurosa, consiste en estudiar las características concretas del problema dado y obtener una medida de la calidad geométrica que se adapte al problema. En este sentido, Dannelongue y Tanguy [3], utilizan para tetraedros la medida:

$$q = \frac{r}{l_{max}}$$

donde r es el radio de la circumferencia inscrita al tetraedro y l_{max} es su lado máximo. Justifican el empleo de esta medida porque en el problema de Stokes con elementos lineales una cota del error es del orden $O(\frac{l_{max}^2}{r})$. Sin embargo, por motivos de coste computacional, utilizan una expresión que aproxima a la anterior:

$$q = \frac{V}{\overline{l}^3}$$

donde V es el volumen del elemento y $\overline{l}$ es la media aritmética de sus lados. Posiblemente se podría haber llegado a esta medida, o a una aproximación similar mediante criterios exclusivamente geométricos y teniendo en cuenta el coste computacional, es decir, definiendo una medida de calidad geométrica *a priori*.

1.2. Elementos estudiados

Hoy en día el uso de los MEF está muy extendido para problemas relacionados con la ingeniería. Como ya se ha comentado, la generación de la malla (pre-proceso de datos) es uno de los aspectos más costosos (desde el punto de vista computacional) de la resolución de un problema mediante el MEF. Y una de las elecciones a tomar a la hora de mallar un dominio es elegir el elemento a utilizar.

En determinadas aplicaciones, la utilización de cuadriláteros es preferible a la de triángulos. Del mismo modo, en problemas tridimensionales los hexaedros son preferibles a los tetraedros. Desafortunadamente, la discretización de un dominio mediante cuadriláteros o hexaedros es considerablemente más complicada que su mallado mediante triángulos o tetraedros. Además, la mayoría de generadores de mallas (especialmente en el caso de malladores de cuadriláteros y hexaedros) primero generan la discretización y posteriormente mejoran la calidad de los elementos mediante el suavizado de su forma. En esta fase de la generación de una malla es donde se enmarca esta tesina.

Concretamente, la metodología planteada en esta tesina permite suavizar mallas de cuadriláteros y de hexaedros. Los resultados obtenidos muestran que se mejoran los valores de distorsión de las mallas estudiadas, comparándo el método con otros existentes. Aún y así, el método que se plantea implica un coste computacional bastante más elevado, cosa que lo hace menos "competitivo" en el caso bidimensional, donde existen otros métodos de suavizado más simples y que funcionan razonablemente bien. Es en el caso tridimensional dónde los resultados son más interesantes.

1.3. Objetivos

El objetivo principal de esta tesina es desarrollar un algoritmo eficiente que permita suavizar mallas de cuadriláteros y de hexaedros mediante la

minimización de una función *Distorsión*.

Para ello, la mayor aportación de la tesina es la modificación de una función *Distorsión* existente (introducida por Oddy *et al.*[6]) de manera que reúna todas las características necesarias para, mediante su minimización, suavizar una malla dada hasta llegar a la malla de mínima distorsión.

Es importante resaltar que la función *Distorsión* debe cumplir unos requisitos mínimos de regularidad a fin de poder utilizar las técnicas clásicas de minimización. Además, el proceso de minimización debe conducir a un mínimo absoluto, con lo que se debe evitar la existencia de mínimos locales en la función.

Desgraciadamente, no es posible obtener una función *Distorsión* general para cualquier tipo de elemento, ya que cada uno de ellos tiene unas peculiaridades propias. Por consiguiente, esta tesina se estructura en tres grandes bloques:

- Modificación de la distorsión de Oddy para para cuadriláteros.
- Modificación de la distorsión de Oddy para hexaedros.
- Desarrollo de un algoritmo de suavizado global de mallas de cuadriláteros y de hexaedros, que minimice su distorsión manteniendo la conectividad de los elementos existente.

Capítulo 2

Medidas de calidad geométrica en mallas de cuadriláteros

2.1. Introducción a las medidas de calidad de las mallas de cuadriláteros

En primer lugar deben obtenerse los grados de libertad que pueden tener las medidas de cuadriláteros. Se entiende como número de grados de libertad de una medida el número de variables independientes que puede tener como máximo la función que representa la medida.

El número de grados de libertad para un determinado tipo de elemento se puede deducir mediante la regla de los grados de libertad:

$$N_{var} = N_{coor} - N_{trans} - N_{giro} - 1 \tag{2.1}$$

donde N_{var} es el número de grados de libertad de la medida; N_{coor} es el número de coordenadas del elemento, es decir, el producto del número de nodos (4 en elementos tipo cuadrilátero) por el número de coordenadas de cada nodo (dos en un elemento bidimensional); N_{trans} es el número de grados de libertad que se pierden por una traslación del elemento (2 en elementos bidimensionales y 3 en elementos tridimensionales); N_{giro} es el número de grados de libertad que se pierden por giros de sólido rígido (1 en elementos bidimensionales y 2 en elementos tridimensionales).

Consecuentemente, si se aplica la regla a cuadriláteros, se llega al resultado:

$$N_{var} = N_{coor} - N_{trans} - N_{giro} - 1 = 8 - 2 - 1 - 1 = 4$$

Hay múltiples posibilidades para determinar 4 variables independientes.

En el caso de restringirse a ángulos y a relaciones entre lados o *aspect ratios* (razón entre dos lados del cuadrilátero), se debe tener en cuenta que hay solamente 3 ángulos independientes y 3 *aspect ratios* independientes. De esta forma, por ejemplo, un grupo de 4 variables podría estar formado por 2 ángulos y 2 *aspect ratios* independientes.

2.1.1. Tipología de cuadriláteros distorsionados

La distorsión en los paralelogramos se debe a dos fenómenos que pueden darse de forma independiente o de forma conjunta:

- Distorsión por cortante
- Distorsión por compresión (uniaxial)

Esta manera de denominar las dos causas de la distorsión parte de la analogía mecánica consistente en asimilar la distorsión de un cuadrilátero a la deformación que sufre un cuadrado para conseguir su estado deformado. Evidentemente, se considera solamente la parte desviadora de la deformación, ya que una deformación hidrostática correspondería a un simple cambio de escala. Esta idea ya fue introducida por Oddy *et al.*[6] y gráficamente se muestra en la figura 2.1. En la figura 2.1.a se presenta un cuadrado. En la figura 2.1.b se representa el cuadrilátero que se obtiene cuando el cuadrado inicial sufre exclusivamente distorsión por compresión. En la figura 2.1.c se representa el cuadrilátero que se genera cuando el cuadrilátero inicial sufre exclusivamente distorsión por cortante.

Es usual asimilar cada causa de la distorsión a un tipo de variable. Mientras que la distorsión por cortante se asimila a una variable de tipo angular, la distorsión por compresión se asimila a una variable tipo *aspect ratio*.

En la figura 2.1 los tres cuadriláteros dibujados son paralelogramos. En realidad, las dos causas de distorsión y sus combinaciones formarán siempre paralelogramos, que son un caso muy particular de cuadriláteros. No obstante, es posible extender las dos causas de distorsión a cuadriláteros en general, ya que a cada nodo de un cuadrilátero se le puede asociar un paralelogramo local formado por los lados adyacentes al nodo, tal como se presenta en la figura 2.2. Luego, a un cuadrilátero cualquiera se le pueden asociar las causas de distorsión de sus 4 paralelogramos locales. La definición del paralelogramo local asociado puede parecer arbitraria, pero más adelante se utilizará este concepto.

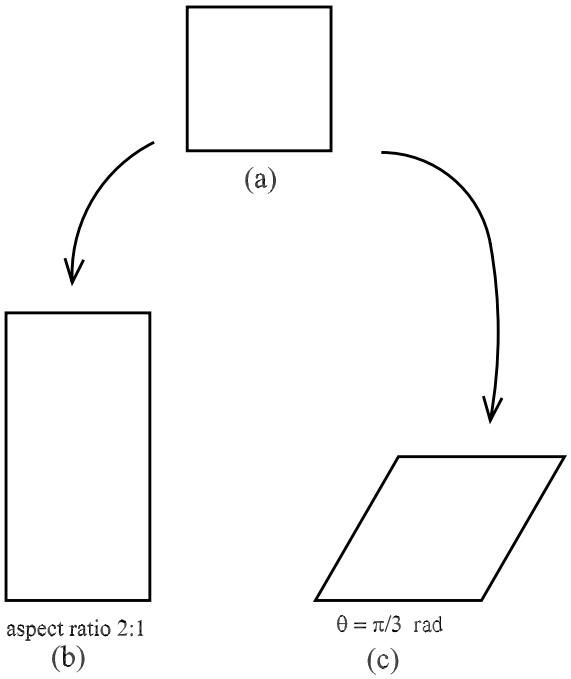


Figura 2.1: Descomposición de la distorsión en cuadriláteros . **(a)** Cuadrado de referencia. **(b)** Cuadrilátero sometido a distorsión por compresión. **(c)** Cuadrilátero sometido a distorsión por cortante.

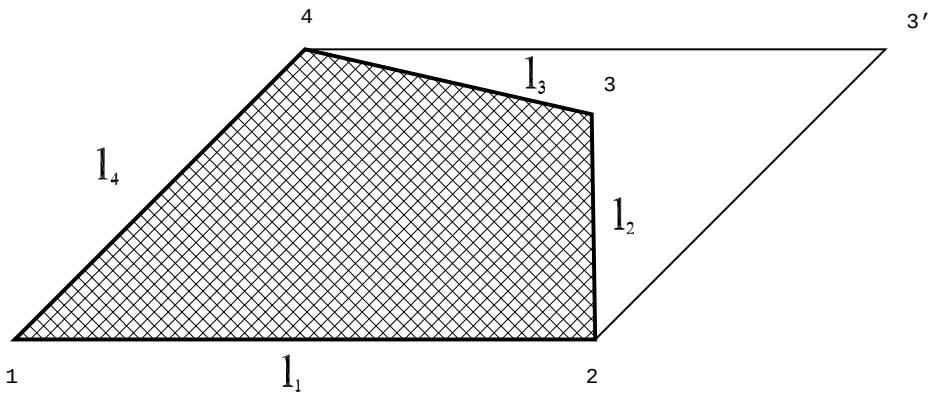


Figura 2.2: Paralelogramo local (123'4) asociado al nodo 1 del cuadrilátero original (1234)

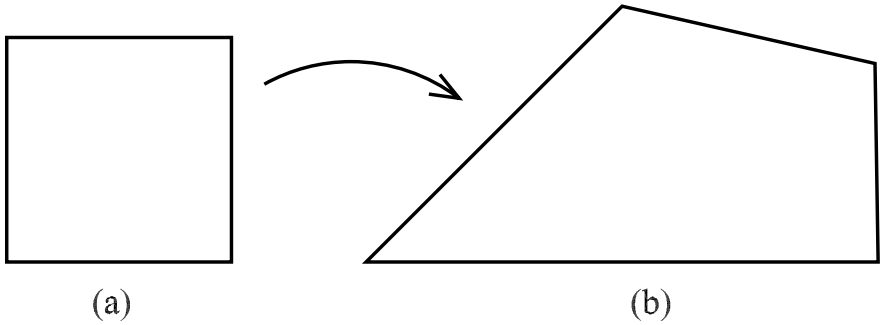


Figura 2.3: **(a)** Cuadrado de referencia. **(b)** Cuadrilátero deformado

2.1.2. Características mínimas a exigir a una medida de la calidad geométrica de cuadriláteros

Antes de introducir la medida de calidad de Oddy es conveniente enumerar aquellos requisitos mínimos que debe cumplir una medida de calidad. Oddy *et al.*[6] enumera las condiciones que debería cumplir esta medida:

- Medir el grado de desviación de un elemento respecto de un elemento de referencia (en este caso cuadrado) (ver figura 2.3).
- Ser sensible a una combinación de distorsión de cortante y de compresión.
- Ser independiente de movimientos de sólido rígido del elemento.
- Ser independiente del tamaño del elemento.
- Ser un número real a partir del cual poder decidir sobre la calidad del elemento.

En la segunda condición falta especificar que la sensibilidad debe ser respecto a cada uno de los paralelogramos locales. Aunque esta apreciación pueda parecer innecesaria, más adelante se demostrará que no considerarla puede ser una fuente de error importante al definir una nueva medida de calidad geométrica de cuadriláteros.

Además de las condiciones anteriores, una buena medida debería tener un coste computacional razonable.

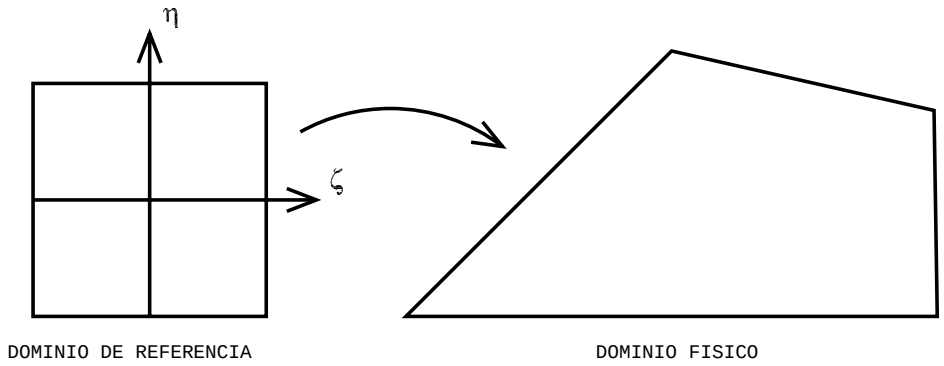


Figura 2.4: Transformación isoparamétrica de un elemento

2.2. Medida de la calidad geométrica de Oddy

Como se ha comentado anteriormente, la tesina se basa en la modificación de la distorsión de Oddy de manera que esta pueda ser minimizada correctamente. En [11] se hace un estudio a fondo de otras medidas de calidad existentes y se llega a la conclusión de que es ésta la que mejor capta todos los tipos de distorsión que puedn sufrir los elementos.

Oddy *et al.*[6] deducen una medida de la distorsión de un cuadrilátero mediante una analogía con la deformación que debe experimentar un cuadrado de la misma área para obtener la forma de dicho cuadrilátero. Para ello, se supone un elemento cuadrado en el dominio local (ξ, η), y supone que éste se deforma hasta obtener el contorno del elemento en el dominio computacional (x, y) mediante la transformación isoparamétrica (ver figura 2.4). La analogía consiste en considerar que si el elemento final se encuentra altamente distorsionado, significa que el cuerpo ha experimentado una gran deformación.

Con el propósito de verificar una de las condiciones que debe cumplir una medida de calidad, se elimina el efecto que produce el tamaño de los elementos mediante la normalización de la matriz jacobiana de dicha transformación, $\boldsymbol{J}$:

$$\boldsymbol{J'} = \frac{\boldsymbol{J}}{\sqrt{|\boldsymbol{J}|}} \tag{2.2}$$

donde $|\boldsymbol{J}|$ es el jacobiano (determinante de la matriz jacobiana). La forma apropiada de cuantificar esta deformación es mediante el tensor de Green de deformaciones:

$$\boldsymbol{\epsilon} = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{C} - \boldsymbol{I}\right) \tag{2.3}$$

donde se ha introducido el tensor de Cauchy:

$$\boldsymbol{C} = \boldsymbol{J'}^T \cdot \boldsymbol{J'} \tag{2.4}$$

El primer invariante de este tensor es una medida del cambio local de área. Dado que el objetivo es medir el cambio en la forma del elemento y no en su área, ésta debe ser eliminada de la expresión (2.3). Así pues, el tensor desviador de deformaciones se escribe como:

$$\boldsymbol{e} = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{C} - \frac{1}{2}\operatorname{tr}\left(\boldsymbol{C}\right)\boldsymbol{I}\right)$$

El segundo invariante de este tensor es:

$$J_2 = \frac{1}{2}\,\boldsymbol{e} : \boldsymbol{e} = \frac{1}{8}\left(\boldsymbol{C} : \boldsymbol{C} - \frac{1}{2}\Big(\operatorname{tr}\left(\boldsymbol{C}\right)\Big)^2\right)$$

En esta expresión, el factor $\frac{1}{8}$ se puede interpretar como un factor de escala en la medición de la deformación, por lo que la medida de la distorsión se define como:

$$D = \boldsymbol{C} : \boldsymbol{C} - \frac{1}{2}\Big(\operatorname{tr}\left(\boldsymbol{C}\right)\Big)^2 \tag{2.5}$$

La expresión anterior representa una medida de la distorsión del elemento definida sobre cada punto del mismo. Sin embargo, desde el punto de vista de la generación de mallas, es preferible una medida global de su distorsión. Por consiguiente, falta especificar cómo se define esta última a partir de la expresión (2.5).

Una buena elección de los puntos de evaluación de la distorsión dentro del elemento va a ser la clave para evitar posibles problemas de no captación de alguna forma de distorsión del elemento. En apartados posteriores se estudiará con detenimiento la distorsión de Oddy. En particular se analizarán las alternativas para pasar de una definición puntual de la distorsión a una elemental. Mediante una reinterpretación de la distorsión de Oddy se solventarán aquellos puntos conflictivos de esta medida. Éstos son, básicamente, un cálculo excesivamente complejo y la falta de una interpretación puramente geométrica.

A continuación se presentan unos tests de dos grados de libertad para evaluar el comportamiento de la distorsión de Oddy frente a diferentes tipos de distorsión.

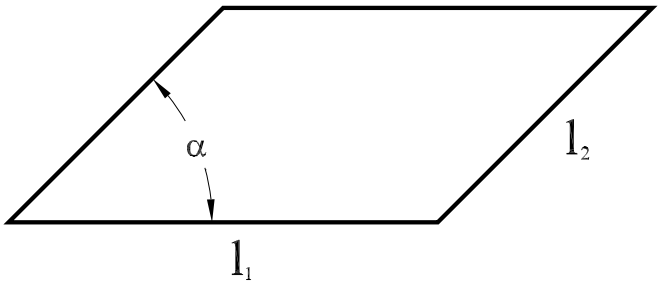


Figura 2.5: Variables que caracterizan a un paralelogramo

En primer lugar se realizará el test del paralelogramo [2]. Este test consiste en ver la evolución de la distorsión de un paralelogramo al modificar su ángulo α y su *aspect ratio*:

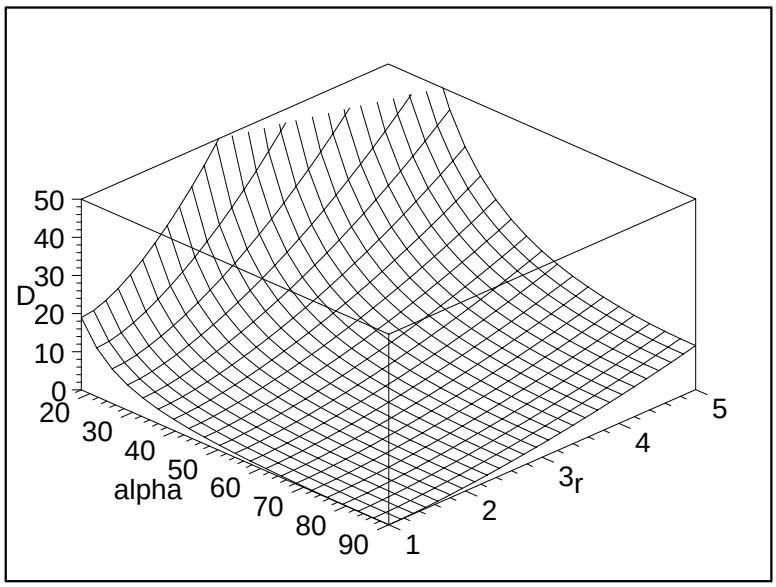
$$r = \frac{max(l_1, l_2)}{min(l_1, l_2)}$$

donde α, l_1 y l_2 se han definido en la figura 2.5. Al tratarse de paralelogramos, no existe el problema de decidir los puntos de evaluación, ya que la distorsión de Oddy es constante en este tipo de cuadriláteros. En la figura 2.6.a se representa el valor de la distorsión de Oddy en función del ángulo α y del *aspect ratio* r. En la figura 2.6.b se presentan las curvas de nivel de la distorsión. El rango y la equidistancia están especificados en la propia figura. Como puede observarse, la mínima distorsión corresponde a un cuadrado ($\alpha = 90$ y $r = 1$).

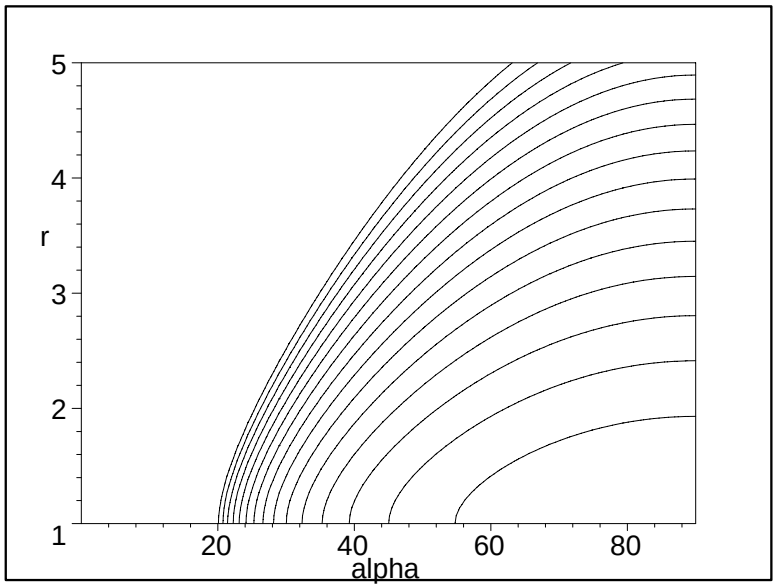
En la figura 2.6 se observa como la medida de calidad es sensible a distintas causas de distorsión y a combinaciones de ellas.

En segundo lugar se realizará el test del trapecio. Este test consiste en ver la evolución de la distorsión de un trapecio al modificar su relación de bases r y su altura z (el significado gráfico de estas variables se puede ver en la figura 2.7).

En este caso se debe decidir en qué puntos evaluar la distorsión. Se ha optado por evaluar la distorsión en los nodos y realizar la media aritmética de los valores obtenidos. Esta decisión se justificará más adelante. En la figura 2.8 se presentan las curvas de nivel de la distorsión y se observa como la medida de calidad es sensible a sus distintas causas. Al aumentar r y z a la vez la interacción es positiva, en el sentido la distorsión aumenta más suavemente que al aumentar solamente una de las dos.



(a)



(b)

Figura 2.6: Test del paralelogramo aplicado a la distorsión de Oddy. **(a)** Representación tridimensional de la distorsión (D). **(b)** Curvas de nivel de D en el rango [1,15], con una equidistancia de 1

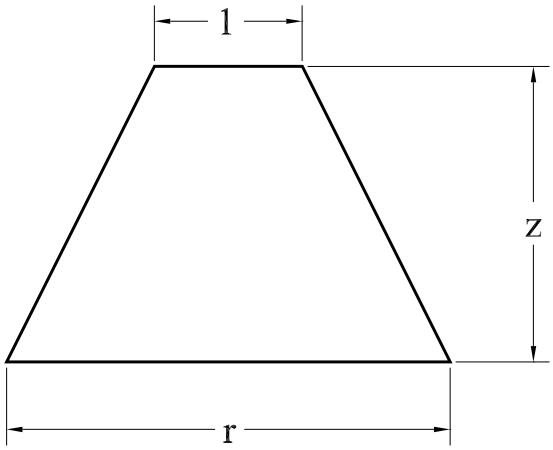


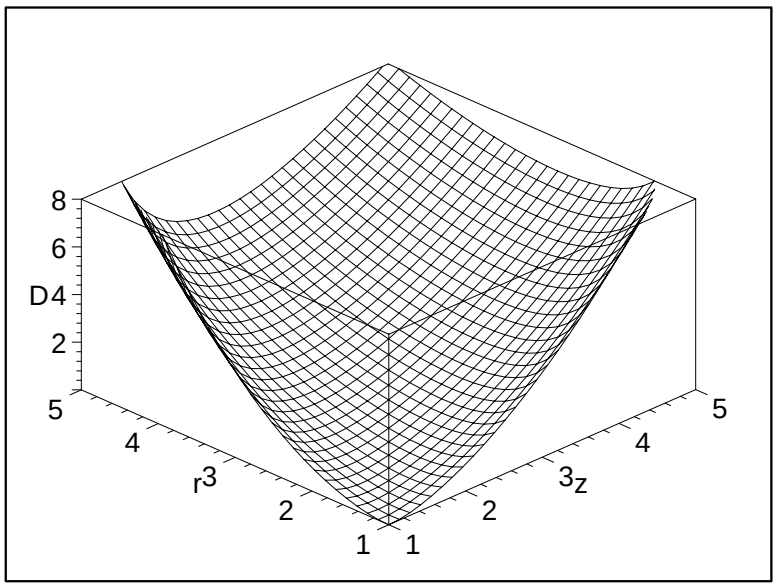
Figura 2.7: Significado de las variables que intervienen en el test del trapecio

En la figura 2.8 se observa como la medida de calidad es sensible a distintas causas de distorsión. En este caso, al aumentar r y z a la vez, la interacción es positiva, en el sentido la distorsión aumenta más suavemente que al aumentar solamente una de las dos.

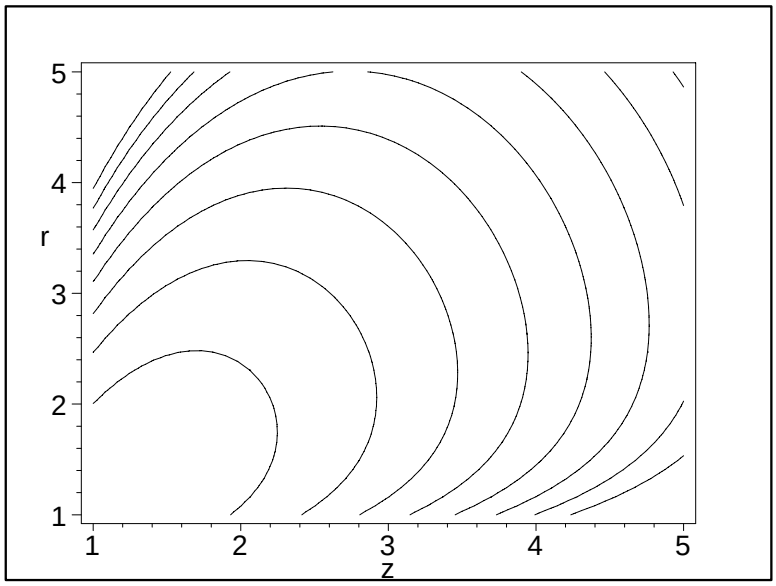
2.3. Reinterpretación de la distorsión de Oddy

En el apartado anterior se ha introducido la medida de calidad geométrica deducida por Oddy *et al.*[6] y se ha comprobado su correcto comportamiento frente a diferentes tipos de distorsión. A continuación, se presenta una nueva interpretación de la distorsión de Oddy. Esta nueva interpretación intenta solventar los inconvenientes que la versión original presenta. Básicamente, tiene tres ventajas respecto a la interpretación introducida por el propio autor:

- se trata de una interpretación puramente geométrica basada en la distorsión de paralelogramos
- proporciona una metodología para definir la distorsión del cuadrilátero a partir de valores puntuales de la distorsión . Además, permite decidir en qué puntos del cuadrilátero se debe evaluar la distorsión
- simplifica el cálculo de la distorsión y de sus derivadas respecto a las coordenadas nodales. Esto es de gran importancia en procesos de minimización de la distorsión de una malla



(a)



(b)

Figura 2.8: Test del trapecio aplicado a la distorsión de Oddy *AMD*. **(a)** Representación tridimensional de la distorsión (D). **(b)** Curvas de nivel de D en el rango [1,8], con una equidistancia de 1

A efectos prácticos, el resultado final de este apartado es que la distorsión de un cuadrilátero se evaluará como media aritmética de los valores de la distorsión en sus vértices. Además, los valores de la distorsión en dichos vértices se calcularán a partir de unos paralelogramos asociados a éstos.

2.3.1. Distorsión de Oddy en el caso de paralelogramos

Un primer paso para deducir la nueva interpretación de la distorsión de Oddy es hallar la distorsión en el caso particular de paralelogramos. El propio autor deduce que el valor de la distorsión de Oddy es constante en todos los puntos de este tipo de cuadriláteros (ver [6]). La deducción es simple si se acepta que la matriz jacobiana de la transformación isoparamétrica es constante en todos los puntos del elemento en el caso de paralelogramos.

Aplicando la definición de la distorsión de Oddy a un paralelogramo obtenemos que, para cualquier punto del mismo, la distorsión vale:

$$D_{Oddy} = \frac{l_2^2}{2l_1^2 sin^2\alpha} + \frac{l_1^2}{2l_2^2 sin^2\alpha} + \frac{1}{sin^2\alpha} - 2 \tag{2.6}$$

donde α, l_1 y l_2 se han definido en la figura 2.5.

La expresión (2.6) se puede simplificar introduciendo como nueva variable el área del elemento que vale:

$$A = l_1 l_2 sin\alpha$$

La expresión resultante es la (2.7).

$$D_{Oddy} = \frac{1}{2}\left(\frac{l_1^2 + l_2^2}{A}\right)^2 - 2 \tag{2.7}$$

De la expresión (2.7) se deduce que, en el caso de paralelogramos, la distorsión de Oddy expresa la misma información que una medida de calidad geométrica más simple que podemos denominar *eficiencia geométrica modificada*:

$$Q_{Oddy} = \frac{l_1^2 + l_2^2}{2A} \tag{2.8}$$

La relación entre D_{Oddy} y Q_{Oddy} para paralelogramos es trivial y puede expresarse como:

$$D_{Oddy} = 2Q_{Oddy}^2 - 2 \tag{2.9}$$

La única diferencia entre D_{Oddy} y Q_{Oddy} está en un cambio en la forma de crecimiento, mientras que la sensibilidad para captar distintas causas

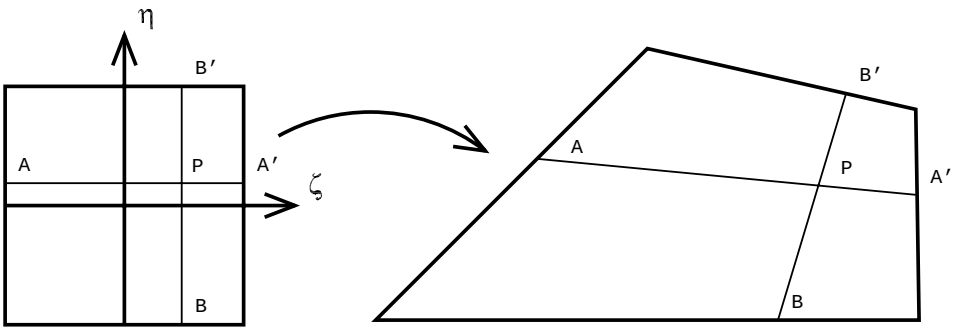


Figura 2.9: Transformación isoparamétrica de rectas paralelas a los lados del cuadrado de referencia: AA' y BB'

de distorsión es la misma. Este resultado es importante porque la forma de crecimiento es una característica fácilmente modificable. En cambio, la sensibilidad para captar distintas causas de distorsión es una propiedad intrínseca de la medida de calidad considerada.

2.4. Definición de la distorsión de Oddy de un cuadrilátero

2.4.1. Cálculo geométrico de la distorsión de Oddy en un punto cualquiera de un cuadrilátero

Una vez deducida una expresión simplificada para calcular la distorsión de Oddy en el caso de paralelogramos (ver ecuación (2.7)), el objetivo es utilizar este resultado para el cálculo de la distorsión en cuadriláteros en general.

Con este fin, primero se debe considerar la siguiente propiedad general de la transformación isoparamétrica bilineal: la imagen de un segmento recto paralelo a uno de los lados del cuadrado de referencia es otro segmento recto (ver figura (2.9)). Esto es un resultado inmediato de la forma que tienen las ecuaciones de la transformación isoparamétrica bilineal.

Este resultado permite definir el concepto de paralelogramo local asociado a un punto P cualquiera de un cuadrilátero. Éste se define como el paralelogramo que tiene por lados los segmentos imagen de los segmentos paralelos a los lados del cuadrado de referencia que pasan por el punto P(ver figura

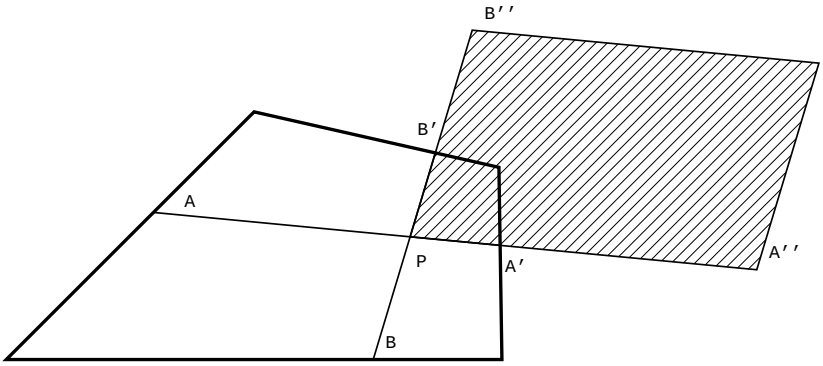


Figura 2.10: Paralelogramo local asociado a un punto P de un cuadrilátero cualquiera, AA'=PA" y BB'=PB"

2.10).

El resultado final es el siguiente: la distorsión de Oddy en un punto de un cuadrilátero cualquiera es la distorsión del paralelogramo local asociado a este punto (ver demostración en el apéndice A).

2.4.2. Puntos de evaluación de la distorsión

En principio, la expresión de la distorsión de Oddy es una medida puntual. Sin embargo, desde el punto de vista de generación de mallas es preferible una medida global de la distorsión . Por consiguiente, se debe especificar cómo se define la distorsión global a partir de la puntual. Se consideran tres alternativas referentes a los puntos de evaluación:

- Distorsión global definida a partir de los valores de la distorsión puntual en los vértices del elemento
- Distorsión global definida a partir del valor de la distorsión puntual en el centro del elemento
- Distorsión global definida a partir de los valores de la distorsión puntual en los puntos de Gauss del elemento

La forma más natural de definir la distorsión global es a partir de los valores de la distorsión puntual en los vértices del elemento. El mismo Oddy [6] recomienda calcular la distorsión en los nodos en la fase de generación

de mallas. Esta recomendación resulta todavía más interesante si calculamos la distorsión de Oddy según su interpretación geométrica. En este caso se llega fácilmente a la conclusión que la distorsión de Oddy en un nodo de un cuadrilátero cualquiera es la distorsión del paralelogramo formado por los dos lados adyacentes al nodo, tal como se muestra en la figura 2.2 (nótese que el paralelogramo (123'4) de la figura tiene la misma distorsión que el cuadrilátero (1234) en el nodo 1). Por ejemplo, la distorsión de Oddy en el nodo 1, se podría calcular utilizando las expresiones (2.10), a partir de las coordenadas nodales.

$$\begin{aligned} l_1^2 &= (x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 \\ l_4^2 &= (x_4 - x_1)^2 + (y_4 - y_1)^2 \\ A_1 &= (x_2 - x_1)(y_4 - y_1) - (x_4 - x_1)(y_2 - y_1) \\ Q_{Oddy,1} &= \frac{l_1^2 + l_4^2}{2A_1} \\ D_{Oddy,1} &= 2Q_{Oddy,1}^2 - 2 \end{aligned} \tag{2.10}$$

Una ventaja de estas expresiones es su naturaleza geométrica. Las longitudes de los lados del elemento sirven para definir el tamaño característico del mismo, y este valor se utiliza usualmente para construir la malla. Luego, no será necesario volver a calcular las longitudes de los lados del cuadrilátero para evaluar su distorsión .

De las expresiones (2.10) se deduce que la distorsión de Oddy en un nodo de un cuadrilátero no depende de la posición del nodo opuesto. En este caso, la distorsión en el nodo 1 no depende de las coordenadas del nodo 3.

Es trivial generalizar las ecuaciones (2.10) para un nodo i cualquiera, $i = 1, 2, 3, 4$:

$$\begin{aligned} l_i^2 &= (x_{[i+1]} - x_i)^2 + (y_{[i+1]} - y_i)^2 \\ l_{[i+3]}^2 &= (x_{[i+3]} - x_i)^2 + (y_{[i+3]} - y_i)^2 \\ A_i &= (x_{[i+1]} - x_i)(y_{[i+3]} - y_i) - (x_{[i+3]} - x_i)(y_{[i+1]} - y_i) \\ Q_{Oddy,i} &= \frac{l_i^2 + l_{[i+3]}^2}{2A_i} \\ D_{Oddy,i} &= 2Q_{Oddy,i}^2 - 2 \end{aligned} \tag{2.11}$$

donde

$$[i] = \text{residuo}\left(\frac{i-1}{4}\right) + 1$$

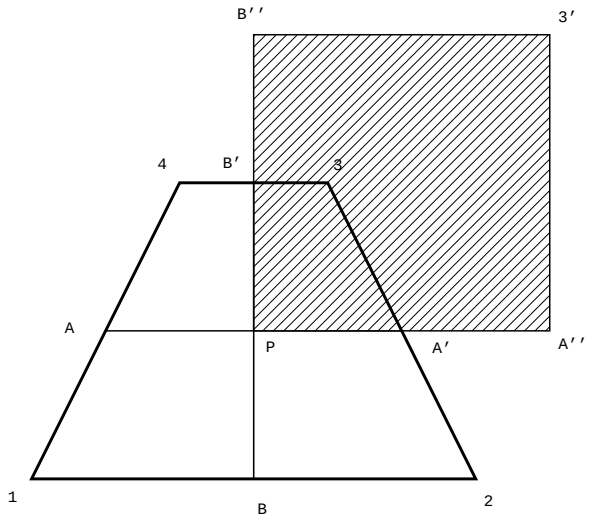


Figura 2.11: Cuadrilátero (1234) con distorsión nula en el centro. Paralelogramo local asociado al centro del elemento(PA"3'B")

Definir la distorsión global a partir del valor de la distorsión puntual en el centro del elemento podría parecer una alternativa más simple. Realmente, el cálculo se simplifica, pero el valor obtenido no es una medida de calidad geométrica correcta. Con un ejemplo, se verá que pueden existir cuadriláteros muy distorsionados con un valor de la distorsión de Oddy en el centro nulo. Esto se entiende fácilmente mediante la interpretación geométrica de la distorsión de Oddy. En la figura 2.11 se presenta un cuadrilátero (1234) altamente distorsionado, con un valor de la distorsión en el centro nulo. En la misma figura se dibuja el paralelogramo local asociado al centro del elemento, que es un cuadrado, $D_{Oddy} = 0$.

Otra posibilidad es definir la distorsión global a partir de los valores de la distorsión puntual en los puntos de Gauss del elemento. En la figura 2.12 se ilustra la siguiente propiedad relacionada con esta posibilidad: la distorsión de un cuadrilátero definida a partir de la distorsión en los puntos de Gauss es la misma que la definida a partir de los nodos del cuadrilátero que tiene por vértices los propios puntos de gauss del cuadrilátero original.

Este resultado se deduce de aplicar en cada punto de Gauss la regla del paralelogramo local asociado. Además, se debe considerar que la distorsión es adimensional y que la transformación isoparamétrica mantiene las proporciones de los segmentos paralelos a los lados del cuadrado de referencia.

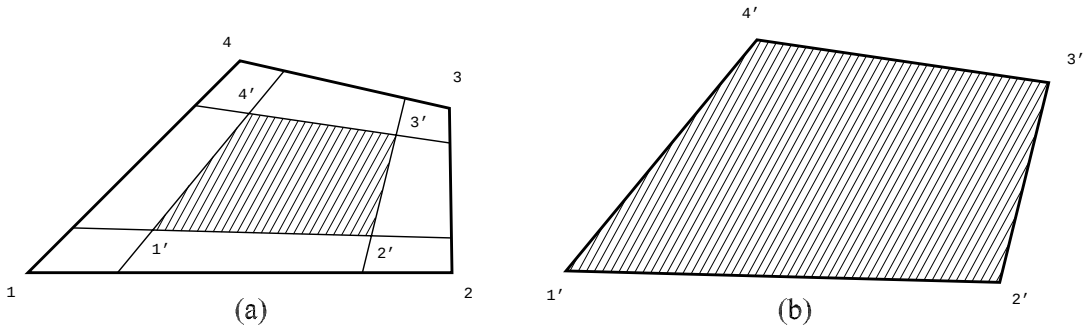


Figura 2.12: **(a)** Cuadrilátero (1234) y cuadrilátero de los puntos de Gauss (1'2'3'4'). **(b)** Ampliación del cuadrilátero de los puntos de Gauss (1'2'3'4')

En la tabla 2.1 se dan los valores de la distorsión del cuadrilátero de la figura 2.12.a. Se observa el siguiente resultado, que se puede generalizar: distorsión máxima se da en los nodos.

En la figura 2.12 se observa que evaluar la distorsión en los puntos de Gauss es lo mismo que evaluar la distorsión en los nodos de un cuadrilátero menos distorsionado. En principio, este resultado no es favorable, ya que la medida de calidad geométrica pierde sensibilidad de captar ciertas causas de distorsión, tal como se observa en la figura 2.13. En la figura 2.13.a, el paralelogramo (1234) tiene la misma distorsión nodal que el paralelogramo (1'2'3'4'). Mientras que en la figura 2.13.b el trapecio (1234) tiene mayor distorsión nodal que el trapecio (1'2'3'4').

Como conclusión, se puede decir que los puntos óptimos para evaluar la distorsión de Oddy son los nodos del elemento.

2.4.3. Definición de la distorsión elemental

Ahora queda por decidir cómo utilizar estos valores para definir la distorsión del elemento. Se consideran dos posibilidades:

- Distorsión elemental definida como la distorsión nodal máxima o *Maximal Nodal Distortion* (MND):

$$D_{Oddy,MND} = \max_{i=1,..,Nen}(D_{Oddy,i}) \tag{2.12}$$

- Distorsión elemental definida como la media aritmética de las distorsiones nodales o *Arithmetic Mean Distortion* (AMD):

Distorsión nodal	
nodo	distorsión
1	2.50
2	2.40
3	0.27
4	1.12
media	1.57
Distorsión en puntos de Gauss	
punto de Gauss	distorsión
1'	1.68
2'	1.49
3'	0.29
4'	0.73
media	1.05

Cuadro 2.1: Comparación entre los valores de la distorsión evaluados en los nodos y los puntos de Gauss del cuadrilátero de la figura 2.12.a

$$D_{Oddy,AMD} = \frac{\sum_{i=1}^{Nen} D_{Oddy,i}}{Nen} \tag{2.13}$$

donde $D_{Oddy,i}$, $i = 1, .., Nen$, se ha definido en la ecuación (2.11) y Nen es el número de nodos del elemento (4 para cuadriláteros y 8 para hexaedros).

Es usual utilizar la definición MND, ya que la definición AMD tiene el inconveniente de promediar los valores mayores de la distorsión con valores que pueden ser incluso nulos, disminuyendo así la distorsión de determinados cuadriláterеos. No obstante, en algunos casos será más interesantante utilizar la defínción AMD. La definición MND hace que, si la distorsión máxima se da en un cierto nodo, la distorsión elemental no dependa de la posición del nodo opuesto. El nodo opuesto se podría mover libremente sin cambiar la distorsión hasta que el nodo de máxima distorsión cambiara. Esto produce que cuadriláteros aparentemente de distinta distorsión, tengan el mismo valor de la distorsión. En cambio, en la defínción AMD no se produce este fenómeno. De esta manera, se puede entender el promediado como una forma de distinguir entre cuadriláteros que deberían tener distorsiones distintas. Por otro lado, desde un punto de vista exclusivamente computacional, la definición AMD es más "suave" que la MND, en el sentido que es derivable en todo

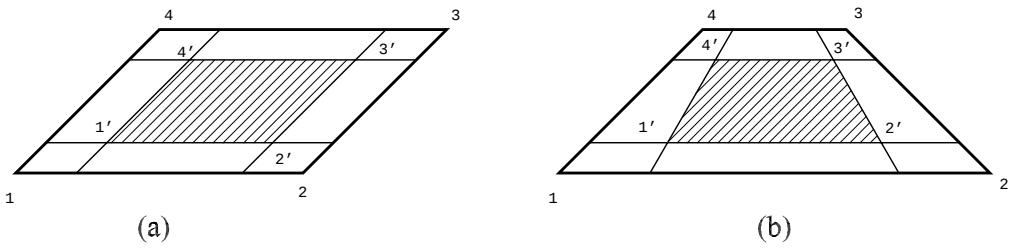


Figura 2.13: **(a)** Paralelogramo (1234) y paralelogramo de los puntos de Gauss (1'2'3'4'). **(b)** Trapecio (1234) y trapecio de los puntos de Gauss (1'2'3'4')

su dominio, mientras que la definición MND puede tener zonas de no derivabilidad. El uso de las derivadas de la distorsión respecto a las coordenadas nodales es necesario en muchos algoritmos de minimización de la distorsión de una malla, como se analizará en el capítulo 4.

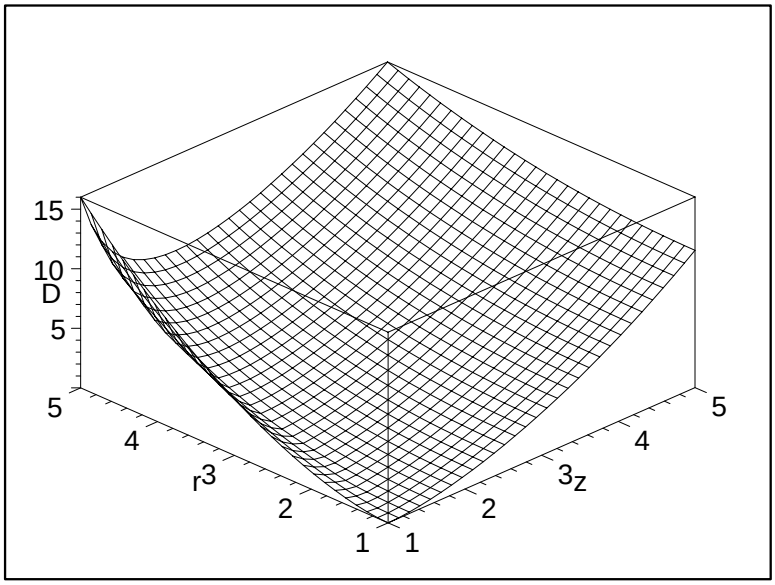
En la figura 2.14 se presenta el test del trapecio aplicado a la definición MND. En ella hay una leve singularidad en las curvas de nivel en forma de punto anguloso (la derivada no es contínua). Si comparamos esta figura con la figura 2.8, en la que hay el mismo test con la definición AMD, se observa que la forma de las curvas de nivel es similar (sensibilidad similar) y que, a diferencia, la separación entre curvas de nivel es mayor en la definición AMD, luego la definición MND tiene un crecimiento más rápido.

No hace falta realizar el test del paralelogramo de la definición MND, dado que coincide exactamente con el test realizado de la definición AMD (ver figura 2.6). Esto se debe a que la distorsión de Oddy es constante en el caso de paralelogramos.

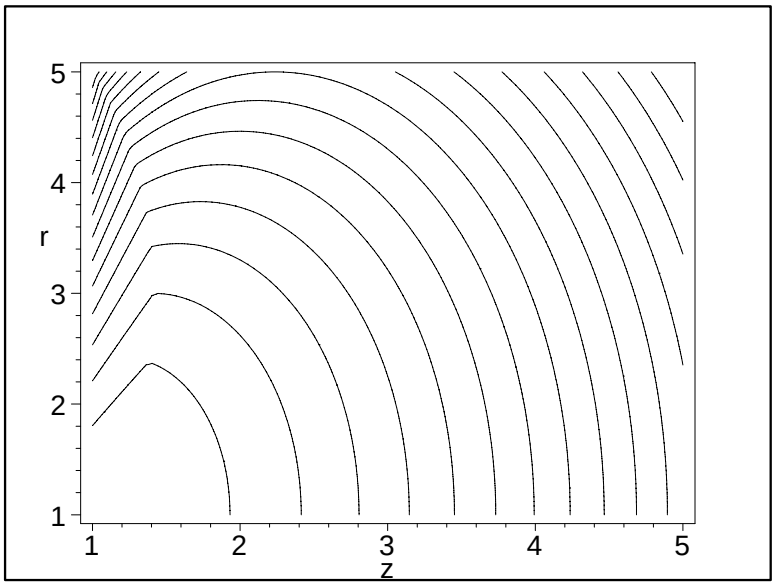
Consecuentemente, a efectos de medir la distorsión de los elementos de una malla de cuadriláteros de ahora en adelante se utilizará la expresión (2.13) y se obviará el subíndice AMD.

2.5. Limitaciones de la distorsión de Oddy

En aparatados anteriores se han expuesto las ventajas de la distorsión de Oddy como medida de calidad para evaluar la distorsión. Sin embargo, ésta, tal como la presentó el propio autor, tiene algunas limitaciones. El campo de aplicación de esta medida de calidad se limita a cuadriláteros no degenerados



(a)



(b)

Figura 2.14: Test del trapecio aplicado a la distorsión de Oddy *MND*. **(a)** Representación tridimensional de la distorsión (D). **(b)** Curvas de nivel de D en el rango [1,15], con una equidistancia de 1

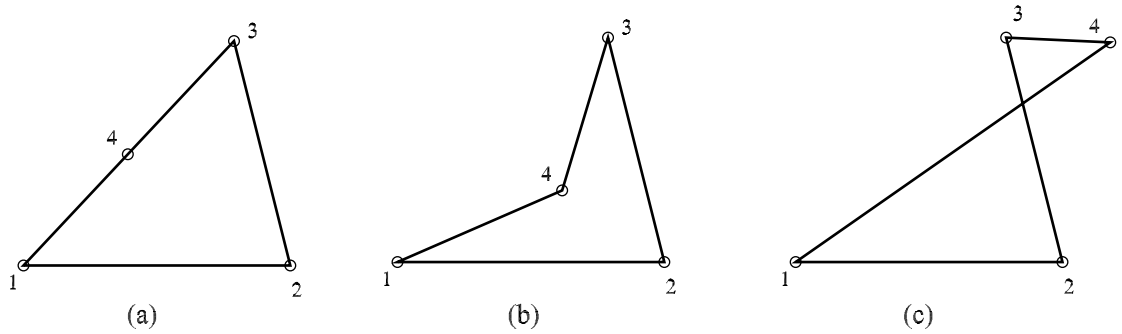


Figura 2.15: Cuadriláteros degenerados. **(a)** Triángulo. **(b)** Cuadrilátero con una concavidad. **(c)** Cuadrilátero cuyos lados se cruzan

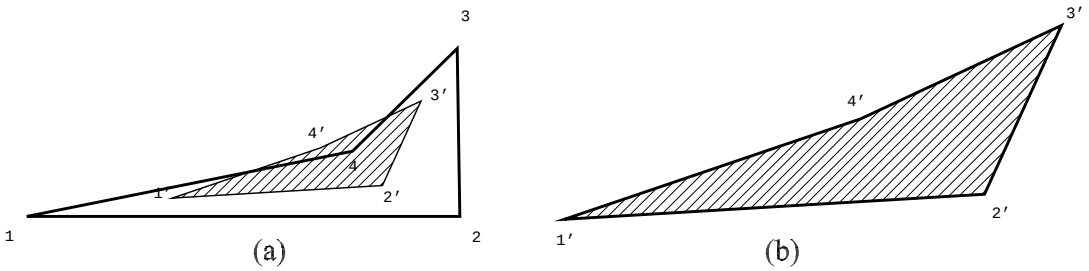


Figura 2.16: **(a)** Cuadrilátero cóncavo (1234). **(b)** Ampliación del cuadrilátero de los puntos de Gauss (1'2'3'4')

o convexos. No obstante, en las distintas fases de la generación de mallas pueden aparecer cuadriláteros degenerados en forma de triángulos, cuadriláteros con concavidades y cuadriláteros cuyos lados se cruzan (ver figura 2.15). El caso del triángulo se puede asimilar al límite entre un cuadrilátero convexo y cóncavo.

Este problema ocurre independientemente de dónde se evalue la distorsión. Esto se observa en la figura 2.16, en la cual, tanto el cuadrilátero original como el de los puntos de Gauss tienen concavidades. En realidad, también puede ocurrir que el cuadrilátero original sea cóncavo y el de los puntos de Gauss no.

La distorsión de Oddy tiende a infinito a medida que el jacobiano de la transformación isoparamétrica tiende a cero. Geométricamente, esto significa

que el paralelogramo local asociado al punto donde se evalua la distorsión tiende a formar ángulos de 180 grados (en el caso de evaluar la distorsión de Oddy en los nodos del elemento, esta situación se da para un triángulo, ver figura 2.15.a). Cuando aparecen concavidades el jacobiano toma valores negativos, y por esta razón deja de estar definida la distorsión , ya que no se puede realizar la raíz cuadrada de la ecuación (2.2), según el procedimiento descrito por el propio autor [6]. Oddy resuelve este problema asignando un valor infinito positivo en estos casos. Esto tiene sentido, dado que los cuadriláteros degenerados no son adecuados en el método de los elementos finitos, luego deben tener una calidad pésima, es decir, el valor de la distorsión muy elevada. Sin embargo, esta forma de resolver el problema no funcionará usualmente si se quiere utilizar la distorsión de Oddy en un algoritmo para minimizar la distorsión de una malla. Normalmente en un algoritmo de minimización se utilizarán los valores de la propia distorsión y de sus derivadas, y desde un punto de vista computacional, estos valores no pueden ser infinitos.

Una primera alternativa para extender la distorsión a cuadriláteros no convexos es simplemente cambiar el orden de las operaciones que propone Oddy, de modo que antes de dividir por la raíz cuadrada del jacobiano (ver ecuación (2.2)) se realice la operación (2.4). De esta forma, se divide directamente por el jacobiano, con su signo:

$$\boldsymbol{C} = \frac{\boldsymbol{J}^T \cdot \boldsymbol{J}}{|\boldsymbol{J}|}$$

Luego, en la operación (2.5) el signo va a desaparecer, ya que el jacobiano se eleva al cuadrado. De esta forma, en el caso de cuadriláteros convexos, nada cambia, y, en el caso de concavidades, se prescinde del signo del jacobiano.

Se debe resaltar que esta modificación de la distorsión original de Oddy, basada en un cambio en el orden en que se realizan las operaciones, aparece de forma natural en la interpretación geométrica que se ha presentado en el subapartado 2.4.2. Esto es así porque en la ecuación (2.10) no se considera el signo del área del paralelogramo local asociado a cada vértice del cuadrilátero (nótese que el área aparece elevada al cuadrado en la expresión de $D_{Oddy,i}$). En la figura 2.17 se muestra un cuadrilátero que presenta una concavidad en el vértice número 4, así como el paralelogramo local asociado a este vértice.

Ambas formas de extender la distorsión, a partir del procedimiento de Oddy o a partir de la interpretación geométrica, son equivalentes. Esta forma de extender la distorsión tiene graves problemas: por un lado no resuelve el caso de cuadriláteros con uno de sus ángulos planos (es decir, triángulos), para los cuales la distorsión sigue valiendo infinito; por otro lado, dado un cuadrilátero A más distorsionado que otro cuadrilátero B, la presente exten-

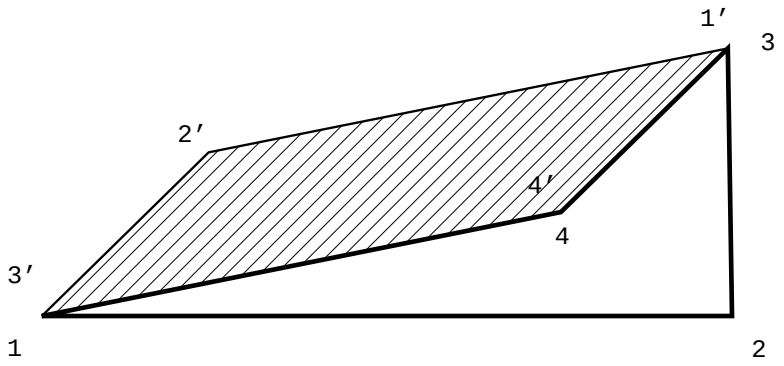


Figura 2.17: Extrapolación de la distorsión de Oddy para cuadriláteros cóncavos. El cuadrilátero (1'2'3'4') es el paralelogramo local del nodo 4 del cuadrilátero (1234)

sión de la medida de la distorsión puede asignar a A un valor inferior o igual al asignado a B. Esto se manifiesta en la figura 2.18, en la que esta extensión de la distorsión tiene el mismo valor en los dos cuadriláteros representados.

Esta última limitación se manifiesta en la aparición de mínimos locales de distorsión. Por ejemplo, en la figura 2.19.a se presenta una malla que contiene un cuadrilátero degenerado (elemento 4567). El objetivo es recolocar, sin modificar la conectividad y sin mover los nodos del contorno, el nodo interior (5) de forma que disminuya la suma total de la distorsión AMD de los elementos de la malla. En la figura 2.19.b se presenta la solución óptima.

En la figura 2.20 se representa la distorsión de Oddy en función de la coordenada y del nodo central, cuando éste se desplaza a lo largo del eje de simetría (2-7) de la figura 2.19. Se observa que existe un mínimo local ($y = 0{,}614$) correspondiente a la malla de la figura 2.19.b. Al aumentar el valor de y aparece un cuadrilátero degenerado (situación que corresponde a la malla de la figura 2.19.a) tipo triángulo, generándose una asíntota vertical. Esta situación corresponde al valor de $y = 1$.

También se observa como hay un mínimo local para $y > 1$, que claramente no nos interesa, puesto que en esta configuración de la malla el elemento superior está muy distorsionado.

En la figura 2.21 se representan las curvas de nivel de la distorsión cuando el nodo interior se desplaza libremente. Nótese que, además de los mínimos locales que aparecían en la figura 2.20, ahora aparecen otros mínimos locales fuera del eje de simetría.

La razón de este comportamiento reside en que la distorsión de Oddy,

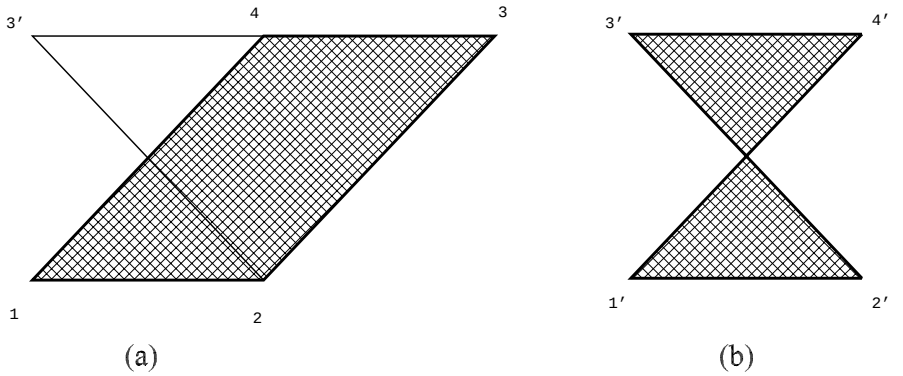


Figura 2.18: **(a)** Paralelogramo (1234). **(b)** cuadrilátero degenerado (1'2'3'4') construido a partir del paralelogramo (1234).

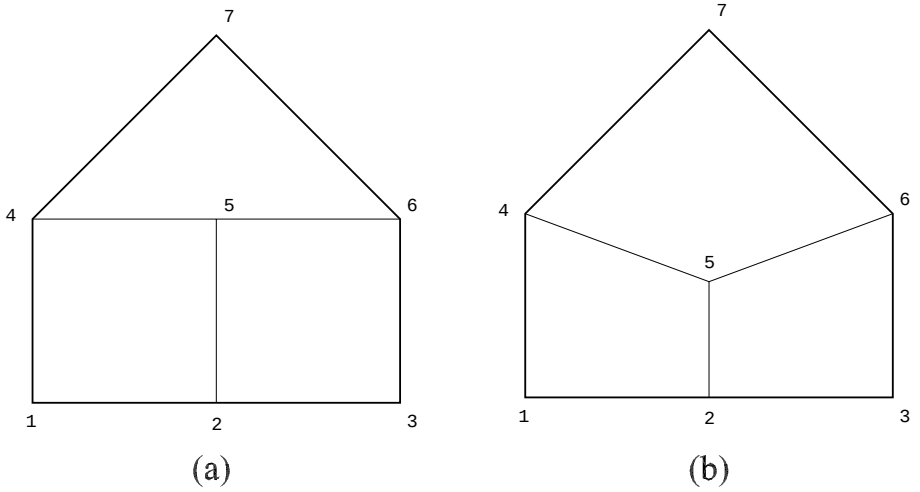


Figura 2.19: Distintas mallas de una misma región. **(a)** Malla que contiene un triángulo. **(b)** Malla de mínima distorsión de Oddy *AMD*

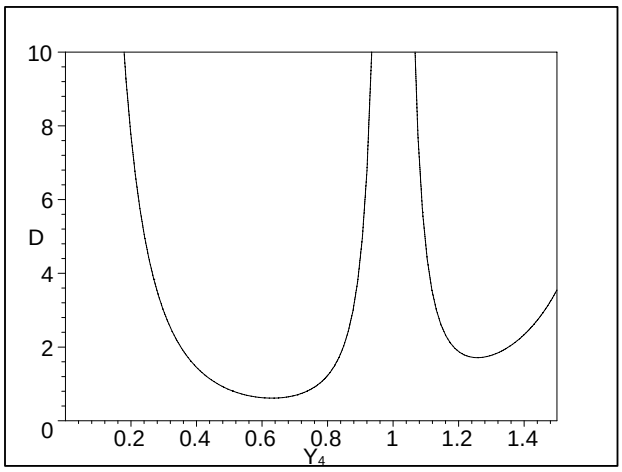


Figura 2.20: Evolución de la distorsión de Oddy original en función de la coordenada y del nodo central(5). El origen de coordenadas coorresponde al punto 2 de la figura 2.19 y los cuadrados de la figura 2.19.a tienen una longitud de lado igual a 1

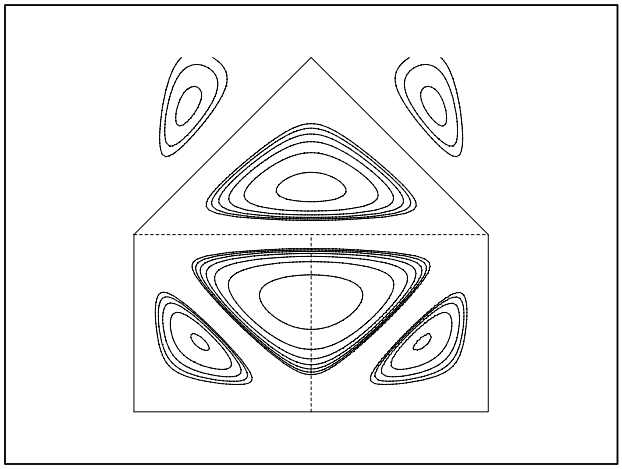


Figura 2.21: Curvas de nivel de la distorsión original en función de las coordenadas del nodo central (5). Cada curva proviene de una unidad de distorsión de 1 a 7

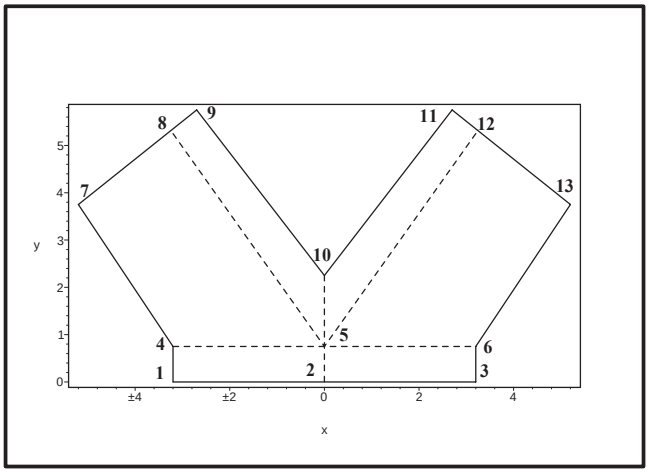


Figura 2.22: Malla en la que los nodos del contorno están fijos y el nodo 5 libre

tal como se ha presentado anteriormente, no tiene en cuenta el signo del jacobiano y esto es la fuente del error. Análogamente, en la interpretación geométrica (ver expresiones (2.11)), el signo de A_i, $i = 1, 2, 3, 4$, desaparece al elevar al cuadrado. El papel de A_i en la interpretación geométrica es el mismo que el del jacobiano. A medida que un ángulo de un nodo tiende a 180^0, A_i se va anulando, y cuando se forma una concavidad A_i toma valores negativos. Sin embargo, esto no se refleja en la distorsión de Oddy.

Los puntos en los que el área se anula representan una asímptota vertical. El conjunto de estas asíntotas verticales dividen el dominio en regiones, dentro de las cuales hay un mínimo local. Este comportamiento se manifiesta a medida que aumenta la complejidad de la malla. Por ejemplo, en la figura 2.22 se muestra una malla formada por 6 elementos. En la figura 2.23 se presentan las curbas de nivel de la distorsión de Oddy cuando se desplaza el nodo 5 por el plano XY dejando fijos los demás nodos. Obsérvese que aparecen tanto asíntotas verticales como mínimos locales.

Pero esto no es todo. Se podria pensar que el único problema de la distorsión de Oddy son sus asíntotas y mínimos locales, de forma que si se encontrara alguna manera de "saltarlas", se podría llegar al mínimo deseado. No es así, porque el mínimo global (el menor de todos los mínimos locales) de la función distorsión de Oddy en la malla de la figura 2.22 no está en el eje de simetría de la malla.

En la figura 2.24 se ve la posición de los mínimos locales de la función y se indica cuál es el mínimo global (en este caso hay dos mínimos globales

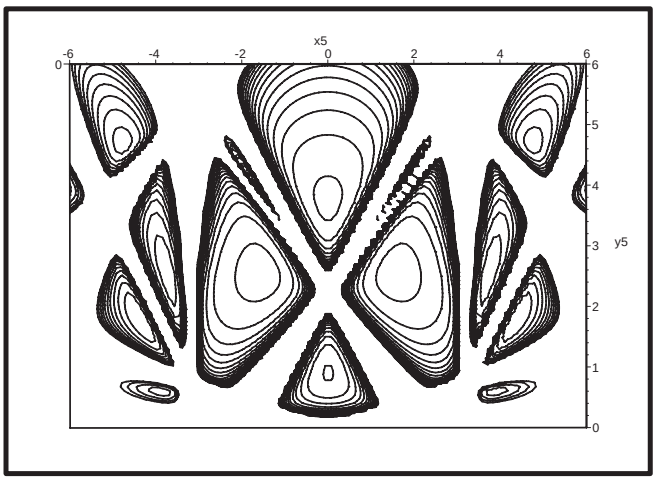


Figura 2.23: Representación de las curvas de nivel de la distorsión de Oddy de la malla de la figura 2.22 en función de la posición del nodo central (5)

puntos G1 y G2). Nótese que ambos mínimos globales producen elementos degenerados. Claramente, el mínimo que se está buscando en el proceso de minimización de la distorsión de Oddy es el punto X. El punto G3 no es el mínimo global, pero es un mínimo inferior al punto X. Los valores de la distorsión de la malla de la figura 2.22 cuando el nodo 5 está en los puntos G1, G2, G3 y X se muestran en la tabla 2.2.

punto	coordenadas	distorsión
G1	(-1.570,2.55)	7.3444
G2	(1.57,2.55)	7.3444
G3	(0,3.74)	7.5968
X	(0,0.90)	9.8293

Cuadro 2.2: Valores de la distorsión de Oddy de la malla de la figura 2.22 cuando el nodo 5 de la misma está en los puntos G1, G2, G3 y X (ver figura 2.24)

A modo de resumen, se debe resaltar que la utilización de la distorsión de Oddy presenta 3 grandes inconvenientes. Estos inconvenientes son:

- existencia de asíntotas en la función
- existencia de múltiples mínimos locales en la función

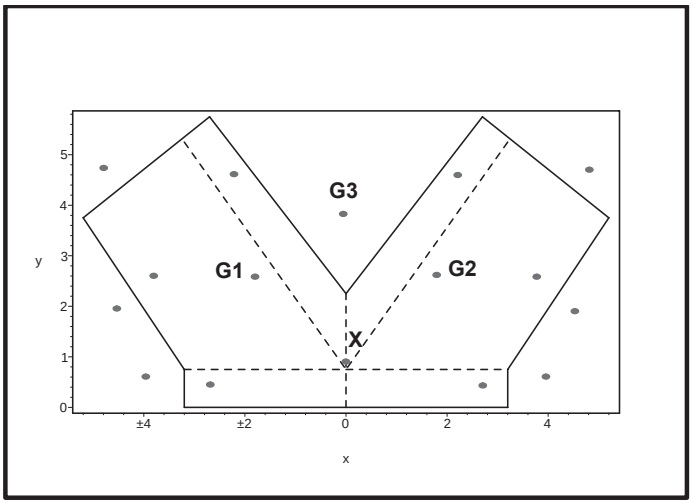


Figura 2.24: Posición aproximada de los mínimos locales de la distorsión de Oddy de la malla de la figura 2.22 (en la zona representada). Los puntos G1 y G2 son los mínimos globales

- el mínimo global de la función puede no ser el que interesa

Es importante resaltar que todos ellos están asociados a la existencia de elementos con nodos cuyos ángulo interno es $\geq 180^o$. Es decir, la existencia de estos inconvenientes está asociada a la presencia de elementos con concavidades. En la figura 2.15.a i 2.15.b, por ejemplo, los cuadriláteros tienen una concavidad en el nodo 4, y en la figura 2.15.c el cuadrilátero presentado tiene dos concavidades: una en el nodo 3 y otra en el nodo 4.

En el subapartado 4.3.2 veremos una forma correcta de modificar la distorsión de Oddy para cuadriláteros. Con la nueva definición, se conseguirá evaluar la distorsión de cuadriláteros degenerados y se podrá utilizar esta medida en un programa de minimización de la distorsión de la malla.

Capítulo 3

Medidas de calidad geométrica en mallas de hexaedros

3.1. Introducción a las medidas de calidad de las mallas de hexaedros

En primer lugar deben obtenerse los grados de libertad que pueden tener las medidas de hexaedros. Aplicando la regla de los grados de libertad (ecuación (2.1)) para hexaedros obtenemos:

$$N_{var} = N_{coor} - N_{trans} - N_{giro} - 1 = 24 - 3 - 2 - 1 = 18$$

Nótese que en el caso de hexaedros el número de variables independientes crece considerablemente si se compara con los cuadriláteros. No vale la pena discutir las 18 posibles variables independientes que se podrían escoger debido al elevado número de variables que entran en juego: 8 aristas, 8 ángulos entre caras y 24 ángulos entre aristas contíguas.

3.1.1. Tipología de hexaedros distorsionados

Análogamente a el caso de los cuadriláteros, en el estudio de la distorsión de los hexaedros nos centraremos en la distorsión de paralepípedos locales asociados. Por este motivo nos interesará conocer las tipologías de paralepípedos distorsionados, que son un caso particular de hexaedros.

La distorsión en los paralepípedos se debe a fenómenos que pueden darse de forma independiente o de forma conjunta, y que pueden actuar segun las tres direccones del espacio:

- Distorsión por cortante

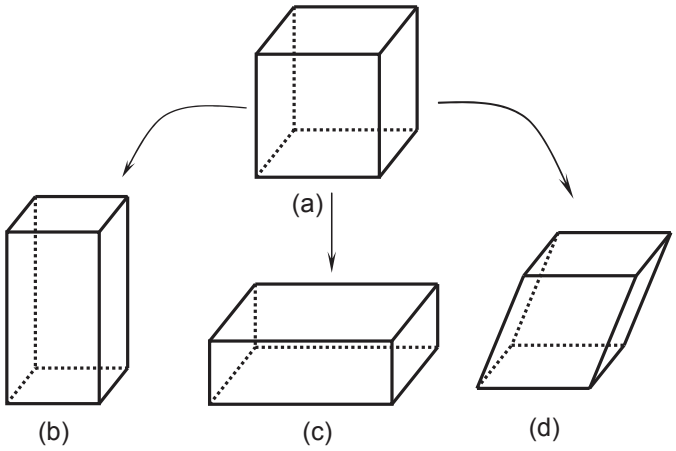


Figura 3.1: Descomposición de la distorsión en cuadriláteros . **(a)** Cubo de referencia. **(b)** Hexaedro sometido a distorsión por compresión uniaxial según un eje. **(c)** Hexaedro sometido a distorsión por compresión uniaxial según dos ejes. **(d)** Hexaedro sometido a distorsión por cortante según dos ejes.

- Distorsión por compresión uniaxial

Como sucedía en problemas bidimensionales, el origen de la denominación de las dos causas de distorsión en hexaedros proviene de asimilar la distorsión de un hexaedro a la deformación que sufre un cubo para conseguir su estado deformado. Aquí también se considera solamente la parte desviadora de la deformación, ya que una deformación hidrostática correspondería a un simple cambio de escala.

En la figura 3.1 se muestra el resultado obtenido al combinar de diferente forma las tipologías de distorsión mencionadas anteriormente.

3.1.2. Características mínimas a exigir a una medida de calidad geométrica de hexaedros

Las características presentadas en el subapartado 2.1.2 son aplicables a cualquier tipo de elemento, por lo tanto, también sirven para una medida de calidad geométrica de hexaedros.

Cabe mencionar que mientras en el subapartado 2.1.2 se hace referencia a los paralelogramos locales, aquí nos referiremos a los paralepípedos locales.

3.2. Reinterpretación de la distorsión de Oddy

La expresión de la distorsión de Oddy (2.5) es aplicable a cualquier tipo de elemento. En este apartado se adaptará la misma para hexaedros.

Análogamente a el caso de los cuadriláteros, es necesaria una nueva interpretación de la distorsión de Oddy, que solvente de manera eficiente los inconvenientes que la versión original presenta. La nueva interpretación presenta las ventajas ya expuestas en el apartado 2.3, es decir:

- se trata de una interpretación puramente geométrica basada en la distorsión de paralepípedos
- proporciona una metodología para definir la distorsión del hexaedro a partir de valores puntuales de la distorsión. Además, permite decidir en qué puntos del hexaedro se debe evaluar la misma
- simplifica el cálculo de la distorsión y de sus derivadas respecto a las coordenadas nodales. Esto es de gran importancia en procesos de minimización de la distorsión de una malla

3.2.1. Distorsión de Oddy en el caso de paralepípedos

Para hallar la distorsión de un hexaedro se procederá análogamente al problema bidimensional. El primer paso será hallar la distorsión de Oddy en el caso particular de los paralepípedos. La distorsión en este tipo de hexaedros es constante en todos los puntos. Esto se deduce del hecho que la matriz jacobiana de la transformación isoparamétrica es constante en todos los puntos del elemento. Aplicando la definición de la distorsión de Oddy (2.5) a un paralepípedo obtenemos que para cualquier punto del mismo ésta vale:

$$D_{Oddy} = \frac{2}{V^{\frac{4}{3}}} \left(\frac{\left(l_1^2 + l_2^2 + l_3^2\right)^2}{3} - (A_1^2 + A_2^2 + A_3^2) \right) \tag{3.1}$$

donde l_1, l_2, l_3, A_1, A_2, A_3 se han definido en la figura 3.2, y V es el volumen del paralepípedo .

Al igual que en el caso de los cuadriláteros, de la expresión (3.1) se puede extraer una medida de calidad geométrica más simple, denominada *eficiencia geométrica modificada*:

$$Q_{Oddy} = \frac{\left(\frac{\left(l_1^2 + l_2^2 + l_3^2\right)^2}{3} - (A_1^2 + A_2^2 + A_3^2) + V^{\frac{4}{3}} \right)^{\frac{3}{4}}}{V} \tag{3.2}$$

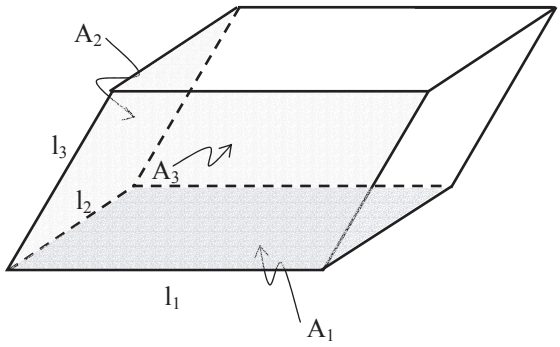


Figura 3.2: Variables que caracterizan a un paralepípedo

Aparentemente la definición de Q_{Oddy}, lejos de simplificar las cosas, las complica, sin embargo más adelante se comentarán detalladamente las ventajas de esta definición. Cabe destacar que el numerador de la expresión (3.2) nunca toma valores negativos: vale cero para un cubo perfecto, y toma valores siempre positivos para cualquier otro hexaedro.

Esta medida de calidad, Q_{Oddy} expresa la misma información que la distorsión de Oddy, tal como se puede ver en la relación existente entre ellas:

$$D_{Oddy} = 2Q_{Oddy}^{\frac{4}{3}} - 2 \tag{3.3}$$

Nótese la similitud de ésta expresión con la de los cuadriláteros (ecuación (2.9)).

La única diferencia entre D_{Oddy} y Q_{Oddy} está en un cambio en la forma de crecimiento, pero la sensibilidad de captar distintas causas de distorsión es la misma.

Esta similitud en el comportamiento de la función distorsión en cuadriláteros y hexaedros facilitará, más adelante, la elección de una función a minimizar válida para cada caso.

3.3. Definición de la distorsión de Oddy de un hexaedro

3.3.1. Cálculo geométrico de la distorsión de Oddy en un punto cualquiera de un hexaedro

Una vez deducida una expresión simplificada para calcular la distorsión de Oddy en el caso de paralepípedos (3.1), el objetivo es utilizar este resultado

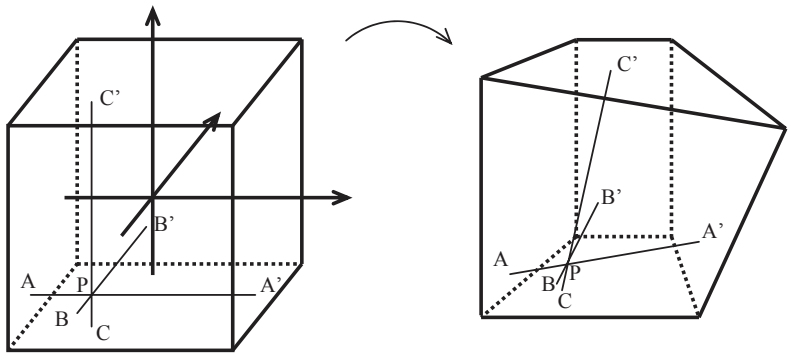


Figura 3.3: Transformación isoparamétrica de rectas paralelas a los lados del cubo de referencia: AA', BB' y CC'

para el cálculo de la distorsión en hexaedros en general.

Al igual que en el caso bidimensional, la transformación isoparamétrica bilineal tiene la siguiente propiedad: la imagen de un segmento recto paralelo a uno de los lados del cubo de referencia es otro segmento recto (ver figura 3.3).

Este resultado también permite definir el concepto de paralepípedo local asociado a un punto P cualquiera de un hexaedro). Éste se define como el paralepípedo que tiene por lados los segmentos imagen de los segmentos paralelos a los lados del cubo de referencia que pasan por el punto P (ver figura 3.4).

El resultado final es el siguiente: la distorsión de Oddy en un punto de un hexaedro cualquiera es la distorsión del paralepípedo local asociado a este punto (ver la demostración en el apéndice B).

3.3.2. Puntos de evaluación de la distorsión

En el apartado 2.4 se ha puesto de manifiesto que desde el punto de vista de generación de mallas es preferible una medida global de la distorsión. Desafortunadamente la distorsión de Oddy es una medida puntual. Se consideran las mismas alternativas que en el caso bidimensional para la elección de los puntos de evaluación de la distorsión en el elemento:

- Distorsión global definida a partir de los valores de la distorsión puntual en los vértices del elemento
- Distorsión global definida a partir del valor de la distorsión puntual en el centro del elemento

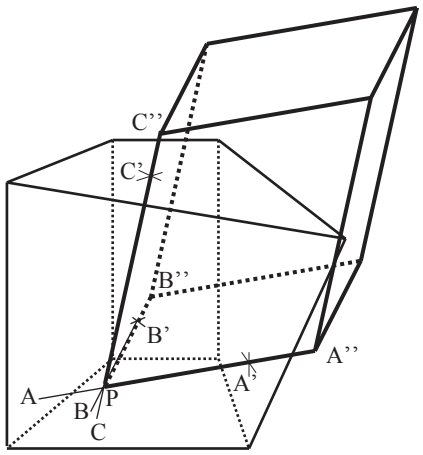


Figura 3.4: Paralepípedo local asociado a un punto P de un hexaedro cualquiera, AA'=PA", BB'=PB" y CC'=PC"

- Distorsión global definida a partir de los valores de la distorsión puntual en los puntos de Gauss del elemento

Como en los problemas bidimensionales, también es recomendable definir la distorsión global a partir de los valores de la distorsión puntual en los vértices del elemento. Si se calcula la distorsión de Oddy según su interpretación geométrica, se llega fácilmente a la conclusión que la distorsión de Oddy en un nodo de un hexaedro cualquiera es la distorsión del paralepípedo formado por los lados adyacentes al nodo, tal como se muestra en la figura 3.5. Por ejemplo, la distorsión de Oddy en el nodo 1 es:

$$\begin{aligned} Q_{Oddy,1} &= \frac{\left(\frac{\left(l_2^2+l_4^2+l_5^2\right)^2}{3} - (A_{24}^2+A_{45}^2+A_{25}^2) + V^{\frac{4}{3}}\right)^{\frac{3}{4}}}{V_1} \\ D_{Oddy,1} &= 2Q_{Oddy,1}^{\frac{4}{3}} - 2 \end{aligned} \tag{3.4}$$

donde, de acuerdo con la figura 3.5, l_2,l_4 y l_5 son las longitudes de los segmentos $\overline{12}$, $\overline{14}$ y $\overline{15}$, y valen:

$$\begin{aligned} l_2^2 &= (x_2-x_1)^2+(y_2-y_1)^2+(z_2-z_1)^2 \\ l_4^2 &= (x_4-x_1)^2+(y_4-y_1)^2+(z_4-z_1)^2 \\ l_5^2 &= (x_5-x_1)^2+(y_5-y_1)^2+(z_5-z_1)^2 \end{aligned} \tag{3.5}$$

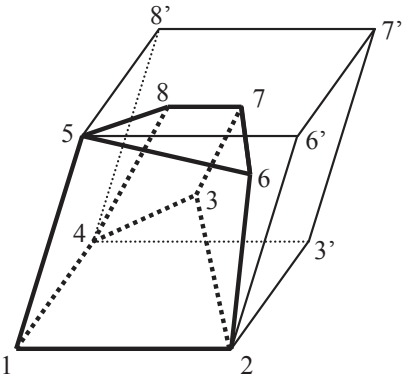


Figura 3.5: Paralepípedo (123'456'7'8'), que tiene la misma distorsión que el hexaedro (12345678) en el nodo 1

A_{24}, A_{45} y A_{25} son las áreas de los paralelogramos $123'4$ $148'5$ y $126'5$, y valen:

$$\begin{aligned}
A_{24}^2 &= ((y_2-y_1)(z_4-z_1)-(z_2-z_1)(y_4-y_1))^2 + \\
&\quad ((x_2-x_1)(y_4-y_1)-(y_2-y_1)(x_4-x_1))^2 + \\
&\quad ((x_4-x_1)(z_2-z_1)-(z_4-z_1)(x_2-y_1))^2 \\
A_{45}^2 &= ((y_4-y_1)(z_5-z_1)-(z_4-z_1)(y_5-y_1))^2 + \\
&\quad ((x_4-x_1)(y_5-y_1)-(y_4-y_1)(x_5-x_1))^2 + \\
&\quad ((x_5-x_1)(z_4-z_1)-(z_5-z_1)(x_4-y_1))^2 \\
A_{25}^2 &= ((y_5-y_1)(z_2-z_1)-(z_5-z_1)(y_2-y_1))^2 + \\
&\quad ((x_5-x_1)(y_2-y_1)-(y_5-y_1)(x_2-x_1))^2 + \\
&\quad ((x_2-x_1)(z_5-z_1)-(z_2-z_1)(x_5-y_1))^2
\end{aligned} \tag{3.6}$$

V_1 es el volumen del paralepípedo local asociado al nodo 1 ($123'456'7'8'$) y vale:

$$\begin{aligned}
V_1 &= ((y_2-y_1)(z_4-z_1)-(z_2-z_1)(y_4-y_1))\,(x_5-x_1) + \\
&\quad ((x_4-x_1)(z_2-z_1)-(z_4-z_1)(x_2-x_1))\,(y_5-y_1) + \\
&\quad ((x_2-x_1)(y_4-y_1)-(y_2-y_1)(x_4-x_1))\,(z_5-z_1)
\end{aligned} \tag{3.7}$$

De las expresiones (3.4), (3.5), (3.6) y (3.7) se deduce que la distorsión de Oddy en un nodo de un hexaedro sólo depende de las posiciones de los nodos adyacentes al mismo. Por ejemplo, en el hexaedro de la figura 3.5 la

distorsión en el nodo 1 sólo depende de las coordenadas de los nodos 1, 2, 4 y 5.

Siguiendo el criterio de enumeración de los nodos adyacentes que se muestra en la figura 3.6 (criterio dextrogiro, regla de la mano derecha), se pueden generalizar las ecuaciones (3.4) para un nodo i cualquiera, $i = 1, ..., 8$:

$$
\begin{aligned}
l_{i2}^2 &= (x_{i2} - x_i)^2 + (y_{i2} - y_i)^2 + (z_{i2} - z_i)^2 \\
l_{i3}^2 &= (x_{i3} - x_i)^2 + (y_{i3} - y_i)^2 + (z_{i3} - z_i)^2 \\
l_{i4}^2 &= (x_{i4} - x_i)^2 + (y_{i4} - y_i)^2 + (z_{i4} - z_i)^2 \\
A_{i2i3}^2 &= ((y_{i2} - y_i)(z_{i3} - z_i) - (z_{i2} - z_i)(y_{i3} - y_i))^2 + \\
&\quad ((x_i 2 - x_i)(y_{i3} - y_i) - (y_{i2} - y_i)(x_{i3} - x_i))^2 + \\
&\quad ((x_{i3} - x_i)(z_{i2} - z_i) - (z_{i3} - z_i)(x_{i2} - y_i))^2 \\
A_{i3i4}^2 &= ((y_{i3} - y_i)(z_{i4} - z_i) - (z_{i3} - z_i)(y_{i4} - y_i))^2 + \\
&\quad ((x_{i3} - x_i)(y_{i4} - y_i) - (y_{i3} - y_i)(x_{i4} - x_i))^2 + \\
&\quad ((x_{i4} - x_i)(z_{i3} - z_i) - (z_{i4} - z_i)(x_{i3} - y_i))^2 \\
A_{i2i4}^2 &= ((y_{i4} - y_i)(z_{i2} - z_i) - (z_{i4} - z_i)(y_{i2} - y_i))^2 + \\
&\quad ((x_{i4} - x_i)(y_{i2} - y_i) - (y_{i4} - y_i)(x_{i2} - x_i))^2 + \\
&\quad ((x_{i2} - x_i)(z_{i4} - z_i) - (z_{i2} - z_i)(x_{i4} - y_i))^2 \\
V_i &= ((y_{i2} - y_i)(z_{i3} - z_i) - (z_{i2} - z_i)(y_{i3} - y_i))(x_{i4} - x_i) + \\
&\quad ((x_{i3} - x_i)(z_{i2} - z_i) - (z_{i3} - z_i)(x_{i2} - x_i))(y_{i4} - y_i) + \\
&\quad ((x_{i2} - x_i)(y_{i3} - y_i) - (y_{i2} - y_i)(x_{i3} - x_i))(z_{i4} - z_i) \\
Q_{Oddy,i} &= \frac{\left(\frac{\left(l_{i2}^2 + l_{i3}^2 + l_{i4}^2\right)^2}{3} - (A_{i2i3}^2 + A_{i3i4}^2 + A_{i2i4}^2) + V_i^{\frac{4}{3}}\right)^{\frac{3}{4}}}{V_i} \\
D_{Oddy,i} &= 2Q_{Oddy,i}^{\frac{4}{3}} - 2
\end{aligned}
\tag{3.8}
$$

donde $l_{i2}, l_{i3}, l_{i4}, A_{i2i3}, A_{i3i4}$ y A_{i2i4} se muestran en la figura 3.6, y V_i es el volumen del paralepípedo local asociado al nodo i.

Las otras dos alternativas en la elección de los puntos de evaluación de la distorsión presentan las mismas características que en los problemas bidimensionales (ver subapartado 2.4.2). Por ejemplo, es fácil generalizar a hexaedros la problemática de evaluar la distorsión sólo en el centro del elemento. Concretamente, la figura 3.7 muestra un hexaedro muy distorsionado tal que el paralepípedo local asociado al dentro del elemento es un cubo y, por tanto, tiene distorsión nula.

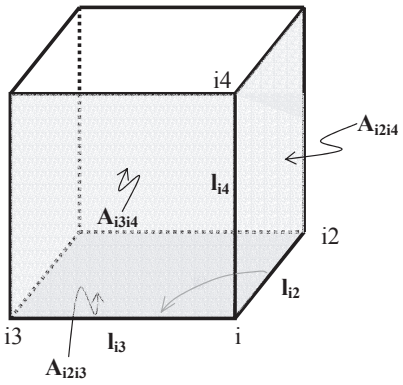


Figura 3.6: Criterio dextrogiro (regla de la mano derecha) de enumeración de los nodos adyacentes a un nodo i

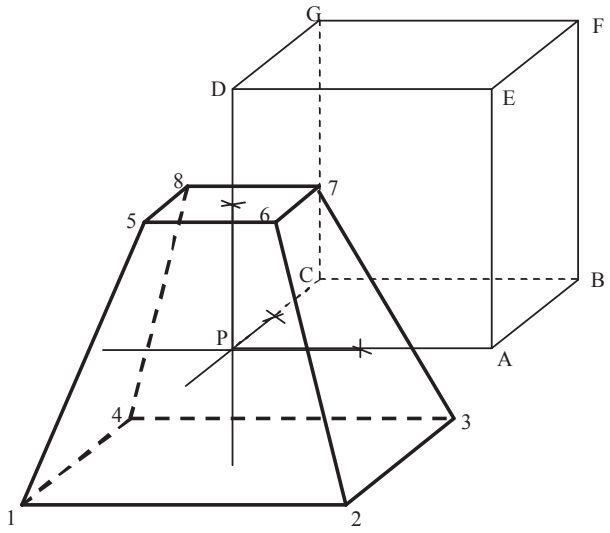


Figura 3.7: Hexaedro (12345678) con distorsión nula en el centro. Paralepípedo local asociado al centro del elemento (PABCDEFG)

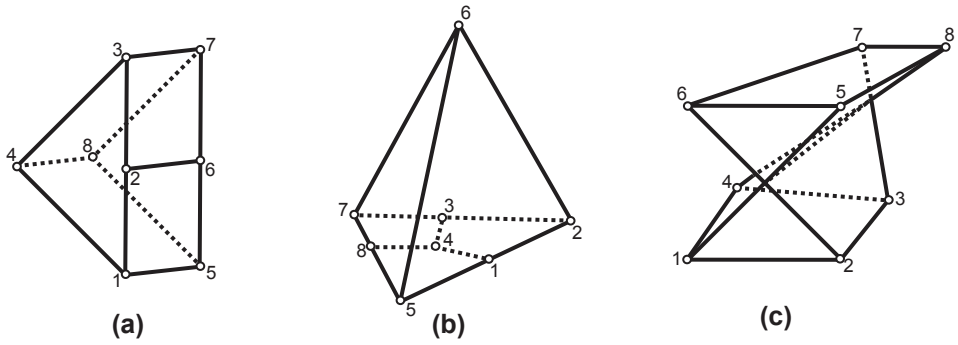


Figura 3.8: Hexaedros degenerados.

3.3.3. Definición de la distorsión elemental

Las consideraciones presentadas en el subapartado 2.4.3 se extienden de forma natural a problemas tridimensionales. Concretamente, la distorsión elemental definida como la media aritmética de las distorsiones nodales (o *Arithmetic Mean Distortion* (AMD)) es la definida en la ecuación (2.13).

En adelante utilizaremos, la media aritmética de las distorsiones nodales (AMD) para medir la calidad geométrica de los elementos de una malla de hexaedros. Con el fin de simplificar la notación se omitirá el subíndice AMD.

3.4. Limitaciones de la distorsión de Oddy

Al igual que en el caso de los cuadriláteros, la distorsión de Oddy aplicada a hexaedros tiene algunas limitaciones. Concretamente, su correcta definición se restringe a hexaedros no degenerados o convexos. La visualización de hexaedros degenerados no es tan fácil como en el caso bidimensional dado que algunos hexaedros degenerados no tienen caras planas, sino que son superficies alabeadas. En la figura 3.8 se muestran algunos ejemplos de hexaedros degenerados.

La mayor complejidad de las mallas de hexaedros con respecto a las de cuadriláteros produce con mayor facilidad elementos degenerados.

Las tres limitaciones de la distorsión de Oddy, que imposibilitan su correcta minimización, son:

- Existencia de asíntotas en la función

La distorsión de Oddy tiende a infinito a medida que el jacobiano de la transformación isoparamétrica tiende a cero. Geométricamente, esto significa

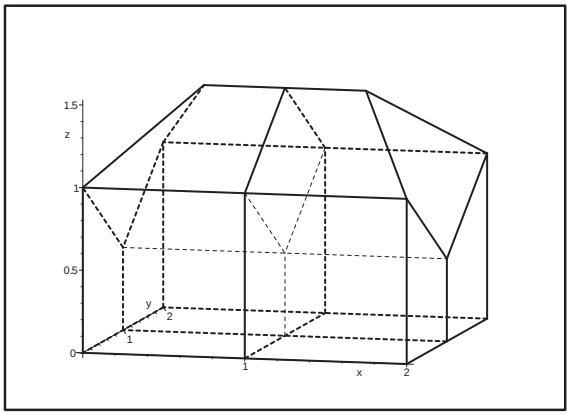


Figura 3.9: Malla de hexaedros con todos los nodos del contorno fijos, y el nodo central libre.

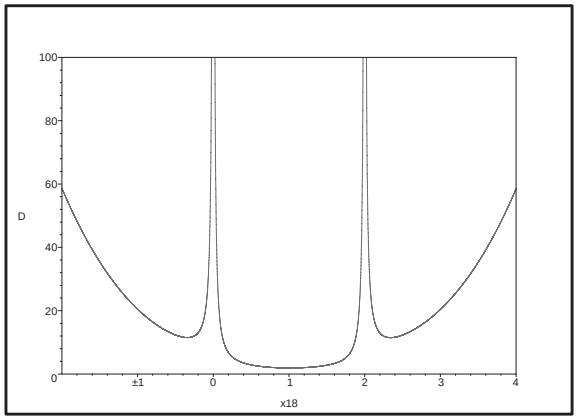
que el paralepípedo local asociado al punto donde se evalúa la distorsión tiende a tener todas las caras en el mismo plano. Este caso se da cuando las tres aristas adyacentes al nodo donde se evalúa la distorsión son coplanares o, lo que es lo mismo, cuando el hexaedro tiene dos o tres caras coplanares. Los hexaedros **(a)** y **(b)** de la figura 3.8 presentan este problema. Para el hexaedro **(a)** los paralepípedos locales asociados a los nodos 2 y 6 tienen volumen nulo, y para el hexaedro **(b)** el paralepípedo local asociado al nodo 4 tiene volumen nulo.

- Existencia de múltiples mínimos locales en la función

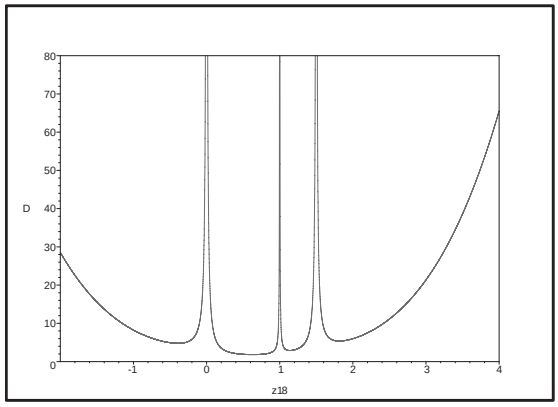
Como se ha comentado anteriormente, los puntos en que el volumen se anula representan asíntotas verticales. Éstas dividen el dominio en regiones. Dentro de cada región se encuentra un mínimo local de la función.

En la figura 3.9 se presenta una malla en la que el nodo central se puede mover paralelamente al eje x. Evidentemente, la mejor malla posible se da para $x = 1$ (teniendo en cuenta la simetría de la malla) pero la figura 3.10.a muestra como, además de este mínimo, hay otros mínimos locales cuando el nodo se sitúa fuera del contorno. Si se considera que el nodo central de la malla puede moverse en las tres direcciones del espacio aparecen muchos mínimos locales más. En particular, la figura 3.10.b muestra los mínimos locales que aparecen en la distorsión de Oddy al mover el nodo central de la malla de la figura 3.9 paralelamente al eje z.

La razón de este comportamiento reside en que en la interpretación geométrica de la distorsión de Oddy (ver ecuación (3.8)) el signo de V_i, $i = 1, 2, ..., 8$, desaparece al elevarlo a $\frac{4}{3}$. A medida que las tres caras adyacentes a un nodo



(a)



(b)

Figura 3.10: Distorsión de Oddy de la malla de la figura 3.9 al mover su nodo central **(a)** paralelamente al eje x, y **(b)** paralelamente al eje z.

tienden a ser coplanares V_i se va anulando y, cuando se forma una concavidad V_i toma valores negativos. Sin embargo, esto no se refleja en la distorsión de Oddy.

- El mínimo global de la función puede no ser el que interesa

Al igual que en los problemas bidimensionales, hay casos en los que el mínimo global de la función (el menor de todos los mínimos locales) se da para configuraciones en las que hay algún elemento degenerado.

En definitiva, la utilización de la medida de la distorsión de Oddy para evaluar la distorsión de un hexaedro no se garantiza que ésta se pueda calcular, ni que un hexaedro A más distorsionado que otro hexaedro B presente un valor de distorsión de Oddy más elevado.

Al igual que pasaba en el problema bidimensional, los tres inconvenientes mencionados de la distorsión de Oddy están asociados a la presencia de elementos degenerados. En este caso se considera que un elemento es degenerado cuando el ángulo formado por dos caras adyacentes del mismo es $\geq 180^o$. Es decir, la presencia de estos inconvenientes está asociada a la presencia de elementos con concavidades. En la figura 3.8.a, por ejemplo, el hexaedro representado tiene una concavidad en el nodo 2 y otra en el nodo 6. En la figura 3.8.b el hexaedro representado tiene una concavidad en los nodos 1,3,4 y 8, y el hexaedro de la figura 3.8.c tiene una concavidad en los nodos 5,6,7 y 8.

En el capítulo 4.3.3 se mostrará una forma correcta de modificar la distorsión de Oddy, consiguiendo evaluar la distorsión de hexaedros degenerados y podiendo utilizar esta medida en un programa de minimización de la distorsión de una malla.

Capítulo 4

Aplicación de la distorsión de Oddy como medida de calidad en el suavizado de mallas de cuadriláteros y de hexaedros

4.1. Concepto de suavizado. Técnicas actuales de suavizado

El suavizado de una malla es la mejora de la calidad geométrica de la misma sin modificar su topología. Es decir, en el proceso de suavizado no se quitan ni se añaden nodos y tampoco se cambia la conexión entre ellos. Solamente se cambia la posición de algunos nodos para conseguir disminuir la distorsión de la malla.

En una malla bidimensional, cada nodo tiene 2 coordenadas, y en una tridimensional 3. Estas coordenadas se pueden fijar o se pueden dejar mover libremente en el proceso de suavizado. A las coordenadas que se fijan se las denomina *coordenadas fijas* y a las que se pueden mover libremente se las denomina *coordenadas libres*. Es usual fijar las coordenadas de los nodos del contorno, ya que generalmente el contorno no debe modificarse en el proceso de suavizado. Sin embargo, es posible permitir dejar que los nodos del contorno se puedan desplazar sobre el mismo. En esta situación, las coordenadas de estos nodos presentan una ligadura (la restricción de pertenecer siempre al contorno).

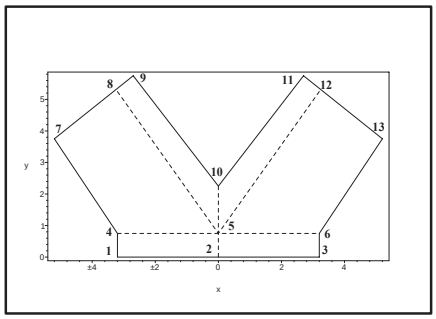
Estos conceptos se pueden entender mejor con el ejemplo presentado anteriormente en la figura 2.19. En este ejemplo, las coordenadas del nodo 5 son coordenadas libres, las coordenadas de los nodos 1, 2, 3, 4, 6 y 7 son

fijas. También sería posible dejar libre la coordenada x del nodo 2, ya que el contorno alrededor de este nodo es paralelo al eje X.

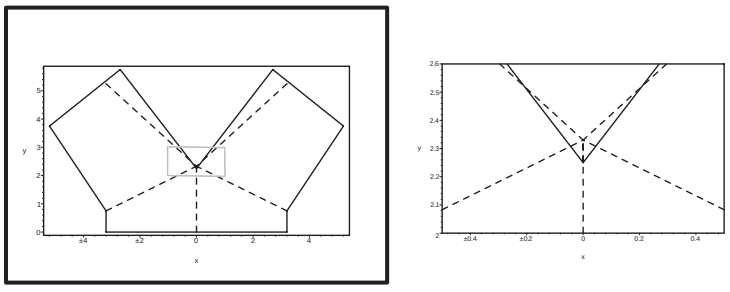
Se pueden clasificar los métodos para realizar el suavizado de una malla en dos tipos. El primero está formado por el método laplaciano y otros métodos derivados o equivalentes a él [5, 10]. En términos generales, estos métodos calculan la nueva posición de los nodos como la resolución de la ecuación de Laplace mediante alguna técnica iterativa. Estos métodos presentan dos graves inconvenientes. Por una parte, resulta muy costoso evitar que en el proceso de suavizado los nodos situados cerca de vértices donde eldominio es no convexo se desplacen a posiciones exteriores al dominio. Por otra parte, estos métodos no calculan la nueva posición de los nodos a partir de alguna medida de la distorsión.

El segundo tipo de métodos se basa en criterios geométricos como el algoritmo debido a Giuliani [4]. En él, se modifica la posición de cada nodo interior de forma que se minimiza una medida de la distorsión media de los elementos que forman el dominio de influencia del nodo (ver detalles en [4]). Es importante resaltar que la medida de la distorsión que se minimiza no coincide, en general, con la medida que posteriormente se utiliza para medir la distorsión de la malla. Esta minimización se realiza mediante un algoritmo iterativo tipo Gauss-Seidel. Se trata de un método más robusto que el Laplaciano, y una de sus ventajas más importantes reside en la dificultad de que determinados nodos sean desplazados al exterior del dominio. Sin embargo, en la figura 4.1.b se puede apreciar como el nodo 5 de la malla, después de ser ésta suavizada mediante el método de Giuliani,pasa a estar fuera del contorno. Estos problemas aparecen cuando los contornos tienen ángulos fuertemente agudos.

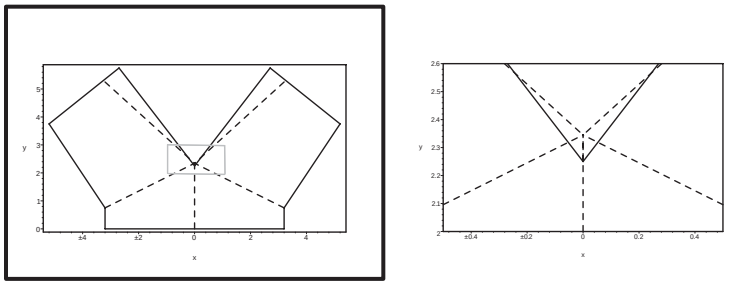
La utilización de este método sobre mallas en las que aparecen pequeños gradientes de la densidad nodal ha proporcionado muy buenos resultados. Sin embargo, su aplicación a mallas donde aparecen variaciones importantes de la densidad nodal produce resultados poco satisfactorios. Una de las consecuencias de este comportamiento consiste en que las zonas donde se ha prescrito valores altos de la densidad nodal, tienden a perder densidad después de varias iteraciones. Sarrate [9] introduce una modificación al método original de Giuliani para solventar este problema, aunque, tal y como muestra la figura 4.1.c, este método tampoco resuelve los problemas de contornos con ángulos fuertemente agudos. En ambos métodos [4, 9] cada iteración es explícita.



(a)



(b)



(c)

Figura 4.1: **(a)** Ejemplo de malla sin suavizar. **(b)** La misma malla que a. suavizada mediante el método de Giuliani [4] con ampliación de la zona central. **(c)** La misma malla que a. suavizada mediante el método de Giuliani modificado [9] con ampliación de la zona central.

4.2. Suavizado de una malla a partir de la minimización de una medida de calidad geométrica global

Al igual que los métodos introducidos por Giuliani [4] y por Sarrate [9], esta técnica de suavizado consiste en minimizar una medida de la distorsión de los elementos de la malla. Sin embargo, difiere de estas técnicas en varios aspectos:

- Se utiliza una medida de la distorsión elemental propia de los elementos estudiados (en nuestro caso, cuadriláteros y hexaedros)
- Se define una medida de la calidad de la malla a partir de la distorsión de todos los elementos de la misma
- Se resuelve mediante una técnica iterativa implícita que modifica la posición de todos los nodos libres en cada iteración, es decir, es una técnica global

Se ha optado por utilizar una medida de la distorsión elemental propia de los elementos en cuestión porque, en principio, tiene más sentido minimizar la medida que después utilizaremos para medir la calidad de la malla. De esta manera, la malla resultante del proceso de minimización será la de mínima distorsión. No obstante, tendrá sentido utilizar otras medidas [4, 9] si la técnica de suavizado resultante es computacionalmente más eficiente y lleva a resultados satisfactorios.

Al utilizar una medida de la calidad de la malla a partir de la distorsión de todos sus elementos se pretende que cada iteración suavice a toda la malla. De esta forma, cada iteración resulta más eficiente. Sin embargo, el coste de cada una de ellas es mayor que el coste de una iteración de una técnica de suavizado local [4, 9]. Aunque el método es computacionalmente más caro, los resultados obtenidos son claramente más satisfactorios.

Nos topamos con el principal problema de utilizar una medida de la calidad de la malla a partir de la distorsión de todos sus elementos, sin embargo, veremos que los resultado obtenidos son visiblemente mejores.

En los apartados siguientes se desarrollará esta técnica global de suavizado. La presentación de dicha técnica se divide en tres partes:

- Elección de la función a minimizar, que será diferente para cuadriláteros y hexaedros (apartado 4.3).
- Desarrollo del algoritmo de minimización (apartado 4.4).

- Implementación de este algoritmo (apartado 4.5).

4.3. Elección de la función a minimizar

4.3.1. Definiciones generales

Una de las conclusiones de los capítulos 2 y 3 es que la distorsión de Oddy [6] es una buena medida de la calidad geométrica de los cuadriláteros y hexaedros. En dichos capítulos también se analizan las alternativas para definir la distorsión elemental a partir de los valores puntuales de distorsión y, concretamente, se recomienda la definición de la distorsión como la media aritmética de las distorsiones nodales, AMD (ecuación (2.13)). Ahora queda por definir la distorsión global de la malla a partir de las distorsiones elementales. Por motivos computacionales, que se especificarán más adelante, es conveniente definir la distorsión global como suma de las contribuciones elementales:

$$D_{malla} = \sum_{e=1}^{N_{elem}} f(D^e_{Oddy})$$

donde N_{elem} es el número de elementos de la malla, f es una función de la distorsión elemental y D_{malla} es la distorsión de la malla. En principio, f debe ser una función monótona estrictamente creciente para que la distorsión de la malla resultante sea coherente. Para escoger f de forma rigurosa se debería tener información más concreta del problema para el que se utilizará la malla, y esto escapa de los objetivos de este estudio. Por simplicidad, tomaremos f igual a la identidad, es decir, la distorsión de la malla se definirá como:

$$D_{malla} = \sum_{e=1}^{N_{elem}} D^e_{Oddy} \tag{4.1}$$

Además, si se define la distorsión del elemento mediante la ecuación (2.13), entonces esta forma de definir la distorsión de la malla tiene una propiedad que proporcionará otra forma de entenderla:

$$\begin{aligned} D_{malla} &= \sum_{e=1}^{N_{elem}} D^e_{Oddy} = \sum_{e=1}^{N_{elem}} \frac{1}{N_{en}} \sum_{i=1}^{N_{en}} D^e_{Oddy,i} = \\ &= \frac{1}{N_{en}} \sum_{k=1}^{N_{pl}} D_{Oddy,k} \end{aligned} \tag{4.2}$$

donde N_{en} es el número de nodos por elemento (4 en el caso de cuadriláteros y 8 en el de hexaedros), y N_{pl} es el número de paralelogramos o paralepípedos locales de los nodos de la malla y vale $N_{pl} = N_{en}N_{elem}$. Obsérvese que $D^e_{Oddy,i}$ es la distorsión de Oddy del nodo i del elemento e, y $D_{Oddy,k}$ es la distorsión de Oddy del k-ésimo paralelogramo o paralepípedo local del elemento. En el caso de los cuadriláteros, a cada elemento de la malla le corresponden 4 paralelogramos locales, 1 por nodo. En cambio, el número de paralelogramos locales por nodo es variable en función de la estructura de la malla. Por ejemplo, en una malla estructurada cada nodo tiene 4 paralelogramos locales. En general un nodo tendrá tantos paralelogramos locales como elementos distintos a los que pertenezca dicho nodo. Un razonamiento análogo se puede hacer con las mallas de hexaedros. Esta nueva forma de interpretar la distorsión consiste en que se puede expresar la distorsión de la malla como suma de las contribuciones de cada uno de los paralelogramos o paralepípedos locales de los nodos de la malla (ver (4.2)).

Nótese que el factor $\frac{1}{N_{en}}$ no influye a la hora de minimizar la función distorsión, puesto que es una constante.

4.3.2. Modificación de la distorsión de Oddy para cuadriláteros

En el capítulo 2 se presentaban las limitaciones de la distorsión de Oddy, que consistían básicamente en la imposibilidad de evaluar de forma correcta la distorsión de cuadriláteros degenerados. Desafortunadamente, la malla inicial a suavizar presenta en muchas ocasiones este tipo de cuadriláteros y, por consiguiente, se tendrá que poder evaluar su distorsión. En este sentido, parece necesario que en los instantes iniciales del proceso de suavizado se deberá utilizar una modificación de la distorsión de Oddy. Al final del proceso la malla sólo tendrá cuadriláteros convexos y se utilizará la distorsión de Oddy original para medir la calidad sin ningún problema. Adicionalmente, puede suceder que en el proceso de suavizado aparezca algún elemento degenerado, por lo tanto, también será necesaria una modificación de la distorsión de Oddy para estos casos.

En este apartado se presenta una modificación de la distorsión de Oddy para poder tratar elementos altamente distorsionados. El principio general de esta modificación va a ser mantener la distorsión en su forma original donde no existan problemas (es decir, cuando todos los elementos sean convexos) y modificarla donde no sea posible evaluarla de forma correcta (cuando los elementos presenten concavidades). Con este principio, se pretende llegar a la misma solución óptima que se obtendría si fuera posible minimizar la

distorsión de Oddy original.

En primer lugar se define una medida para paralelogramos, que es el inverso de Q_{Oddy} (2.8):

$$q_{Oddy} = \frac{1}{Q_{Oddy}} = \frac{2A}{l_1^2 + l_2^2}$$

siendo $A = l_1 l_2 sin\alpha$, donde α, l_1 y l_2 se han definido en la figura 2.5.

Puesto que la expresión anterior está definida para paralelogramos, también se puede definir la $q_{Oddy,i}$ para un nodo i, $i = 1, 2, 3, 4$, de un cuadrilátero en general:

$$q_{Oddy,i} = \frac{1}{Q_{Oddy,i}} = \frac{2A_i}{l_i^2 + l_{[i+3]}^2} \tag{4.3}$$

donde el significado de las variables es el mismo que el de las expresiones de (2.11).

En consecuencia, la función global a minimizar, D_{malla} se puede escribir como:

$$D_{malla} = \frac{1}{N_{en}} \sum_{k=1}^{N_{pl}} 2(\frac{1}{q_{Oddy,k}^2} - 1) \tag{4.4}$$

donde el subíndice k hace referencia a una numeración de los paralelogramos locales de los nodos de la malla.

La introducción de esta nueva medida q_{Oddy}, viene motivada por un mayor control sobre las asíntotas de la función a minimizar (ver capítulo 2). Estas asíntotas se producen cuando el denominador de la expresión de Q_{Oddy} se hace nulo, por lo tanto, cuando $q_{Oddy} = 0$. Nótese que es más fácil controlar cuando un valor esta cerca del 0 que controlar cuando un valor es excesivamente grande.

Nótese que al ser q_{Oddy} el inverso de Q_{Oddy}, la minimización de Q_{Oddy} se puede enfocar desde el punto de vista de la maximización de q_{Oddy}.

Seguidamente se presenta un test, denominado *el test del cuadriátero*, que servirá de base para la modificación de la distorsión de Oddy. Sea el cuadrado determinado por los vértices (1234) (ver figura 4.2), en el que los puntos 2, 3 y 4 permanecen fijos y el nodo 1 puede moverse libremente sobre el eje X, siendo x la coordenada del nodo 1 en este eje. El objetivo de este ejemplo es mostrar como varía la distorsión de Oddy evaluada en el punto libre 1 al moverse éste a lo largo del eje X. Se estudia el comportamiento de la distorsión en un nodo porque la modificación de la distorsión de Oddy se realiza a partir de la modificación de la distorsiones puntuales y no de la modificación de la distorsión elemental. Nótese que la degeneración de un

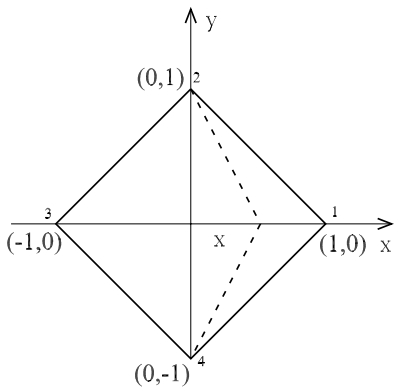


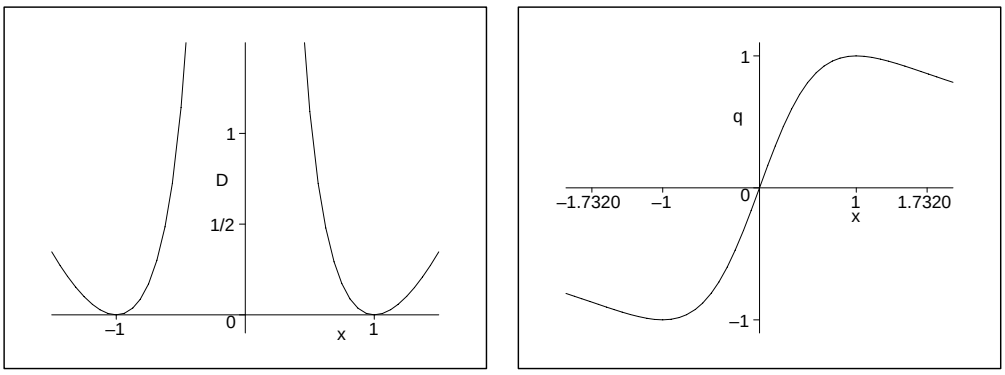
Figura 4.2: Significado de las variables que intervienen en el test del cuadrilátero.

cuadrilátero se atribuye a la posición deficiente de uno de sus nodos, y es la distorsión en este nodo lo que hace que la distorsión de Oddy original no se pueda evaluar.

En la figura 4.3.a se presenta la gráfica correspondiente a la evolución de $D_{Oddy,1}$ en función de la coordenada x del nodo 1. Como era de esperar, para $x > 0$ (cuadriláteros convexos) aparece una rama cóncava con un mínimo en $x = 1$ (correspondiente a un cuadrado). Para $x = 0$ aparece una asíntota vertical asociada a un cuadrilátero degenerado a triángulo. Este resultado ya se enunciaba en el apartado 2.5, cuando se introducían las limitaciones de la distorsión de Oddy. Para $x < 0$ (cuadriláteros cóncavos) se extiende la definición de la distorsión de Oddy de acuerdo con el apartado 2.5 (extensión mediante la modificación del orden en que se realizan las operaciones para calcular la distorsión de Oddy). Como puede observarse, aparece un comportamiento incorrecto con la presencia de un mínimo local en $x = -1$. En la figura 4.3.b se representa la evolución de $q_{Oddy,1}$ (ver ecuación (4.3)) también en función de la coordenada x del nodo 1. En principio, $D_{Oddy,i}$ y $q_{Oddy,i}$ expresan la misma información ya que tienen la misma sensibilidad en captar las distintas causas de la distorsión de los cuadriláteros. Esto se debe a que existe una relación entre ambas:

$$D_{Oddy,i} = 2\left(\frac{1}{q^2_{Oddy,i}} - 1\right) \tag{4.5}$$

Sin embargo, aparecen distintas diferencias entre $D_{Oddy,i}$ y $q_{Oddy,i}$ debidas a:



(a) **(b)**

Figura 4.3: Test del cuadrilátero. **(a)** Evolución de $D_{Oddy,1}$ en función de la coordenada x. **(b)** Evolución de $q_{Oddy,1}$ en función de la coordenada x

- la relación 4.5 no está definida en todos los puntos (si $q_{Oddy,i} = 0$, $D_{Oddy,i}$ no está definida)
- la relación no depende del signo de $q_{Oddy,i}$ (a dos cuadriláteros con $q_{Oddy,i}$ distintas solamente en signo, se les asocia un mismo valor de $D_{Oddy,i}$)
- $q_{Oddy,i}$ es una función contínua, que puede medir todo tipo de cuadriláteros , estén éstos degenerados o no

Estas diferencias hacen que sea mejor utilizar $q_{Oddy,i}$ que $D_{Oddy,i}$ para modificar la distorsión de Oddy.

Por otra parte, analizando cómo varia la distorsión de Oddy del nodo 2 mientras movemos el nodo uno por el eje X, se aprecia otra asímptota diferente a la de la figura 4.3.a. Este comportamiento se pone de manifiesto en la figura 4.4.a. En este caso la asímptota se produce para $x = -1$, ya que cuando el nodo 1 está en esta posición, el área del paralelogramo local asociado al nodo 2 toma el valor de 0, y consecuentemente $q_{Oddy,2}$ también (ver ecuación (4.3)).

En la figura 4.4.b se presenta la variación de $q_{Oddy,2}$ al desplazar el nodo 1 sobre el eje X y, efectivamente, se observa que $q_{Oddy,2} = 0$ para $x = -1$.

La figura 4.5 presenta la distorsión de la malla (ver ecuación (4.4)), que se compone de un sólo elemento, para el test del cuadrilátero cuando desplazamos el nodo 1 por el plano XY. Puesto que la distorsión de la malla se expresa como suma de las distorsiones de los paralelogramos locales, en esta figura aparecen todas las asíntotas presentes al evaluar las distorsiones de los paralelogramos locales.

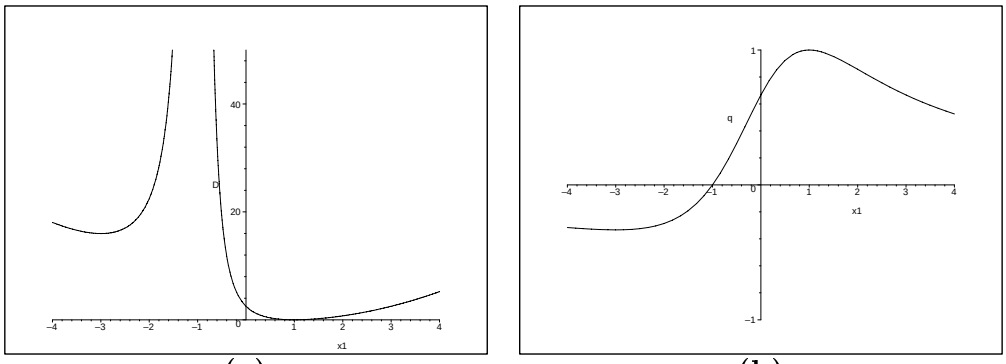


Figura 4.4: Test del cuadrilátero. **(a)** Evolución de $D_{Oddy,2}$ en función de la coordenada x del nodo 1.**(b)** Evolución de $q_{Oddy,2}$ en función de la coordenada x del nodo 1

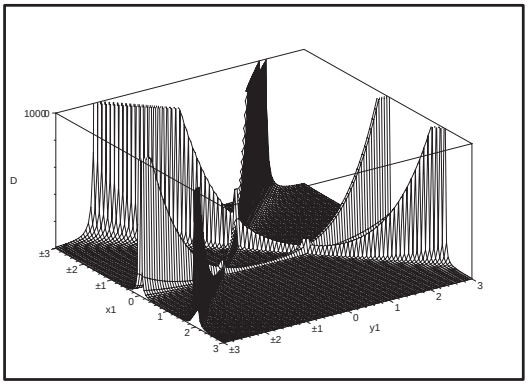


Figura 4.5: Test del cuadrilátero. Distorsión de Oddy original D_{Oddy} del cuadrilátero de la figura 4.2 al mover el nodo 1 en el plano XY.

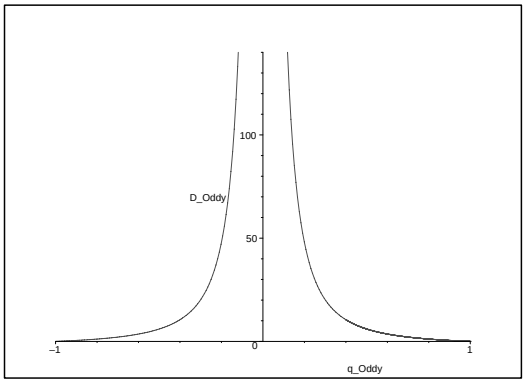


Figura 4.6: Representación de $D_{Oddy,1}$ en función de $q_{Oddy,1}$

La ecuación (4.5) pone de manifiesto que $D_{Oddy,i}$ depende exclusivamente de $q_{Oddy,i}$ $(i = 1, ..., N_{node})$. Esta dependencia se muestra en la figura 4.6, donde se presenta $D_{Oddy,i}$ en función de $q_{Oddy,i}$. Sólo se ha representado esta dependencia en el rango de $q_{Oddy,i}$ que va de -1 a 1, ya que se puede demostrar que el valor de q_{Oddy}, tal y como lo hemos definido, está comprendido entre éstos dos valores.

Evidentemente, cuando $q_{Oddy,i}$ tiende a 0, $D_{Oddy,i}$ tiende a infinito. Recuérdese que este era uno de los principales problemas de la distorsión de Oddy: la existencia de asíntotas verticales.

Con el objetivo de solventar este problema (la existencia de asíntotas verticales) se definie una función $D_{OM,i}$ por partes:

$$D_{OM,i} = \begin{cases} D_{Oddy,i} & \text{si } q_{Oddy,i} \geq q_0 \\ 2\left(\frac{3}{q_0^4} q_{Oddy,i}^2 - \frac{8}{q_0^3} q_{Oddy,i} + \frac{6}{q_0^2} - 1\right) & \text{si } q_{Oddy,i} < q_0 \end{cases} \tag{4.6}$$

Esta función adopta la expresión de $D_{Oddy,i}$ para $q_{Oddy,i}$ mayores que un cierto q_0, y para valores de $q_{Oddy,i}$ menores que este q_0 se ajusta una parlábola tangente a la función $D_{Oddy,i}$. Más adelante se discutirá sobre el valor de q_0):

La representación de $D_{OM,i}$ se muestra en la figura 4.7, superpuesta a la definición original de $D_{Oddy,i}$.

Realmente se podría haber elegido cualquier función monótona tangente a la función $D_{Oddy,i}$ para acoplarla a ella en el punto $q_{Oddy,i} = q_0$. Se han barajado dos opciones, principalmente por su sencillez: una recta y una parábola. Se ha elegido la parábola porque decrece más rápidamente, y tiene mayor gradienteeva hacia al mínimo dónde queremos llegar.

Mediante la modificación introducida en la ecuación (4.6) se ha conseguido eliminar la existencia de asíntotas verticales. Sin embargo, todavia apare-

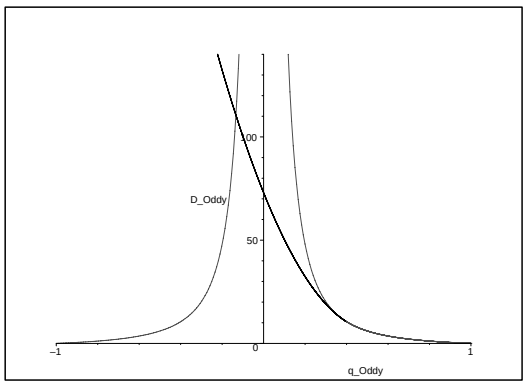


Figura 4.7: Linea continua: representación de $D_{OM,i}$ en función de $q_{Oddy,i}$. Línea discontinua: representación de $D_{Oddy,i}$ en función de $q_{Oddy,i}$

cen mínimos locales. Por ejemplo, en el test de cuadrilátero, al mover el nodo 1 hacia valores de x menores que -1, el valor de $q_{Oddy,1}$ aumenta (ver figura 4.3.b). Esto sucede porque $q_{Oddy,i}$ no es injectiva. Por consiguiente, y a pesar de la definición (4.6), el valor de $D_{OM,i}$ disminuye en lugar de aumentar, como sería deseable.

En la figura 4.8 se muestra como varia la distorsión de la malla del test del cuadrilátero (malla de un solo elemento) evaluando la distorsión de los paralelogramos locales con $D_{Oddy,i}$ o $D_{OM,i}$. Obsérvese que utilizando $D_{OM,i}$ se han eliminado las asíntotas verticales. Sin embargo, no se soluciona el problema de la existéncia de varios mínimos locales, puesto que la función no es estríctamente monótona.

Este comportamiento puede visualizarse más claramente en el ejemplo presentado en la figura 4.9. En ella se muestran dos configuraciones del test del cuadrilátero. Para el cuadrilátero A $x = -3$ y para el cuadrilátero B $x = -0{,}9$. Obsérvese que el cuadrilátero A está claramente más distorsionado que el cuadrilátero B, sin embargo, el valor de $D_{OM,1}$ para el cuadrilátero A es inferior al valor de $D_{OM,1}$ para el cuadrilátero B.

Por último, la figura 4.10 presenta los valores de D_{malla} para el test del cuadrilátero , utilizando $D_{OM,i}$ para la evaluación de la distorsión de los paralelogramos locales asociados a cada nodo, cuando el nodo 1 se desplaza por el plano XY. Como puede observarse, la función no es estrictamente monótona, y un proceso de minimización podría conducir a configuraciones diferentes a la que proporciona el mínimo absoluto.

Se plantean dos posibles opciones para solventar estos problemas de D_{OM}:

- Modificar la definición de $q_{Oddy,i}$ para que sea injectiva.

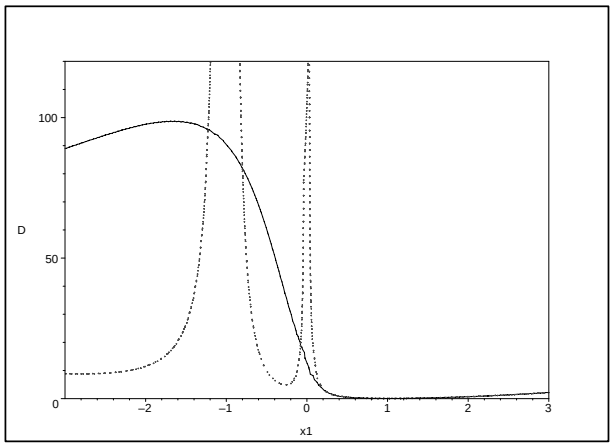


Figura 4.8: Test del cuadrilátero. Linea discontinua: evolución de D_{malla}, utilizando $D_{Oddy,i}$ para evaluar la distorsión de los paralelogramos locales del elemento, en función de la coordenada x. Linea contínua: evolución de D_{malla}, utilizando $D_{OM,i}$ para evaluar la distorsión de los paralelogramos locales del elemento, en función de la coordenada x

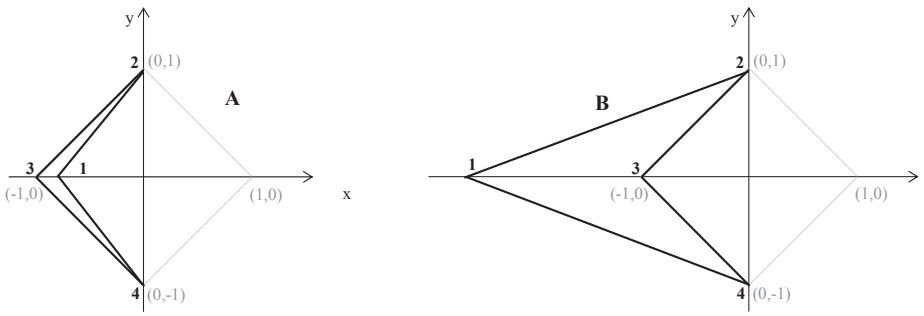


Figura 4.9: Cuadrilátero A, con el nodo 1 situado en $x = -3$. Cuadrilátero B, con el nodo 1 situado en $x = -0{,}9$

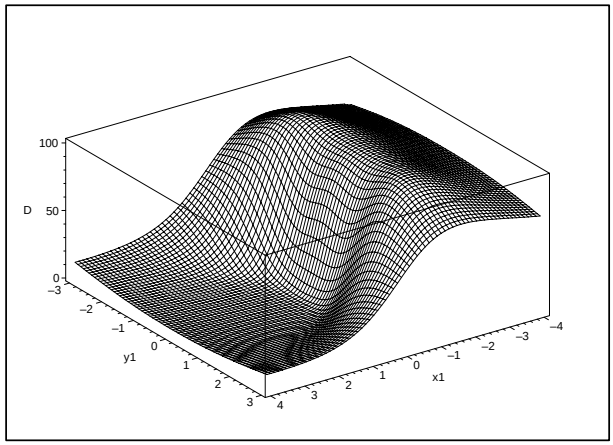


Figura 4.10: Test del cuadrilátero. Representación de D_{malla} al desplazar el nodo 1 del cuadrilátero por el plano XY, utilizando D_{OM} para evaluar la distorsión de los paralelogramos locales asociados a cada nodo.

- Sumarle a la definición de D_{OM} una función contínua que incremente la función lejos del mínimo que nos interesa (cuando el cuadrilátero es un cuadrado), de manera que no apareccan mínimos locales.

La primera opción se ha tratado ámpliamente en [11] basándose en el test del cuadrilátero, pero extrapolar los resultados obtenidos a cuadriláteros en general no es obvio. Esta opción es inviable si queremos controlar $D_{Oddy,i}$ controlando únicamente $q_{Oddy,i}$. En el test del cuadrilátero parece muy intuitivo que si el nodo 1 está en $x = -3$ (cuadrilátero A de la figura 4.9) el cuadrilátero tendría que tener más distorsión que si el nodo 1 está en $x = -0{,}9$ (cuadrilátero B de la figura 4.9). Sin embargo, matemáticamente no se puede decir que el cuadrilátero A es peor que el B.

Se ha optado, por lo tanto, por sumar a la función D_{OM} otra función que haga que desaparezcan los mínimos locales. Esta función tiene que cumplir unas ciertas condiciones para que funcione correctamente, y su minimización sea eficiente:

- Depender de las mismas variables que la función D_{OM}.
- Ser continua y derivable en todo su dominio (para poder ser minimizada correctamente).
- Tener un mínimo en el mínimo deseado de la función D_{OM} (correspondiente a que el elemento sea un cuadrado) o muy cerca de él.

- Tener grandes gradientes alrededor del mínimo, para que, al ser sumada a D_{OM}, elimine los mínimos locales de ésta última situados lejos del mínimo deseado.

La primera condición implica que la nueva función debe depender única y exclusivamente de las coordenadas de los nodos del elemento. Es más, tiene que poderse evaluar de forma separada para cada nodo, y sólo tiene que requerir las coordenadas de los nodos adyacentes al nodo en cuestión.

La tercera condición es vital, ya que si se eligiera una función el mínimo de la cual estuviera muy alejado del de D_{OM}, estaríamos camuflando por completo el mínimo al que queremos llegar.

La función que se ha elegido es el producto escalar de los lados del elemento en cuestión elevado al cuadrado (E^2). Esta función se evalúa en cada nodo (${E^2}_i$, $i = 1, 2, 3, 4$) y después se suman las contribuciones de cada nodo.

$$\begin{aligned} E_i &= (x_{i+1} - x_i)(x_{i+3} - x_i) + (y_{i+1} - y_i)(y_{i+3} - y_i) \\ E^2 &= \sum_{i=1}^{4} {E^2}_i \end{aligned} \tag{4.7}$$

La elección de esta función es intuitiva, ya que el producto escalar entre dos segmentos es mayor (en valor absoluto), cuanto más menos ortogonales sean los mismos. Realmente, esta función en el caso de un cuadrado vale 0, ya que todos sus ángulos son rectos. Se eleva la función producto escalar al cuadrado para eliminar el efecto de valores negativos, que harían que para ángulos rectos valiera 0, pero no fuera un mínimo. En la figura 4.11 se muestra la representación de la función E^2 al mover el nodo 1 del cuadrado de la figura 4.2 en el plano XY. Se puede apreciar claramente como la función cumple todos los requisitos mencionados anteriormente.

La figura 4.12 muestra cómo si se aplica al test del cuadrilátero la suma de las funciones D_{OM} y E^2 se solventan todos los problemas mencionados: la función es contínua (no existen asíntotas verticales) y derivable en todo su dominio y sólo tiene un mínimo (correspondiente a cuando el elemento es un cuadrado). Es importante resaltar que no existen mínimos locales.

Se tiene que sumar la función ${E^2}_i$ a $D_{OM,i}$ independientemente del valor de $q_{Oddy,i}$ (recordar que la función $D_{OM,i}$ está definida por partes (4.6)), ya que sino la función a minimizar no sería contínua. De todas formas, una vez el proceso de minimización ha llegado cerca de la solución (no se interponga ninguna asímptota entre la configuración de la malla y la solución), la distorsión de Oddy original ya funciona bién. Por éste motivo se aplicará esta

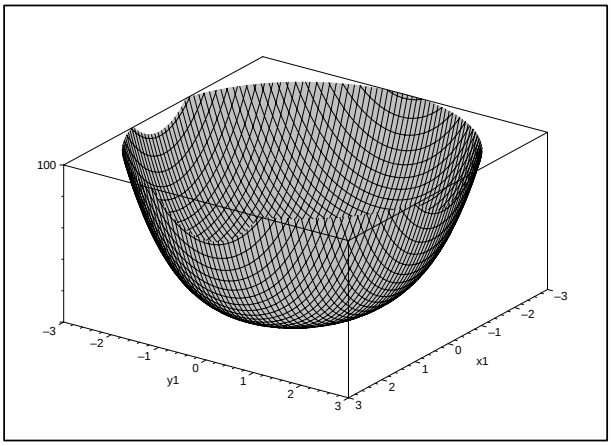


Figura 4.11: Representación de la función E^2 aplicada al elemento de la figura 4.2 al mover su nodo 1 en el plano XY. El mínimo vale 0 y se da para el nodo 1 situado en el punto (1,0) (cuando el elemento es un cuadrado)

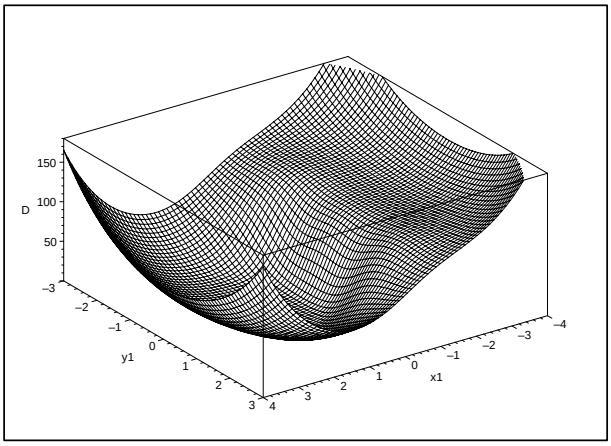


Figura 4.12: Test del cuadrilátero. Representación de $D_{OM} + E^2$ en función de la posición del nodo 1 del cuadrilátero de la figura 4.2

modificación en la distorsión de Oddy original sólo si algún elemento de la malla tiene una concavidad en alguno de sus nodos.

Se define *nconc* cómo el número de concavidades que tiene la malla, entendiendo el número de concavidades como el numero de nodos de la misma que tienen alguna concavidad (ángulo interno $\geq 180^o$). De ésta forma, la fución elegida para minimizar la distorsión de la malla es la siguiente:

$$D_{malla} = \begin{cases} \sum_{e=1}^{N_{elem}} D^e_{Oddy} & \text{si } nconc = 0 \\ \sum_{e=1}^{N_{elem}} D^e_{OM} & \text{si } nconc > 0 \end{cases} \tag{4.8}$$

donde

$$D^e_{Oddy} = \frac{1}{Nen} \sum_{i=1}^{Nen} D_{Oddy,i} \tag{4.9}$$

$$D^e_{OM} = \frac{1}{Nen} \sum_{i=1}^{Nen} D_{OM,i} + \sum_{i=1}^{Nen} {E^2}_i \tag{4.10}$$

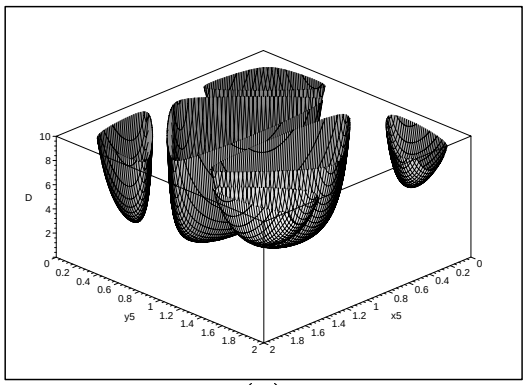
En la figura 4.13 se presentan los resultados de evaluar las funciones $D_{Oddy,original}$, D_{OM} y $D_{OM} + {E^2}_{prodesc}$ a la malla de la figura 2.19.a. Los resultados son espectaculares, y muestran claramente como funciona la modificación introducida para obtener una función que reúna todas las condiciones para ser minimizada.

A modo de resumen, el procedimiento para obtener la nueva definición de la distorsión de Oddy en el nodo i, $i = 1, 2, 3, 4$, que denominaremos distorsión de Oddy modificada en el nodo i, $D_{OM,i}$, es el siguiente:

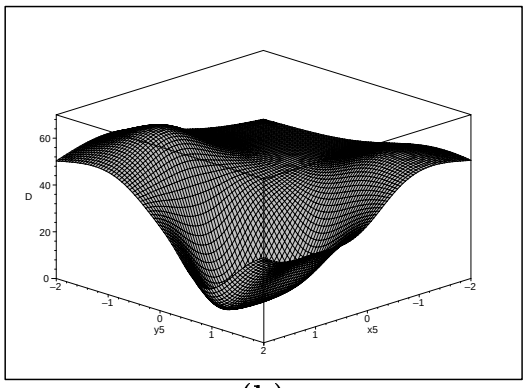
- Fijar un cierto valor de q_0 entre 0 y 1
- Calcular los valores de $q_{Oddy,i}$ y de ${E^2}_i$:

$$\begin{aligned} l_i^2 &= (x_{[i+1]} - x_i)^2 + (y_{[i+1]} - y_i)^2 \\ l_{[i+3]}^2 &= (x_{[i+3]} - x_i)^2 + (y_{[i+3]} - y_i)^2 \\ A_i &= (x_{[i+1]} - x_i)(y_{[i+3]} - y_i) - (x_{[i+3]} - x_i)(y_{[i+1]} - y_i) \\ {E^2}_i &= \left[(x_{[i+1]} - x_i)(x_{[i+3]} - x_i) + (y_{[i+1]} - y_i)(y_{[i+3]} - y_i)\right]^2 \\ q_{Oddy,i} &= \frac{2A_i}{l_i^2 + l_{[i+3]}^2} \end{aligned} \tag{4.11}$$

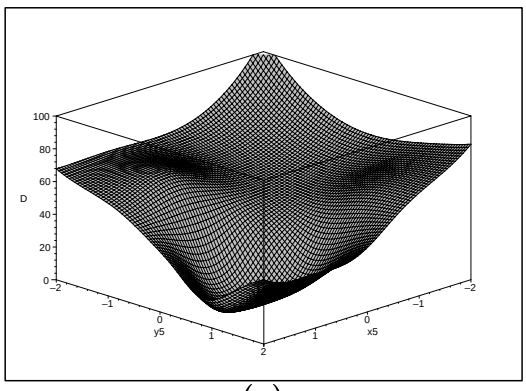
- Evaluar el número de concavidades que tiene la malla (nótese que el número de concavidades es el número de nodos en los que $E_i \leq 0$).



(a)



(b)



(c)

Figura 4.13: Representación de **(a)** D_{Oddy} **(b)** D_{OM} **(c)** $D_{OM} + E^2$ de la malla de la figura 2.19.a en función de la posición del nodo central, estando los nodos del contorno fijos

- Calcular el valor de la distorsión de Oddy modificada en el nodo i, $D_{OM,i}$ (en el caso de que existan concavidades):

$$D_{OM,i} = \begin{cases} 2\left(\dfrac{1}{q_{Oddy,i}^2} - 1\right) & \text{si } q_{Oddy,i} \geq q_0 \\ 2\left(\dfrac{3}{q_0^4} q_{Oddy,i}^2 - \dfrac{8}{q_0^3} q_{Oddy,i} + \dfrac{6}{q_0^2} - 1\right) & \text{en caso contrario} \end{cases} \tag{4.12}$$

- Por último, aplicar la definición de D_{malla} (4.8), dependiendo de si existen concavidades en la malla o no.

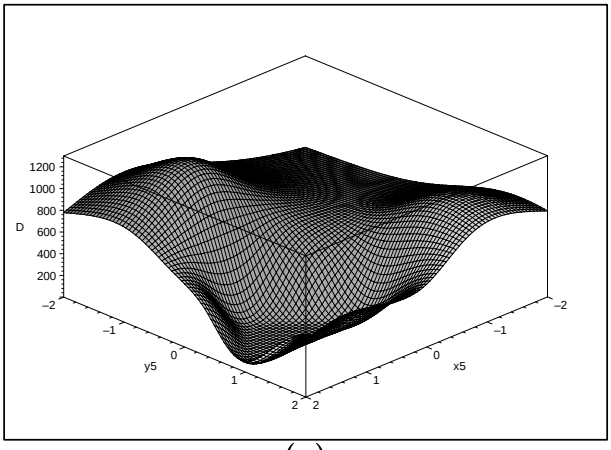
No se han dado indicaciones concretas de cómo elegir q_0. Solamente se ha especificado que $0 < q_0 < 1$. En el ejemplo anterior, así como en los ejemplos que se presentan más adelante, se ha tomado $q_0 = 0{,}5$. En principio, tomar q_0 próximo a 0 hace que a un . elemento no se le aplique la definición de la distorsión modificada hasta que éste ya está muy distorsionado. Si se toma un valor de q_0 próximo a 1, se da demasiada importancia a la función modificada, desaprovechando así las buenas propiedades que tiene la distorsión de Oddy original.

Estos aspectos quedan reflejados en la forma de la función de manera que para q_0 próximo a 0, los mínimos locales que se forman en $D_{OM,i}$ són más accentuados, y para q_0 próximo a 1 se suavizan (ver figura 4.14).Esto es bastante intuitivo, si pensamos que si esperamos a que un elemento esté muy distorsionado para aplicarle la definición de distorsión modificada nos acercamos más a la asímptota.

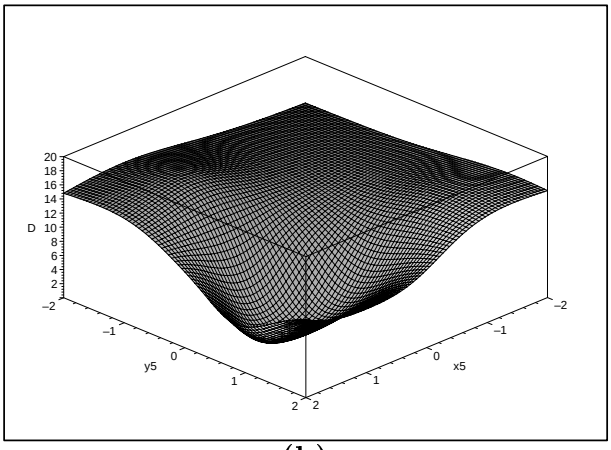
4.3.3. Modificación de la distorsión de Oddy para hexaedros

En el capítulo 3 se han presentado las limitaciones que presenta la la distorsión de Oddy para medir la distorsión de mallas de hexaedros. Al igual que en el caso bidimensional, los problemas surgen cuando la malla presenta elementos degenerados. Este tipo de elementos puede presentarse en la malla a suavizar tanto en la malla original (antes de ser suavizada) como durante en el proceso de suavizado.

Como ya se ha visto, existe una analogia clara entre el problema bidimensional y el tridimensional, por lo que se procederá de la misma forma para solventar los problemas que presenta la distorsión de Oddy: mantener la distorsión de Oddy en su forma original cuando no existan problemas (es decir,



(a)



(b)

Figura 4.14: Representación de la función $D_{OM,i}$ aplicada a la malla de la figura 2.19.a. utilizando **(a)** $q_0 = 0{,}2$, y **(b)** $q_0 = 0{,}8$

cuando todos los elementos sean convexos) y modificarla donde no sea posible evaluarla de forma correcta (cuando los elementos presenten concavidades)

En primer lugar se define una medida para paralepípedos, que es el inverso de Q_{Oddy} (3.2).

$$q_{Oddy} = \frac{V}{\left(\frac{\left(l_1^2 + l_2^2 + l_3^2\right)^2}{3} - (A_1^2 + A_2^2 + A_3^2) + V^{\frac{4}{3}} \right)^{\frac{3}{4}}}$$

donde las variables l_1, l_2, l_3, A_1, A_2, A_3 y V se han definido en la figura 3.2. Se puede demostrar que los valores de q_{Oddy} están comprendidos entre -1 y 1.

Puesto que la expresión anterior está definida para paralepípedos, también se puede definir la $q_{Oddy,i}$ para un nodo i, $i = 1, ..., 8$ de un hexaedro en general:

$$q_{Oddy,i} = \frac{V_i}{\left(\frac{\left(l_{i2}^2 + l_{i3}^2 + l_{i4}^2\right)^2}{3} - (A_{i2i3}^2 + A_{i3i4}^2 + A_{i2i4}^2) + V_i^{\frac{4}{3}} \right)^{\frac{3}{4}}} \tag{4.13}$$

donde el significado de las variables es el mismo que el de las expresiones (3.8).

En consecuencia, la función global a minimizar, D_{malla}, se puede escribir como:

$$D_{malla} = \frac{1}{N_{en}} \sum_{k=1}^{N_{pl}} 2 \left(\frac{1}{q_{Oddy,k}^{\frac{4}{3}}} - 1 \right) \tag{4.14}$$

La introducción de esta nueva medida q_{Oddy} viene motivada por el mismo motivo que en el problema bidimensional: tener un mayor control sobre las asíntotas de la función a minimizar (ver subapartado 4.3.2).

Seguidamente se presenta un test, denominado *el test del hexaedro*, que servirá de base para la modificación de la distorsión de Oddy. Sea el cubo determinado por los vértices (12345678) (ver figura 4.15) en el que los puntos 1,2,3,4,5,6 y 8 permanecen fijos y el nodo 7 puede desplazarse libremente por el eje X, siendo x la coordenada del nodo 7 en este eje. El objetivo de este test es mostrar como varía la distorsión de Oddy evaluada en el nodo libre 7, al moverse éste a lo largo del eje X. Al igual que en el problema bidimensional (donde se ha estudiado el *el test del cuadriátero*), se estudia el comportamiento de la distorsión en un nodo porque la modificación de la

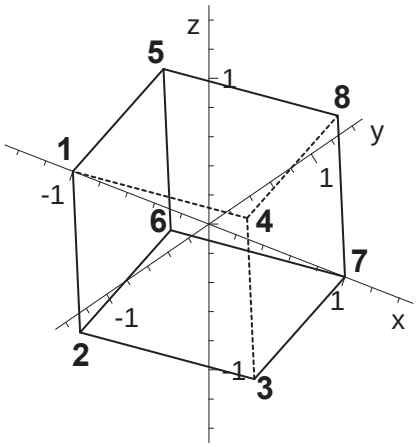


Figura 4.15: Significado de las variables que intervienen en el test del hexaedro.

distorsión de Oddy se realiza a partir de la modificación de las distorsiones puntuales.

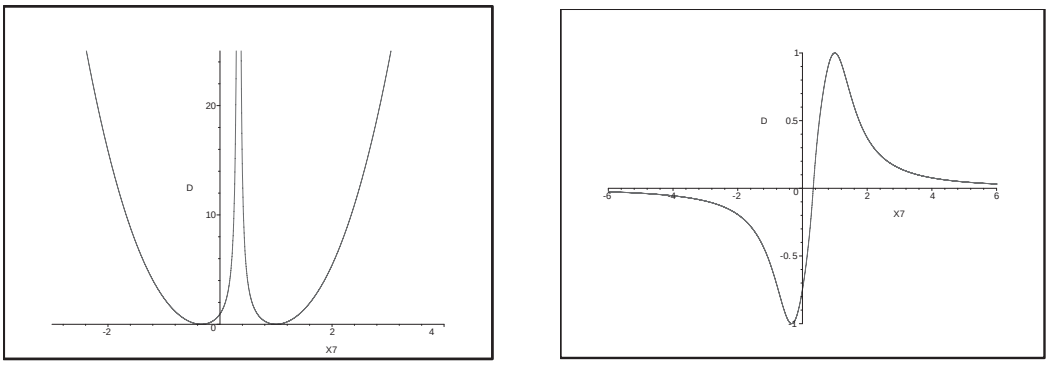
En la figura 4.16.a se presenta la gráfica correspondiente a la evolución de $D_{Oddy,7}$ en función de la coordenada x del nodo 7. Como era de esperar, para $x = 0{,}33$ (cuando las aristas adyacentes al nodo 7 son coplanares) aparece una asíntota vertical. En $x = -0{,}334$ aparece un mínimo local, que corresponde a un hexaedro degenerado. Este resultado ya se enunciaba en el apartado 3.4, donde se intruducían las limitaciones de la distorsión de Oddy.

En la figura 4.16.b se representa la evolución de $q_{Oddy,7}$ (ver ecuación (4.13)) en función, también, de la coordenada x del nodo 7. Nótese que la función $q_{Oddy,7}$ se anula para $x = 0{,}33$, que es cuando $D_{Oddy,7}$ tiene la asíntota vertical. Este comportamiento es obvio si se tiene en cuenta la relación entre ambas funciones:

$$D_{Oddy,i} = 2\left(\frac{1}{q_{Oddy,i}^{\frac{4}{3}}} - 1\right) \tag{4.15}$$

Esta relación entre $D_{Oddy,i}$ y $q_{Oddy,i}$ pone de manifiesto que, aunque expresan la misma informació, ya que tienen la misma sensibilidad en captar distintas causas de la distorsión, aparecen diferencias importantes entre ellas, al igual que pasaba en el problema bidimensional. Estas diferencias son:

- la relación 4.15 no está definida en todos los puntos (si $q_{Oddy,i} = 0$, $D_{Oddy,i}$ no está definida)



(a) **(b)**

Figura 4.16: Test del hexaedro. **(a)** Evolución de $D_{Oddy,7}$ en función de la coordenada x del nodo 7. **(b)** Evolución de $q_{Oddy,7}$ en función de la coordenada x del nodo 7.

- la relación no depende del signo de $q_{Oddy,i}$ (a dos hexaedros con $q_{Oddy,i}$ distintas solamente en signo, se les asocia un mismo valor de $D_{Oddy,i}$)

- $q_{Oddy,i}$ es una función contínua, que puede medir todo tipo de hexaedros, estén éstos degenerados o no

Estas diferencias hacen que sea mejor utilizar $q_{Oddy,i}$ que $D_{Oddy,i}$ para modificar la distorsión de Oddy.

En la figura 4.17 se muestran las curbas de nivel de la distorsión de la malla (4.14) (que se compone de un solo elemento) para el test del hexaedro cuando desplazamos el nodo 7 por el plano XY. Puesto que la distorsión de la malla se expresa como suma de las distorsiones de los paralepípedos locales asociados a cada nodo, en esta figura aparecen todas las asíntotas correspondientes a configuraciones en las que el elemento tiene alguna concaviadad.

Cabe mencionar que si se permite que el nodo 7 de la malla de la figura 4.15 se desplace verticalmente (varie su coordenada z) aún aparecen más asíntotas en la función, pero la representación de éste comportamiento en una gráfica tridimensional no es posible.

Se ha conseguido hacer depender $D_{Oddy,i}$ únicamente de $q_{Oddy,i}$ (ver ecuación (4.15)), tal y como se hizo en el problema bidimensional. Dada esta dependencia, cuando $q_{Oddy,i}$ tiende a 0, $D_{Oddy,i}$ tiende a infinito. Recuérdese que este era uno de los principales problemas de la distorsión de Oddy: la existendia de asíntotas verticales.

Para solventar el problema de la existencia de asíntotas verticales se procede de forma análoga al caso bidimensional: se ajusta una parábola tangente

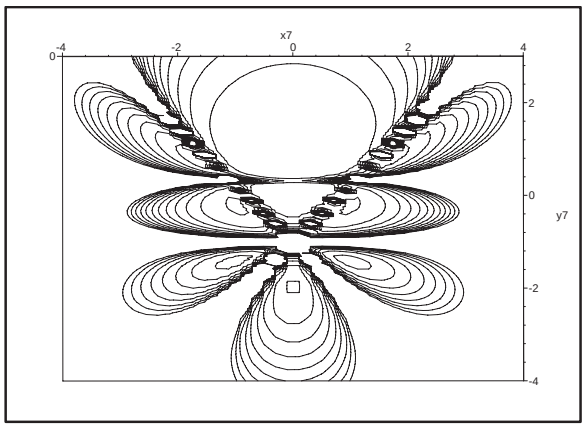


Figura 4.17: Test del hexaedro. Curbas de nivel de la distorsión de Oddy original D_{Oddy} del hexaedro de la figura 4.15 al desplazarse el nodo 7 por el plano XY.

a la función $D_{Oddy,i}$ cuando el valor de $q_{Oddy,i}$ sea menor que un q_0 determinado. Por lo tanto, la función modificada de Oddy es:

$$D_{OM,i} = \begin{cases} D_{Oddy,i} & \text{si } q_{Oddy,i} \geq q_0 \\ \frac{1}{9q_0^{\frac{4}{3}}} \left(\frac{21}{q_0^2} q_{Oddy,i}^2 - \frac{66}{q_0} q_{Oddy,i} + 63 - 18 q_0^{\frac{4}{3}} \right) & \text{si } q_{Oddy,i} < q_0 \end{cases} \tag{4.16}$$

La representación de $D_{OM,i}$ se muestra en la figura 4.18, superpuesta a la representación original de $D_{Oddy,i}$.

Mediante la modificación introducida en la ecuación (4.16) se ha conseguido eliminar la existencia de asíntotas verticales. Sin embargo, al igual que pasaba en el problema bidimensional, todavía aparecen mínimos locales. Este comportamiento se explica de la misma forma que en el caso de los cuadriláteros: la función $q_{Oddy,i}$ no es injectiva y eso hace que en algunas circunstancias, al distorsionar más un elemento, el valor de $D_{OM,i}$ disminuya en vez de crecer, como sería deseable.

En la figura 4.19 se muestra como varia la distorsión de la malla del test del hexaedro (malla de un solo elemento) evaluando la distorsión de los paralepípedos locales con $D_{Oddy,i}$ o con $D_{OM,i}$. Obsérvese que utilizando $D_{OM,i}$ se han eliminado las asíntotas verticales. Sin embargo, no se soluciona el problema de la existencia de mínimos locales, puesto que la función no es estrictamente monótona.

Por último, la figura 4.20 presenta los valores de D_{malla} para el test del

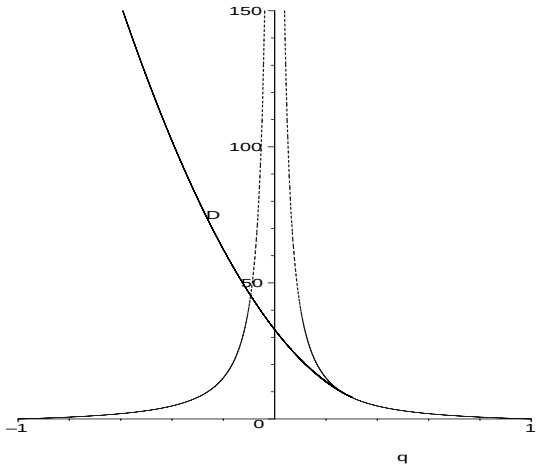


Figura 4.18: Linea continua: representación de $D_{OM,i}$ en función de $q_{Oddy,i}$. Línea discontinua: representación de $D_{Oddy,i}$ en función de $q_{Oddy,i}$

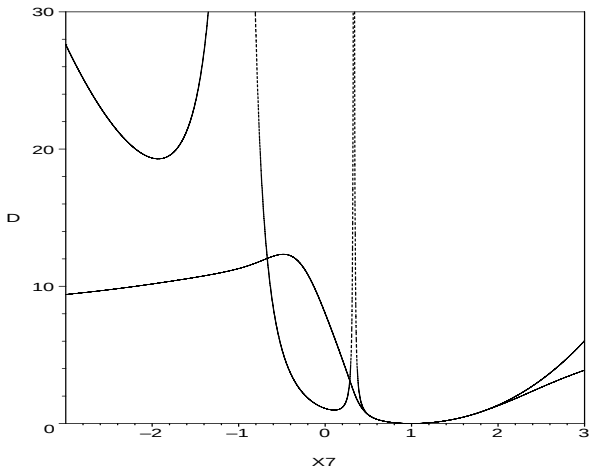


Figura 4.19: Test del hexaedro. Linea discontinua: evolución de D_{malla}, utilizando $D_{Oddy,i}$ para evaluar la distorsión de los paralepípedos locales del elemento, en función de la coordenada x del nodo 7. Linea contínua: evolución de D_{malla}, utilizando $D_{OM,i}$ para evaluar la distorsión de los paralepípedos locales del elemento, en función de la coordenada x del nodo 7

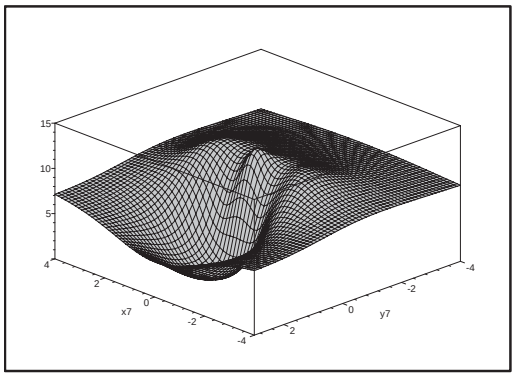


Figura 4.20: Test del hexaedro. Representación de D_{malla} al desplazar el nodo 7 del hexaedro por el plano XY, utilizando D_{OM} para evaluar la distorsión de los paralepípedos locales asociados a cada nodo.

hexaedro utilizando $D_{OM,i}$ en la evaluación de la distorsión de los paralepípedos locales asociados a cada nodo, cuando el nodo 7 se desplaza por el plano XY. Como puede observarse un proceso de minimización podría conducir a configuraciones diferentes a la que proporciona el mínmo absoluto, puesto que la curbatura de la función cambia de signo en algunas regiones del dominio (en algunas zonas la función es cóncava y en otras convexa).

Siguiendo con la analogía con el problema bidimensional, para solventar el problema de la existencia de mínimos locales en $D_{OM,i}$, se ha optado por sumarle a la misma una función contínua que incremente $D_{OM,i}$ lejos del mínimo que nos interesa (cuando el hexaedro es un cubo). Las características que debe tener esta función se han comentado en el subapartado 4.3.2.

La función que se ha elegido parte de el producto escalar de los lados del hexaedro. En cada nodo i se evalúa las funciones E_{i23}, E_{i34} y E_{i24}, $i = 1, ..,8$ que son el producto escalar (dos a dos) de dos de los tres lados que confluyen en el nodo. Después se suman las contribuciones de cada nodo para formar la función E^2:

$$E^2 = \sum_{i=1}^{8} ({E^2}_{i23} + {E^2}_{i34} + {E^2}_{i24}) \tag{4.17}$$

donde

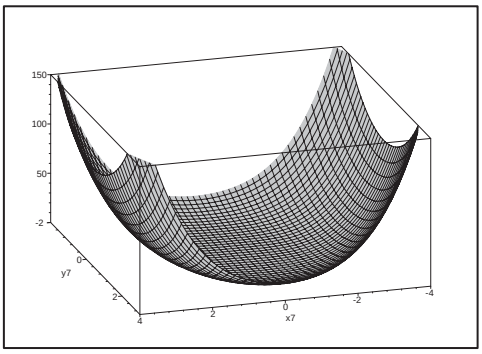


Figura 4.21: Representación de la función E^2 aplicada al elemento de la figura 4.15 al desplazarse el nodo 7 en el plano XY. El mínimo vale 0 y se da para el nodo 7 situado en el punto (1,0,0) (cuando el elemento es un cubo)

$$
\begin{aligned}
E_{i23} &= (x_{i2}-x_i)(x_{i3}-x_i)+(y_{i2}-y_i)(y_{i3}-y_i)+(z_{i2}-z_i)(z_{i3}-z_i)\\
E_{i34} &= (x_{i3}-x_i)(x_{i4}-x_i)+(y_{i3}-y_i)(y_{i4}-y_i)+(z_{i3}-z_i)(z_{i4}-z_i)\\
E_{i24} &= (x_{i2}-x_i)(x_{i4}-x_i)+(y_{i2}-y_i)(y_{i4}-y_i)+(z_{i2}-z_i)(z_{i4}-z_i)
\end{aligned}
$$

Nótese que la definición (4.17) se basa en el producto escalar entre las aristas adyacentes al nodo i. Su elección obedece a las mismas razones que el problema bidimensional. Admemás, la función E^2 vale 0 para un cubo perfecto.

En la figura 4.21 se presenta la variación de E^2 cuando el nodo 7 de la malla de la figura 4.15 se desplaza por el plano XY. Se puede apreciar claramente como la función cumple con todos los requisitos necesarios.

La figura 4.22 muestra cómo si se aplica al test del hexaedro la suma de las funciones D_{OM} y E^2 se solventan todos los problemas mencionados: la función es contínua (no existen asíntotas verticales) y derivable en todo su dominio y sólo tiene un mínimo (correspondiente a cuando el elemento es un cubo). Es importante reesaltar que no existen mínimos locales.

Una vez el proceso de minimización ha llegado cerca de la solución (no se interponga ninguna asímptota entre la configuración de la malla actual y la configuración óptima) la distorsión de Oddy original ya funciona bién. Por éste motivo se aplicará esta modificación en la distorsión de Oddy original sólo si algún elemento de la malla está degenerado (es decir, cuando tenga una concavidad en alguno de sus nodos).

Se define *nconc* como el número de concavidades que tiene la malla, entendiendo el número de concavidades como el número de nodos de la misma

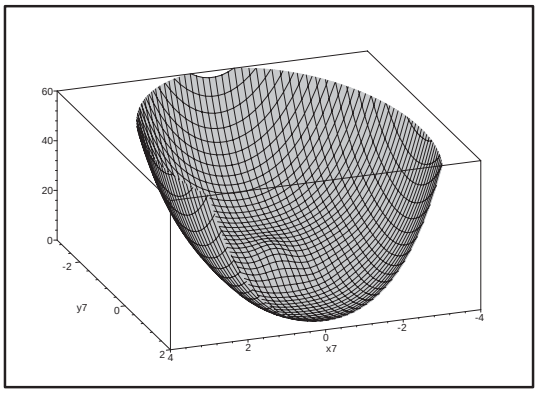


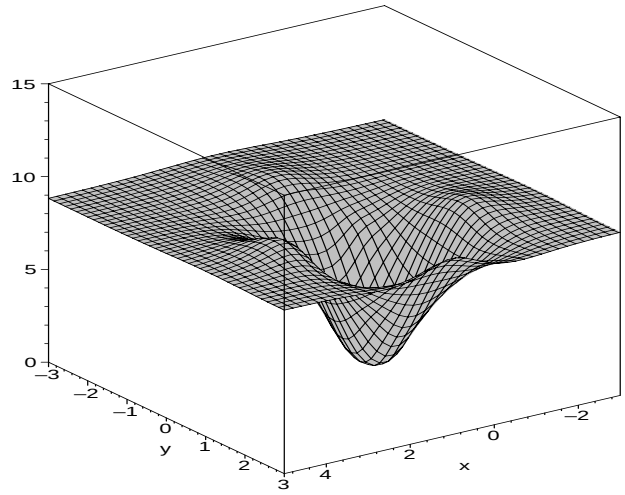
Figura 4.22: Test del hexaedro. Representación de $D_{OM} + E^2$ en función de la posición del nodo 7 del hexaedro de la figura 4.15 en el plano XY

que tienen alguna concavidad (ver apartado 3.4). De ésta forma, la expresión de la función elegida para minimizar la distorsión de la malla es la expuesta en las ecuaciones (4.8), (4.9) y (4.10), teniendo en cuenta que ahora (en el caso de hexaedros), $D_{Oddy,i}$, $D_{OM,i}$ y E^2 tienen las expresiones (4.15), (4.16) y (4.17) respectivamente.

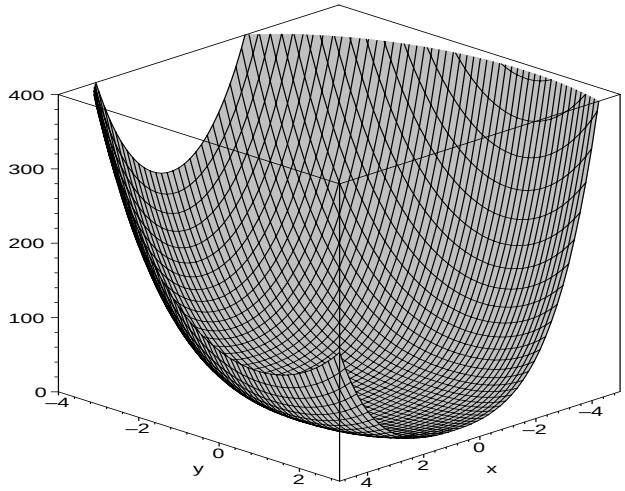
En la figura 4.23 se presentan los resultados de evaluar las funciones D_{OM} y $D_{OM} + E^2$ a la malla de la figura 3.9, cuando su nodo central se desplaza paralelamente al plano XY, con $z = 0{,}5$. La representación de $D_{Oddy,original}$ no se adjunta porque el elevado número de asíntotas que tiene hacen muy confusa su visualización. Los resultados son espectaculares, y muestran claramente como funciona la modificación introducida para obtener una función que reúna todas las condiciones para ser minimizada.

A modo de resumen, el procedimiento para obtener la nueva definición de la distorsión de Oddy en el nodo i, $i = 1, ..., 8$, que denominaremos distorsión de Oddy modificada en el nodo i, $D_{OM,i}$, es el siguiente:

- Fijar un cierto valor de q_0 entre 0 y 1
- Calcular los valores de $q_{Oddy,i}$ y de ${E^2}_i$ segun las expresiones (4.13) y (4.17) respectivamente.
- Evaluar el número de concavidades que tiene la malla (nótese que el número de concavidades es el número de nodos en los que $E_{i23} \leq 0$, o $E_{i34} \leq 0$ o $E_{i24} \leq 0$).
- Calcular el valor de la distorsión de Oddy modificada en el nodo i, $D_{OM,i}$ (en el caso de que existan concavidades):



(a)



(b)

Figura 4.23: Representación de D_{malla} de la malla de la figura 3.9 utilizando **(a)** D_{OM} y **(b)** $D_{OM} + E^2$ para evaluar la distorsión de los paralepípedos locales asociados a cada nodo, cuando el nodo central de la misma se desplaza paralelamente al plano XY con $z = 0{,}5$. Los nodos del contorno están fijos.

$$D_{OM,i} = \begin{cases} D_{Oddy,i} & \text{si } q_{Oddy,i} \geq q_0 \\ \frac{1}{9q_0^{\frac{4}{3}}} \left(\frac{21}{q_0^2} q_{Oddy,i}^2 - \frac{66}{q_0} q_{Oddy,i} + 63 - 18 q_0^{\frac{4}{3}} \right) & \text{en caso contrario} \end{cases} \tag{4.18}$$

- Por último, aplicar la definición de D_{malla} (4.8), dependiendo de si existen concavidades en la malla o no.

No se han dado indicaciones concretas de cómo elegir q_0. Solamente se ha especificado que $0 < q_0 < 1$. En el ejemplo anterior, así como en los ejemplos que se presentan más adelante, se ha tomado $q_0 = 0{,}5$ y los resultados son completamente satisfactorios. La discusión sobre los posibles valores de q_0 es la misma que la desarrollada en el apartado 4.3.2.

4.4. Método de minimización empleado

Una vez definida la función a minimizar, se describirá el método de minimización empleado. El método parte de la idea de anular el gradiente de la función a minimizar mediante un proceso iterativo tipo *Newton-Raphson*. Sin embargo, también se utiliza la información que aporta la propia función a minimizar mediante una estrategia *Line-search* de minimización. Cuando el método de *Newton-Raphson* resulte inadecuado per encontrarse la configuración de la malla lejos de la de mínima distorsión, se utilizan técnicas de minimización más simples basadas exclusivamente en el gradiente de la función (concretamente se utilizará el método de máximo descenso). Uno de los criterios a tomar será definir cuando se está lo suficientemente cerca de la solución como para empezar a aplicar *Newton-Raphson*. Además, se modifica el método original, utilizando propiedades características de este problema concreto.

A continuación se describe con más detalle el método empleado. En primer lugar, se introducirá el método original de *Newton-Raphson*. En segundo lugar, se presentarán las modificaciones realizadas al método original y sus motivaciones.

4.4.1. Método de *Newton-Raphson*

La función a minimizar es D_{malla} (4.8). Por esta razón se imponen las siguientes ecuaciones:

$$\nabla D_{malla} = \mathbf{0} \tag{4.19}$$

donde ∇D_{malla} es el gradiente de D_{malla} respecto a las coordenadas libres de la malla.

Debido a que el proceso de minimización de la distorsión de la malla es el mismo para el caso de cuadriláteros y de hexaedros, se hará referencia a D_{malla} de forma general, como indican las ecuaciones (4.8), (4.9) y (4.10). Dependiendo de si se trata de mallas de cuadriláteros o de hexaedros las expresiones de $D_{Oddy,i}$, $D_{OM,i}$ y E^2 serán diferentes.

Sea N_{eq} el número total de coordenadas libres de la malla, a cierta coordenada libre a_i, $i = 1, 2, .., N_{eq}$ le corresponde la siguiente ecuación del sistema de ecuaciones de (4.19):

$$\frac{\partial D_{malla}}{\partial a_i} = 0 \tag{4.20}$$

Considerando la ecuación (4.8), se puede reescribir la ecuación (4.20) como sigue:

$$\begin{cases} \sum_{e=1}^{N_{elem}} \dfrac{\partial D^e_{Oddy}}{\partial a_i} = 0 & \text{si } nconc = 0 \\ \sum_{e=1}^{N_{elem}} \dfrac{\partial D^e_{OM}}{\partial a_i} = 0 & \text{si } nconc > 0 \end{cases} \tag{4.21}$$

El sistema de ecuaciones de (4.19) se resuelve de forma iterativa, resolviendo en cada iteración un sistema de N_{eq} ecuaciones lineales con N_{eq} incógnitas:

$$\boldsymbol{H}^k_{D_{malla}} \cdot \Delta \boldsymbol{a}^{k+1} = -\nabla D^k_{malla} \tag{4.22}$$

donde $\boldsymbol{H}^k_{D_{malla}}$ es la matriz Hessiana de D_{malla} en la iteración k, $\Delta \boldsymbol{a}^{k+1} = \boldsymbol{a}^{k+1} - \boldsymbol{a}^k$, siendo $\boldsymbol{a}^k$ y $\boldsymbol{a}^{k+1}$ los vectores de las coordenadas libres en dos iteraciones consecutivas, y ∇D^k_{malla} es ∇D_{malla} en la iteración k. Nótese que $\boldsymbol{H}_{D_{malla}}$ es una matriz $N_{eq} \times N_{eq}$. Sean i y j, $i = 1, 2, .., N_{eq}$ y $j = 1, 2, .., N_{eq}$, luego:

$$[\boldsymbol{H}_{D_{malla}}]_{ij} = \frac{\partial^2 D_{malla}}{\partial a_i \partial a_j} \tag{4.23}$$

La matriz hessiana de una función es simétrica si la función es suficientemente continua. Este resultado se deduce de la ecuación (4.23). Si el problema de minimización de la distorsión de la malla tiene solución, entonces la matriz hessiana $\boldsymbol{H}_{D_{malla}}$ será definida positiva alrededor de la solución óptima (propiedad de la matriz hessiana en un mínimo).

La modificación de la distorsión de Oddy se ha hecho, en parte, para conseguir que la matriz del sistema sea definida positiva en un entorno lo mayor posible. No obstante, puede suceder que, en cierta iteración k, la matriz hessiana resultante no sea definida positiva. Esto ocurre si $\boldsymbol{a}^k$ está lejos de la solución óptima. Si la matriz hessiana no es definida positiva, entonces utilizar el método de *Newton-Raphson* puede llevar a resultados incorrectos. Por ejemplo, puede pasar que:

$$\left(\nabla D^k_{malla}\right)^T \cdot \Delta \boldsymbol{a}^{k+1} = -\left(\Delta \boldsymbol{a}^{k+1}\right)^T \cdot \boldsymbol{H}^k_{D_{malla}} \cdot \Delta \boldsymbol{a}^{k+1} > 0$$

Esto significa que $\Delta \boldsymbol{a}^{k+1}$ tiene componente positiva en la dirección del gradiente. Entonces la distorsión de la malla puede llegar incluso a crecer si se utiliza el $\Delta \boldsymbol{a}^{k+1}$ obtenido mediante el método de *Newton-Raphson*.

4.4.2. Modificaciones al método de *Newton-Raphson*

El método original de *Newton-Raphson* converge cuando se está cerca de la solución óptima. En general, la posición de las coordenadas libres de la malla inicial, $\boldsymbol{a}^0$, estará demasiado lejos de la posición óptima, $\boldsymbol{a}^{opt}$, para poder emplear directamente el método original de *Newton-Raphson*. A continuación se presentan las modificaciones realizadas al método de *Newton-Raphson*.

Limitación del avance

Una primera modificación consiste en limitar la longitud del avance en una iteración k, aprovechando información que conocemos *a priori*. No es posible que en una iteración el movimiento óptimo de un nodo sea mucho mayor que una longitud característica de los elementos a los que pertenece el nodo. Esto significa que, si $\Delta \boldsymbol{a}^{k+1}$ es el avance que se obtiene por el método de *Newton-Raphson*, ninguna de sus componentes debe ser mayor que un cierto valor máximo. Al vector de valores máximos lo denominamos $\Delta \boldsymbol{a}^{max}$ y tiene N_{eq} componentes. Para calcular este vector se debe establecer un criterio para asociar a cada punto de la malla un tamaño característico. Este tamaño será el que limitará el avance en una iteración , y debe asegurar que ningun nodo salga del elemento al que pertenece al ser movido. Se define el tamaño característico de un punto j, $l^j_{p_{mean}}$, como:

$$l^j_{p_{mean}} = \frac{\sum_{k=1}^{N^j_{sp}} (l_{jk})}{N^j_{sp}}$$

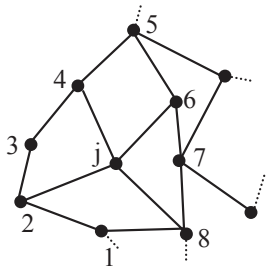


Figura 4.24: Puntos que rodean al nodo j en una malla de cuadriláteros.

donde N_{sp}^{j} es el número de puntos que rodean al nodo j (nodos vecinos), y l_{jk} es la distancia del punto j al punto k. En la figura 4.24 se muestran los nodos vecinos a un determinado nodo j. $l_{p_{mean}}^{j}$ se puede interpretar como una media de las distancias de un punto a todos los que le rodean. Esta definición también se puede desarollar separando por cordenadas los tamaños característicos. Estos serían la media de las distáncias del punto j al punto k, segun el eje al que corresponda la cordenada *i-ésima*:

$$l_{p_{mean},x_i}^{j} = \frac{\sum_{k=1}^{N_{sp}^{j}}(|x_i^j - x_i^k|)}{N_{sp}^{j}} \tag{4.24}$$

También se podría definir el tamaño característico del elemento como la distáncia al nodo vecino más cercano o al más alejado, de la forma:

$$l_{p_{min}}^{j} = \min_{k=1,..,N_{sp}^{j}}(l_{jk})$$

$$l_{p_{max}}^{j} = \max_{k=1,..,N_{sp}^{j}}(l_{jk})$$

Sin embargo, la elección de $l_{p_{min}}^{j}$ podría ser demasiado restrictiva en algunos casos, mientras que $l_{p_{max}}^{j}$ podría representar un valor excesivamente permisivo, teniendo en cuenta que este tamaño característico no tiene en cuenta hacia dónde se mueve el nodo.

La figura 4.25 aclara este posible comportamiento. La elección de $l_{p_{mean}}^{j}$ conlleva un riesgo, ya que podría ser que algún nodo saliera del elemento al que pertenece en alguna iteración. Aún y asi se ha elegio esta medida del tamaño característico y su utilización en diferentes ejemplos ha proporcionado resultados plenamente satisfactorios.

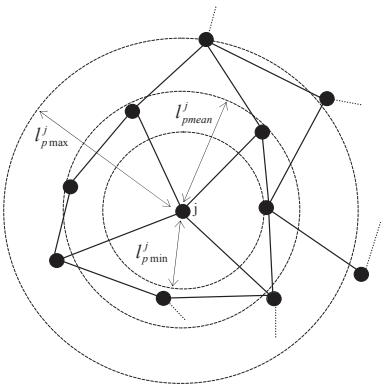


Figura 4.25: Tamaños característicos del nudo j (en una malla de cuadriláteros), teniendo en cuenta $l^j_{p_mean}$, $l^j_{p_min}$ o $l^j_{p_max}$.

Como se ha comentado anteriormente, a un nodo le pueden corresponder ninguna, una o dos coordenadas libres en función de las condiciones de contorno introducidas. Se asocia a cada coordenada libre un valor de $l^j_{p_{mean},x_i}$,ver ecuación (4.24), correspondiente al tamaño característico del punto j segun el eje al que corresponda la cordenada *i-ésima*, que es el eje de la cordenada libre. Al valor asociado a una coordenada libre i, $i = 1, 2, ..N_{eq}$, lo denominaremos l^i_{cl}. Con estos valores se puede formar un vector de N_{eq} componentes $\mathbf{l}_{cl}$.

Finalmente, se define $\Delta\boldsymbol{a}^{max}$ como:

$$\Delta\boldsymbol{a}^{max} = \mu\boldsymbol{l}_{cl} \tag{4.25}$$

donde $\mu \in [0, 1]$ y es un parámetro que se debe fijar *a priori*. A medida que μ toma valores menores, el método se hace más estable, pero también puede que se vuelva más lento. En los ejemplos que se presentan posteriormente se ha tomado $\mu = 1$, obteniendo resultados completamente satisfactorios.

El vector definido en (4.25) es un vector que varía a medida que la malla se suaviza. Nótese que para cada configuración de los nodos en la malla, los tamaños característicos de cada punto son distintos.

Una vez obtenido $\Delta\boldsymbol{a}^{max}$, en cada iteración debe reescalarse el valor de $\Delta\boldsymbol{a}^{k+1}$ de tal forma que ninguna de sus componentes sea mayor que la componente correspondiente de $\Delta\boldsymbol{a}^{max}$. Para realizar este reescalado, primero se calcula un factor α definido como:

$$\alpha = \max_{i=1,..,N_{eq}} \left(\frac{\left| \left[\Delta\boldsymbol{a}^{k+1}\right]_i \right|}{\left[\Delta\boldsymbol{a}^{max}\right]_i} \right)$$

Si $\alpha < 1$, entonces no se modifica $\Delta \boldsymbol{a}^{k+1}$. En caso contrario, se define el avance en la iteración $k+1$ como:

$$\Delta \boldsymbol{a}_{LA}^{k+1} = \frac{\Delta \boldsymbol{a}^{k+1}}{\alpha} \tag{4.26}$$

Aplicación de una técnica de minimización lineal: *Line-search*

Sea $\Delta \boldsymbol{a}^{k+1}$ la solución del sistema (4.22), reescalada si es necesario, según la ecuación (4.26). Nótese que se suprime el subíndice de $\Delta \boldsymbol{a}_{LA}^{k+1}$ por simplicidad. A continuación se presentará una modificación del módulo de $\Delta \boldsymbol{a}^{k+1}$ basada en una técnica de minimización lineal, *Line-search*.

El objetivo es que en $\boldsymbol{a}^{k+1}$ modificado, $\boldsymbol{a}_{LS}^{k+1}$, la distorsión de la malla sea mínima, manteniendo la dirección marcada por el $\Delta \boldsymbol{a}^{k+1}$ original. Este objetivo se traduce en obtener un valor ξ_{opt} de modo que se minimice la expresión:

$$D(\xi) = D_{malla}(\boldsymbol{a}^k + \xi \Delta \boldsymbol{a}_{LA}^{k+1}) \tag{4.27}$$

Se considera preferible no realizar un proceso iterativo para minimizar la expresión (4.27). Alternativamente, se propone un método basado en la minimización de una interpolación cúbica de $D(\xi)$. En una cierta iteración $k+1$ se pueden calcular con facilidad los valores de $D_{malla}(\boldsymbol{a}^k)$, $D_{malla}(\boldsymbol{a}^{k+1})$ y ∇D_{malla}^k. A partir de estos valores se obtienen:

$$\begin{aligned} D(0) &= D_{malla}(\boldsymbol{a}^k) \\ D(1) &= D_{malla}(\boldsymbol{a}^{k+1}) \\ \left.\frac{dD}{d\xi}\right|_{\xi=0} &= (\nabla D_{malla}^k)^T \cdot \Delta \boldsymbol{a}_{LA}^{k+1} \\ \left.\frac{d^2D}{d\xi^2}\right|_{\xi=0} &= \left(\Delta \boldsymbol{a}_{LA}^{k+1}\right)^T \cdot \boldsymbol{H}_{D_{malla}}^k \cdot \Delta \boldsymbol{a}_{LA}^{k+1} \end{aligned} \tag{4.28}$$

El cálculo de $\left.\frac{d^2D}{d\xi^2}\right|_{\xi=0}$ puede parecer demasiado costoso e innecesario. Sin este valor no se puede hacer una interpolación cúbica, pero sí que se puede hacer una interpolación parabólica, que ya permitiría hacer una estrategia *Line-search*. Sin embargo, el valor de $\left.\frac{d^2D}{d\xi^2}\right|_{\xi=0}$ se puede obtener a partir de $\left.\frac{dD}{d\xi}\right|_{\xi=0}$ con muy pocas operaciones:

$$\left.\frac{d^2D}{d\xi^2}\right|_{\xi=0} = \frac{1}{\alpha^2}\left(\Delta \boldsymbol{a}^{k+1}\right)^T \cdot \boldsymbol{H}^k_{D_{malla}} \cdot \Delta \boldsymbol{a}^{k+1} = -\frac{1}{\alpha^2}(\nabla D^k_{malla})^T \cdot \Delta \boldsymbol{a}^{k+1} = -\frac{1}{\alpha}\left.\frac{dD}{d\xi}\right|_{\xi=0}$$

La interpolación cúbica de $D(\xi)$ se puede escribir como:

$$P_3(\xi) = b_0 + b_1\xi + b_2\xi^2 + b_3\xi^3$$

donde:

$$\begin{aligned} b_0 &= D(0) \\ b_1 &= \left.\frac{dD}{d\xi}\right|_{\xi=0} \\ b_2 &= \left.\frac{1}{2}\,\frac{d^2D}{d\xi^2}\right|_{\xi=0} \\ b_3 &= D(1) - D(0) - \left.\frac{dD}{d\xi}\right|_{\xi=0} - \left.\frac{1}{2}\,\frac{d^2D}{d\xi^2}\right|_{\xi=0} \end{aligned}$$

con estos valores se calcula:

$$\Delta = b_2^2 - 3b_1b_3$$

si $\Delta < 0$ la función $P_3(\xi)$ no tiene extremos locales. Luego, no se realiza la estrategia *Line-search*. En caso contrario, se calculan ξ_1 y ξ_2, que verifican $\dfrac{dP_3}{d\xi} = 0$:

$$\begin{aligned} \xi_1 &= -\frac{b_2}{3b_3} + \frac{\sqrt{\Delta}}{3b_3} \\ \xi_2 &= -\frac{b_2}{3b_3} - \frac{\sqrt{\Delta}}{3b_3} \end{aligned}$$

A continuación se evaluan los valores de $P_3(\xi_1)$ y $P_3(\xi_2)$, suponiendo que se verifica $P_3(\xi_1) \simeq D(\xi_1)$ y $P_3(\xi_2) \simeq D(\xi_2)$ respectivamente. Finalmente, se elige ξ_{opt} entre los valores de ξ_1, ξ_2 y 1, tomando aquel valor al que le corresponda un menor valor de $P_3(\xi)$. El vector de las coordenadas libres en la iteración $k+1$ resulta:

$$\boldsymbol{a}^{k+1}_{LS} = \boldsymbol{a}^k + \xi_{opt}\Delta \boldsymbol{a}^{k+1}_{LA} \tag{4.29}$$

Nótese que no se considera la posibilidad de que $\xi_{opt} = 0$, porque si se permitiera esta posibilidad el método se pararía. En la siguiente iteración el valor de $\boldsymbol{a}^{k+1}$ sería $\boldsymbol{a}^k$, y volvería a ocurrir el mismo problema.

Es recomendable acotar los valores admisibles de ξ_1 y ξ_2 para que no resulten desplazamientos nodales excesivos. Una opción razonable es rechazar ξ_i, $i = 1, 2$, si $|\xi_i| > 1$. De este modo, se mantiene la limitación del avance introducida anteriormente.

Aplicación del método del máximo descenso

Como ya se ha visto en los capítulos 2 y 3, cuando los elementos estudiados tienen concavidades es cuando la función distorsión es más problemática, y el elemento está más distorsionado. Siendo así, es bastante intuitivo considerar que si los elementos de la malla tienen alguna concavidad aún se está bastante alejado de la solución del problema de minimización. En consecuencia, la utilización del método de *Newton-Raphson* puede presentar problemas de convergencia en estas situaciones. Por lo tanto se ha considerado muy interesante utilizar el método del máximo descenso cuando la malla está lejos de la configuración de mínima distorsión (es decir, cuando no hay concavidades). Así, la resolución del sistema en cada iteración se hará mediante el método de máximo descenso si algún elemento tiene concavidades, y el método de *Newton-Raphson* si ningún elemento tiene concavidades.

En este caso se considera que la información que proporciona $\boldsymbol{H}^k_{D_{malla}}$ es incorrecta y no se utiliza. Se utiliza exclusivamente ∇D^k_{malla}, tomando $\Delta\boldsymbol{a}^{k+1}$ la dirección de ∇D^k_{malla}, con sentido contrario (dirección de máximo descenso). El módulo de $\Delta\boldsymbol{a}^{k+1}$ vendrá determinado por $\Delta\boldsymbol{a}^{max}$ de forma parecida a como se hacía en la ecuación (4.26). Este método se complementa con una estrategia *Line-search* de minimización parabólica. A continuación se detallará cada uno de los pasos a seguir.

Por otra parte, en el subapartado 4.4.1, donde se presentaba el método de original de *Newton-Raphson*, ya se anticipaba que es posible que en cierta iteración:

$$\left(\nabla D^k_{malla}\right)^T \cdot \Delta\boldsymbol{a}^{k+1} > 0$$

Esto significa que la dirección de $\Delta\boldsymbol{a}^{k+1}$ que se obtiene mediante *Newton-Raphson* no es correcta. Nótese que tanto la modificación por limitación de avance como la modificación por la estrategia *Line-search* no cambian la dirección del vector $\Delta\boldsymbol{a}^{k+1}$. Por lo tanto, estas modificaciones son incapaces de corregir $\Delta\boldsymbol{a}^{k+1}$ cuando éste tiene una dirección incorrecta. En consecuencia, cuando la dirección de $\Delta\boldsymbol{a}^{k+1}$ sea deficiente, también se deberá aplicar la modificación que se presenta a continuación.

En primer lugar debe calcularse un parámetro β:

$$\beta = \max_{i=1,..,N_{eq}} \left(\frac{\left| \left[\nabla D^k_{malla} \right]_i \right|}{\left[\Delta \boldsymbol{a}^{max} \right]_i} \right)$$

En segundo lugar se define el avance provisional en la iteración $k+1$ como:

$$\Delta \boldsymbol{a}^{k+1}_{MDP} = -\frac{\nabla D^k_{malla}}{\beta} \tag{4.30}$$

Finalmente, se realiza una estrategia *Line-search* de minimización. En este caso se desea obtener un valor de ξ tal que minimice:

$$D(\xi) = D_{malla}(\boldsymbol{a}^k + \xi \Delta \boldsymbol{a}^{k+1}_{MDP})$$

Se ha escogido realizar una minimización parabólica puesto que el cálculo de

$$\left. \frac{d^2 D}{d\xi^2} \right|_{\xi=0} = \left(\Delta \boldsymbol{a}^{k+1}_{MDP} \right)^T \cdot \boldsymbol{H}^k_{D_{malla}} \cdot \Delta \boldsymbol{a}^{k+1}_{MDP}$$

es excesivo desde el punto de vista computacional. La interpolación parabólica se realiza imponiendo los valores:

$$\begin{aligned} D(0) &= D_{malla}(\boldsymbol{a}^k) \\ D(1) &= D_{malla}(\boldsymbol{a}^{k+1}_{MDP}) \\ \left. \frac{dD}{d\xi} \right|_{\xi=0} &= (\nabla D^k_{malla})^T \cdot \Delta \boldsymbol{a}^{k+1}_{MDP} \end{aligned}$$

donde:

$$\boldsymbol{a}^{k+1}_{MDP} = \boldsymbol{a}^k + \Delta \boldsymbol{a}^{k+1}_{MDP}$$

Al polinomio interpolante lo denominaremos $P_2(\xi)$, y tiene por ecuación:

$$P_2(\xi) = b_0 + b_1 \xi + b_2 \xi^2$$

siendo:

$$\begin{aligned} b_0 &= D(0) \\ b_1 &= \left. \frac{dD}{d\xi} \right|_{\xi=0} \\ b_2 &= D(1) - D(0) - \left. \frac{dD}{d\xi} \right|_{\xi=0} \end{aligned}$$

el mínimo de esta parábola está en:

$$\xi_1 = -\frac{b_1}{2b_2}$$

El valor de ξ_{opt} será el que dé un valor menor de $P_2(\xi)$, considerando como candidatos ξ_1 y 1. No es recomendable tomar $\xi_{opt} = \xi_1$ si $|\xi_1| > 1$, por los motivos argumentados en el apartado 4.4.2.

El vector de las coordenadas libres en la iteración $k+1$ resulta:

$$\boldsymbol{a}_{MD}^{k+1} = \boldsymbol{a}^k + \xi_{opt}\Delta\boldsymbol{a}_{MDP}^{k+1} \tag{4.31}$$

La utilización exclusiva de este método en la minimización de la distorsión de la malla es altamente desaconsejable. Por un lado, la dirección del gradiente no es siempre la mejor dirección. En particular, son conocidos los problemas que aparecen cuando los valores propios de la hessiana son muy distintos. En este caso se requieren muchas iteraciones para conseguir llegar a la solución. Por otro lado, la elección del módulo de $\Delta\boldsymbol{a}_{MDP}^{k+1}$ no es muy rigurosa, y podría ser demasiado grande cerca de la solución. Sin embargo, en los ejemplos realizados se ha comprobado que esta técnica es útil en las primeras iteraciones para entrar en la zona de convergencia del método de *Newton-Raphson*.

4.5. Programación del método de minimización

En este apartado se presentarán las características básicas de la programación del método de minimización descrito en el apartado anterior. En particular se detallarán los gradientes y hessianas de las distorsiones elementales (para los cuadriláteros y los hexaedros), ya que estos valores serán suficientes para construir el gradiente y la hessiana de la distorsión de la malla, como se justificará a continución.

4.5.1. Analogía de la estructura del programa con la de un programa estándar de elementos finitos

El objetivo del programa es hallar la posición óptima de las coordenadas libres de la malla, $\boldsymbol{a}^{opt}$, es decir, el valor de $\boldsymbol{a}$ que minimiza D_{malla} (ver ecuación (4.8)). El método parte de la idea de resolver el sistema de ecuaciones (4.19) mediante una estrategia iterativa tipo *Newton-Raphson* (4.22). Se realizan modificaciones a este método, presentadas en el subapartado 4.4.2. Sin embargo, la estructura del programa viene condicionada básicamente por la estrategia original tipo *Newton-Raphson*.

En cualquier caso, el punto clave del programa es construir el sistema (4.22) y resolverlo en cada iteración k. Para construir el sistema (obtener ∇D^k_{malla} y $\boldsymbol{H}^k_{D_{malla}}$) se utiliza una técnica general de los programas de elementos finitos. Esta técnica consiste en obtener las contribuciones de cada elemento en ∇D^k_{malla} y $\boldsymbol{H}^k_{D_{malla}}$, y ensamblarlas para generar los valores de ∇D^k_{malla} y $\boldsymbol{H}^k_{D_{malla}}$ globales. Esto es posible porque se define la distorsión de la malla como suma de las distorsiones elementales (ver ecuación (4.8)). A continuación, se justificará con más detalle porqué es posible utilizar como base del programa la estructura de un programa de elementos finitos.

En la notación usual del método de los elementos finitos, el sistema (4.22):

$$\boldsymbol{H}^k_{D_{malla}} \cdot \Delta \boldsymbol{a}^{k+1} = -\nabla D^k_{malla}$$

puede reescribirse como:

$$\boldsymbol{K}^k_{global} \cdot \Delta \boldsymbol{a}^{k+1} = \boldsymbol{f}^k$$

donde $\boldsymbol{K}^k_{global} = \boldsymbol{H}^k_{D_{malla}}$ es la matriz de rigidez global y $\boldsymbol{f}^k = -\nabla D^k_{malla}$ es el vector de fuerzas global.

Análogamente pueden definirse el vector de fuerzas elemental, $(\boldsymbol{f}^e)^k$, y la matriz de rigidez elemental, $(\boldsymbol{K}^e)^k$, como:

$$(\boldsymbol{f}^e)^k = -(\nabla D^e_{AMD})^k \quad (4.32)$$

$$(\boldsymbol{K}^e)^k = \boldsymbol{H}^k_{D^e_{AMD}} \quad (4.33)$$

donde $(\nabla D^e_{AMD})^k$ es el gradiente de la distorsión elemental del elemento e en la iteración k, y $\boldsymbol{H}^k_{D^e_{AMD}}$ es la matriz hessiana de la distorsión elemental del elemento e en la iteración k (se ha simplificado la notación $D_{AMD} = D_{OM,AMD}$). En elementos tipo cuadrilátero , un elemento tiene 4 nodos, y cada nodo tiene 2 coordenadas, que son en total 8 coordenadas. Por esta razón, $(\boldsymbol{f}^e)^k$ es un vector de 8 componentes y $(\boldsymbol{K}^e)^k$ es una matriz 8×8. En elementos tipo hexaedro , cada elemento tiene 8 nodos, y cada nodo 3 coordenadas, que son un total de 24 coordenadas. En este caso, pues, $(\boldsymbol{f}^e)^k$ es un vector de 24 componentes y $(\boldsymbol{K}^e)^k$ es una matriz 24×24 (nótese cómo crece el órden del sistema al pasar de 2 a 3 dimensiones). En el siguiente apartado, se obtendrán explícitamente $(\boldsymbol{f}^e)^k$ y $(\boldsymbol{K}^e)^k$.

El vector de fuerzas global y la matriz de rigidez global se pueden obtener mediante una operación de ensamblaje a partir de los respectivos vectores y matrices locales. Esto es posible porque, dados i y j, $i = 1, 2, .., N_{eq}$ y $j = 1, 2, .., N_{eq}$, se verfica:

$$[\boldsymbol{f}]_i = [-\nabla D_{malla}]_i = -\frac{\partial D_{malla}}{\partial a_i} = -\sum_{e=1}^{N_{elem}} \frac{\partial D^e_{AMD}}{\partial a_i} = \sum_{\substack{e=1 \\ i \in e}}^{N_{elem}} [\boldsymbol{f}^e]_{i_l}$$

$$[\boldsymbol{K}_{global}]_{ij} = [\boldsymbol{H}_{D_{malla}}]_{ij} = \frac{\partial^2 D_{malla}}{\partial a_i \partial a_j} = \sum_{e=1}^{N_{elem}} \frac{\partial^2 D^e_{AMD}}{\partial a_i a_j} = \sum_{\substack{e=1 \\ i\, y\, j \in e}}^{N_{elem}} [\boldsymbol{K}^e]_{i_l j_l}$$

donde i_l y j_l se refieren a la numeración local del elemento, $i_l = 1, 2, .., (8$ o $24)$ y $j_l = 1, 2, .., (8$ o $24)$, y corresponden a las coordenadas libres a_i y a_j respectivamente. Nótese que se ha suprimido el índice k de iteración para simplificar la notación.

La matriz del sistema de ecuaciones, $\boldsymbol{K}_{global}$, tiene las siguientes propiedades:

- Es una matriz simétrica
- Alrededor de la solución óptima del método de suavizado, es una matriz definida positiva
- Es una matriz en *sky-line*

$\boldsymbol{K}_{global}$ es una matriz simétrica porque es una matriz hessiana. Alrededor de la solución óptima del método de suavizado es una matriz definida positiva porque es una propiedad de una matriz hessiana en un mínimo. $\boldsymbol{K}_{global}$ es una matriz en *sky-line* debido a la propia numeración de los nodos de la malla.

Es conveniente utilizar las propiedades de la matriz del sistema para optimizar la forma de resolución del mismo. En principio, la propiedad referente a la definición de la matriz nos lleva a rechazar la utilización de algoritmos para matrices definidas positivas, ya que la matriz del sistema no siempre lo es. Sin embargo, cuando la matriz del sistema no es definida positiva no tiene sentido utilizarla (ver subapartado 4.4.2), y es cuando se debería utilizar un método que utilizara exclusivamente información del gradiente de la función a minimizar. Por consiguiente, es posible utilizar formas de resolución para matrices simétricas definidas positivas.

4.5.2. Evaluación de los gradientes y hessianas elementales

El problema que se presenta ahora es obtener efectivamente los gradientes y hessianas elementales, o bien, empleando la notación de elementos finitos, los vectores de fuerzas y las matrices de rigidez elementales.

La distorsión elemental elegida es la definida a partir de la media aritmética de las distorsiones nodales (ver ecuacion (2.13)):

$$D^e_{AMD} = \frac{\sum_{i=1}^{N_{en}} D_{OM,i}}{N_{en}}$$

donde N_{en} es el número de nodos por elemento, y $D_{OM,i}$ depende de si se trata de cuadriláteros o de hexaedros (ver ecuaciones (4.6) y (4.16)).

De la ecuación (2.13) se deduce que es posible obtener $\boldsymbol{f}^e$ y $\boldsymbol{K}^e$ (ver ecuaciones (4.32) y (4.33), respectivamente), a partir de la contribución de cada nodo del elemento. Es decir, se realiza un ensamblaje a nivel elemental sumando la aportación de cada nodo.

$$\boldsymbol{f}^e = \frac{1}{N_{en}} \sum_{i=1}^{N_{en}} \boldsymbol{f}^e_i \tag{4.34}$$

$$\boldsymbol{K}^e = \frac{1}{N_{en}} \sum_{i=1}^{N_{en}} \boldsymbol{K}^e_i \tag{4.35}$$

donde $\boldsymbol{f}^e_i$ y $\boldsymbol{K}^e_i$ son la aportación del nodo i a $\boldsymbol{f}^e$ y $\boldsymbol{K}^e$, respectivamente. Luego, será suficiente obtener de forma explícita $\boldsymbol{f}^e_i$ y $\boldsymbol{K}^e_i$, para cierto nodo i, $i = 1, .., N_{en}$. $\boldsymbol{f}^e_i$ es el gradiente de $D^e_{OM,i}$ cambiado de signo, y $\boldsymbol{K}^e_i$ es la hessiana de $D^e_{OM,i}$.

El objetivo es obtener el gradiente y la hessiana de $D^e_{OM,i}$ respecto a las coordenadas nodales. En la deducción que se presenta a continuación se prescinde del superíndice e, $D_{OM,i} = D^e_{OM,i}$ por simplicidad.

La función $D_{OM,i}$ está definida por partes (ver ecuaciones (4.6) y (4.16)). Sin embargo, en cada parte $D_{OM,i}$ depende exclusivamente de $q_{Oddy,i}$. Por esta razón, en ambos casos, la primera operación que debe realizarse para obtener el gradiente y la hessiana de $D_{OM,i}$ es obtener el gradiente y la hessiana de $q_{Oddy,i}$ (ver ecuaciones (4.3) y (4.13)).

Evaluación en mallas de cuadriláteros

En el caso de los cuadriláteros, la función $q_{Oddy,i}$ depende de las variables $(l_i^2, l_{[i+3]}^2, A_i)$:

$$q_{Oddy,i} = \frac{2A_i}{l_i^2 + l_{[i+3]}^2}$$

El gradiente y la hessiana de $q_{Oddy,i}$ respecto a las variables $(l_i^2, l_{[i+3]}^2, A_i)$ son :

$$\hat{\nabla} q_{Oddy,i} = \frac{1}{l_i^2 + l_{[i+3]}^2} \begin{bmatrix} -q_{Oddy,i} \\ -q_{Oddy,i} \\ 2 \end{bmatrix}$$

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{q_{Oddy,i}} = \frac{2}{\left(l_i^2 + l_{[i+3]}^2\right)^2} \begin{bmatrix} q_{Oddy,i} & q_{Oddy,i} & -1 \\ q_{Oddy,i} & q_{Oddy,i} & -1 \\ -1 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

Para obtener el gradiente y la hessiana respecto las coordenadas nodales $(x_i, y_i, x_{[i+1]}, y_{[i+1]}, x_{[i+3]}, y_{[i+3]})$ deberemos hallar las matrices jacobianas y hessianas del cambio de variable. Nótese que según las ecuaciones (4.3), $q_{Oddy,i}$ no depende de $(x_{[i+2]}, y_{[i+2]})$. Sea $\boldsymbol{r}$ la función que nos permite obtener $(l_i^2, l_{[i+3]}^2, A_i)$ a partir de $(x_i, y_i, x_{[i+1]}, y_{[i+1]}, x_{[i+3]}, y_{[i+3]})$. Esta función vectorial se puede escribir como:

$$\boldsymbol{r} = \begin{bmatrix} l_i^2 \\ l_{[i+3]}^2 \\ A_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (x_{[i+1]} - x_i)^2 + (y_{[i+1]} - y_i)^2 \\ (x_{[i+3]} - x_i)^2 + (y_{[i+3]} - y_i)^2 \\ (x_{[i+1]} - x_i)(y_{[i+3]} - y_i) - (x_{[i+3]} - x_i)(y_{[i+1]} - y_i) \end{bmatrix}$$

La jacobiana de $\boldsymbol{r}$ es:

$$\boldsymbol{J}_{\boldsymbol{r}} = \begin{bmatrix} -2(x_{[i+1]} - x_i) & -2(x_{[i+3]} - x_i) & y_{[i+1]} - y_{[i+3]} \\ -2(y_{[i+1]} - y_i) & -2(y_{[i+3]} - y_i) & x_{[i+3]} - x_{[i+1]} \\ 2(x_{[i+1]} - x_i) & 0 & y_{[i+3]} - y_i \\ 2(y_{[i+1]} - y_i) & 0 & x_i - x_{[i+3]} \\ 0 & 2(x_{[i+3]} - x_i) & y_i - y_{[i+1]} \\ 0 & 2(y_{[i+3]} - y_i) & x_{[i+1]} - x_i \end{bmatrix}$$

con esta matriz ya es posible obtener el gradiente de $q_{Oddy,i}$ respecto a las coordenadas nodales como el siguiente producto matricial:

$$\nabla q_{Oddy,i} = \boldsymbol{J}_{\boldsymbol{r}} \cdot \hat{\nabla} q_{Oddy,i}$$

Para calcular la hessiana de $q_{Oddy,i}$ respecto a las coordenadas nodales, $\boldsymbol{H}_{q_{Oddy,i}}$, es necesario calcular primero las hessianas de l_i^2, $l_{[i+3]}^2$ y A_i respecto a las coordenadas nodales:

$$\boldsymbol{H}_{l_i^2} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -2 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{H}_{l_{[i+3]}^2} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{H}_{A_i} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

La expresión de la hessiana de $q_{Oddy,i}$ respecto a las coordenadas nodales, $\boldsymbol{H}_{q_{Oddy,i}}$, es:

$$\boldsymbol{H}_{q_{Oddy,i}} = \boldsymbol{J_r} \cdot \hat{\boldsymbol{H}}_{q_{Oddy,i}} \cdot \boldsymbol{J_r}^T - \frac{q_{Oddy,i}}{l_i^2 + l_{[i+3]}^2}(\boldsymbol{H}_{l_i^2} + \boldsymbol{H}_{l_{[i+3]}^2}) + \frac{2}{l_i^2 + l_{[i+3]}^2}\boldsymbol{H}_{A_i}$$

Por otra parte, se deben calcular el gradiente y la hessiana de la función producto escalar definida en (4.7). Al igual que sucede con la función $q_{Oddy,i}$, ${E^2}_i$ sólo depende de las coordenadas $(x_i, y_i, x_{[i+1]}, y_{[i+1]}, x_{[i+3]}, y_{[i+3]})$. Debido a la simplicidad de la función E_i (ver ecuación (4.11)), el gradiente y la hessiana de ${E^2}_i$ respecto las cordenadas nodales, $\nabla {E^2}_i$ y $\boldsymbol{H}_{{E^2}_i}$, se calculará en base a el gradiente y la hessiana de E_i:∇E_i y $\boldsymbol{H}_{E_i}$:

$$\nabla E_i = \begin{bmatrix} 2x_i - x_{i+1} - x_{i+3} \\ 2y_i - y_{i+1} - y_{i+3} \\ x_{i+3} - x_i \\ y_{i+3} - y_i \\ x_{i+1} - x_i \\ y_{i+1} - y_i \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{H}_{E_i} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ & 2 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ & & 0 & 0 & 1 & 0 \\ & & & 0 & 0 & 1 \\ & & (sim) & & 0 & 0 \\ & & & & & 0 \end{bmatrix}$$

En consecuencia, fácilmente se obtiene:

$$\nabla {E^2}_i = 2E_i \cdot \nabla E_i$$

Y con la ecuación (4.36) se obtiene la matriz $\boldsymbol{H}_{E_i}$:

$$\boldsymbol{H}_{{E^2}_i} = 2\left(E_i \cdot \boldsymbol{H}_{E_i} + \nabla E_i \cdot \nabla E_i^T\right) \tag{4.36}$$

Una vez calculados $\nabla q_{Oddy,i}$ y $\boldsymbol{H}_{q_{Oddy,i}}$, $\nabla {E^2}_i$ y $\boldsymbol{H}_{{E^2}_i}$, para calcular $\nabla D_{OM,i}$ y $\boldsymbol{H}_{D_{OM,i}}$ se deben considerar dos posibilidades. Esto se debe a que la función $D_{OM,i}$ está definida por partes (ver ecuación (4.6)). Las dos posibilidades son:

- $q_{Oddy,i} \geq q_0$
- $q_{Oddy,i} < q_0$

En ambos casos $D_{OM,i}$ depende de las coordenadas nodales exclusivamente por su relación con $q_{Oddy,i}$ (ver ecuaciones (4.11) y (4.12)). Entonces, el gradiente y la hessiana de $D_{OM,i}$ se pueden obtener a partir del gradiente y la hessiana de $q_{Oddy,i}$ aplicando la regla de la cadena:

- Si $q_{Oddy,i} \geq q_0$:

$$R_1 = -\frac{4}{q^3_{Oddy,i}}$$

$$R_2 = \frac{12}{q^4_{Oddy,i}}$$

$$\nabla D_{OM,i} = R_1 \nabla q_{Oddy,i} + \nabla {E^2}_i \tag{4.37}$$

$$\boldsymbol{H}_{D_{OM,i}} = R_1 \boldsymbol{H}_{q_{Oddy,i}} + R_2 \nabla q_{Oddy,i} \cdot \nabla q^T_{Oddy,i} + \boldsymbol{H}_{{E^2}_i} \tag{4.38}$$

- Si $q_{Oddy,i} < q_0$:

$$
\begin{aligned}
S_1 &= -\frac{4}{q_0^3}\left(\frac{3q_{Oddy,i}}{q_0} - 4\right) \\
S_2 &= \frac{12}{q_0^4} \\
\nabla D_{OM,i} &= S_1 \nabla q_{Oddy,i} + \nabla {E^2}_i \qquad (4.39) \\
\boldsymbol{H}_{D_{OM,i}} &= S_1 \boldsymbol{H}_{q_{Oddy,i}} + S_2 \nabla q_{Oddy,i} \cdot \nabla q_{Oddy,i}^T + \boldsymbol{H}_{{E^2}_i} \qquad (4.40)
\end{aligned}
$$

En las expresiones (4.37), (4.38), (4.39) y (4.40), los términos correspondientes a ${E^2}_i$ sólo se deben considerar cuando la malla tiene concavidades, de acuerdo con la definición de D_{malla} que hemos hecho (ver ecuación (4.8)).

$\nabla D_{OM,i}$ y $\boldsymbol{H}_{D_{OM,i}}$ son el gradiente y la hessiana, respectivamente, de $D_{OM,i}$ respecto a las coordenadas $(x_i, y_i, x_{[i+1]}, y_{[i+1]}, x_{[i+3]}, y_{[i+3]})$. En cambio:

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{f}_i^e &= -\tilde{\nabla} D_{OM,i} \\
\boldsymbol{K}_i^e &= \tilde{\boldsymbol{H}}_{D_{OM,i}}
\end{aligned}
$$

donde $\tilde{\nabla} D_{OM,i}$ y $\tilde{\boldsymbol{H}}_{D_{OM,i}}$ son el gradiente y la hessiana, respectivamente, de $D_{OM,i}$ respecto las coordenadas $(x_1, y_1, x_2, y_2, x_3, y_3, x_4, y_4)$. En $\nabla D_{OM,i}$ y $\boldsymbol{H}_{D_{OM,i}}$ falta la aportación de $(x_{[i+2]}, y_{[i+2]})$. Para pasar de $\nabla D_{OM,i}$ (vector de 6 componentes) y $\boldsymbol{H}_{D_{OM,i}}$ (matriz 6×6) a $\boldsymbol{f}_i^e$ (vector de 8 componentes) y $\boldsymbol{K}_i^e$ (matriz 8×8), se debe ampliar $\nabla D_{OM,i}$ y $\boldsymbol{H}_{D_{OM,i}}$ añadiendo ceros a las posiciones que corresponden a $(x_{[i+2]}, y_{[i+2]})$. Esto se debe a que $D_{OM,i}$ no depende de $(x_{[i+2]}, y_{[i+2]})$, entonces, las derivadas de $D_{OM,i}$ respecto $(x_{[i+2]}, y_{[i+2]})$ son nulas. Además de añadir ceros en las posiciones correspondientes a $(x_{[i+2]}, y_{[i+2]})$, deben permutarse las componentes de $\boldsymbol{f}_i^e$ y $\boldsymbol{K}_i^e$ para que estén ordenadas según la numeración de las coordenadas del elemento $(x_1, y_1, x_2, y_2, x_3, y_3, x_4, y_4)$. El orden original corresponde al definido por las coordenadas $(x_i, y_i, x_{[i+1]}, y_{[i+1]}, x_{[i+2]}, y_{[i+2]}, x_{[i+3]}, y_{[i+3]})$, que en general no coincide con el orden de las coordenadas del elemento.

Evaluación en mallas de hexaedros

En el caso de los hexaedros, la función $q_{Oddy,i}$ depende de las siete variables l_{i2}^2, l_{i3}^2, l_{i4}^2, A_{i2i3}^2, A_{i3i4}^2, A_{i2i4}^2, V_i (ver el significado de las variables en la figura 3.6):

$$q_{Oddy,i} = \frac{V_i}{\left(\frac{\left(l_{i2}^2 + l_{i3}^2 + l_{i4}^2\right)^2}{3} - \left(A_{i2i3}^2 + A_{i3i4}^2 + A_{i2i4}^2\right) + V_i^{\frac{4}{3}} \right)^{\frac{3}{4}}}$$

Para simplificar la notación en este capítulo, se utilizarán las siguientes variables:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \left(l_{i2}^2 + l_{i3}^2 + l_{i4}^2\right) \\ \mathcal{S} &= \left(\frac{\left(l_{i2}^2 + l_{i3}^2 + l_{i4}^2\right)^2}{3} - \left(A_{i2i3}^2 + A_{i3i4}^2 + A_{i2i4}^2\right) + V^{\frac{4}{3}} \right)^{\frac{3}{4}} \end{aligned}$$

El gradiente de $q_{Oddy,i}$ respecto a estas variables es:

$$\hat{\nabla} q_{Oddy,i} = q_{Oddy,i} \cdot \mathbf{g_1}$$

donde

$$\mathbf{g_1} = \begin{bmatrix} -\frac{\mathcal{L}}{2\mathcal{S}} \\ -\frac{\mathcal{L}}{2\mathcal{S}} \\ -\frac{\mathcal{L}}{2\mathcal{S}} \\ \frac{3}{4\mathcal{S}} \\ \frac{3}{4\mathcal{S}} \\ \frac{3}{4\mathcal{S}} \\ \frac{1}{V_i}\left(1 - \frac{V_i^{\frac{4}{3}}}{\mathcal{S}}\right) \end{bmatrix} \tag{4.41}$$

de tal manera que $\hat{\nabla} q_{Oddy,i}$ se puede expresar como

$$\hat{\nabla} q_{Oddy,i} = q_{Oddy,i} \cdot \mathbf{g_1}$$

La jacobiana de $\mathbf{g_1}$ es:

$$\mathbf{J_{g_1}} = \begin{bmatrix} T_1 & T_1 & T_1 & T_2 & T_2 & T_2 & T_3 \\ & T_1 & T_1 & T_2 & T_2 & T_2 & T_3 \\ & & T_1 & T_2 & T_2 & T_2 & T_3 \\ & & & T_4 & T_4 & T_4 & T_5 \\ & & (sim) & & T_4 & T_4 & T_5 \\ & & & & & T_4 & T_5 \\ & & & & & & T_6 \end{bmatrix} \tag{4.42}$$

donde

$$
\begin{aligned}
T_1 &= \frac{1}{\mathcal{S}}\left(\frac{\mathcal{L}^2}{3\mathcal{S}^2} - \frac{1}{2}\right) \\
T_2 &= -\frac{\mathcal{L}}{\mathcal{S}^2} \\
T_3 &= \frac{2\mathcal{L}}{3\mathcal{S}^2} V_i^{\frac{1}{3}} \\
T_4 &= \frac{3}{4\mathcal{S}^2} \\
T_5 &= -\frac{V_i^{\frac{1}{3}}}{\mathcal{S}^2} \\
T_6 &= \frac{7V_i^{\frac{1}{3}}}{3\mathcal{S}^{\frac{7}{4}}}\left(\frac{V_i^{\frac{4}{3}}}{\mathcal{S}} - 1\right)
\end{aligned}
$$

Con el gradiente de $q_{Oddy,i}$ y la matriz $\mathbf{J_{g_1}}$ es fácil obtener la matriz Hessiana de $q_{Oddy,i}$ respecto a las variables (l_{i2}^2, l_{i3}^2, l_{i4}^2, A_{i2i3}^2, A_{i3i4}^2, A_{i2i4}^2, V_i) segun la siguiente ecuación:

$$
\hat{\boldsymbol{H}}_{q_{Oddy,i}} = \frac{\hat{\nabla} q_{Oddy,i} \cdot \hat{\nabla} q_{Oddy,i}^T}{q_{Oddy,i}} + q_{Oddy,i} \cdot \mathbf{J_{g_1}} \tag{4.43}
$$

Sea $\mathbf{r}$ la función que nos permite obtener (l_{i2}^2, l_{i3}^2, l_{i4}^2, A_{i2i3}^2, A_{i3i4}^2, A_{i2i4}^2, V_i) a partir de las coordenadas nodales (x_i, y_i, z_i, x_{i2}, y_{i2}, z_{i2}, x_{i3}, y_{i3}, z_{i3}, x_{i4}, y_{i4}, z_{i4}), ver ecuaciones (3.8). Por lo tanto se puede calcular su matriz jacobiana $\mathbf{J_r}$ (cuyos coeficientes se muestran en el apéndice C, expresiones (C.1) a (C.12)).

Entonces, el gradiente de $q_{Oddy,i}$ respecto las coordenadas nodales es:

$$
\nabla q_{Oddy,i} = \boldsymbol{J_r} \cdot \hat{\nabla} q_{Oddy,i} \tag{4.44}
$$

Para obtener la matriz Hessiana de $q_{Oddy,i}$ respecto las coordenadas nodales necesitamos las Hessianas de las variables (l_{i2}^2, l_{i3}^2, l_{i4}^2, A_{i2i3}^2, A_{i3i4}^2, A_{i2i4}^2, V_i) respecto dichas coordenadas nodales. Denominaremos $\mathbf{H_{l_i^2}}$, $\mathbf{H_{l_{i2}^2}}$, $\mathbf{H_{l_{i3}^2}}$, $\mathbf{H_{A_{i2i3}^2}}$, $\mathbf{H_{V_i}}$ a estas Hessianas.

Entonces, la expresión de la hessiana de $q_{Oddy,i}$ respecto a las coordenadas nodales, $\boldsymbol{H}_{q_{Oddy,i}}$,es:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{H}_{q_{Oddy,i}} &= \boldsymbol{J_r} \cdot \hat{\boldsymbol{H}}_{q_{Oddy,i}} \cdot \boldsymbol{J_r}^T - \frac{q_{Oddy,i}\mathcal{L}}{2\mathcal{S}}(\boldsymbol{H}_{l_i}) + \\ & \frac{3q_{Oddy,i}}{4\mathcal{S}}(\boldsymbol{H}_{A_i}) + \frac{1}{\mathcal{S}^{\frac{3}{4}}}\left(1 - \frac{V_i^{\frac{4}{3}}}{\mathcal{S}}\right)\boldsymbol{H}_{V_i} \end{aligned} \tag{4.45}$$

donde

$$\begin{aligned} \boldsymbol{H}_{l_i} &= \boldsymbol{H}_{l_i^2} + \boldsymbol{H}_{l_{i2}^2} + \boldsymbol{H}_{l_{i3}^2} \\ \boldsymbol{H}_{A_i} &= \boldsymbol{H}_{A_{i2i3}} + \boldsymbol{H}_{A_{i3i4}} + \boldsymbol{H}_{A_{i2i4}} \end{aligned}$$

Los coeficientes de las matrices $\boldsymbol{H}_{l_i}$, $\boldsymbol{H}_{A_i}$ y $\boldsymbol{H}_{V_i}$ se muestran en el apéndice C (expresiones (C.13), (C.14) a (C.25), y (C.26) respectivamente).

Por otra parte, se deben calcular el gradiente y la hessiana de la función producto escalar definida en (4.17). Al igual que sucede con la función $q_{Oddy,i}$, ${E^2}_i$ sólo depende de las coordenadas (x_i, y_i, z_i, x_{i2}, y_{i2}, z_{i2}, x_{i3}, y_{i3}, z_{i3}, x_{i4}, y_{i4}, z_{i4}). Debido a la simplicidad de las funciones E_{i23}, E_{i34} y E_{i24} (ver ecuación (4.13)), el gradiente y la hessiana de ${E^2}_i$ respecto las cordenadas nodales, $\nabla {E^2}_i$ y $\boldsymbol{H}_{{E^2}_i}$, se calculará en base a el gradiente y la hessiana de E_{i23}, E_{i34} y E_{i24}:∇E_{i23}, ∇E_{i34}, ∇E_{i24}, $\boldsymbol{H}_{E_{i23}}$, $\boldsymbol{H}_{E_{i34}}$ y $\boldsymbol{H}_{E_{i24}}$:

$$\nabla E_{i23} = \begin{bmatrix} 2x_i - x_{i2} - x_{i3} \\ 2y_i - y_{i2} - y_{i3} \\ 2z_i - z_{i2} - z_{i3} \\ x_{i3} - x_i \\ y_{i3} - y_i \\ z_{i3} - z_i \\ x_{i2} - x_i \\ y_{i2} - y_i \\ z_{i2} - z_i \end{bmatrix}$$

$$\nabla E_{i34} = \begin{bmatrix} 2x_i - x_{i3} - x_{i4} \\ 2y_i - y_{i3} - y_{i4} \\ 2z_i - z_{i3} - z_{i4} \\ x_{i4} - x_i \\ y_{i4} - y_i \\ z_{i4} - z_i \\ x_{i3} - x_i \\ y_{i3} - y_i \\ z_{i3} - z_i \end{bmatrix}$$

$$\nabla E_{i24} = \begin{bmatrix} 2x_i - x_{i2} - x_{i4} \\ 2y_i - y_{i2} - y_{i4} \\ 2z_i - z_{i2} - z_{i4} \\ x_{i4} - x_i \\ y_{i4} - y_i \\ z_{i4} - z_i \\ x_{i2} - x_i \\ y_{i2} - y_i \\ z_{i2} - z_i \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{H}_{E_{i23}} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & 2 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & 2 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & (sim) & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & & & & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & & & & & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & & & & & & 0 & 0 \\ & & & & & & & & & & & 0 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{H}_{E_{i34}} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ & 2 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ & & 2 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ & & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ & & & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ & & & & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ & & & & (sim) & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & & & & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & & & & & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & & & & & & 0 & 0 \\ & & & & & & & & & & & 0 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{H}_{E_{i24}} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ & & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1- & 0 & 0 & -1 \\ & & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & (sim) & & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ & & & & & & & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ & & & & & & & & 0 & 0 & 0 & 1 \\ & & & & & & & & & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & & & & & & 0 & 0 \\ & & & & & & & & & & & 0 \end{pmatrix}$$

En consecuencia, es fácil comprobar que:

$$\nabla {E^2}_i = 2E_{i23} \cdot \nabla E_{i23} + 2E_{i34} \cdot \nabla E_{i34} + 2E_{i24} \cdot \nabla E_{i24} \tag{4.46}$$

De forma similar se obtiene la matriz hessiana:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{H}_{E_i} = 2(E_{i23} \ &\cdot \ \boldsymbol{H}_{E_{i23}} + \nabla E_{i23} \cdot \nabla E_{i23}^T + \\ E_{i34} \ &\cdot \ \boldsymbol{H}_{E_{i34}} + \nabla E_{i34} \cdot \nabla E_{i34}^T + \\ E_{i24} \ &\cdot \ \boldsymbol{H}_{E_{i24}} + \nabla E_{i24} \cdot \nabla E_{i24}^T) \end{aligned} \tag{4.47}$$

Una vez calculados $\nabla q_{Oddy,i}$ y $\boldsymbol{H}_{q_{Oddy,i}}$, $\nabla {E^2}_i$ y $\boldsymbol{H}_{{E^2}_i}$, para calcular $\nabla D_{OM,i}$ y $\boldsymbol{H}_{D_{OM,i}}$ se deben considerar dos posibilidades. Esto se debe a que la función $D_{OM,i}$ está definida por partes (ver ecuación (4.16)). Las dos posibilidades son:

- $q_{Oddy,i} \geq q_0$
- $q_{Oddy,i} < q_0$

En ambos casos $D_{OM,i}$ depende de las coordenadas nodales exclusivamente por su relación con $q_{Oddy,i}$ (ver ecuaciones (4.13) y (4.18)). Entonces, el gradiente y la hessiana de $D_{OM,i}$ se pueden obtener a partir del gradiente y la hessiana de $q_{Oddy,i}$ aplicando la regla de la cadena:

- Si $q_{Oddy,i} \geq q_0$:

$$
\begin{aligned}
R_1 &= -\frac{-8}{3q_{Oddy,i}^{\frac{7}{3}}} \\
R_2 &= \frac{42}{9q_{Oddy,i}^{\frac{10}{3}}} \\
\nabla D_{OM,i} &= R_1 \nabla q_{Oddy,i} + \nabla {E^2}_i \qquad (4.48) \\
\boldsymbol{H}_{D_{OM,i}} &= R_1 \boldsymbol{H}_{q_{Oddy,i}} + R_2 \nabla q_{Oddy,i} \cdot \nabla q_{Oddy,i}^T + \boldsymbol{H}_{{E^2}_i} \qquad (4.49)
\end{aligned}
$$

- Si $q_{Oddy,i} < q_0$:

$$
\begin{aligned}
S_1 &= -\frac{6}{9q_0^{\frac{7}{3}}}\left(\frac{7q_{Oddy,i}}{q_0} - 11\right) \\
S_2 &= \frac{42}{9q_{Oddy,i}^{\frac{10}{3}}} \\
\nabla D_{OM,i} &= S_1 \nabla q_{Oddy,i} + \nabla {E^2}_i \qquad (4.50) \\
\boldsymbol{H}_{D_{OM,i}} &= S_1 \boldsymbol{H}_{q_{Oddy,i}} + S_2 \nabla q_{Oddy,i} \cdot \nabla q_{Oddy,i}^T + \boldsymbol{H}_{{E^2}_i} \qquad (4.51)
\end{aligned}
$$

En las expresiones (4.48), (4.49), (4.50) y (4.51), los términos correspondientes a ${E^2}_i$ sólo se deben considerar cuando la malla no tiene concavidades, de acuerdo con la definición de D_{malla} (ver ecuación (4.8)).

$\nabla D_{OM,i}$ y $\boldsymbol{H}_{D_{OM,i}}$ son el gradiente y la hessiana, respectivamente, de $D_{OM,i}$ respecto a las coordenadas (x_i, y_i, z_i, x_{i2}, y_{i2}, z_{i2}, x_{i3}, y_{i3}, z_{i3}, x_{i4}, y_{i4}, z_{i4}). En cambio:

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{f}_i^e &= -\tilde{\nabla} D_{OM,i} \\
\boldsymbol{K}_i^e &= \tilde{\boldsymbol{H}}_{D_{OM,i}}
\end{aligned}
$$

donde $\tilde{\nabla} D_{OM,i}$ y $\tilde{\boldsymbol{H}}_{D_{OM,i}}$ son el gradiente y la hessiana, respectivamente, de $D_{OM,i}$ respecto las coordenadas (x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, x_3, y_3, z_3, x_4, y_4, z_4, x_5, y_5, z_5, x_6, y_6, z_6, x_7, y_7, z_7, x_8, y_8, z_8). En $\nabla D_{OM,i}$ y $\boldsymbol{H}_{D_{OM,i}}$ falta la aportación de los nodos que no son adyacentes al nodo i. Para pasar de $\nabla D_{OM,i}$ (vector de 12 componentes) y $\boldsymbol{H}_{D_{OM,i}}$ (matriz 12×12) a $\boldsymbol{f}_i^e$ (vector de 24 componentes) y $\boldsymbol{K}_i^e$ (matriz 24×24), se debe ampliar $\nabla D_{OM,i}$ y $\boldsymbol{H}_{D_{OM,i}}$ añadiendo ceros a las posiciones que corresponden las coordenadas de los nodos no adyacentes. Esto se debe a que $D_{OM,i}$ no depende de estos nodos y,

entonces, las derivadas de $D_{OM,i}$ respecto a ellos son nulas. Además de añadir ceros en las posiciones correspondientes, deben permutarse las componentes de $\boldsymbol{f}_i^e$ y $\boldsymbol{K}_i^e$ para que estén ordenadas según la numeración de las coordenadas del elemento (x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, x_3, y_3, z_3, x_4, y_4, z_4, x_5, y_5, z_5, x_6, y_6, z_6, x_7, y_7, z_7, x_8, y_8, z_8). El orden original corresponde al definido por las coordenadas (x_i, y_i, z_i, x_{i2}, y_{i2}, z_{i2}, x_{i3}, y_{i3}, z_{i3}, x_{i4}, y_{i4}, z_{i4}), que en general no coincide con el orden de las coordenadas del elemento.

Capítulo 5

Ejemplos

En este capítulo se presentan algunos ejemplos de suavizado de mallas de cuadriláteros y de hexaedros que ponen de manifiesto la calidad de la malla final obtenida y la robustez del método de suavizado desarrollado.

5.1. Ejemplos en mallas de cuadriláteros

En este apartado se muestran seis ejemplos de mallas de cuadriláteros. Cada ejemplo parte de una malla obtenida a partir de un generador de mallas de cuadriláteros [8] sin utilizar ningún algoritmo de suavizado. Por este motivo, dichas mallas contienen elementos muy distorsionados.

Posteriormente, a cada malla se le ha aplicado:

- el algoritmo de suavizado que se propone en la presente Tesina (al que se ha denominado Oddy modificado)
- la técnica de suavizado de Giulliani [4]
- la técnica de suavizado de Giulliani modificado [9]

Solamente se ha mostrado la geometría de la malla original y la de la malla suavizada con el método de Oddy modificado, puesto que el reducido tamaño de algunos elementos impide ver a simple vista las diferéncias en las mallas resultado de aplicar las diferentes técnicas de suavizado.

Con el fin de comparar los tres métodos utilizados, se ha medido la distorsión de Oddy en las mallas suavizadas, y se presentan los valores de la distorsión media final ($\overline{D}$) y la distorsión elemental máxima (D_{max}) en cada caso. Las expresiones de estos valores son:

$$\begin{aligned} \overline{D} &= \frac{D_{malla}}{N_{elem}} \\ D_{max} &= \max_{e=1,..,N_{elem}} \{D^e_{Oddy}\} \end{aligned}$$

No se presentan los valores de la distorsión elemental mínima, puesto que esta no es un valor significativo de la distorsión de una malla. Esto es porque dicha distorsión suele corresponder a cuadriláteros casi cuadrados, y las diferencias entre ellos son inapreciables.

En cada ejemplo se muestran también las distribuciones de distorsión por elementos. En el eje de abcisas se representan las distorsiones y en el eje de ordenadas el logaritmo en base 10 del número de elementos cuya distorsión está en la horquilla de distorsiones correspondiente.

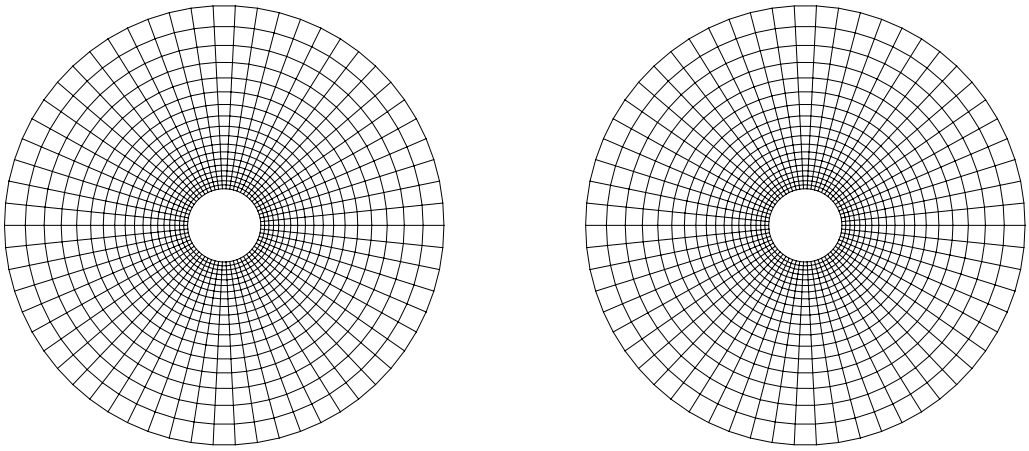
Con los siete ejemplos mostrados se pone de manifiesto que el método de suavizado de Oddy modificado puede aplicarse a mallas con un número importante de elementos (14.053 elementos en la malla G) y con fuertes gradientes del tamaño de elemento.

La tabla 5.1 muestra el número de elementos y nodos que tiene cada malla:

Número de elementos y nodos de cada malla		
Malla	Número de elementos	Número de nodos
A	1.116	1.178
B	2.768	2.815
C	5.042	5.361
D	8.904	9.046
E	11.150	11.241
F	14.053	14.415

Cuadro 5.1: Número de elementos y nodos de cada malla.

En todos los casos estudiados se han obtenido valores de $\overline{D}$ y D_{max} menores con el método de Oddy modificado que con los métodos de Giulliani, excepto en la malla E, en la que la D_{max} mínima se da utilizando el método de Giulliani modificado. Además, en las gráficas de las distribuciones de distorsión por elementos se observa claramente como el método de Oddy modificado proporciona a mallas mucho más regulares (en el sentido que todos los elementos se encuentran en un rango de distorsión más pequeño) y menos distorsionadas. En dichas distribuciones también se observa que en todos los casos la totalidad de elementos se enmarca en un rango de distorsiones menos ámplio y menor que en los otros métodos aplicados.



(a) **(b)**

Figura 5.1: Geometría de la malla A. **(a)** Discretización previa. **(b)** Discretización final obtenida por la minimización de la distorsión de Oddy modificada.

La malla A (ver figura 5.1) corresponde a una discretización estructurada de un anillo circular. Como puede observarse, es una malla bastante regular, en el sentido de que es estructurada y sus elementos están muy poco distorsionados. De todas formas, dada su geometría radial, los elementos de la malla original (sin suavizar) se distribuyen en distintos intervalos de distorsiones claramente diferenciados. Aparentemente no se puede reducir la distorsión de la malla inicial. Sin embargo, la figura 5.2 muestra como al utilizar el método de Oddy modificado se reduce claramente su distorsión. Concretamente, se reduce ligeramente la $\overline{D}$ cuando se utiliza el método de Oddy modificado respecto a el método de Giulliani modificado, mientras que la distorsión máxima se reduce a la mitad.

Además, la malla suavizada mediante el método de Giulliani tiene elementos que no se representan en la figura 5.2 debido a que tienen una distorsión tan elevada que su presencia en el gráfico no permite una clara visualización de los resultados. Concretamente, hay 124 elementos con una distorsión superior a 0,305 (el límite superior del gráfico).

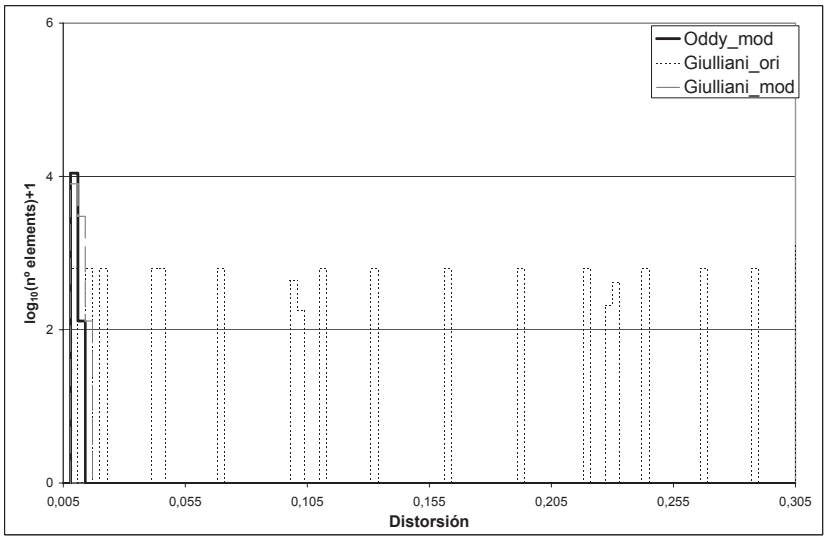
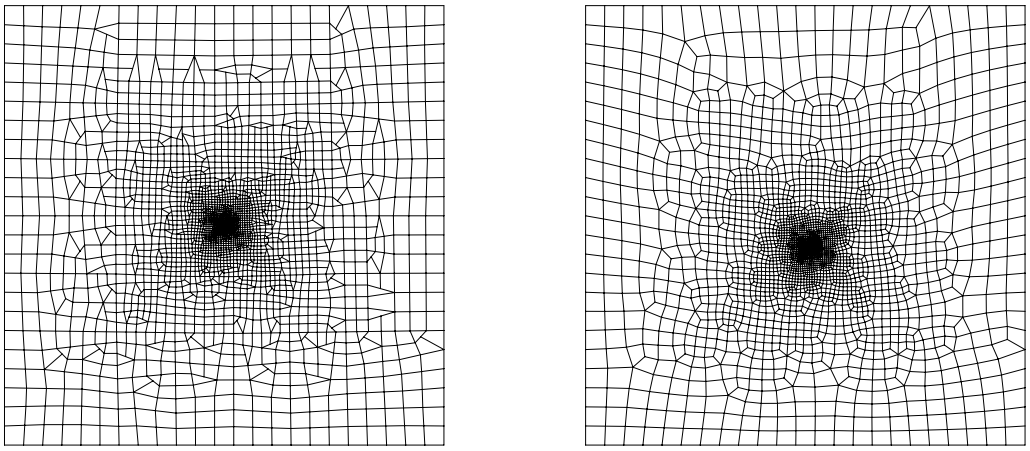


Figura 5.2: Distribución de la distorsión por elementos de la malla A suavizada con los métodos de Oddy modificado, Giulliani y Giulliani modificado. En el caso de la malla suavizada mediante el método de Giulliani, quedan 124 elementos con una distorsión superior a la máxima que se representa en el gráfico (0.31). No se varia la escala del mismo para facilitar su visualización

Distorsiones de Oddy finales		
método de suavizado	$\overline{D}$	D_{max}
Giuliani original	$1{,}87 \cdot 10^{-1}$	0,78
Giuliani modificado	$1{,}10 \cdot 10^{-2}$	0,02
Oddy modificado	$1{,}07 \cdot 10^{-2}$	0,01

Cuadro 5.2: Distorsiones de Oddy finales de la malla A (ver figura 5.1.a) en función del método de suavizado empleado.



(a) **(b)**

Figura 5.3: Geometría de la malla B. **(a)** Discretización previa. **(b)** Discretización final obtenida por la minimización de la distorsión de Oddy modificada.

La malla B (ver figura 5.3) corresponde a la discretización de un cuadrado cuando se prescribe una alta densidad nodal en su centro. Como puede observarse, es una malla no estructurada y presenta un gradiente importante en el tamaño de los elementos.

La tabla 5.3 muestra como se reduce a menos de la mitad la $\overline{D}$ y la D_{max} cuando se utiliza el método de Oddy modificado respecto a el método de Giulliani original y Giulliani modificado respectivamente.

La figura 5.4 muestra como mejora la distribución de la distorsión por elementos. Cabe mencionar que utilizando el método de Giulliani modificado quedan 2 elementos con una distorsión superior a 2,5 (el límite superior del gráfico), pero no se ha variado la escala de la figura para facilitar su visualización.

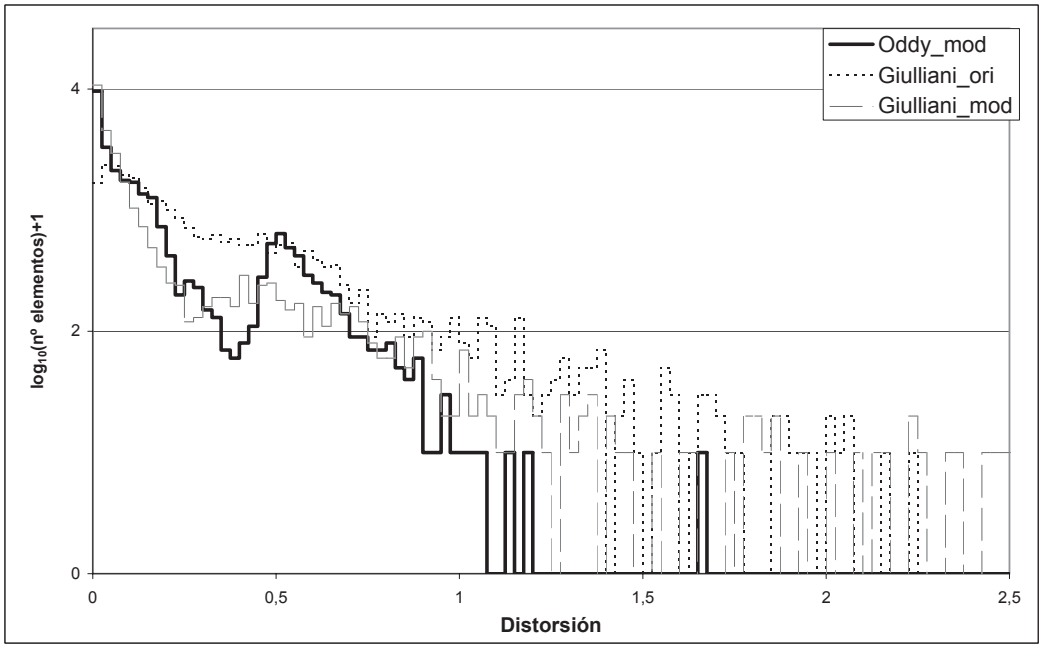
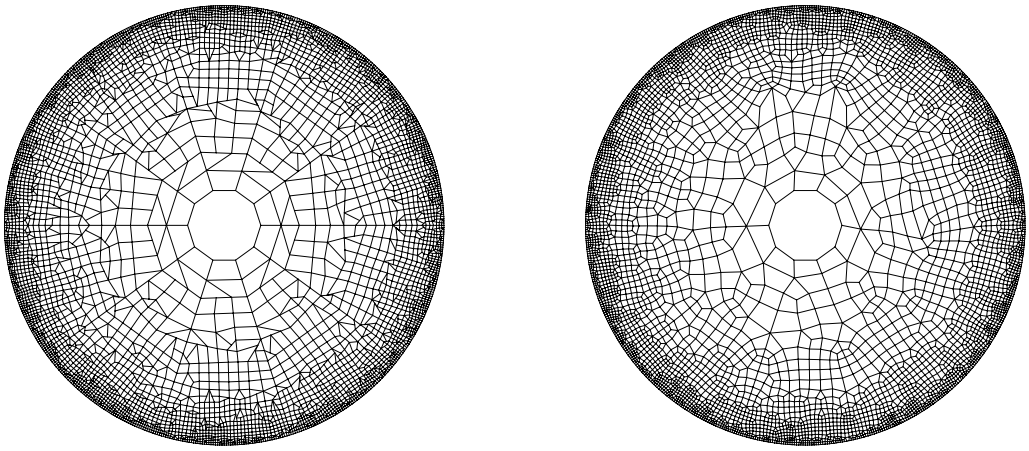


Figura 5.4: Distribución de la distorsión por elementos de la malla B suavizada con los métodos de Oddy modificado, Giulliani y Giulliani modificado. En el caso de la malla suavizada mediante el método de Giulliani modificado, quedan 2 elementos con una distorsión superior a la máxima que se representa en el gráfico (2.5). No se varia la escala del mismo para facilitar su visualización

Distorsiones de Oddy finales		
método de suavizado	$\overline{D}$	D_{max}
Giuliani original	$3{,}16 \cdot 10^{-1}$	2,24
Giuliani modificado	$1{,}53 \cdot 10^{-1}$	3,96
Oddy modificado	$1{,}50 \cdot 10^{-1}$	1,66

Cuadro 5.3: Distorsiones de Oddy finales de la malla B (ver figura 5.3.a) en función del método de suavizado empleado.



(a) **(b)**

Figura 5.5: Geometría de la malla C. **(a)** Discretización previa. **(b)** Discretización final obtenida por la minimización de la distorsión de Oddy modificada.

La malla C (ver figura 5.5) corresponde a la discretización de un anillo circular en el que se ha prescrito un tamaño de elemento muy pequeño sobre el contorno exterior. En este caso, el número de nodos y elementos es muy superior a los ejemplos anteriores. Obsérvese que la influencia del contorno sobre la distorsión de los elementos es muy pequeña, puesto que su forma es muy suave. En este sentido es importante resaltar que la distorsión de los elementos se debe básicamente al gradiente del tamaño prescrito entre la corona interior y la exterior. Por este motivo las diferencias entre los tres métodos analizados son tan pronunciadas (ver figura 5.6).

En la figura 5.6 se presenta la distribución de la distorsión de elementos en función de su distorsión. Con el fin de presentar claramente las distribuciones obtenidas mediante los tres métodos de suavizado, la escala de las distorsiones se ha limitado al intervalo $[0, 4]$. Es importante resaltar que en el caso de Giulliani original hay 11 elementos por encima del límite superior de dicho intervalo, mientras que en el caso de Giulliani modificado hay 2 elementos por encima del mismo. Nótese como mediante el método de Oddy modificado se obtiene una distribución de elementos mucho más concentrada en valores pequeños de la distorsión que la obtenida mediante los otros dos métodos.

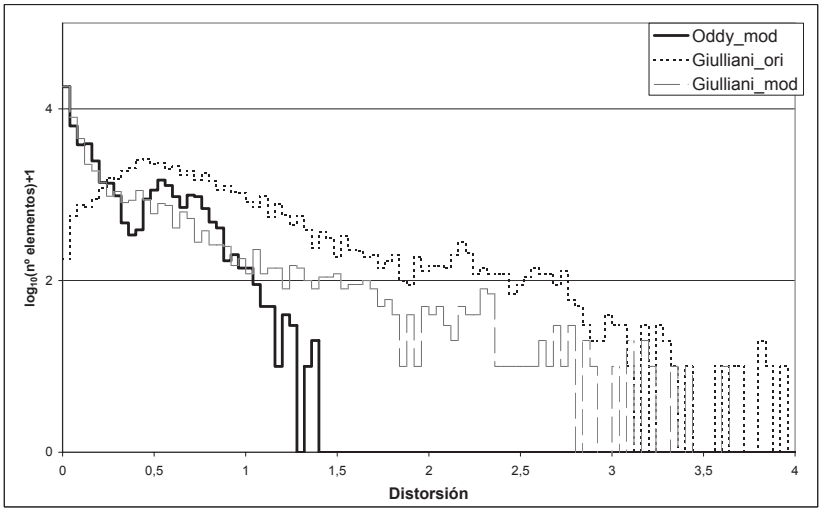
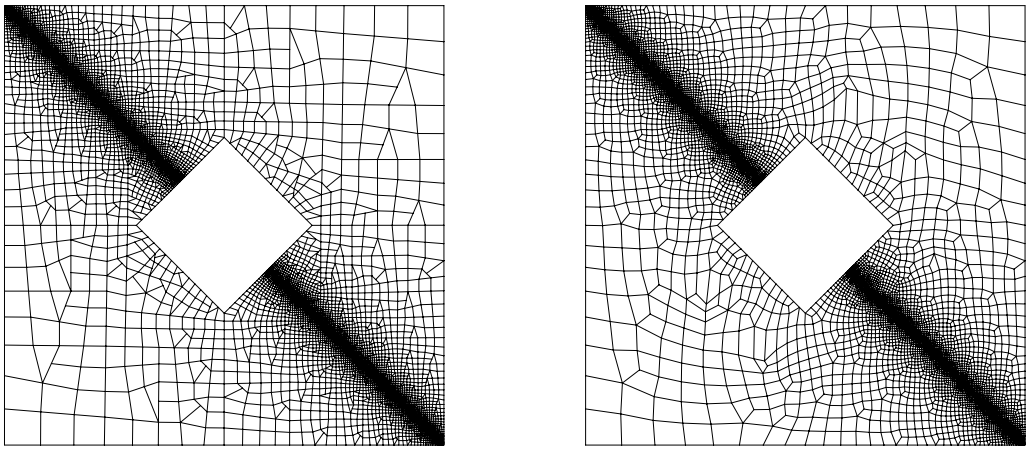


Figura 5.6: Distribución de la distorsión por elementos de la malla C suavizada con los métodos de Oddy modificado, Giulliani y Giulliani modificado. En el caso de la malla suavizada mediante el método de Giulliani quedan 11 elementos con una distorsión superior a la máxima que se representa en el gráfico; la malla suavizada mediante el método de Giulliani modificado presenta 2 elementos con una distorsión superior a este límite.

En la tabla 5.4 se presentan los valores de $\overline{D}$ y D_{max} obtenidos por los tres métodos de suavizado. Es importante resaltar que el valor de D_{max} obtenido mediante el método de Oddy modificado es un orden de magnitud inferior al obtenido mediante Giulliani original. Además, el método de Oddy modificado proporciona una menor $\overline{D}$ que los otros dos métodos.

Distorsiones de Oddy finales		
método de suavizado	$\overline{D}$	D_{max}
Giuliani original	$8{,}15 \cdot 10^{-1}$	15,10
Giuliani modificado	$2{,}58 \cdot 10^{-1}$	7,92
Oddy modificado	$2{,}11 \cdot 10^{-1}$	1,36

Cuadro 5.4: Distorsiones de Oddy finales de la malla C (ver figura 5.5.a) en función del método de suavizado empleado.



(a) **(b)**

Figura 5.7: Geometría de la malla D. **(a)** Discretización previa. **(b)** Discretización final obtenida por la minimización de la distorsión de Oddy modificada.

La malla D (ver figura 5.7) corresponde a la discretización de un dominio limitado por dos cuadrados, en el que se ha prescrito un tamaño de elemento muy pequeño según una diagonal. Es importante resaltar que este ejemplo es el único caso en que la D_{max} mínima no se obtiene cuando la malla es suavizada mediante el método de Oddy modificado. Concretamente, el método de Giulliani modificado proporciona una D_{max} ligeramente menor. Sin embargo, el método de Oddy modificado genera una distribución de elementos que además de tener una $\overline{D}$ menor, también está más concentrada en un valor menor de la distorsión.

Cabe destacar que tanto el método de Oddy modificado como el de Giulliani modificado funcionan mucho mejor que el método de Giulliani (ver figura 5.8), que deja 3 elementos con una distorsión superior a la máxima representada en el gráfico. No se varía la escala del mismo para facilitar su visualización.

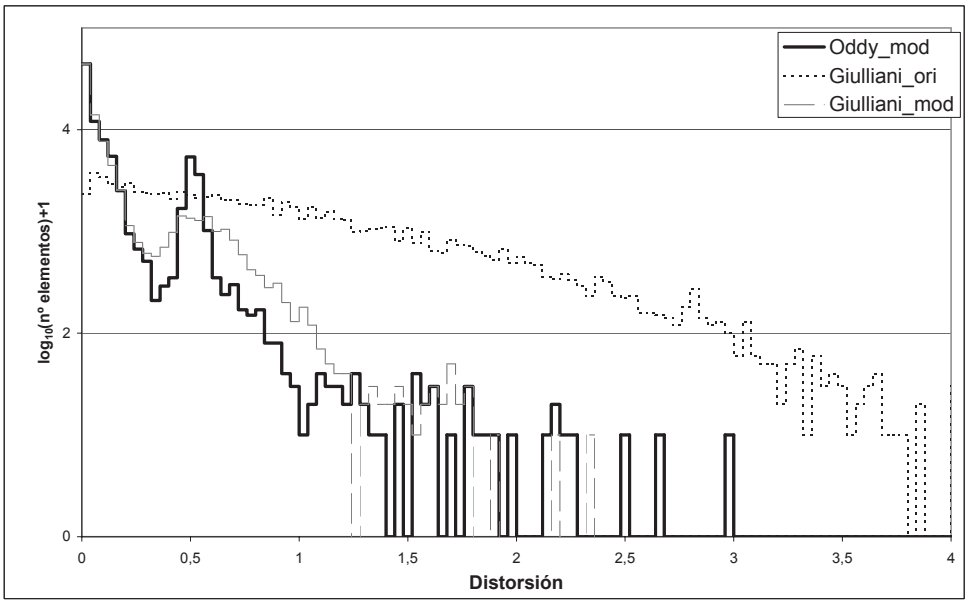
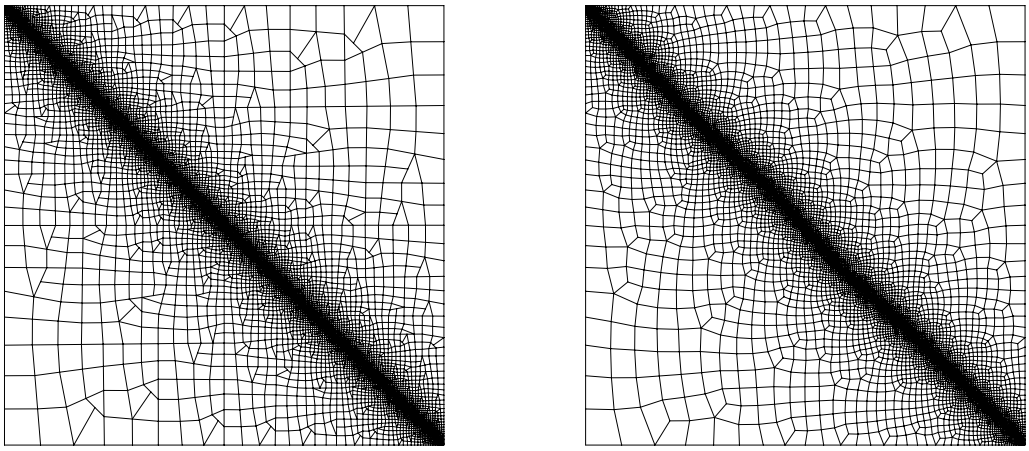


Figura 5.8: Distribución de la distorsión por elementos de la malla D suavizada con los métodos de Oddy modificado, Giulliani y Giulliani modificado. En el caso de la malla suavizada mediante el método de Giulliani, quedan 3 elementos con una distorsión superior a la máxima que se representa en el gráfico (4). No se varia la escala del mismo para facilitar su visualización

Distorsiones de Oddy finales		
método de suavizado	$\overline{D}$	D_{max}
Giuliani original	$2{,}84 \cdot 10^{0}$	17500,00
Giuliani modificado	$1{,}42 \cdot 10^{-1}$	2,38
Oddy modificado	$1{,}35 \cdot 10^{-1}$	2,98

Cuadro 5.5: Distorsiones de Oddy finales de la malla D (ver figura 5.7.a) en función del método de suavizado empleado.



(a) **(b)**

Figura 5.9: Geometría de la malla E. **(a)** Discretización previa. **(b)** Discretización final obtenida por la minimización de la distorsión de Oddy modificada.

La malla E (ver figura 5.9) corresponde a la discretización de un cuadrado, en el que se ha prescrito un tamaño de elemento muy pequeño según una diagonal del mismo. El número de elementos y nodos en este ejemplo es bastante superior a los anteriores ejemplos analizados. La figura 5.10 muestra como utilizando el método de Oddy modificado se obtiene una distribución de los elementos en en función de su distorsión claramente mejor en el sentido que dicha distribución está mucho más concentrada en los valores pequeños de la distorsión que las distribuciones obtenidas mediante los métodos de Giulliani. En la tabla 5.6 se presentan los valores de $\overline{D}$ y D_{max} obtenidos por los tres métodos de suavizado. Es importante resaltar que tanto el valor de $\overline{D}$ como el de D_{max} son considerablemente menores cuando se utiliza el método de Oddy modificado respecto a cuando se utilizan los otros dos métodos estudiados.

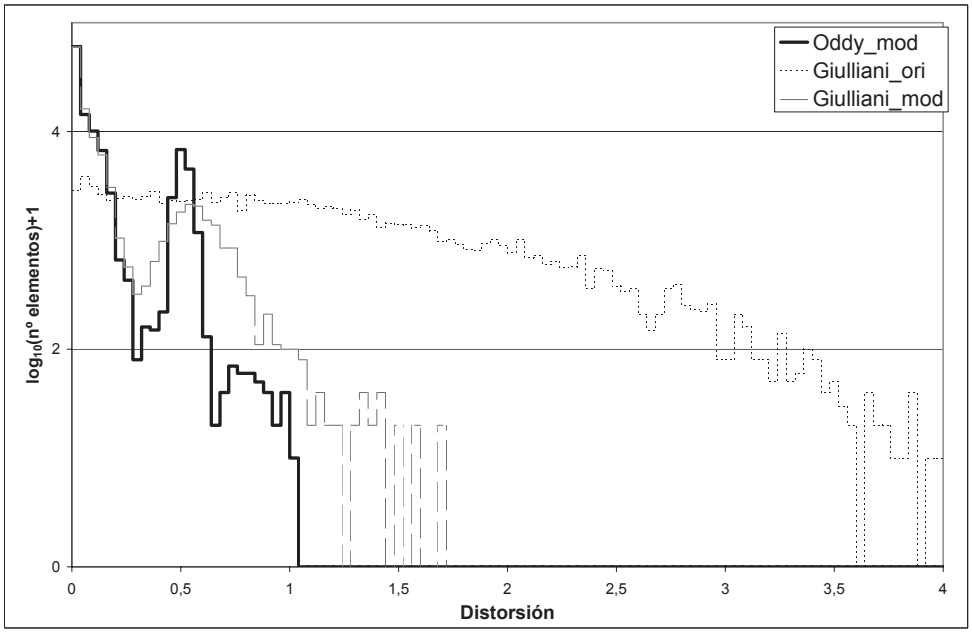
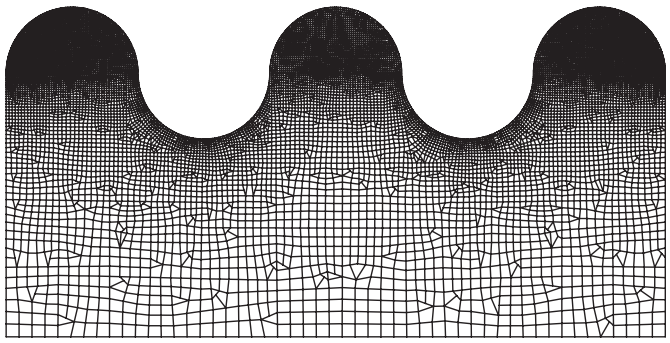


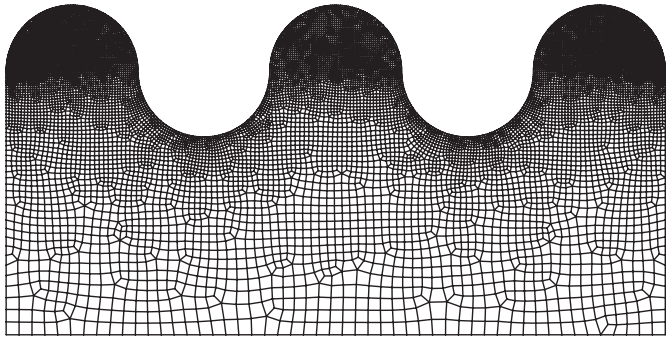
Figura 5.10: Distribución de la distorsión por elementos de la malla E suavizada con los métodos de Oddy modificado, Giulliani y Giulliani modificado.

Distorsiones de Oddy finales		
método de suavizado	$\overline{D}$	D_{max}
Giuliani original	$1{,}01 \cdot 10^{0}$	4,00
Giuliani modificado	$1{,}26 \cdot 10^{-1}$	1,71
Oddy modificado	$1{,}12 \cdot 10^{-1}$	1,01

Cuadro 5.6: Distorsiones de Oddy finales de la malla E (ver figura 5.9.a) en función del método de suavizado empleado.



(a)



(b)

Figura 5.11: Geometría de la malla F. **(a)** Discretización previa. **(b)** Discretización final obtenida por la minimización de la distorsión de Oddy modificada.

La malla F (ver figura 5.11) es la malla bidimensional con más elementos (concretamente 14.053 elementos) que se ha analizado en este trabajo. Los resultados obtenidos con el método de Oddy modificado son notablemente mejores que los obtenido mediante los métodos de Giulliani y Giulliani modificado. Concretamente, se ha reducido la D_{max} en más de un 10 %. $\overline{D}$ también se ha reducido considerablemente.

Es en este caso donde más se manifiesta la diferencia entre los costes computacionales de cada método. Esto es debido a que el método de Oddy modificado es un método implícito, lo que implica resolver un sistema de ecuaciones en cada iteración del método de Newton-Raphson. El orden del sistema es el número de coordenadas libres de la malla (en este ejemplo, el número de nodos intermos multiplicado por el número de dimensiones espaciales, 2), por lo que en este caso el coste computacional ha sido muy elevado.

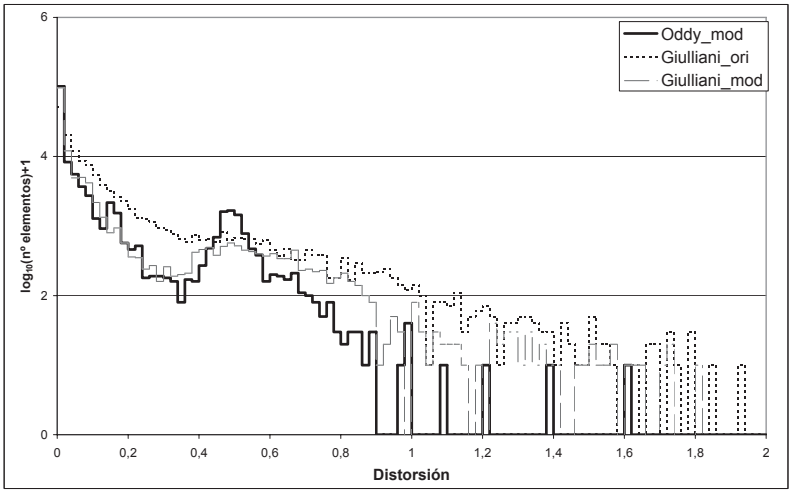


Figura 5.12: Distribución de la distorsión por elementos de la malla F suavizada con los métodos de Oddy modificado, Giulliani y Giulliani modificado. En el caso de la malla suavizada mediante el método de Giulliani, quedan 9 elementos con una distorsión superior a la máxima representada en el gráfico; la malla suavizada mediante el método de Giulliani modificado tiene 4 elementos superiores a dicho límite, y la suavizada mediante el método de Oddy modificado 3.

Sin embargo, los resultados son satisfactorios como muestra la figura 5.12, en la que se observa una mayor concentración de elementos en la zona de baja distorsión cuando se utiliza el método de Oddy modificado con respecto a los métodos de Giulliani.

Distorsiones de Oddy finales		
método de suavizado	$\overline{D}$	D_{max}
Giuliani original	$3{,}01 \cdot 10^{-1}$	953,81
Giuliani modificado	$2{,}42 \cdot 10^{-1}$	953,98
Oddy modificado	$2{,}07 \cdot 10^{-1}$	833,80

Cuadro 5.7: Distorsiones de Oddy finales de la malla F (ver figura 5.11.a) en función del método de suavizado empleado.

5.2. Ejemplos en mallas de hexaedros

En este apartado se muestran cuatro ejemplos de mallas de hexaedros. Estas mallas se han generado a partir de una discretización bidimensional, mediante un algoritmo de barrido ("sweep"). Por consiguiente, se trata de mallas estructuradas. Se ha considerado que los puntos situados en el contorno de la malla son fijos y, por lo tanto, no se pueden mover. Por este motivo no se muestran las mallas después de ser suavizadas, porque viendo solamente el contorno de las mismas no hay diferencia.

Se presenta en la tabla 5.8 el número de elementos y de nodos de cada malla.

Número de elementos y nodos de cada malla		
Malla	Número de elementos	Número de nodos
I	1.152	1.539
II	1.152	1.539
III	1.600	2.106
IV	4.864	6.237

Cuadro 5.8: Número de elementos y nodos de cada malla.

Al igual que en los ejemplos bidimensionales, se dan los valores de la distorsión media final ($\overline{D}$) y la distorsión elemental máxima (D_{max}) en cada caso. Se puede apreciar como en todos los casos estudiados se han obtenido valores de $\overline{D}$ y D_{max} claramente menores con el método de Oddy modificado que con los métodos de Giulliani. Además, en las gráficas de las distribuciones de distorsión por elementos se observa como, claramente, el método de Oddy modificado lleva a mallas mucho más regulares (en el sentido que todos los elementos se encuentran en un rango de distorsión más pequeño) y menos distorsionadas. En dichas distribuciones se observa que en todos los casos la totalidad de elementos se enmarca en un rango de distorsiones menos ámplio y menor que en los otros métodos aplicados.

La malla *I* (figura 5.13) tiene los elementos muy poco distorsionados. Por éste motivo, las diferencias entre los resultados obtenidos al suavizarla mediante los tres métodos estudiados no varían mucho. Sin embargo, se mejoran los valores de $\overline{D}$ y D_{max} utilizando el método de Oddy modificado con respecto a los otros dos métodos, tal y como se muestra en la tabla 5.9.

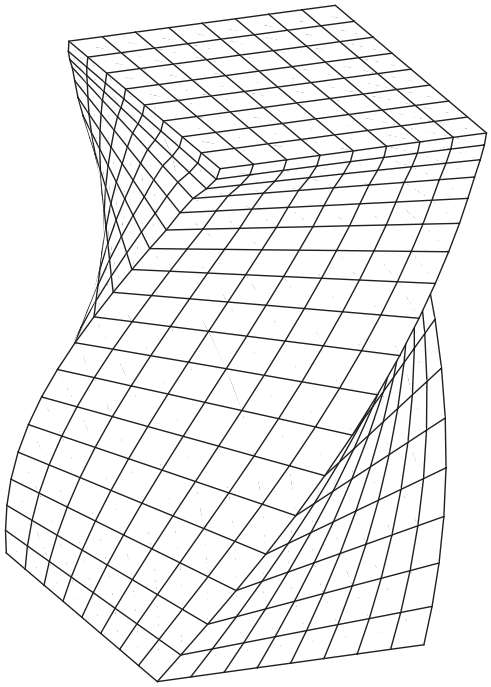


Figura 5.13: Geometría de la malla I.

Distorsiones de Oddy finales		
método de suavizado	$\overline{D}$	D_{max}
Giuliani original	$6{,}1 \cdot 10^{-1}$	2,39
Giuliani modificado	$6{,}0 \cdot 10^{-1}$	2,41
Oddy modificado	$5{,}9 \cdot 10^{-1}$	2,37

Cuadro 5.9: Distorsiones de Oddy finales de la malla I (ver figura 5.13) en función del método de suavizado empleado.

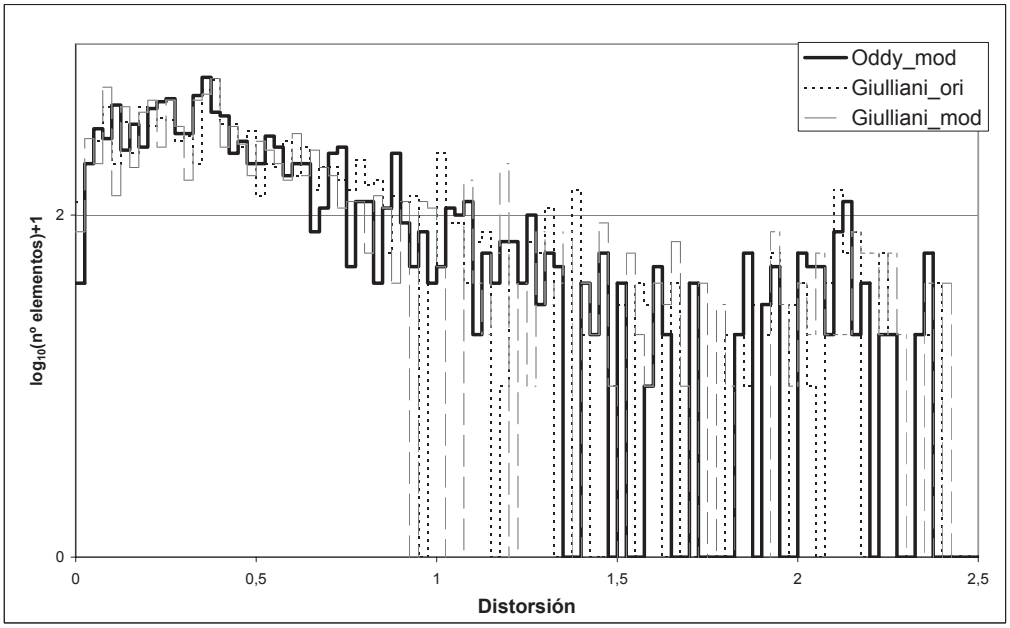


Figura 5.14: Distribución de la distorsión por elementos de la malla I suavizada con los métodos de Oddy modificado, Giulliani y Giulliani modificado.

La malla II presenta elementos muy distorsionados, como puede apreciarse en sus "tapas" (ver figura 5.15). Aunque los nodos del contorno permanecen fijos durante el proceso de suavizado, los resultados obtenidos mediante el método de Oddy modificado son claramente mejores que los obtenidos mediante los métodos de Giulliani i Giulliani mofidicado. Es importante resaltar que tanto los valores de $\overline{D}$ como los de D_{max} se reducen en más de un orden de magnitud (ver tabla 5.10) cuando se utiliza el método de Oddy modificado respecto a los métodos de Giulliani. Además, en la malla suavizada mediante los métodos de Giulliani y Giulliani modificado, quedan 16 elementos con una distorsión superior 16 (la máxima que se representa en la figura 5.16). No se ha variado la escala del gráfico para facilitar su visualización. Asimismo, debe remarcarse que la distribución de elementos en función de su distorsión es mucho más compacta y está centrada en valores de distorsión menores si se utiliza el método de Oddy modificado con respecto a los otros dos métodos.

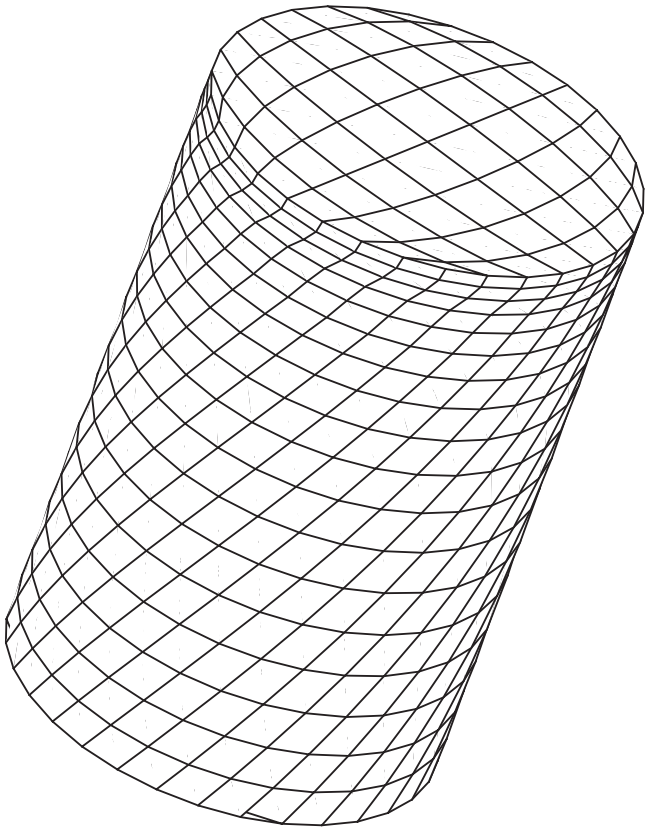


Figura 5.15: Geometría de la malla II.

Distorsiones de Oddy finales		
método de suavizado	$\overline{D}$	D_{max}
Giuliani original	2,40	52,47
Giuliani modificado	2,41	53,22
Oddy modificado	$5{,}9 \cdot 10^{-1}$	2,37

Cuadro 5.10: Distorsiones de Oddy finales de la malla II (ver figura 5.15) en función del método de suavizado empleado.

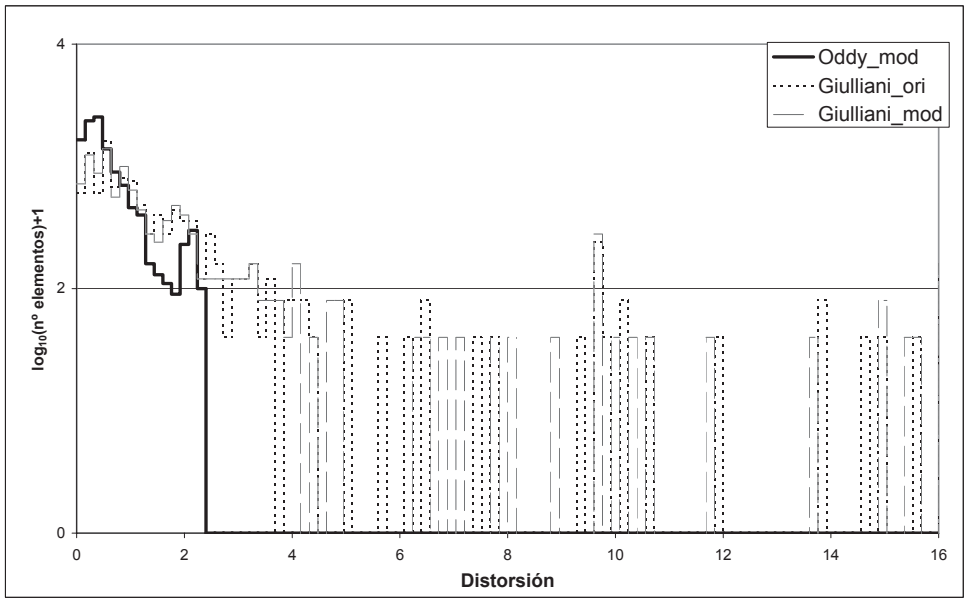


Figura 5.16: Distribución de la distorsión por elementos de la malla II suavizada con los métodos de Oddy modificado, Giulliani y Giulliani modificado. En los casos de la malla suavizada mediante los métodos de Giulliani original y modificado, quedan 16 elementos con una distorsión superior a la máxima que se representa en el gráfico. No se varia la escala del mismo para facilitar su visualización

En la malla III (ver figura 5.17) se corresponde a la discretización de un arco circular. Como puede observarse, la malla inicial presenta elementos muy poco distorsionados. Como sucedía en los anteriores ejemplos, también se obtienen unos resultados mejores al suavizar la malla mediante el método de Oddy modificado que medianto los otros dos métodos estudiados (ver cuadro 5.11). Cabe destacar que, al igual que pasaba en la malla II, al suavizar la malla mediante los métodos de Giulliani y Giulliani modificado hay elementos con una distorsión demasiado elevada para representarlos en la distribución de la distorsión por elementos (ver figura 5.18). En este caso un elemento para el método de Giulliani y 4 para el método de Giulliani modificado tienen una distorsión superior a 23 (el valor máximo representado en el gràfico).

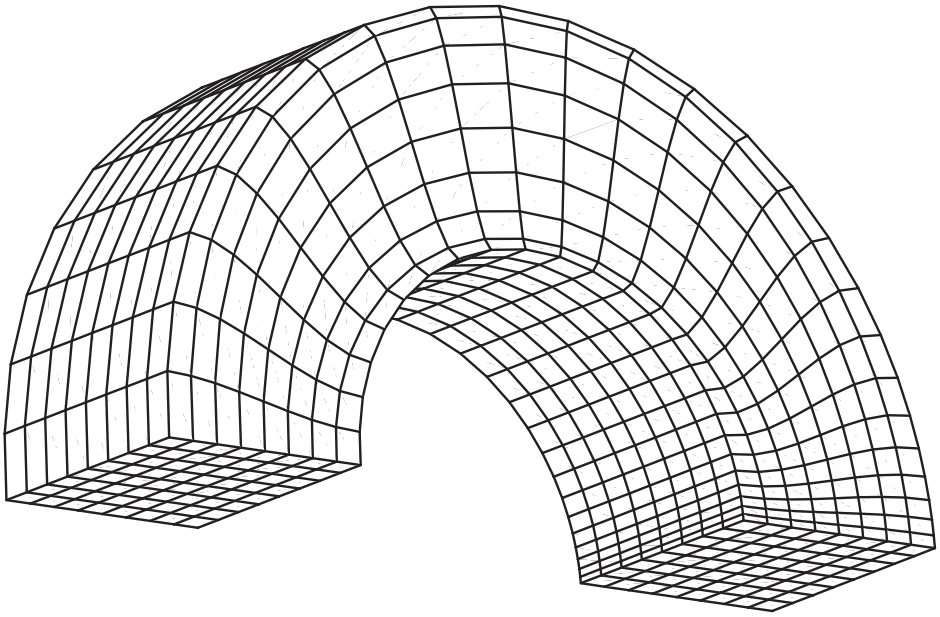


Figura 5.17: Geometría de la malla III.

Distorsiones de Oddy finales		
método de suavizado	$\overline{D}$	D_{max}
Giuliani original	1,75	23,14
Giuliani modificado	1,77	24,88
Oddy modificado	1,64	16,70

Cuadro 5.11: Distorsiones de Oddy finales de la malla III (ver figura 5.17) en función del método de suavizado empleado.

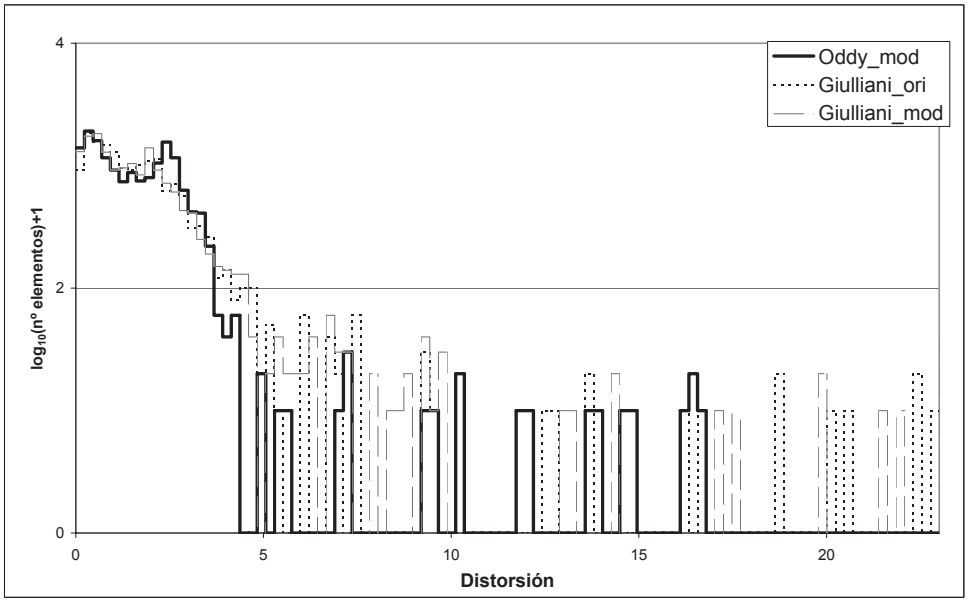


Figura 5.18: Distribución de la distorsión por elementos de la malla III suavizada con los métodos de Oddy modificado, Giulliani y Giulliani modificado. En el caso de la malla suavizada mediante el método de Giulliani, queda 1 elemento con una distorsión superior a la máxima que se representa en el gráfico; la malla suavizada mediante el método de Giulliani modificado tiene 4 elementos superiores a dicho límite. No se varia la escala del gráfico para facilitar su visualización

El último ejemplo (malla IV)es el más relevante y sorprendente de todos los ejemplos presentados en este capítulo. La malla inicial (ver figura 5.19) corresponde a la discretización de un pórtico.

Los resultados obtenidos al suavizar la malla IV con los tres métodos estudiados también muestran que el método de Oddy modificado obtiene mallas de mejor calidad que los métodos de Giulliani y Giulliani modificado. Es muy importante resaltar que al suavizar la malla IV mediante el método de Giulliani original se obtienen 6 nodos con concavidades. Asimismo, si se suaviza la malla mediante el método de Giulliani modificado también aparecen nodos con concavidades; en este caso 2. Sin embargo, al suavizar la malla mediante el método de Oddy modificado no sólo se reducen $\overline{D}$ y D_{max} (ver tabla 5.12), sino que además no aparece ningún nodo con concavidades.

Con el objetivo de resaltar este comportamiento del método de Oddy modificado, en la figura 5.21.a se presenta un elemento de la malla IV antes de ser ésta suavizada. Dicho elemento está muy próximo a un cubo perfecto,

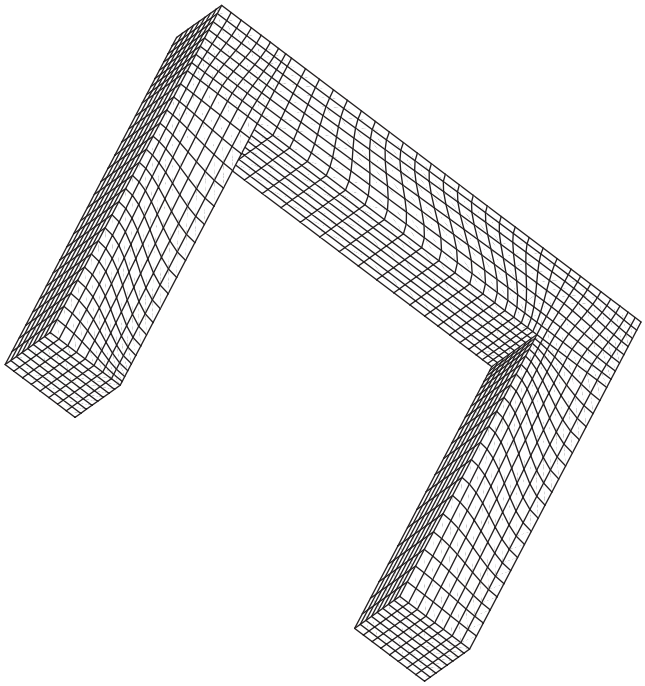


Figura 5.19: Geometría de la malla IV.

pero se debe recordar que al suavizar la malla, la configuración de los elementos vecinos influyen en la posición final de los nodos del elemento en cuestión. Las figuras 5.21.b y 5.21.c presentan el mismo elemento una vez suavizada la malla mediante el método de Giulliani original y Giulliani modificado respectivamente. Nótese que los nodos 1 y 4 del elemento (que además pertenecen al contorno) presentan una concavidad. Finalmente, la figura 5.21.d presenta el mismo elemento una vez la malla ha sido suavizada mediante el método de Oddy modificado. Se debe resaltar que han desaparecido las concavidades que antes aparecían en los nodos 1 y 4.

En la figura 5.22 se muestra la ubicación del elemento de la figura 5.21 dentro de la malla. En la figura 5.23 se ha hecho una ampliación del elemento para visualizarlo mejor. La configuración del elemento en las figuras 5.22 y 5.23 es la correspondiente a la malla suavizada mediante el método de Giulliani original. En esta figura se puede apreciar como dos nodos (el 1 y el 4 concretamente) del elemento pertenecen al contorno de la malla. Es precisamente la restricción de movimiento de estos dos nodos la que hace que el elemento cueste más de suavizar. Tanto es así, que, como ya se ha visto, los métodos de Giulliani y Giulliani modificado en vez de suavizar el elemento lo distorsionan aún más llegando a hacerlo degenerado.

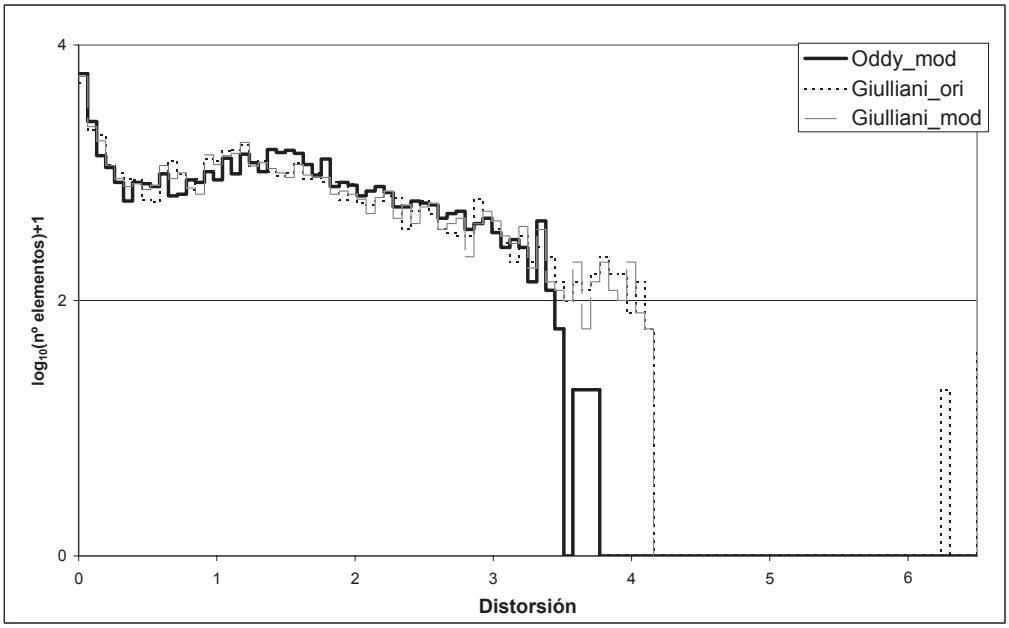


Figura 5.20: Distribución de la distorsión por elementos de la malla IV suavizada con los métodos de Oddy modificado, Giulliani y Giulliani modificado. En los casos de la malla suavizada mediante los métodos de Giulliani original y modificado, quedan 4 elementos con una distorsión superior a la máxima que se representa en el gráfico. No se varia la escala del mismo para facilitar su visualización

Distorsiones de Oddy finales		
método de suavizado	$\overline{D}$	D_{max}
Giuliani original	1,31	49,46
Giuliani modificado	0,85	4,16
Oddy modificado	1,24	3,75

Cuadro 5.12: Distorsiones de Oddy finales de la malla IV (ver figura 5.19) en función del método de suavizado empleado.

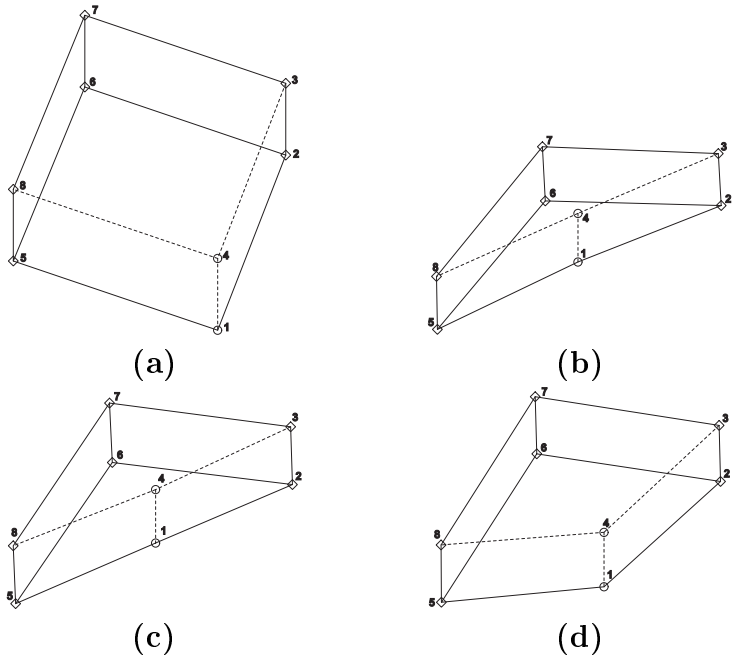


Figura 5.21: Configuración de un elemento de la malla IV con la malla: **(a)** sin suavizar (malla original) **(b)** suavizada mediante el método de Giulliani original **(c)** suavizada mediante el método de Giulliani modificado **(d)** suavizada mediante el método de Oddy modificado

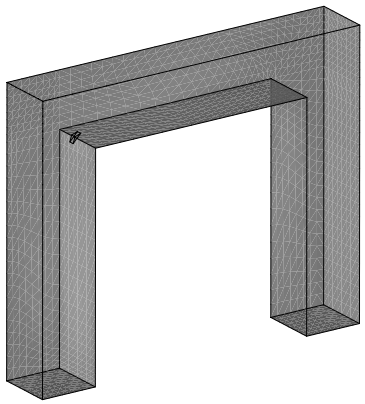


Figura 5.22: Vista de la malla IV (ver figura 5.19) donde solamente se ven las caras traseras del contornos de la misma y el elemento de la figura 5.21; la malla ha sido suavizada mediante el método de Giulliani original.

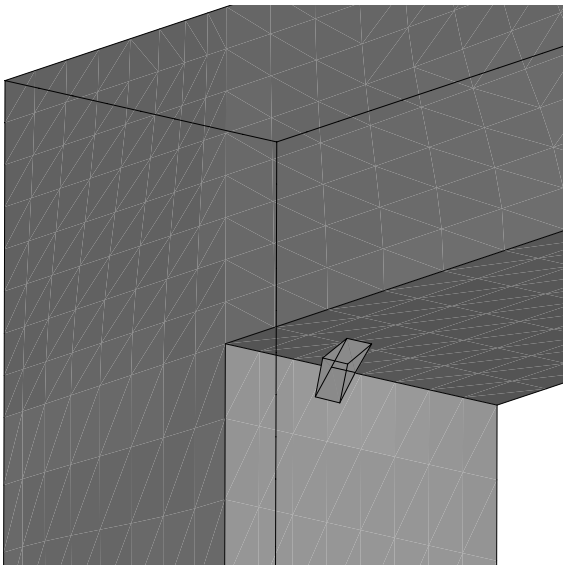


Figura 5.23: Vista amplida del elemento de la figura 5.21, ubicado dentro de la la malla IV (ver figura 5.19). Solamente se ven las caras traseras del contorno de la malla. La malla ha sido suavizada mediante el método de Giulliani original.

Capítulo 6

Conclusiones

El trabajo realizado en esta tesina se ha basado en el análisis de la medida de distorsión de Oddy y el desarrollo de una técnica de suavizado de mallas de cuadriláteros y de hexaedros basada en la minimización de dicha medida de la distorsión.

A partir del estudio de la distorsión de Oddy se ha logrado obtener una forma más eficiente de calcular dicha medida de la distorsión, que se basa en criterios geométricos. Mediante esta interpretación geométrica se deduce que los puntos óptimos para evaluar la distorsión de Oddy son sus nodos, siendo aconsejable definir la distorsión de Oddy elemental como la media aritmética de las distorsiones nodales (AMD). De esta forma la distorsión de Oddy de un elemento se puede evaluar a partir de sus coordenadas nodales.

Tanto en problemas bidimensionales como tridimensionales, la distorsión de Oddy presenta graves limitaciones cuando ésta se evalúa en elementos altamente distorsionados. Estas limitaciones generan tres problemas básicos para poder minimizar la función distorsión de Oddy mediante una técnica estándar de minimización. Estos problemas son:

- existencia de asíntotas verticales en la función distorsión
- existencia de múltiples mínimos locales
- el mínimo global de la función se puede corresponder a una configuración que no interesa desde el punto de vista práctico. Es decir, el mínimo global se puede corresponder con una malla en la que aparezcan elementos áltamente distorsionados

Para solventar el problema de las asíntotas verticales se ha modificado la distorsión de Oddy definiéndola por partes. De esta manera, cuando la configuración de algun elemento está próxima a una asíntota vertical, se

evalúa la distorsión de la malla con una función tangente a la distorsión de Oddy original. Cuando los elementos de la malla están poco distorsionados, se evalúa la distorsión de la malla con la distorsión de Oddy original. A la función resultado de esta modificación se la ha denominado D_{OM}.

La definición de D_{OM} solventa el problema de las asíntotas verticales, pero no el de la existencia de varios mínimos locales en la función. Para solventar este problema se ha tenido que aplicar otra modificación a la función. Dicha modificación consiste en sumarle a D_{OM} otra función (E^2), que se basa en el producto escalar de los lados del elemento.

Con la función resultante de estas las dos modificaciones aplicadas se solventan los tres problemas que presenta la distorsión de Oddy original.

Estas modificaciones implantadas en la distorsión de Oddy mantienen la dependencia exclusiva de las coordenadas nodales, característica muy importante de cara a la fácil implementación de un algoritmo de suavizado.

Dado que los problemas que presenta la distorsión de Oddy original estan asociados a la presencia de elementos altamente distorsionados (degenerados), sólo se aplicarán las modificaciones mencionadas cuando en la malla a suavizar aparezcan este tipo de elementos. Si no hay ningún elemento degenerado en la malla se utiliza la distorsión de Oddy original.

Se ha implementado una técnica de suavizado global basada en un método iterativo tipo *Newton-Raphson*. En cada iteración se limita el avance teniendo en cuenta una medida del tamaño característico asociado a cada nodo. También se utiliza una técnica de minimización lineal *line-search*, ya que de este modo se acelera la convergencia del algoritmo. Cuando se utiliza la modificación propuesta para la distorsión de Oddy (cuando hay elementos degenerados en la malla) se aplica una técnica de minimización basada exclusivamente en el gradiente de la función, ya que en estos casos no se está lo sificientemente cerca de la solución como para asegurar que la matriz hessiana del método de *Newton-Raphson* esté bien definida.

Los resultados obtenidos mediante el algoritmo desarrollado son favorables, puesto que se obtienen valores medios de distorsión menores que los obtenidos mediante otras técnicas de suavizado (Giulliani y Giulliani modificado). Cabe mencionar, sin embargo, que el algoritmo desarrollado es un algoritmo implícito, aspecto que conlleva un coste computacional considerablemente más elevado que las otras dos técnicas mencionadas. En este aspecto podrían enmarcarse futuras línias de investigación, desarrollando técnicas de minimzación que, en vez de ser globales, se basaran en la minimización de la función en pequeños dominios de influencia de la malla. De esta forma, en cada iteración el algoritmo resolvería muchos más sistemas de ecuaciones, pero estos serían de un orden muchísimo menor.

Bibliografía

[1] I. Babuska and AK. Aziz, "On the angle condition in the finite element method", *SIAM Journal on Numerical Analysis*, **13**, pp. 214-226, (1976).

[2] T.D. Blacker and M.B. Stephenson, "Paving: a new approach to automated quadrilateral mesh generation", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **32**, pp. 811-847, (1991).

[3] H.H. Dannelongue and P.A. Tanguy, "Three-dimensional adaptative finite element computations and applications to non-newtonian fluids", *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **13**, pp. 145-165, (1991).

[4] S. Giuliani, "An algorithm for continuous rezoning of the hydrodynamic grid in arbitrary lagrangian- eulerian computer codes", *Nuclear Engineering and Design*, **72**, pp. 205-212, (1982).

[5] L.R. Hermann, "Laplacian-isoparametric grid generation scheme", *J. Eng. Mech. Div. ASCE* **102**, pp. 749-756, (1976).

[6] A. Oddy, J. Goldak, M. McDill and M. Bibby, "A distortion metric for isoparametric finite elements", *Trans. CSME* **38** CSME-32 Accession No. 2161 (1988).

[7] A. Perronet, "Triangulation par arbre-4 de triangles equilatéraux et maximisation de la qualité", *Publication du Laboratoire d'Analyse Numérique, Université Pierre et Marie Curie Centre National de la Recherche Scientifique*, (1992).

[8] J. Sarrate, A. Huerta, "Efficient unstructured quadrilateral mesh generation", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **49**, pp. 1327-1350,(2000).

[9] J. Sarrate, A. Huerta, "An improved algorithm to smooth graded quadrilateral meshes preserving the prescribed element size", *Communictions In Numerical Methods in Engineering*, **17**, pp. 89-99,(2001).

[10] J.Z. Zhu, O.C. Zienkiewicz, E. Hinton and J. Wu, "A new aproach to the development of automatic quadrilateral mesh generation", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **32**, pp. 849-866, (1991).

[11] J. Palau, "Medidas de calidad geométrica de mallas en el MEF. Aplicación al suavizado de mallas de cuadriláteros", Tesina, Universitat Politècnica de Catalunya, Barcelona, (2000).

Apéndice A

Demostración de una propiedad de la Distorsión de Oddy

Proposición 1. *Sean* $\boldsymbol{u}$ *y* $\boldsymbol{v}$ *dos vectores linealmente independientes, tales que el ángulo de* $\boldsymbol{u}$ *respecto al eje X (sentido antihorario) es menor que el mismo ángulo del vector* $\boldsymbol{v}$ *respecto dicho eje. Sea (1'2'3'4') cualquier paralelogramo que se puede formar con los dos vectores. Entonces, la matriz jacobiana de la transformación isoparamétrica*

$$\hat{\boldsymbol{J}} = \begin{pmatrix} \hat{J}_{11} & \hat{J}_{12} \\ \hat{J}_{21} & \hat{J}_{22} \end{pmatrix}$$

es constante y tiene por expresión:

$$\begin{pmatrix} \hat{J}_{11} \\ \hat{J}_{21} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\boldsymbol{u}$$

$$\begin{pmatrix} \hat{J}_{12} \\ \hat{J}_{22} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\boldsymbol{v}$$

Demostración:

La transformación isoparamétrica en este caso tiene por expresión:

$$\boldsymbol{x} = \frac{\xi}{2}\boldsymbol{u} + \frac{\eta}{2}\boldsymbol{v} + \boldsymbol{x_0}$$

donde $\boldsymbol{x_0}$ son las coordenadas del centro de un paralelogramo cualquiera que se puede formar con $\boldsymbol{u}$ y $\boldsymbol{v}$.

Entonces, la matriz jacobiana tiene por expresión:

$$\begin{pmatrix} \hat{J}_{11} \\ \hat{J}_{21} \end{pmatrix} = \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \xi} = \frac{1}{2}\boldsymbol{u}$$

$$\begin{pmatrix} \hat{J}_{12} \\ \hat{J}_{22} \end{pmatrix} = \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \eta} = \frac{1}{2}\boldsymbol{v}$$

Proposición 2. *Sea (1234) un cuadrilátero y* $\boldsymbol{x_i}$, $i = 1, 2, 3, 4$, *las coordenadas de sus nodos en el sistema de coordenadas en el dominio físico* (x, y). *Sean* (ξ_P, η_P) *las coordenadas de un punto P del cuadrilátero (1234) en el dominio de referencia* (ξ, η). *Entonces la distorsión de Oddy en el punto P del cuadrilátero (1234) es igual a la distorsión de Oddy del paralelogramo local asociado al punto P del cuadrilátero (1234).*

Demostración:

Se va a demostrar que la matriz jacobiana de la transformación isoparamétrica en el punto P del cuadrilátero (1234), $\boldsymbol{J}$,es igual a la matriz jacobiana de la transformación isoparamétrica del paralelogramo local asociado al punto P, $\hat{\boldsymbol{J}}$. Esta demostración es suficiente porque la distorsión de Oddy en el punto P solamente depende de la matriz jacobiana en el punto P.

La transformación isoparamétrica del cuadrilátero (1234) tiene por expresión:

$$\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{4} N_i \boldsymbol{x_i} \tag{A.1}$$

donde

$$\begin{aligned} N_1 &= \frac{1}{4}(1-\xi)(1-\eta) \\ N_2 &= \frac{1}{4}(1+\xi)(1-\eta) \\ N_3 &= \frac{1}{4}(1+\xi)(1+\eta) \\ N_4 &= \frac{1}{4}(1-\xi)(1+\eta) \end{aligned}$$

En primer lugar se va a obtener el paralelogramo local asociado al punto P en el dominio físico (x, y). Está definido por los vectores $\boldsymbol{u} \equiv \boldsymbol{AA'}$ y $\boldsymbol{v} \equiv \boldsymbol{BB'}$, donde $\boldsymbol{AA'}$ y $\boldsymbol{BB'}$ son las imágenes de los vectores en el dominio (ξ, η) que pasan por P, paralelos al cuadrado de referencia (ver figura A.1).

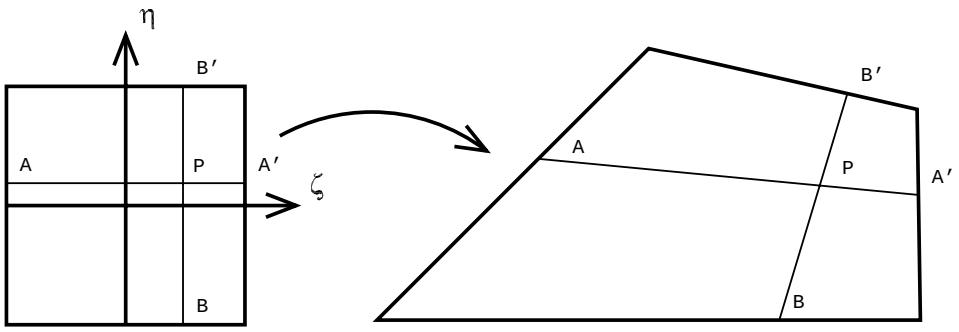


Figura A.1: Transformación isoparamétrica de rectas paralelas a los lados del cuadrado de referencia: AA' y BB', que pasan por el punto P

En la figura A.2 se presenta el paralelogramo local asociado al punto P. Nótese que los vectores $\boldsymbol{u}$ y $\boldsymbol{v}$ que definen sus lados verifican:

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{AA'} = \boldsymbol{PA''}$$
$$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{BB'} = \boldsymbol{PB''}$$

Para obtener efectivamente los vectores $\boldsymbol{u}$ y $\boldsymbol{v}$ se calculan las coordenadas:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{x_A} &= \frac{1-\eta_P}{2}\boldsymbol{x_1} + \frac{1+\eta_P}{2}\boldsymbol{x_4} \\
\boldsymbol{x_{A'}} &= \frac{1-\eta_P}{2}\boldsymbol{x_2} + \frac{1+\eta_P}{2}\boldsymbol{x_3} \\
\boldsymbol{x_B} &= \frac{1-\xi_P}{2}\boldsymbol{x_1} + \frac{1+\xi_P}{2}\boldsymbol{x_2} \\
\boldsymbol{x_{B'}} &= \frac{1-\xi_P}{2}\boldsymbol{x_4} + \frac{1+\xi_P}{2}\boldsymbol{x_3}
\end{aligned}$$

Entonces,

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{AA'} = \boldsymbol{x'_A} - \boldsymbol{x_A} = \frac{1-\eta_P}{2}(\boldsymbol{x_2} - \boldsymbol{x_1}) + \frac{1+\eta_P}{2}(\boldsymbol{x_3} - \boldsymbol{x_4})$$
$$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{BB'} = \boldsymbol{x'_B} - \boldsymbol{x_B} = \frac{1-\xi_P}{2}(\boldsymbol{x_4} - \boldsymbol{x_1}) + \frac{1+\xi_P}{2}(\boldsymbol{x_3} - \boldsymbol{x_2})$$

En segundo lugar se calculará la matriz jacobiana de la transformación isoparamétrica del cuadrilátero (1234). La primera columna de $\boldsymbol{J}$ es $\dfrac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \xi}$ y la

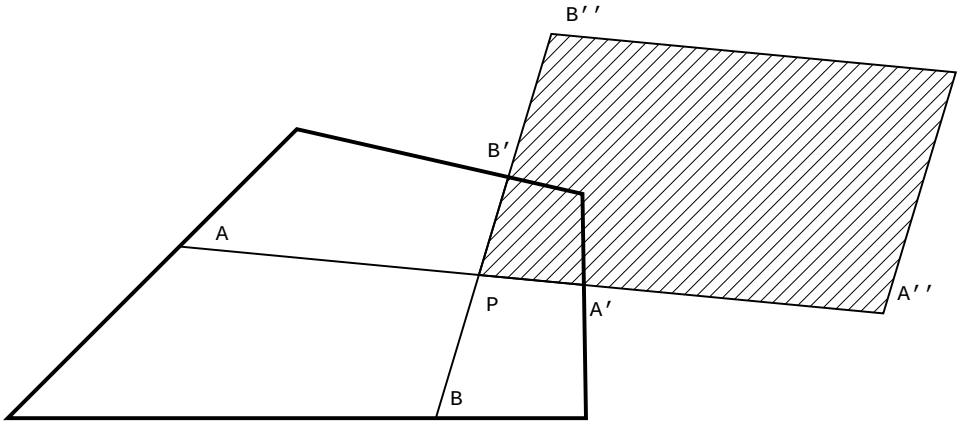


Figura A.2: Paralelogramo local asociado a un punto P de un cuadrilátero cualquiera, AA'=PA" y BB'=PB"

segunda columna es $\dfrac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \eta}$. Obteniendo dichas expresiones, mediante derivación de la expresión (A.1), y evaluándolas en (ξ_P, η_P) se llega a que:

$$\left.\frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \xi}\right|_P = \frac{1}{2}\boldsymbol{u}$$

$$\left.\frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \eta}\right|_P = \frac{1}{2}\boldsymbol{v}$$

Entonces, aplicando la proposición 1, se verifica que:

$$\boldsymbol{J} = \hat{\boldsymbol{J}}$$

Apéndice B

Demostración de una propiedad de la distorsión de Oddy en hexaedros

Proposición 3. *Sean* $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{v}$ *y* $\boldsymbol{w}$ *tres vectores linealmente independientes. Sea (1'2'3'4'5'6'7'8') cualquier paralepípedo que se puede formar con los tres vectores. Entonces, la matriz jacobiana de la transformación isoparamétrica*

$$\hat{\boldsymbol{J}} = \begin{pmatrix} \hat{J}_{11} & \hat{J}_{12} & \hat{J}_{13} \\ \hat{J}_{21} & \hat{J}_{22} & \hat{J}_{23} \\ \hat{J}_{31} & \hat{J}_{32} & \hat{J}_{33} \end{pmatrix}$$

es constante y tiene por expresión:

$$\begin{pmatrix} \hat{J}_{11} \\ \hat{J}_{21} \\ \hat{J}_{31} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\boldsymbol{u}$$

$$\begin{pmatrix} \hat{J}_{12} \\ \hat{J}_{22} \\ \hat{J}_{32} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\boldsymbol{v}$$

$$\begin{pmatrix} \hat{J}_{13} \\ \hat{J}_{23} \\ \hat{J}_{33} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\boldsymbol{w}$$

Demostración:

La transformación isoparamétrica en este caso tiene por expresión:

$$\boldsymbol{x} = \frac{\xi}{2}\boldsymbol{u} + \frac{\eta}{2}\boldsymbol{v} + \frac{\rho}{2}\boldsymbol{w} + \boldsymbol{x_0}$$

donde $\boldsymbol{x_0}$ son las coordenadas del centro de un paralepípedo cualquiera que se puede formar con $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{v}$ y $\boldsymbol{w}$.

Entonces, la matriz jacobiana tiene por expresión:

$$\begin{pmatrix} \hat{J}_{11} \\ \hat{J}_{21} \\ \hat{J}_{31} \end{pmatrix} = \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \xi} = \frac{1}{2}\boldsymbol{u}$$

$$\begin{pmatrix} \hat{J}_{12} \\ \hat{J}_{22} \\ \hat{J}_{32} \end{pmatrix} = \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \eta} = \frac{1}{2}\boldsymbol{v}$$

$$\begin{pmatrix} \hat{J}_{13} \\ \hat{J}_{23} \\ \hat{J}_{33} \end{pmatrix} = \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \rho} = \frac{1}{2}\boldsymbol{w}$$

Proposición 4. *Sea (12345678) un hexaedro y* $\boldsymbol{x_i}$, $i = 1, ..., 8$, *las coordenadas de sus nodos en el sistema de coordenadas en el dominio físico* (x, y, z). *Sean* (ξ_P, η_P, η_P) *las coordenadas de un punto P del hexaedro (12345678) en el dominio de referencia* (ξ, η, ρ). *Entonces la distorsión de Oddy en el punto P del hexaedro (12345678) es igual a la distorsión de Oddy del paralepípedo local asociado al punto P del hexaedro (12345678).*

Demostración:

Se va a demostrar que la matriz jacobiana de la transformación isoparamétrica en el punto P del hexaedro (12345678), $\boldsymbol{J}$,es igual a la matriz jacobiana de la transformación isoparamétrica del paralepípedo local asociado al punto P, $\hat{\boldsymbol{J}}$. Esta demostración es suficiente porque la distorsión de Oddy en el punto P solamente depende de la matriz jacobiana en el punto P.

La transformación isoparamétrica del hexaedro (12345678) tiene por expresión:

$$\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{8} N_i \boldsymbol{x_i} \tag{B.1}$$

donde

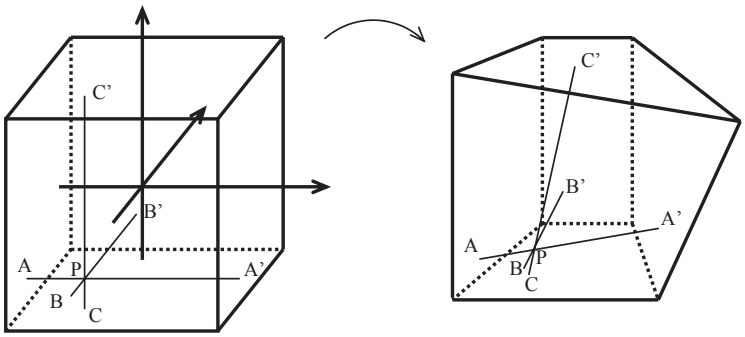


Figura B.1: Transformación isoparamétrica de rectas paralelas a los lados del cubo de referencia: AA', BB' y CC', que pasan por el punto P

$$
\begin{aligned}
N_1 &= \frac{1}{8}(1-\xi)(1-\eta)(1-\rho) \\
N_2 &= \frac{1}{8}(1+\xi)(1-\eta)(1-\rho) \\
N_3 &= \frac{1}{8}(1+\xi)(1+\eta)(1-\rho) \\
N_4 &= \frac{1}{8}(1-\xi)(1+\eta)(1-\rho) \\
N_5 &= \frac{1}{8}(1-\xi)(1-\eta)(1+\rho) \\
N_6 &= \frac{1}{8}(1+\xi)(1-\eta)(1+\rho) \\
N_7 &= \frac{1}{8}(1+\xi)(1+\eta)(1+\rho) \\
N_8 &= \frac{1}{8}(1-\xi)(1+\eta)(1+\rho)
\end{aligned}
$$

En primer lugar se va a obtener el paralepípedo local asociado al punto P en el dominio físico (x, y, z). Está definido por los vectores $\boldsymbol{u} \equiv \boldsymbol{AA'}$, $\boldsymbol{v} \equiv \boldsymbol{BB'}$ y $\boldsymbol{w} \equiv \boldsymbol{CC'}$, donde $\boldsymbol{AA'}$, $\boldsymbol{BB'}$ y $\boldsymbol{CC'}$ son las imágenes de los vectores en el dominio (ξ, η, ρ) que pasan por P, paralelos al cubo de referencia (ver figura B.1).

En la figura B.2 se presenta el paralepípedo local asociado al punto P. Nótese que los vectores $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{v}$ y $\boldsymbol{v}$ que definen sus lados verifican:

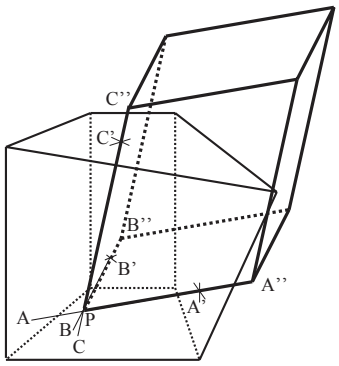


Figura B.2: Paralepípedo local asociado a un punto P de un hexaedro cualquiera, AA'=PA", BB'=PB" y CC'=PC"

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{AA'} = \boldsymbol{PA''}$$
$$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{BB'} = \boldsymbol{PB''}$$
$$\boldsymbol{w} = \boldsymbol{CC'} = \boldsymbol{PC''}$$

Para obtener efectivamente los vectores $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{v}$ y $\boldsymbol{w}$ se calculan las coordenadas:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{x_A} &= \frac{1}{4}((1-\eta_P)(1-\rho_P)\boldsymbol{x_1} + (1+\eta_P)(1-\rho_P)\boldsymbol{x_4} + \\
&\quad (1-\eta_P)(1+\rho_P)\boldsymbol{x_5} + (1+\eta_P)(1+\rho_P)\boldsymbol{x_8}) \\
\boldsymbol{x'_A} &= \frac{1}{4}((1-\eta_P)(1-\rho_P)\boldsymbol{x_2} + (1+\eta_P)(1-\rho_P)\boldsymbol{x_3} + \\
&\quad (1-\eta_P)(1+\rho_P)\boldsymbol{x_6} + (1+\eta_P)(1+\rho_P)\boldsymbol{x_7}) \\
\boldsymbol{x_B} &= \frac{1}{4}((1-\xi_P)(1-\rho_P)\boldsymbol{x_1} + (1+\xi_P)(1-\rho_P)\boldsymbol{x_2} + \\
&\quad (1-\xi_P)(1+\rho_P)\boldsymbol{x_5} + (1+\xi_P)(1+\rho_P)\boldsymbol{x_6}) \\
\boldsymbol{x'_B} &= \frac{1}{4}((1-\xi_P)(1-\rho_P)\boldsymbol{x_4} + (1+\xi_P)(1-\rho_P)\boldsymbol{x_3} + \\
&\quad (1-\xi_P)(1+\rho_P)\boldsymbol{x_8} + (1+\xi_P)(1+\rho_P)\boldsymbol{x_7}) \\
\boldsymbol{x_C} &= \frac{1}{4}((1-\xi_P)(1-\eta_P)\boldsymbol{x_1} + (1+\xi_P)(1-\eta_P)\boldsymbol{x_2} + \\
&\quad (1-\xi_P)(1+\eta_P)\boldsymbol{x_4} + (1+\xi_P)(1+\eta_P)\boldsymbol{x_3}) \\
\boldsymbol{x'_C} &= \frac{1}{4}((1-\xi_P)(1-\eta_P)\boldsymbol{x_5} + (1+\xi_P)(1-\eta_P)\boldsymbol{x_6} + \\
&\quad (1-\xi_P)(1+\eta_P)\boldsymbol{x_8} + (1+\xi_P)(1+\eta_P)\boldsymbol{x_7})
\end{aligned}$$

Entonces,

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{u} = \boldsymbol{AA'} = \boldsymbol{x'_A} - \boldsymbol{x_A} &= \frac{1}{4}((1-\eta_P)(1-\rho_P)(\boldsymbol{x_2}-\boldsymbol{x_1}) + \\
&\quad (1+\eta_P)(1-\rho_P)(\boldsymbol{x_3}-\boldsymbol{x_4}) + \\
&\quad (1-\eta_P)(1+\rho_P)(\boldsymbol{x_6}-\boldsymbol{x_5}) + \\
&\quad (1+\eta_P)(1+\rho_P)(\boldsymbol{x_7}-\boldsymbol{x_8})) \\
\boldsymbol{v} = \boldsymbol{BB'} = \boldsymbol{x'_B} - \boldsymbol{x_B} &= \frac{1}{4}((1-\xi_P)(1-\rho_P)(\boldsymbol{x_4}-\boldsymbol{x_1}) + \\
&\quad (1+\xi_P)(1-\rho_P)(\boldsymbol{x_3}-\boldsymbol{x_2}) + \\
&\quad (1-\xi_P)(1+\rho_P)(\boldsymbol{x_8}-\boldsymbol{x_5}) + \\
&\quad (1+\xi_P)(1+\rho_P)(\boldsymbol{x_7}-\boldsymbol{x_6})) \\
\boldsymbol{w} = \boldsymbol{CC'} = \boldsymbol{x'_C} - \boldsymbol{x_C} &= \frac{1}{4}((1-\xi_P)(1-\eta_P)(\boldsymbol{x_5}-\boldsymbol{x_1}) + \\
&\quad (1+\xi_P)(1-\eta_P)(\boldsymbol{x_6}-\boldsymbol{x_2}) + \\
&\quad (1-\xi_P)(1+\eta_P)(\boldsymbol{x_8}-\boldsymbol{x_4}) + \\
&\quad (1+\xi_P)(1+\eta_P)(\boldsymbol{x_7}-\boldsymbol{x_3}))
\end{aligned}$$

En segundo lugar se calculará la matriz jacobiana de la transformación isoparamétrica del hexaedro (12345678). La primera columna de $\boldsymbol{J}$ es $\dfrac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \xi}$, la segunda columna es $\dfrac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \eta}$, y la tercera es $\dfrac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \rho}$. Obteniendo dichas expresiones mediante la derivación de la expresión (B.1) y evaluándolas en (ξ_P, η_P, ρ_P) se llega a que:

$$\left.\frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \xi}\right|_P = \frac{1}{2}\boldsymbol{u}$$

$$\left.\frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \eta}\right|_P = \frac{1}{2}\boldsymbol{v}$$

$$\left.\frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \rho}\right|_P = \frac{1}{2}\boldsymbol{w}$$

Entonces, aplicando la proposición 3, se verifica que:

$$\boldsymbol{J} = \hat{\boldsymbol{J}}$$

Apéndice C

Matrices utilizadas en el problema tridimensional

En este apendice se muestran los coeficientes de las matrices $\boldsymbol{J_r}$, $\boldsymbol{H}_{l_i}$, $\boldsymbol{H}_{A_i}$ y $\boldsymbol{H}_{V_i}$, que se utilizan en las expresiones (4.44) y (4.45) del problema tridimensional. Las variables (x_i, y_i, z_i, x_{i2}, y_{i2}, z_{i2}, x_{i3}, y_{i3}, z_{i3}, x_{i4}, y_{i4}, z_{i4}) son las coordenadas nodales de los nodos del elemento adyacentes al nodo i (ver figura 3.6).

A continuación se muestra el valor de los coeficientes de la matriz $\boldsymbol{J_r}$ por columnas, utilizada en las expresiones (4.44) y (4.45).

$$
\begin{aligned}
\mathbf{J_r}(1,1) &= -2x_{i2} + 2x_i \\
\mathbf{J_r}(1,2) &= -2x_{i3} + 2x_i \\
\mathbf{J_r}(1,3) &= -2x_{i4} + 2x_i \\
\mathbf{J_r}(1,4) &= 2((x_{i2} - x_i)(y_{i3} - y_i) - (y_{i2} - y_i)(x_{i3} - x_i))(-y_{i3} + y_{i2}) + \\
&\quad 2((x_{i3} - x_i)(z_{i2} - z_i) - (z_{i3} - z_i)(x_{i2} - x_i))(-z_{i2} + z_{i3}) \\
\mathbf{J_r}(1,5) &= 2((x_{i3} - x_i)(y_{i4} - y_i) - (y_{i3} - y_i)(x_{i4} - x_i))(-y_{i4} + y_{i3}) + \\
&\quad 2((x_{i4} - x_i)(z_{i3} - z_i) - (z_{i4} - z_i)(x_{i3} - x_i))(-z_{i3} + z_{i4}) \\
\mathbf{J_r}(1,6) &= 2((x_{i4} - x_i)(y_{i2} - y_i) - (y_{i4} - y_i)(x_{i2} - x_i))(-y_{i2} + y_{i4}) + \\
&\quad 2((x_{i2} - x_i)(z_{i4} - z_i) - (z_{i2} - z_i)(x_{i4} - x_i))(-z_{i4} + z_{i2}) \\
\mathbf{J_r}(1,7) &= -(y_{i2} - y_i)(z_{i3} - z_i) + (z_{i2} - z_i)(y_{i3} - y_i) + \\
&\quad (-z_{i2} + z_{i3})(y_{i4} - y_i) + (-y_{i3} + y_{i2})(z_{i4} - z_i)
\end{aligned}
\tag{C.1}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathbf{J_r}(2,1) &= -2y_{i2} + 2y_i \\
\mathbf{J_r}(2,2) &= -2y_{i3} + 2y_i \\
\mathbf{J_r}(2,3) &= -2y_{i4} + 2y_i \\
\mathbf{J_r}(2,4) &= 2((y_{i2} - y_i)(z_{i3} - z_i) - (z_{i2} - z_i)(y_{i3} - y_i))(-z_{i3} + z_{i2}) + \\
&\quad 2((x_{i2} - x_i)(y_{i3} - y_i) - (y_{i2} - y_i)(x_{i3} - x_i))(-x_{i2} + x_{i3}) \\
\mathbf{J_r}(2,5) &= 2((y_{i3} - y_i)(z_{i4} - z_i) - (z_{i3} - z_i)(y_{i4} - y_i))(-z_{i4} + z_{i3}) + \\
&\quad 2((x_{i3} - x_i)(y_{i4} - y_i) - (y_{i3} - y_i)(x_{i4} - x_i))(-x_{i3} + x_{i4}) \\
\mathbf{J_r}(2,6) &= 2((y_{i4} - y_i)(z_{i2} - z_i) - (z_{i4} - z_i)(y_{i2} - y_i))(-z_{i2} + z_{i4}) + \\
&\quad 2((x_{i4} - x_i)(y_{i2} - y_i) - (y_{i4} - y_i)(x_{i2} - x_i))(-x_{i4} + x_{i2}) \\
\mathbf{J_r}(2,7) &= (-z_{i3} + z_{i2})(x_{i4} - x_i) - (x_{i3} - x_i)(z_{i2} - z_i) + \\
&\quad (z_{i3} - z_i)(x_{i2} - x_i) + (-x_{i2} + x_{i3})(z_{i4} - z_i)
\end{aligned}
\tag{C.2}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathbf{J_r}(3,1) &= -2z_{i2} + 2z_i \\
\mathbf{J_r}(3,2) &= -2z_{i3} + 2z_i \\
\mathbf{J_r}(3,3) &= -2z_{i4} + 2z_i \\
\mathbf{J_r}(3,4) &= 2((y_{i2} - y_i)(z_{i3} - z_i) - (z_{i2} - z_i)(y_{i3} - y_i))(-y_{i2} + y_{i3}) + \\
&\quad 2((x_{i3} - x_i)(z_{i2} - z_i) - (z_{i3} - z_i)(x_{i2} - x_i))(-x_{i3} + x_{i2}) \\
\mathbf{J_r}(3,5) &= 2((y_{i3} - y_i)(z_{i4} - z_i) - (z_{i3} - z_i)(y_{i4} - y_i))(-y_{i3} + y_{i4}) + \\
&\quad 2((x_{i4} - x_i)(z_{i3} - z_i) - (z_{i4} - z_i)(x_{i3} - x_i))(-x_{i4} + x_{i3}) \\
\mathbf{J_r}(3,6) &= 2((y_{i4} - y_i)(z_{i2} - z_i) - (z_{i4} - z_i)(y_{i2} - y_i))(-y_{i4} + y_{i2}) + \\
&\quad 2((x_{i2} - x_i)(z_{i4} - z_i) - (z_{i2} - z_i)(x_{i4} - x_i))(-x_{i2} + x_{i4}) \\
\mathbf{J_r}(3,7) &= (-y_{i2} + y_{i3})(x_{i4} - x_i) + (-x_{i3} + x_{i2})(y_{i4} - y_i) - \\
&\quad (x_{i2} - x_i)(y_{i3} - y_i) + (y_{i2} - y_i)(x_{i3} - x_i)
\end{aligned}
\tag{C.3}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathbf{J_r}(4,1) &= 2x_{i2} - 2x_i \\
\mathbf{J_r}(4,2) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(4,3) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(4,4) &= 2((x_{i2} - x_i)(y_{i3} - y_i) - (y_{i2} - y_i)(x_{i3} - x_i))(y_{i3} - y_i) + \\
&\quad 2((x_{i3} - x_i)(z_{i2} - z_i) - (z_{i3} - z_i)(x_{i2} - x_i))(-z_{i3} + z_i) \\
\mathbf{J_r}(4,5) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(4,6) &= 2((x_{i4} - x_i)(y_{i2} - y_i) - (y_{i4} - y_i)(x_{i2} - x_i))(-y_{i4} + y_i) + \\
&\quad 2((x_{i2} - x_i)(z_{i4} - z_i) - (z_{i2} - z_i)(x_{i4} - x_i))(z_{i4} - z_i) \\
\mathbf{J_r}(4,7) &= (-z_{i3} + z_i)(y_{i4} - y_i) + (y_{i3} - y_i)(z_{i4} - z_i)
\end{aligned}
\tag{C.4}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathbf{J_r}(5,1) &= 2y_{i2} - 2y_i \\
\mathbf{J_r}(5,2) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(5,3) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(5,4) &= 2((y_{i2} - y_i)(z_{i3} - z_i) - (z_{i2} - z_i)(y_{i3} - y_i))(z_{i3} - z_i) + \\
&\quad 2((x_{i2} - x_i)(y_{i3} - y_i) - (y_{i2} - y_i)(x_{i3} - x_i))(-x_{i3} + x_i) \\
\mathbf{J_r}(5,5) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(5,6) &= 2((y_{i4} - y_i)(z_{i2} - z_i) - (z_{i4} - z_i)(y_{i2} - y_i))(-z_{i4} + z_i) + \\
&\quad 2((x_{i4} - x_i)(y_{i2} - y_i) - (y_{i4} - y_i)(x_{i2} - x_i))(x_{i4} - x_i) \\
\mathbf{J_r}(5,7) &= (x_{i4} - x_i)(z_{i3} - z_i) + (-x_{i3} + x_i)(z_{i4} - z_i)
\end{aligned}
\tag{C.5}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathbf{J_r}(6,1) &= 2z_{i2} - 2z_i \\
\mathbf{J_r}(6,2) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(6,3) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(6,4) &= 2((y_{i2} - y_i)(z_{i3} - z_i) - (z_{i2} - z_i)(y_{i3} - y_i))(-y_{i3} + y_i) + \\
&\quad 2((x_{i3} - x_i)(z_{i2} - z_i) - (z_{i3} - z_i)(x_{i2} - x_i))(x_{i3} - x_i) \\
\mathbf{J_r}(6,5) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(6,6) &= 2((y_{i4} - y_i)(z_{i2} - z_i) - (z_{i4} - z_i)(y_{i2} - y_i))(y_{i4} - y_i) + \\
&\quad 2((x_{i2} - x_i)(z_{i4} - z_i) - (z_{i2} - z_i)(x_{i4} - x_i))(-x_{i4} + x_i) \\
\mathbf{J_r}(6,7) &= (-y_{i3} + y_i)(x_{i4} - x_i) + (x_{i3} - x_i)(y_{i4} - y_i)
\end{aligned}
\tag{C.6}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathbf{J_r}(7,1) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(7,2) &= 2x_{i3} - 2x_i \\
\mathbf{J_r}(7,3) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(7,4) &= 2((x_{i2} - x_i)(y_{i3} - y_i) - (y_{i2} - y_i)(x_{i3} - x_i))(-y_{i2} + y_i) + \\
&\quad 2((x_{i3} - x_i)(z_{i2} - z_i) - (z_{i3} - z_i)(x_{i2} - x_i))(z_{i2} - z_i) \\
\mathbf{J_r}(7,5) &= 2((x_{i3} - x_i)(y_{i4} - y_i) - (y_{i3} - y_i)(x_{i4} - x_i))(y_{i4} - y_i) + \\
&\quad 2((x_{i4} - x_i)(z_{i3} - z_i) - (z_{i4} - z_i)(x_{i3} - x_i))(-z_{i4} + z_i) \\
\mathbf{J_r}(7,6) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(7,7) &= (y_{i4} - y_i)(z_{i2} - z_i) + (-y_{i2} + y_i)(z_{i4} - z_i)
\end{aligned}
\tag{C.7}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathbf{J_r}(8,1) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(8,2) &= 2y_{i3} - 2y_i \\
\mathbf{J_r}(8,3) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(8,4) &= 2((y_{i2} - y_i)(z_{i3} - z_i) - (z_{i2} - z_i)(y_{i3} - y_i))(-z_{i2} + z_i) + \\
&\quad 2((x_{i2} - x_i)(y_{i3} - y_i) - (y_{i2} - y_i)(x_{i3} - x_i))(x_{i2} - x_i) \\
\mathbf{J_r}(8,5) &= 2((y_{i3} - y_i)(z_{i4} - z_i) - (z_{i3} - z_i)(y_{i4} - y_i))(z_{i4} - z_i) + \\
&\quad 2((x_{i3} - x_i)(y_{i4} - y_i) - (y_{i3} - y_i)(x_{i4} - x_i))(-x_{i4} + x_i) \\
\mathbf{J_r}(8,6) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(8,7) &= (-z_{i2} + z_i)(x_{i4} - x_i) + (x_{i2} - x_i)(z_{i4} - z_i)
\end{aligned}
\tag{C.8}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathbf{J_r}(9,1) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(9,2) &= 2z_{i3} - 2z_i \\
\mathbf{J_r}(9,3) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(9,4) &= 2((y_{i2} - y_i)(z_{i3} - z_i) - (z_{i2} - z_i)(y_{i3} - y_i))(y_{i2} - y_i) + \\
&\quad 2((x_{i3} - x_i)(z_{i2} - z_i) - (z_{i3} - z_i)(x_{i2} - x_i))(-x_{i2} + x_i) \\
\mathbf{J_r}(9,5) &= 2((y_{i3} - y_i)(z_{i4} - z_i) - (z_{i3} - z_i)(y_{i4} - y_i))(-y_{i4} + y_i) + \\
&\quad 2((x_{i4} - x_i)(z_{i3} - z_i) - (z_{i4} - z_i)(x_{i3} - x_i))(x_{i4} - x_i) \\
\mathbf{J_r}(9,6) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(9,7) &= (x_{i4} - x_i)(y_{i2} - y_i) + (-x_{i2} + x_i)(y_{i4} - y_i)
\end{aligned}
\tag{C.9}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathbf{J_r}(10,1) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(10,2) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(10,3) &= 2x_{i4} - 2x_i \\
\mathbf{J_r}(10,4) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(10,5) &= 2((x_{i3}-x_i)(y_{i4}-y_i) - (y_{i3}-y_i)(x_{i4}-x_i))(-y_{i3}+y_i) + \\
&\quad 2((x_{i4}-x_i)(z_{i3}-z_i) - (z_{i4}-z_i)(x_{i3}-x_i))(z_{i3}-z_i) \\
\mathbf{J_r}(10,6) &= 2((x_{i4}-x_i)(y_{i2}-y_i) - (y_{i4}-y_i)(x_{i2}-x_i))(y_{i2}-y_i) + \\
&\quad 2((x_{i2}-x_i)(z_{i4}-z_i) - (z_{i2}-z_i)(x_{i4}-x_i))(-z_{i2}+z_i) \\
\mathbf{J_r}(10,7) &= (y_{i2}-y_i)(z_{i3}-z_i) - (z_{i2}-z_i)(y_{i3}-y_i)
\end{aligned}
\tag{C.10}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathbf{J_r}(11,1) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(11,2) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(11,3) &= 2y_{i4} - 2y_i \\
\mathbf{J_r}(11,4) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(11,5) &= 2((y_{i3}-y_i)(z_{i4}-z_i) - (z_{i3}-z_i)(y_{i4}-y_i))(-z_{i3}+z_i) + \\
&\quad 2((x_{i3}-x_i)(y_{i4}-y_i) - (y_{i3}-y_i)(x_{i4}-x_i))(x_{i3}-x_i) \\
\mathbf{J_r}(11,6) &= 2((y_{i4}-y_i)(z_{i2}-z_i) - (z_{i4}-z_i)(y_{i2}-y_i))(z_{i2}-z_i) + \\
&\quad 2((x_{i4}-x_i)(y_{i2}-y_i) - (y_{i4}-y_i)(x_{i2}-x_i))(-x_{i2}+x_i) \\
\mathbf{J_r}(11,7) &= (x_{i3}-x_i)(z_{i2}-z_i) - (z_{i3}-z_i)(x_{i2}-x_i)
\end{aligned}
\tag{C.11}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathbf{J_r}(12,1) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(12,2) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(12,3) &= 2z_{i4} - 2z_i \\
\mathbf{J_r}(12,4) &= 0 \\
\mathbf{J_r}(12,5) &= 2((y_{i3}-y_i)(z_{i4}-z_i) - (z_{i3}-z_i)(y_{i4}-y_i))(y_{i3}-y_i) + \\
&\quad 2((x_{i4}-x_i)(z_{i3}-z_i) - (z_{i4}-z_i)(x_{i3}-x_i))(-x_{i3}+x_i) \\
\mathbf{J_r}(12,6) &= 2((y_{i4}-y_i)(z_{i2}-z_i) - (z_{i4}-z_i)(y_{i2}-y_i))(-y_{i2}+y_i) + \\
&\quad 2((x_{i2}-x_i)(z_{i4}-z_i) - (z_{i2}-z_i)(x_{i4}-x_i))(x_{i2}-x_i) \\
\mathbf{J_r}(12,7) &= (x_{i2}-x_i)(y_{i3}-y_i) - (y_{i2}-y_i)(x_{i3}-x_i)
\end{aligned}
\tag{C.12}
$$

A continuación se muestran los coeficientes de la matriz $\boldsymbol{H}_{l_i}$, utilizada en la expresión (4.45).

$$\boldsymbol{H}_{l_i} = \begin{pmatrix} 6 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 \\ & 6 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & -2 & 0 \\ & & 6 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & -2 \\ & & & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & (sim) & & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & & & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & & & & 2 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & & & & & 2 & 0 & 0 \\ & & & & & & & & & & 2 & 0 \\ & & & & & & & & & & & 2 \end{pmatrix} \quad \text{(C.13)}$$

A continuación se muestran los coeficientes del triángulo superior de la matriz $\boldsymbol{H}_{A_i}$ por columnas (es una matriz simétrica), utilizada en la expresión (4.45).

$$\begin{aligned} \boldsymbol{H}_{A_i}(1,1) &= 2(-y_{i3}+y_{i2})^2 + 2(-z_{i2}+z_{i3})^2 + 6(-y_{i4}+y_{i3})^2 + \\ &\quad 6(-z_{i3}+z_{i4})^2 + 6(-y_{i2}+y_{i4})^2 + 6(-z_{i4}+z_{i2})^2 \end{aligned} \quad \text{(C.14)}$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{H}_{A_i}(1,2) &= 2(-y_{i3}+y_{i2})(-x_{i2}+x_{i3}) + 6(-y_{i4}+y_{i3})(-x_{i3}+x_{i4}) + \\ &\quad 6(-y_{i2}+y_{i4})(-x_{i4}+x_{i2}) \\ \boldsymbol{H}_{A_i}(2,2) &= 2(-z_{i3}+z_{i2})^2 + 2(-x_{i2}+x_{i3})^2 + 6(-z_{i4}+z_{i3})^2 + \\ &\quad 6(-x_{i3}+x_{i4})^2 + 6(-z_{i2}+z_{i4})^2 + 6(-x_{i4}+x_{i2})^2 \end{aligned} \quad \text{(C.15)}$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{H}_{A_i}(1,3) &= 2(-z_{i2}+z_{i3})(-x_{i3}+x_{i2}) + 6(-z_{i3}+z_{i4})(-x_{i4}+x_{i3}) + \\ &\quad 6(-z_{i4}+z_{i2})(-x_{i2}+x_{i4}) \\ \boldsymbol{H}_{A_i}(2,3) &= 2(-z_{i3}+z_{i2})(-y_{i2}+y_{i3}) + 6(-z_{i4}+z_{i3})(-y_{i3}+y_{i4}) + \\ &\quad 6(-z_{i2}+z_{i4})(-y_{i4}+y_{i2}) \\ \boldsymbol{H}_{A_i}(3,3) &= 2(-y_{i2}+y_{i3})^2 + 2(-x_{i3}+x_{i2})^2 + 6(-y_{i3}+y_{i4})^2 + \\ &\quad 6(-x_{i4}+x_{i3})^2 + 6(-y_{i4}+y_{i2})^2 + 6(-x_{i2}+x_{i4})^2 \end{aligned} \quad \text{(C.16)}$$

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{H}_{A_i}(1,4) &= 2(-y_{i3}+y_{i2})(y_{i3}-y_i)+2(-z_{i2}+z_{i3})(-z_{i3}+z_i)+ \\
&\quad 6(-y_{i2}+y_{i4})(-y_{i4}+y_i)+6(-z_{i4}+z_{i2})(z_{i4}-z_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(2,4) &= 2(-x_{i2}+x_{i3})(y_{i3}-y_i)-2(x_{i2}-x_i)(y_{i3}-y_i)+ \\
&\quad 2(y_{i2}-y_i)(x_{i3}-x_i)+6(-x_{i4}+x_{i2})(-y_{i4}+y_i)+ \\
&\quad 6(x_{i4}-x_i)(y_{i2}-y_i)-6(y_{i4}-y_i)(x_{i2}-x_i) \qquad \text{(C.17)} \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(3,4) &= 2(-x_{i3}+x_{i2})(-z_{i3}+z_i)+2(x_{i3}-x_i)(z_{i2}-z_i)- \\
&\quad 2(z_{i3}-z_i)(x_{i2}-x_i)+6(-x_{i2}+x_{i4})(z_{i4}-z_i)- \\
&\quad 6(x_{i2}-x_i)(z_{i4}-z_i)+6(z_{i2}-z_i)(x_{i4}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(4,4) &= 2(y_{i3}-y_i)^2+2(-z_{i3}+z_i)^2+6(-y_{i4}+y_i)^2+ \\
&\quad 6(z_{i4}-z_i)^2
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{H}_{A_i}(1,5) &= 2(-y_{i3}+y_{i2})(-x_{i3}+x_i)+2(x_{i2}-x_i)(y_{i3}-y_i)- \\
&\quad 2(y_{i2}-y_i)(x_{i3}-x_i)+6(-y_{i2}+y_{i4})(x_{i4}-x_i)- \\
&\quad 6(x_{i4}-x_i)(y_{i2}-y_i)+6(y_{i4}-y_i)(x_{i2}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(2,5) &= 2(-z_{i3}+z_{i2})(z_{i3}-z_i)+2(-x_{i2}+x_{i3})(-x_{i3}+x_i)+ \\
&\quad 6(-z_{i2}+z_{i4})(-z_{i4}+z_i)+6(-x_{i4}+x_{i2})(x_{i4}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(3,5) &= 2(-y_{i2}+y_{i3})(z_{i3}-z_i)-2(y_{i2}-y_i)(z_{i3}-z_i)+ \\
&\quad 2(z_{i2}-z_i)(y_{i3}-y_i)+6(-y_{i4}+y_{i2})(-z_{i4}+z_i)+ \\
&\quad 6(y_{i4}-y_i)(z_{i2}-z_i)-6(z_{i4}-z_i)(y_{i2}-y_i) \qquad \text{(C.18)} \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(4,5) &= 2(y_{i3}-y_i)(-x_{i3}+x_i)+6(-y_{i4}+y_i)(x_{i4}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(5,5) &= 2(z_{i3}-z_i)^2+2(-x_{i3}+x_i)^2+6(-z_{i4}+z_i)^2+ \\
&\quad 6(x_{i4}-x_i)^2
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{H}_{A_i}(1,6) &= 2(-z_{i2}+z_{i3})(x_{i3}-x_i)-2(x_{i3}-x_i)(z_{i2}-z_i)+ \\
&\quad 2(z_{i3}-z_i)(x_{i2}-x_i)+6(-z_{i4}+z_{i2})(-x_{i4}+x_i)+ \\
&\quad 6(x_{i2}-x_i)(z_{i4}-z_i)-6(z_{i2}-z_i)(x_{i4}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(2,6) &= 2(-z_{i3}+z_{i2})(-y_{i3}+y_i)+2(y_{i2}-y_i)(z_{i3}-z_i)- \\
&\quad 2(z_{i2}-z_i)(y_{i3}-y_i)+6(-z_{i2}+z_{i4})(y_{i4}-y_i)- \\
&\quad 6(y_{i4}-y_i)(z_{i2}-z_i)+6(z_{i4}-z_i)(y_{i2}-y_i) \qquad \text{(C.19)} \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(3,6) &= 2(-y_{i2}+y_{i3})(-y_{i3}+y_i)+2(-x_{i3}+x_{i2})(x_{i3}-x_i)+ \\
&\quad 6(-y_{i4}+y_{i2})(y_{i4}-y_i)+6(-x_{i2}+x_{i4})(-x_{i4}+x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(4,6) &= 2(-z_{i3}+z_i)(x_{i3}-x_i)+6(z_{i4}-z_i)(-x_{i4}+x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(5,6) &= 2(z_{i3}-z_i)(-y_{i3}+y_i)+6(-z_{i4}+z_i)(y_{i4}-y_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(6,6) &= 2(-y_{i3}+y_i)^2+2(x_{i3}-x_i)^2+6(y_{i4}-y_i)^2+ \\
&\quad 6(-x_{i4}+x_i)^2
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{H}_{A_i}(1,7) &= 2(-y_{i3}+y_{i2})(-y_{i2}+y_i)+2(-z_{i2}+z_{i3})(z_{i2}-z_i)+ \\
&\quad 6(-y_{i4}+y_{i3})(y_{i4}-y_i)+6(-z_{i3}+z_{i4})(-z_{i4}+z_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(2,7) &= 2(-x_{i2}+x_{i3})(-y_{i2}+y_i)+2(x_{i2}-x_i)(y_{i3}-y_i)- \\
&\quad 2(y_{i2}-y_i)(x_{i3}-x_i)+6(-x_{i3}+x_{i4})(y_{i4}-y_i)- \\
&\quad 6(x_{i3}-x_i)(y_{i4}-y_i)+6(y_{i3}-y_i)(x_{i4}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(3,7) &= 2(-x_{i3}+x_{i2})(z_{i2}-z_i)-2(x_{i3}-x_i)(z_{i2}-z_i)+ \\
&\quad 2(z_{i3}-z_i)(x_{i2}-x_i)+6(-x_{i4}+x_{i3})(-z_{i4}+z_i)+ \\
&\quad 6(x_{i4}-x_i)(z_{i3}-z_i)-6(z_{i4}-z_i)(x_{i3}-x_i) \qquad \text{(C.20)} \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(4,7) &= 2(y_{i3}-y_i)(-y_{i2}+y_i)+2(-z_{i3}+z_i)(z_{i2}-z_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(5,7) &= 2(-x_{i3}+x_i)(-y_{i2}+y_i)-2(x_{i2}-x_i)(y_{i3}-y_i)+ \\
&\quad 2(y_{i2}-y_i)(x_{i3}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(6,7) &= 4(x_{i3}-x_i)(z_{i2}-z_i)-2(z_{i3}-z_i)(x_{i2}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(7,7) &= 2(-y_{i2}+y_i)^2+2(z_{i2}-z_i)^2+6(y_{i4}-y_i)^2+ \\
&\quad 6(-z_{i4}+z_i)^2
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{H}_{A_i}(1,8) &= 2(-y_{i3}+y_{i2})(x_{i2}-x_i)-2(x_{i2}-x_i)(y_{i3}-y_i)+ \\
&\quad 2(y_{i2}-y_i)(x_{i3}-x_i)+6(-y_{i4}+y_{i3})(-x_{i4}+x_i)+ \\
&\quad 6(x_{i3}-x_i)(y_{i4}-y_i)-6(y_{i3}-y_i)(x_{i4}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(2,8) &= 2(-z_{i3}+z_{i2})(-z_{i2}+z_i)+2(-x_{i2}+x_{i3})(x_{i2}-x_i)+ \\
&\quad 6(-z_{i4}+z_{i3})(z_{i4}-z_i)+6(-x_{i3}+x_{i4})(-x_{i4}+x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(3,8) &= 2(-y_{i2}+y_{i3})(-z_{i2}+z_i)+2(y_{i2}-y_i)(z_{i3}-z_i)- \\
&\quad 2(z_{i2}-z_i)(y_{i3}-y_i)+6(-y_{i3}+y_{i4})(z_{i4}-z_i)- \\
&\quad 6(y_{i3}-y_i)(z_{i4}-z_i)+6(z_{i3}-z_i)(y_{i4}-y_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(4,8) &= 4(x_{i2}-x_i)(y_{i3}-y_i)-2(y_{i2}-y_i)(x_{i3}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(5,8) &= 2(z_{i3}-z_i)(-z_{i2}+z_i)+2(-x_{i3}+x_i)(x_{i2}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(6,8) &= 2(-y_{i3}+y_i)(-z_{i2}+z_i)-2(y_{i2}-y_i)(z_{i3}-z_i)+ \\
&\quad 2(z_{i2}-z_i)(y_{i3}-y_i) \qquad\qquad (C.21) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(7,8) &= 2(-y_{i2}+y_i)(x_{i2}-x_i)+6(y_{i4}-y_i)(-x_{i4}+x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(8,8) &= 2(-z_{i2}+z_i)^2+2(x_{i2}-x_i)^2+6(z_{i4}-z_i)^2+ \\
&\quad 6(-x_{i4}+x_i)^2
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{H}_{A_i}(1,9) &= 2(-z_{i2}+z_{i3})(-x_{i2}+x_i)+2(x_{i3}-x_i)(z_{i2}-z_i)- \\
&\quad 2(z_{i3}-z_i)(x_{i2}-x_i)+6(-z_{i3}+z_{i4})(x_{i4}-x_i)- \\
&\quad 6(x_{i4}-x_i)(z_{i3}-z_i)+6(z_{i4}-z_i)(x_{i3}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(2,9) &= 2(-z_{i3}+z_{i2})(y_{i2}-y_i)-2(y_{i2}-y_i)(z_{i3}-z_i)+ \\
&\quad 2(z_{i2}-z_i)(y_{i3}-y_i)+6(-z_{i4}+z_{i3})(-y_{i4}+y_i)+ \\
&\quad 6(y_{i3}-y_i)(z_{i4}-z_i)-6(z_{i3}-z_i)(y_{i4}-y_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(3,9) &= 2(-y_{i2}+y_{i3})(y_{i2}-y_i)+2(-x_{i3}+x_{i2})(-x_{i2}+x_i)+ \\
&\quad 6(-y_{i3}+y_{i4})(-y_{i4}+y_i)+6(-x_{i4}+x_{i3})(x_{i4}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(4,9) &= 2(-z_{i3}+z_i)(-x_{i2}+x_i)-2(x_{i3}-x_i)(z_{i2}-z_i)+ \\
&\quad 2(z_{i3}-z_i)(x_{i2}-x_i) \qquad\qquad (C.22) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(5,9) &= 4(y_{i2}-y_i)(z_{i3}-z_i)-2(z_{i2}-z_i)(y_{i3}-y_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(6,9) &= 2(-y_{i3}+y_i)(y_{i2}-y_i)+2(x_{i3}-x_i)(-x_{i2}+x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(7,9) &= 2(z_{i2}-z_i)(-x_{i2}+x_i)+6(-z_{i4}+z_i)(x_{i4}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(8,9) &= 2(-z_{i2}+z_i)(y_{i2}-y_i)+6(z_{i4}-z_i)(-y_{i4}+y_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(9,9) &= 2(y_{i2}-y_i)^2+2(-x_{i2}+x_i)^2+6(-y_{i4}+y_i)^2+ \\
&\quad 6(x_{i4}-x_i)^2
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{H}_{A_i}(1,10) &= 6(-y_{i4}+y_{i3})(-y_{i3}+y_i)+6(-z_{i3}+z_{i4})(z_{i3}-z_i)+ \\
&\quad 6(-y_{i2}+y_{i4})(y_{i2}-y_i)+6(-z_{i4}+z_{i2})(-z_{i2}+z_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(2,10) &= 6(-x_{i3}+x_{i4})(-y_{i3}+y_i)+6(x_{i3}-x_i)(y_{i4}-y_i)- \\
&\quad 6(y_{i3}-y_i)(x_{i4}-x_i)+6(-x_{i4}+x_{i2})(y_{i2}-y_i)- \\
&\quad 6(x_{i4}-x_i)(y_{i2}-y_i)+6(y_{i4}-y_i)(x_{i2}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(3,10) &= 6(-x_{i4}+x_{i3})(z_{i3}-z_i)-6(x_{i4}-x_i)(z_{i3}-z_i)+ \\
&\quad 6(z_{i4}-z_i)(x_{i3}-x_i)+6(-x_{i2}+x_{i4})(-z_{i2}+z_i)+ \\
&\quad 6(x_{i2}-x_i)(z_{i4}-z_i)-6(z_{i2}-z_i)(x_{i4}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(4,10) &= 6(-y_{i4}+y_i)(y_{i2}-y_i)+6(z_{i4}-z_i)(-z_{i2}+z_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(5,10) &= 12(x_{i4}-x_i)(y_{i2}-y_i)-6(y_{i4}-y_i)(x_{i2}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(6,10) &= 6(-x_{i4}+x_i)(-z_{i2}+z_i)-6(x_{i2}-x_i)(z_{i4}-z_i)+ \\
&\quad 6(z_{i2}-z_i)(x_{i4}-x_i) \qquad\qquad (C.23) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(7,10) &= 6(y_{i4}-y_i)(-y_{i3}+y_i)+6(-z_{i4}+z_i)(z_{i3}-z_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(8,10) &= 6(-x_{i4}+x_i)(-y_{i3}+y_i)-6(x_{i3}-x_i)(y_{i4}-y_i)+ \\
&\quad 6(y_{i3}-y_i)(x_{i4}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(9,10) &= 12(x_{i4}-x_i)(z_{i3}-z_i)-6(z_{i4}-z_i)(x_{i3}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(10,10) &= 6(-y_{i3}+y_i)^2+6(z_{i3}-z_i)^2+6(y_{i2}-y_i)^2+ \\
&\quad 6(-z_{i2}+z_i)^2
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{H}_{A_i}(1,11) &= 6(-y_{i4}+y_{i3})(x_{i3}-x_i)-6(x_{i3}-x_i)(y_{i4}-y_i)+ \\
&\quad 6(y_{i3}-y_i)(x_{i4}-x_i)+6(-y_{i2}+y_{i4})(-x_{i2}+x_i)+ \\
&\quad 6(x_{i4}-x_i)(y_{i2}-y_i)-6(y_{i4}-y_i)(x_{i2}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(2,11) &= 6(-z_{i4}+z_{i3})(-z_{i3}+z_i)+6(-x_{i3}+x_{i4})(x_{i3}-x_i)+ \\
&\quad 6(-z_{i2}+z_{i4})(z_{i2}-z_i)+6(-x_{i4}+x_{i2})(-x_{i2}+x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(3,11) &= 6(-y_{i3}+y_{i4})(-z_{i3}+z_i)+6(y_{i3}-y_i)(z_{i4}-z_i)- \\
&\quad 6(z_{i3}-z_i)(y_{i4}-y_i)+6(-y_{i4}+y_{i2})(z_{i2}-z_i)- \\
&\quad 6(y_{i4}-y_i)(z_{i2}-z_i)+6(z_{i4}-z_i)(y_{i2}-y_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(4,11) &= 6(-y_{i4}+y_i)(-x_{i2}+x_i)-6(x_{i4}-x_i)(y_{i2}-y_i)+ \\
&\quad 6(y_{i4}-y_i)(x_{i2}-x_i) \qquad\qquad (C.24) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(5,11) &= 6(-z_{i4}+z_i)(z_{i2}-z_i)+6(x_{i4}-x_i)(-x_{i2}+x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(6,11) &= 12(y_{i4}-y_i)(z_{i2}-z_i)-6(z_{i4}-z_i)(y_{i2}-y_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(7,11) &= 12(x_{i3}-x_i)(y_{i4}-y_i)-6(y_{i3}-y_i)(x_{i4}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(8,11) &= 6(z_{i4}-z_i)(-z_{i3}+z_i)+6(-x_{i4}+x_i)(x_{i3}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(9,11) &= 6(-y_{i4}+y_i)(-z_{i3}+z_i)-6(y_{i3}-y_i)(z_{i4}-z_i)+ \\
&\quad 6(z_{i3}-z_i)(y_{i4}-y_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(10,11) &= 6(-y_{i3}+y_i)(x_{i3}-x_i)+6(y_{i2}-y_i)(-x_{i2}+x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(11,11) &= 6(-z_{i3}+z_i)^2+6(x_{i3}-x_i)^2+6(z_{i2}-z_i)^2+ \\
&\quad 6(-x_{i2}+x_i)^2
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{H}_{A_i}(1,12) &= 6(-z_{i3}+z_{i4})(-x_{i3}+x_i)+6(x_{i4}-x_i)(z_{i3}-z_i)- \\
&\quad 6(z_{i4}-z_i)(x_{i3}-x_i)+6(-z_{i4}+z_{i2})(x_{i2}-x_i)- \\
&\quad 6(x_{i2}-x_i)(z_{i4}-z_i)+6(z_{i2}-z_i)(x_{i4}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(2,12) &= 6(-z_{i4}+z_{i3})(y_{i3}-y_i)-6(y_{i3}-y_i)(z_{i4}-z_i)+ \\
&\quad 6(z_{i3}-z_i)(y_{i4}-y_i)+6(-z_{i2}+z_{i4})(-y_{i2}+y_i)+ \\
&\quad 6(y_{i4}-y_i)(z_{i2}-z_i)-6(z_{i4}-z_i)(y_{i2}-y_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(3,12) &= 6(-y_{i3}+y_{i4})(y_{i3}-y_i)+6(-x_{i4}+x_{i3})(-x_{i3}+x_i)+ \\
&\quad 6(-y_{i4}+y_{i2})(-y_{i2}+y_i)+6(-x_{i2}+x_{i4})(x_{i2}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(4,12) &= 12(x_{i2}-x_i)(z_{i4}-z_i)-6(z_{i2}-z_i)(x_{i4}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(5,12) &= 6(-z_{i4}+z_i)(-y_{i2}+y_i)-6(y_{i4}-y_i)(z_{i2}-z_i)+ \\
&\quad 6(z_{i4}-z_i)(y_{i2}-y_i) \qquad\qquad (\text{C.25}) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(6,12) &= 6(y_{i4}-y_i)(-y_{i2}+y_i)+6(-x_{i4}+x_i)(x_{i2}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(7,12) &= 6(-z_{i4}+z_i)(-x_{i3}+x_i)-6(x_{i4}-x_i)(z_{i3}-z_i)+ \\
&\quad 6(z_{i4}-z_i)(x_{i3}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(8,12) &= 12(y_{i3}-y_i)(z_{i4}-z_i)-6(z_{i3}-z_i)(y_{i4}-y_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(9,12) &= 6(-y_{i4}+y_i)(y_{i3}-y_i)+6(x_{i4}-x_i)(-x_{i3}+x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(10,12) &= 6(z_{i3}-z_i)(-x_{i3}+x_i)+6(-z_{i2}+z_i)(x_{i2}-x_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(11,12) &= 6(-z_{i3}+z_i)(y_{i3}-y_i)+6(z_{i2}-z_i)(-y_{i2}+y_i) \\
\boldsymbol{H}_{A_i}(12,12) &= 6(y_{i3}-y_i)^2+6(-x_{i3}+x_i)^2+6(-y_{i2}+y_i)^2+ \\
&\quad 6(x_{i2}-x_i)^2
\end{aligned}
$$

A continuación se muestran los coeficientes del triángulo superior de la matriz $\boldsymbol{H}_{V_i}$ (es una matriz simétrica), utilizada en la expresión (4.45).

$$\boldsymbol{H}_{V_i} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -V1 & -V2 & 0 & -V4 & -V5 & 0 & -V10 & -V11 \\ & 0 & 0 & V1 & 0 & -V3 & V4 & 0 & -V6 & V10 & 0 & -V12 \\ & & 0 & V2 & V3 & 0 & V5 & V6 & 0 & V11 & V12 & 0 \\ & & & 0 & 0 & 0 & 0 & -V7 & -V8 & 0 & -V13 & -V14 \\ & & & & 0 & 0 & V7 & 0 & -V9 & V13 & 0 & -V15 \\ & & & & & 0 & V8 & V9 & 0 & V14 & V15 & 0 \\ & & & & (sim) & & 0 & 0 & 0 & 0 & -V16 & -V17 \\ & & & & & & & 0 & 0 & V16 & 0 & -V18 \\ & & & & & & & & 0 & V17 & V18 & 0 \\ & & & & & & & & & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & & & & & & 0 & 0 \\ & & & & & & & & & & & 0 \end{pmatrix} \tag{C.26}$$

donde

$$\begin{aligned} V1 &= z_{i3} - z_{i4} & V10 &= z_{i2} - z_{i3} \\ V2 &= y_{i4} - y_{i3} & V11 &= y_{i3} - y_{i2} \\ V3 &= x_{i3} - x_{i4} & V12 &= x_{i2} - x_{i3} \\ V4 &= z_{i4} - z_{i2} & V13 &= z_{i3} - z_i \\ V5 &= y_{i2} - y_{i4} & V14 &= y_i - y_{i3} \\ V6 &= x_{i4} - x_{i2} & V15 &= x_{i3} - x_i \\ V7 &= z_i - z_{i4} & V16 &= z_i - z_{i2} \\ V8 &= y_{i4} - y_i & V17 &= y_{i2} - y_i \\ V9 &= x_i - x_{i4} & V18 &= x_i - x_{i2} \end{aligned}$$