



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIAS MATEMÁTICAS

FACULTAD DE CIENCIAS

MÉTODO DE SCHWARZ ADITIVO DE DOS
NIVELES MEDIANTE FUNCIONES DE BASE
RADIAL

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO ACADÉMICO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS

P R E S E N T A

MIGUEL ANGEL CAN EK

DIRECTOR DE TESIS:

DR. PEDRO GONZÁLEZ CASANOVA HENRÍQUEZ

MÉXICO, D.F.

ENERO 2010



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

AGRADECIMIENTOS

Manifiesto mi gratitud al Dr. Pedro González Casanova Henríquez por la asesoría académica brindada durante el desarrollo de la Tesis.

A las valiosas observaciones y comentarios de mis sinodales:

Dr. José Antonio Muñoz Gómez

Dr. Miguel Angel Moreles Vázquez

M. en A.P. María Lourdes Velasco Arregui

Dra. María de la Luz Jimena de Teresa de Oteyza

A todos ellos, agradezco la atención y el tiempo dedicado a este trabajo.

Mi agradecimiento al apoyo otorgado por el Posgrado en Ciencias Matemáticas y de la Especialización en Estadística (UNAM).

Finalmente, expreso mi reconocimiento a todos aquellos que de alguna u otra forma contribuyeron a la realización de este trabajo.

Dedicado a *Fheve, Isis, Ivana y Lizbeth*

Resumen

En esta tesis proponemos un método de dos niveles para resolver numéricamente Ecuaciones Diferenciales Parciales (EDP) mediante el uso de Funciones de Base Radial (FBR). Las FBR han tenido un fuerte impacto en la solución de EDPs en la última década. No obstante uno de los problemas más importantes que presentan estos métodos es que el número de condicionamiento de la matriz del correspondiente sistema lineal de ecuaciones aumenta al incrementarse el número de nodos. Lo anterior representa un obstáculo para la solución de problemas reales de gran escala, una de las necesidades más importantes del mundo moderno.

Para enfrentar el problema de mal condicionamiento, se han formulado diferentes estrategias entre las que destacan los métodos de preconditionamiento y los métodos de descomposición de dominio. En trabajos recientes se han estudiado los métodos de Schwarz tanto aditivo como multiplicativo para los métodos de colocación asimétrico y simétrico. Como es bien sabido, los métodos clásicos tales como diferencias finitas, elemento finito o volumen finito, al aplicar la técnica de descomposición de dominio con el incremento en el número de subdominios, en general estos métodos no convergen. Este fenómeno se observa también para el caso de técnicas de descomposición de dominio mediante funciones de base radial.

Para los métodos antes referidos, una solución para el problema descrito consiste en utilizar los llamados métodos de Schwarz de dos niveles. Se entiende por un nivel un método que utilice una sola malla. De esta manera un método de dos niveles utiliza una segunda malla. La finalidad de esta segunda malla es lograr que la comunicación local entre los subdominios sea global, optimizando así la transmisión de información entre subdominios lejanos. Es importante destacar que la principal limitación para la convergencia de los métodos de un nivel es la comunicación local al aumentar el número de subdominios. Hasta donde se tiene conocimiento, no existe en la literatura una formulación equivalente para los métodos de FBR.

En este trabajo formulamos el algoritmo de tipo Schwarz aditivo de uno y dos niveles. Resolvemos numéricamente tres EDPs estacionarias aplicando ambos métodos, utilizando colocación asimétrica y la FBR de placa delgada (TPS). El método de dos niveles como se esperaba, al hacer la comparación con el método de un nivel, mostró superioridad al disminuir significativamente el número de iteraciones así como un menor error al incrementarse el número de subdominios. El método de dos niveles no fue efectivo para una EDP cuya solución presenta un alto gradiente. Hoy en día ya existe una teoría que trata esta problemática, pero queda fuera del alcance de este trabajo.

Índice general

Índice de figuras	viii
Índice de tablas	ix
1. Introducción	1
2. Aproximación de funciones con FBR	4
2.1. El problema de interpolación	4
2.2. Enfoque algebraico	5
2.3. Enfoque Hilbertiano	17
3. Solución numérica de EDPs usando colocación	29
3.1. Problema estacionario	29
3.1.1. Colocación asimétrica	29
3.1.2. Colocación simétrica	31
3.2. Problema no estacionario	32
3.2.1. Colocación asimétrica	32
3.2.2. Colocación simétrica	35
4. Descomposición de dominio	37
4.1. Introducción	37
4.1.1. Métodos con traslape	38
4.1.2. Métodos sin traslape	39
4.2. Escalabilidad	40
4.3. DD para más de 2 subdominios	42
4.4. Schwarz aditivo	43
4.5. Schwarz multiplicativo	46
4.6. Schwarz aditivo y multiplicativo no estacionario	47

4.7. Análisis clásico de Fourier	48
4.8. Análisis clásico de Fourier (Helmholtz)	50
4.9. Algoritmo 1	52
5. Algoritmo de dos niveles	53
5.1. ¿Por qué un algoritmo de dos niveles?	53
5.2. Precondicionamiento	55
5.3. Proyecciones	55
5.4. Métodos de dos niveles aditivo y multiplicativo	57
5.5. Algoritmo 2	60
5.6. Algoritmo 3	61
6. Resultados	62
6.1. Ejemplo 1	62
6.2. Ejemplo 2	66
6.3. Ejemplo 3	70
Conclusiones	74
A. Método FBR theta	76
B. Simbología	78
Referencias	80

Índice de figuras

4.1. Descomposición en dos dominios con traslape.	40
4.2. Descomposición en dos dominios sin traslape.	41
4.3. Coloreado de subdominios con cuatro colores.	47
5.1. Error constante en Ω_i	54
5.2. Función de Green.	54
5.3. Malla de dos niveles.	57
6.1. Gráfica del error de la tabla 6.2.	64
6.2. Comparación de iteraciones de la tabla 6.4.	66
6.3. Porcentaje de disminución de iteraciones del método de dos niveles de la tabla 6.4.	67
6.4. Comparativo de iteraciones de la tabla 6.6.	68
6.5. Porcentaje de disminución de iteraciones del método de dos niveles de la tabla 6.6.	69
6.6. Resultados de la tabla 6.7.	71
6.7. Gráfica de la solución aproximada para $\varepsilon = 0.5$	71
6.8. Gráfica de la solución analítica para $\varepsilon = 0.5$	72
6.9. Gráfica de la solución aproximada para $\varepsilon = 0.01$	73
6.10. Gráfica de la solución analítica para $\varepsilon = 0.01$	73

Índice de tablas

2.1. Diferentes tipos de FBR.	6
2.2. Funciones de base radial y el grado del polinomio.	13
2.3. FBRs de Wendland de soporte compacto.	17
2.4. Tasas de convergencia para algunas FBR.	28
6.1. Resultados numéricos al variar el tamaño de traslape.	63
6.2. Resultados numéricos al aumentar el número de subdominios.	64
6.3. Resultados numéricos al variar el número de subdominios con la incorporación de una malla gruesa, ejemplo 1.	65
6.4. Comparativo en porcentaje entre iteraciones de ambos métodos del ejemplo 1. . .	65
6.5. Resultados numéricos al variar el número de subdominios del ejemplo 2.	67
6.6. Comparativo en porcentaje entre iteraciones de ambos métodos del ejemplo 2. . .	68
6.7. Resultados numéricos al variar el número de subdominios y una $\varepsilon=0.5$	70
6.8. Resultados numéricos al variar el número de subdominios y una $\varepsilon=0.01$	72

CAPÍTULO 1

Introducción

Durante la última década, los métodos de funciones de base radial para la solución de ecuaciones diferenciales parciales han producido un impacto tanto en la ingeniería como en las matemáticas. En la literatura se pueden encontrar varios enfoques para la solución de Ecuaciones Diferenciales Parciales (EDPs) usando Funciones de Base Radial (FBRs), entre los cuales destacan los trabajos pioneros [33, 34] donde se formulan por primera vez los métodos de colocación. La versión simétrica de este enfoque se plantea en [13]. Durante este periodo se formulan además, los métodos de cuadratura diferencial [49], el método de soluciones fundamentales [19], el esquema de Galerkin [55], el método de reciprocidad dual [69, 18], entre otros.

Los métodos anteriores han tenido ya un impacto considerable en diferentes campos aplicados, de los cuales destacamos: matemáticas financieras [22, 29], transferencia de calor [73], problemas de valor inicial [27], ecuación no lineal de Burger [28], convección difusión [5, 36, 74, 30], ecuaciones diferenciales elípticas [48], modelación de aguas de poca profundidad [38, 25, 61], campo superficial del viento [21], flujo en cavidades [70], modelos mixtos bifásico y trifásico [26, 23], geofísica y dinámica de fluidos [1, 15]. La diferencia fundamental que distinguen a los métodos de funciones de base radial, respecto a los métodos clásicos como Diferencias Finitas, Elemento Finito o Volumen Finito, es que a diferencia de estos últimos los primeros no requieren de construcción de mallas. Otra de las ventajas más importantes de estos métodos es que son algorítmicamente más simples que las técnicas clásicas, pues se ajustan con facilidad tanto para casos que involucran altas dimensiones como para fronteras más complicadas. Además, puede alcanzarse convergencia exponencial cuando se incrementa el número de nodos, (ver [3]).

Por otra parte, los métodos de colocación mediante funciones de base radial, dan

lugar a un sistema de ecuaciones lineales en donde la matriz de discretización es mal condicionada cuando el número de nodos aumenta, (ver [43]). Para enfrentar este problema se han utilizado de forma destacada las técnicas de descomposición de dominio y de preconditionamiento.

En relación a las técnicas de descomposición de dominio, mediante colocación asimétrica existen varios antecedentes en la literatura. En particular para problemas estacionarios tenemos [68, 36, 39, 37], y para problemas no estacionarios, [42, 60, 6]. Los trabajos anteriores se han formulado para técnicas de Schwarz con traslape, tanto aditivas como multiplicativas. La convergencia de estos métodos se ha presentado recientemente en [75], para el caso de dos subdominios.

Como se sabe los métodos aditivo y multiplicativo de Schwarz aplicados con descomposición de dominio y que actualmente se investigan en el ámbito de funciones de base radial, tienen una limitación importante al requerir un número de iteraciones considerablemente alto en su proceso, además de que no convergen al aumentar el número de subdominios. Para resolver lo anterior, proponemos utilizar un método iterativo de dos niveles que incorpore una segunda malla cuyo espaciado sea mayor que el de la primera malla. Es aquí donde radica la contribución de este trabajo, pues en lo que se refiere a FBRs, este método conocido como *método de dos niveles* aún no se ha investigado.

En esta tesis presentamos tres algoritmos. El primero es meramente el método de Schwarz aditivo con descomposición de dominio con traslape, o sea, un nivel. El segundo, es del tipo dos niveles y el tercero es una variación del segundo en términos de residuales. Esta formulación se hace con el objeto de investigar si el algoritmo de dos niveles es estacionario, es decir, si el número de iteraciones no cambia con el incremento de subdominios. Para esto, se estudian numéricamente tres problemas estacionarios en EDP, para los cuales realizamos la codificación y ejecución de los programas correspondientes a los dos primeros algoritmos en el lenguaje de programación C++ bajo el sistema operativo LINUX. En el primer programa se aplica el algoritmo de un nivel y en el segundo programa se incorpora la malla gruesa.

En el capítulo 2 se exponen distintos conceptos sobre funciones de base radial. En el capítulo 3 se describen los métodos de colocación tanto asimétrica como simétrica para un problema estacionario y no estacionario en ambos casos. En el capítulo 4, se abordan los métodos aditivo y multiplicativo de Schwarz con descomposición de dominio con traslape así como los análisis de Fourier Clásico para la ecuación de Laplace y Helmholtz. El capítulo 5 se dedica a la exposición de diferentes conceptos

que dan lugar a la justificación del método de dos niveles. El capítulo 6 expone los resultados de las ecuaciones analizadas.

Cabe destacar que este es un primer paso para el entendimiento de cómo utilizar la idea de dos niveles mediante funciones de base radial, ya que en este trabajo solamente utilizamos mallas cartesianas, y como se sabe las FBR, una de sus características principales, es que son libres de malla. Sin embargo esto último es un tema para investigaciones futuras.

CAPÍTULO 2

Aproximación de funciones con FBR

En este capítulo expondremos la teoría básica de la interpolación con FBRs basándonos en dos enfoques, el primero de tipo algebraico en donde definimos el problema de interpolación y estudiamos la existencia y unicidad del mismo, ver [20, 34, 1, 46, 14, 40, 51, 41]. En el segundo enfoque de tipo Hilbertiano, abordamos la convergencia del interpolante dando algunas cotas del error para diferentes FBRs. Esta teoría es el fundamento para los métodos de colocación que exponemos en el siguiente capítulo. Este material es tomado de [58, 15].

2.1. El problema de interpolación

En muchas disciplinas científicas nos encontramos con el problema de que dado un conjunto de datos, necesitamos encontrar una función S que proporcione un “buen” ajuste para los datos. Un buen ajuste puede ser entendido de diferentes maneras, en nuestro caso el criterio en que nos basamos es que S sea exacta para los datos del problema en cuestión. Este enfoque es llamado *interpolación*, y si los datos no están en una malla uniforme o regular, el proceso se llama *interpolación de datos aleatorios*.

A continuación definimos el problema de interpolación para datos aleatorios.

Definición 1 *Dados los datos (\mathbf{x}_j, y_j) , $j = 1, 2, \dots, N$ con $\mathbf{x}_j \in \mathbb{R}^d$, $y_j \in \mathbb{R}$, encontrar una función continua S tal que $S(\mathbf{x}_j) = y_j$, $j = 1, 2, \dots, N$.*

Como \mathbf{x}_j está en un espacio d -dimensional arbitrario \mathbb{R}^d significa que el problema anterior nos permite abordar muchos tipos de aplicaciones. Si $d = 1$ los datos

podrían ser los valores observados sobre cierto periodo de tiempo. Así los \mathbf{x}_j son números reales. Si $d = 2$ podríamos pensar que los datos se obtuvieron de una región plana y los \mathbf{x}_j corresponden a las dos coordenadas en el plano cartesiano. Para $d = 3$ es completamente análogo al caso $d = 2$, sólo que ahora estaríamos en el espacio y este caso es posiblemente el más importante en ciertas aplicaciones; como ejemplo podríamos estar interesados en la distribución de la temperatura dentro de algún cuerpo sólido. Los ejemplos para dimensiones mayor a 3 pueden no ser intuitivos, pero existen varias aplicaciones, i.e., en finanzas, optimización, economía o estadística e inteligencia artificial, en donde estos casos son importantes.

Una manera común y conveniente para abordar el problema de interpolación de datos aleatorios, es el de suponer que S es una combinación lineal de ciertas funciones base B_k , i.e.,

$$S(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^N c_k B_k(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$$

Resolviendo el problema de interpolación bajo este supuesto obtenemos un sistema lineal de ecuaciones de la forma

$$\mathbf{A}\mathbf{c} = \mathbf{y}$$

donde las entradas de la matriz de interpolación \mathbf{A} están dadas por $A_{jk} = B_k(\mathbf{x}_j)$, $j, k = 1, 2, \dots, N$, $\mathbf{c} = (c_1, c_2, \dots, c_N)^T$ y $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_N)^T$.

Este problema diremos que está *bien planteado* si existe una solución y esta es única, en otras palabras si y sólo si \mathbf{A} es no singular.

2.2. Enfoque algebraico

En este enfoque iremos desarrollando el problema de interpolación a través de distintos tipos de funciones, todas radiales, pero con el objetivo de que el problema sea bien planteado.

Como punto de partida y con objeto de ilustrar el concepto de función de base radial, escogeremos una función bien identificada en muchas ramas de las matemáticas. Esta es la Gaussiana

$$\phi(r) = e^{-(\varepsilon r)^2}, \quad r \in \mathbb{R}.$$

El parámetro ε se relaciona con la varianza σ^2 de la función de distribución normal por $\varepsilon^2 = 1/(2\sigma^2)$. Si componemos la función Gaussiana con la función distancia Euclidiana $\|\cdot\|$ obtenemos, para cualquier centro fijo $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^d$, una función de varias variables

$$\Phi_k(\mathbf{x}) = e^{-\varepsilon^2 \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|^2}, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d.$$

En términos de ϕ , la función de varias variables anterior queda

$$\Phi_k(\mathbf{x}) = \phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|)$$

de aquí el nombre de función de base radial.

Definición 2 Una función $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ es llamada radial, si existe una función $\phi : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ tal que:

$$\Phi(\mathbf{x}) = \phi(r), \quad \text{donde } r = \|\mathbf{x}\|,$$

En esta definición $\|\cdot\|$ usualmente es la norma Euclidiana en \mathbb{R}^d . En la tabla 2.1 se muestran una serie de funciones de base radial. Note que utilizando la igualdad $\Phi(\mathbf{x}) = \phi(r)$, en algunas ocasiones usamos $\phi(r)$ para referirnos a $\Phi(\mathbf{x})$.

Núcleo Radial	Nombre	Tipo de Soporte
$\phi(r) = r^{2d} \log r$	Placa delgada	Suave a tramos
$\phi(r) = \sqrt{r^2 + c^2}$	Multicuádrica	C^∞
$\phi(r) = (\sqrt{r^2 + c^2})^{-1/2}$	Inv. Multicuádrica	C^∞
$\phi(r) = e^{-r^2 c^2}$	Gaussiana	C^∞
$\phi(r) = (1 - r)_+^4$	Wendland	Compacto

Tabla 2.1: Diferentes tipos de FBR.

De la definición 1, vemos que para una función radial Φ

$$\|\mathbf{x}_1\| = \|\mathbf{x}_2\| \Rightarrow \Phi(\mathbf{x}_1) = \Phi(\mathbf{x}_2), \quad \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathbb{R}^d$$

En otras palabras, el valor de Φ en cualquier punto que se encuentre a una cierta distancia fija del origen, es constante. Así, Φ es radialmente simétrica sobre su centro.

Los interpolantes de funciones de base radial, tienen la importante propiedad de ser invariantes bajo todas las transformaciones Euclidianas, es decir, las traslaciones, las rotaciones y las reflexiones. Por esto se entiende que no importa si primero cal-

culamos el interpolante radial y después aplicamos una transformación Euclidiana, o si primero transformamos los datos y después calculamos el interpolante radial.

Ahora bien, el problema de interpolación dado en la definición 1, de suponer que S es una combinación lineal de ciertas funciones base, ahora lo podemos plantear como una combinación lineal de funciones radiales Φ_k , es decir,

$$S(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^N \lambda_k \Phi_k(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d \quad (2.1)$$

La expresión (2.1) la podemos expresar como un sistema de ecuaciones lineales,

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{y} \quad (2.2)$$

donde $A_{jk} = \Phi_k(\mathbf{x}_j)$ para $j, k = 1, 2, \dots, N$, $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N)^T$, $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_N)^T$ y Φ_k es alguna de las FBR de la tabla 2.1.

Para que el sistema (2.2) tenga solución única, la matriz \mathbf{A} debe ser invertible. Como \mathbf{A} está en términos de una FBR, una manera de asegurar su invertibilidad es que Φ sea definida positiva. Definimos entonces primero una matriz positiva definida y posteriormente una función positiva definida.

Definición 3 Una matriz real simétrica \mathbf{A} es llamada *semidefinida positiva* si su forma cuadrática asociada es no negativa

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \lambda_i \lambda_j A_{i,k} \geq 0, \quad (2.3)$$

para $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N)^T \in \mathbb{R}^N$. Si además, el único vector $\boldsymbol{\lambda}$ que hace que (2.3) sea cero es el vector cero, entonces \mathbf{A} se llama *definida positiva*.

Un resultado conocido del álgebra lineal es que los valores propios de una matriz definida positiva son todos positivos. Entonces el determinante de este tipo de matriz es positivo y la matriz es no singular. Esto es precisamente lo que se busca puesto que el sistema dado en (2.2) tiene solución única. Debido a que los elementos de la matriz \mathbf{A} dada en (2.2) están en términos de evaluaciones de una FBR, reformulamos la definición 3 en términos de funciones.

Definición 4 Una función continua $\Phi : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ es llamada *definida positiva* si para cualesquiera N puntos distintos $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N \in \mathbb{R}^d$ y $\mathbf{c} = (c_1, c_2, \dots, c_N) \in$

\mathbb{R}^n

$$\sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N c_j c_i \Phi(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_i) > 0$$

la función $\phi : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ se llama *definida positiva en \mathbb{R}^d* si $\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|)$ es *definida positiva*.

La definición de positiva semidefinida se obtiene cambiando la desigualdad estricta $>$ por \geq . El uso de una FBR definida positiva garantiza que la desigualdad

$$\mathbf{c}^T \mathbf{A} \mathbf{c} = \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N c_j c_i \phi(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|) > 0, \quad \mathbf{c} \neq \mathbf{0}$$

se cumple para cualquier conjunto de puntos. Entonces \mathbf{A} es definida positiva y en consecuencia invertible.

Mencionamos ahora algunas de las propiedades más importantes de las funciones (estrictamente) definidas positivas. El siguiente teorema enlista estas propiedades.

Teorema 1 *Algunas propiedades básicas de funciones definidas positivas son*

1. *Combinaciones lineales no negativas de funciones definidas positivas son definidas positivas . Si $\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_n$ son definidas positivas en \mathbb{R}^d y $c_j \geq 0$, $j = 1, 2, \dots, n$, entonces*

$$\Phi(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^n c_j \Phi_j, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^s,$$

es también definida positiva. Más aún, si al menos una de las Φ_j es estrictamente definida positiva y la correspondiente $c_j > 0$, entonces Φ es estrictamente definida positiva.

2. $\Phi(\mathbf{0}) \geq 0$.

3. $\Phi(-\mathbf{x}) = \overline{\Phi(\mathbf{x})}$

4. *Cualquier función definida positiva es acotada. En efecto,*

$$|\Phi(\mathbf{x})| \leq \Phi(\mathbf{0}).$$

5. *Si Φ es definida positiva con $\Phi(\mathbf{0}) = 0$ entonces $\Phi \equiv 0$.*

6. El producto de funciones (estrictamente) definidas positivas es (estrictamente) definida positiva.

La propiedad (3) demuestra que cualquier función definida positiva real debe ser par, entonces tenemos el siguiente teorema.

Teorema 2 Una función continua de valor real Φ es definida positiva en \mathbb{R}^d si y sólo si es par y

$$\sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N c_j c_k \Phi(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k) \geq 0 \quad (2.4)$$

para cualesquiera N puntos $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N \in \mathbb{R}^d$, y $\mathbf{c} = (c_1, c_2, \dots, c_N)^T \in \mathbb{R}^N$.

La función Φ es estrictamente definida positiva en \mathbb{R}^d si la forma cuadrática 2.4 es cero solamente para $\mathbf{c} \equiv \mathbf{0}$.

En la definición 4 se caracterizan las funciones definidas positivas en términos de la función de varias variables Φ . Sin embargo al trabajar con funciones radiales tenemos la igualdad $\Phi(\mathbf{x}) = \phi(\|\mathbf{x}\|)$, esto nos indica que es conveniente también referirse a la función univariada ϕ como una función radial definida positiva. Esto de alguna manera es un abuso de notación, no obstante es lo que comúnmente se encuentra en la literatura.

Una consecuencia inmediata de la notación anterior es

Lema 1 Si $\Phi = \phi(\|\cdot\|)$ es (estrictamente) definida positiva y radial en \mathbb{R}^d entonces Φ es también (estrictamente) definida positiva y radial en \mathbb{R}^σ para cualquier $\sigma \leq d$.

Ahora bien, para las funciones definidas positivas podemos dar un criterio para decidir si una FBR es definida positiva. Iniciaremos por dar la definición de una función completamente monótona.

Definición 5 Una función $\phi : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ que pertenece a $C[0, \infty) \cap C^\infty(0, \infty)$ y que satisface:

$$(-1)^\ell \phi^{(\ell)}(r) \geq 0, \quad r > 0, \ell = 0, 1, 2, \dots \quad (2.5)$$

es llamada completamente monótona en $[0, \infty)$.

Ejemplos de funciones completamente monótonas son

1. La función $\varphi(r) = \varepsilon$, $\varepsilon \geq 0$, es completamente monótona en $[0, \infty)$.

2. La función $\varphi(r) = e^{-\varepsilon r}$, $\varepsilon \geq 0$ es completamente monótona en $[0, \infty)$ puesto que

$$(-1)^\ell \varphi^{(\ell)}(r) = \varepsilon^\ell e^{-\varepsilon r} \geq 0, \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

3. La función $\varphi(r) = \frac{1}{(1+r)^\beta}$, $\beta \geq 0$, es completamente monótona en $[0, \infty)$ ya que

$$(-1)^\ell \varphi^{(\ell)}(r) = (-1)^{2\ell} \beta(\beta+1) \cdots (\beta+\ell-1)(1+r)^{-\beta-\ell} \geq 0, \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

Algunas propiedades de funciones completamente monótonas que pueden encontrarse en [4, 16, 59] son

- Un combinación lineal finita no negativa de funciones completamente monótonas es completamente monótona.
- El producto de dos funciones completamente monótonas es completamente monótona.
- Si φ es completamente monótona y ψ es absolutamente monótona (i.e., $\psi^{(\ell)} \geq 0$ para toda $\ell \geq 0$), entonces $\varphi \circ \psi$ es completamente monótona.
- Si φ es completamente monótona y ψ es una función positiva tal que su derivada es completamente monótona, entonces $\varphi \circ \psi$ es completamente monótona.

El primer resultado que relaciona este concepto con funciones estrictamente definidas positivas fue dado por Schoenberg [46], dando así un criterio para la invertibilidad del sistema de ecuaciones (2.2) y puede ser aplicado a la interpolación de datos aleatorios en \mathbb{R}^d .

Teorema 3 *Si la función $\phi : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ es completamente monótona pero no constante, entonces $\phi(\|\cdot\|^2)$ es estrictamente positiva y radial en \mathbb{R}^d para cualquier d .*

Ejemplos de estas funciones completamente monótonas y no constantes son

- $\phi(r) = (r + c^2)^{-\beta}$, $c, \beta > 0$
- $\phi(r) = e^{-cr^2}$, $c > 0$

A continuación damos un resultado más general que relaciona a las funciones definidas positivas.

Teorema 4 $\phi : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ es definida positiva en \mathbb{R}^d y en todas las dimensiones d si y sólo si $\phi(\sqrt{\cdot})$ es completamente monótona en $[0, \infty)$ y no constante.

Aquí debemos comentar que hay funciones radiales que son definidas positivas sólo en algunas dimensiones específicas, mientras otras son definidas positivas para dimensiones arbitrarias, una función de este tipo es la Gaussiana $\phi(r) = e^{-cr^2}$, $c > 0$.

Aún cuando este tipo de funciones son FBR válidas para el problema de interpolación, hay FBR que no son definidas positivas, por ejemplo $\phi(r) = r^3$. No obstante hay una posibilidad de relajar la condición de definida positiva a fin de abarcar más FBR que hagan del problema de interpolación un problema bien planteado. Este concepto es el de función condicionalmente definida positiva.

Definición 6 Una función par continua de valor real Φ en \mathbb{R}^d es llamada condicionalmente definida positiva de orden m si

$$\sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N c_j c_k \Phi(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k) \geq 0 \quad (2.6)$$

para cualesquiera N puntos distintos $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N \in \mathbb{R}^d$ y $\mathbf{c} = (c_1, \dots, c_N)^T \in \mathbb{R}^N$ que satisfacen

$$\sum_{j=1}^N c_j \mathbf{x}_j^\alpha = 0, \quad |\alpha| < m, \quad \alpha \in \mathbb{N}_0^d \quad (2.7)$$

La función Φ , es llamada estrictamente condicionalmente definida positiva de orden m si para $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N$ distintos en \mathbb{R}^d y \mathbf{c} distinto de cero implica la desigualdad estricta en (2.6).

En esta definición hemos utilizado la notación multi-índice, es decir,

$$\alpha \in \mathbb{N}_0^d, \quad |\alpha| = \sum_{i=1}^d \alpha_i, \quad \text{y} \quad \mathbf{x}^\alpha = x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2} \cdots x_d^{\alpha_d}. \quad (2.8)$$

Note que si usamos funciones condicionalmente definidas positivas, el problema de interpolación dado en (2.1) por la matriz \mathbf{A} de (2.2) podría ser singular si no se cumple $\mathbf{c}^T \mathbf{A} \mathbf{c} > 0$, lo que es posible si \mathbf{c} satisface (2.7), por lo que hay que reformular el problema.

Para los puntos dados $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\}$ y los valores y_1, y_2, \dots, y_N , encontrar

$\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^N$ y $\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^M$ tal que

$$S(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \lambda_j \Phi(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}) + \sum_{i=1}^M \beta_i p_i(\mathbf{x}) \quad (2.9)$$

$$S(\mathbf{x}_i) = y_i, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (2.10)$$

$$\sum_{j=1}^N \lambda_j p_k(\mathbf{x}_j) = 0, \quad k = 1, 2, \dots, M \quad (2.11)$$

donde p_1, p_2, \dots, p_M forman una base para el espacio \mathbb{P}_{m-1}^d de polinomios de grado menor o igual a $m-1$ en d variables y cuya dimensión es $M = \binom{d+m-1}{d}$.

De este modo, el correspondiente sistema de ecuaciones puede ser escrito en forma matricial como:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{P} \\ \mathbf{P}^T & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\lambda} \\ \boldsymbol{\beta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

donde $A_{i,j} = \Phi(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$, $P_{i,j} = p_j(\mathbf{x}_i)$, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$, $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{N \times M}$, $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^{N \times 1}$, $\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^{M \times 1}$, $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{N \times 1}$ y $\mathbf{0} \in \mathbb{R}^{M \times 1}$.

Para investigar si la matriz resultante del problema de interpolación reformulado es invertible, necesitamos el concepto de conjunto unisolvente.

Definición 7 *Llamamos a un conjunto de puntos $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\} \subset \mathbb{R}^d$ m -unisolvente si el único polinomio de grado a lo más m que interpola los elementos cero en \mathcal{X} es el polinomio cero.*

$$p \in \mathbb{P}_m^d \quad y \quad p(\mathbf{x}_i) = 0, \quad 1 \leq i \leq N \Rightarrow p \equiv 0$$

Para dar un ejemplo necesitamos el siguiente teorema

Teorema 5

- *Los monomios $\mathbf{x} \mapsto \mathbf{x}^\alpha$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$, $\alpha \in \mathbb{N}_0^\alpha$ son linealmente independientes.*
- $\dim \mathbb{P}_m^d = \binom{m+d}{d}$

Como ejemplo consideremos $\dim \mathbb{P}_1^2 = \binom{3}{2} = 3$. Puesto que todo polinomio en dos variables describe un plano en el espacio, este plano se determina de manera única por tres puntos si y sólo si estos tres puntos no son colineales. Entonces

$\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3\}$, $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^2$, $i = 1, 2, 3$, es 1-unisolvente si y sólo si los puntos \mathbf{x}_i no son colineales.

En términos de conjunto unisolvente tenemos el siguiente teorema.

Teorema 6 *Sea ϕ condicionalmente positiva definida de orden m y \mathcal{X} es un conjunto m -unisolvente. Entonces (2.12) tiene solución única.*

Entonces, para una función condicionalmente definida positiva ϕ de orden m , una solución única al problema (2.9) existe si \mathcal{X} es m -unisolvente. Además, un resultado análogo al teorema (4) es el teorema conocido como teorema de Michelli que enunciamos a continuación.

Teorema 7 *Sea $\phi \in C[0, \infty) \cap C^\infty(0, \infty)$. Entonces la función $\Phi = \phi(\|\cdot\|^2)$ es condicionalmente definida positiva de orden m y radial en \mathbb{R}^d para toda d si y sólo si $(-1)^m \phi^{(m)}$ es completamente monótona en $(0, \infty)$.*

Un resultado complementario de este importante teorema es

Teorema 8 *Si ϕ es como en el Teorema 7 y no es un polinomio de grado a lo más m , entonces Φ es estrictamente condicionalmente definida positiva de orden m y es una función radial en \mathbb{R}^d para toda d .*

El teorema de Michelli, es una poderosa herramienta para conocer la naturaleza de funciones de base radial, pues mediante sencillos cálculos de derivadas podemos determinar si una función es completamente monótona y así caracterizar estas funciones. En la tabla 2.2 mostramos una lista de las FBR más usuales en donde damos el grado de polinomio necesario.

Nombre	$\phi(r)$	Parámetros	Polinomio
Placa delgada	$(-1)^{1+\beta/2} r^\beta \log r$	$\beta > 0, \beta \in 2\mathbb{N}$	$1 + \beta/2$
Multicuádrica	$(-1)^{\lceil \beta/2 \rceil} (r^2 + c^2)^{\beta/2}$	$\beta > 0, \beta \notin 2\mathbb{N}$	$\lceil \beta \rceil$
Inv. Multicuádrica	$(r^2 + c^2)^{-\beta/2}$	$\beta > 0, \beta \notin 2\mathbb{N}$	0
Potencias	$(-1)^{\lceil \beta/2 \rceil} r^\beta$	$\beta > 0, \beta \notin 2\mathbb{N}$	$\lceil \beta/2 \rceil$
Gaussiana	e^{-cr^2}	$c > 0$	0
Wendland	$(1-r)_+^\beta p(r)$	$\beta > 0$	0

Tabla 2.2: Funciones de base radial y el grado del polinomio.

Para ver cómo funciona el criterio del teorema 7 damos los siguientes ejemplos para algunas FBRs.

1. Las funciones:

$$\phi(r) = (-1)^{\lceil\beta\rceil} (r + \alpha^2)^\beta, \quad \alpha > 0, \beta > 0, \beta \notin \mathbb{N}$$

implican que

$$\phi^{(k)}(r) = (-1)^{\lceil\beta\rceil} \beta(\beta-1) \cdots (\beta - \lceil\beta\rceil + 1) (r + \alpha^2)^{\beta-k}$$

así

$$(-1)^{\lceil\beta\rceil} \phi^{(\lceil\beta\rceil)}(r) = (\beta-1) \cdots (\beta - \lceil\beta\rceil + 1) (r + \alpha^2)^{\beta-\lceil\beta\rceil}$$

es completamente monótona. Además, $m = \lceil\beta\rceil$ es la m más pequeña, para la cual $(-1)^m \phi^m$ es completamente monótona. Por lo tanto, el multicuadrado

$$\phi(r) = (-1)^{\lceil\beta\rceil} (r^2 + \alpha^2)^\beta, \quad \alpha > 0, \beta > 0$$

es estrictamente condicionalmente definido positivo de orden $m \geq \lceil\beta\rceil$ y es radial en \mathbb{R}^d para toda d .

2. Las funciones

$$\phi(r) = (-1)^{\lceil\beta/2\rceil} r^{\lceil\beta/2\rceil}, \quad \beta > 0, \beta \notin 2\mathbb{N}$$

implican que:

$$\phi^{(k)}(r) = (-1)^{\lceil\beta/2\rceil} \frac{\beta}{2} \left(\frac{\beta}{2} - 1\right) \cdots \left(\frac{\beta}{2} - k + 1\right) r^{\frac{\beta}{2}-k}$$

así, $(-1)^{\lceil\beta/2\rceil} \phi^{(\lceil\beta/2\rceil)}$ es completamente monótona y $m = \lceil\beta/2\rceil$ es la m más pequeña, tal que $(-1)^m \phi^m$ es completamente monótona. Por lo tanto, las potencias

$$\phi(r) = (-1)^{\lceil\beta/2\rceil} r^{\lceil\beta\rceil}, \quad \beta > 0, \beta \notin 2\mathbb{N}$$

son estrictamente condicionalmente definidas positivas de orden $m \geq \lceil\beta\rceil$ y son radiales en \mathbb{R}^d para toda d .

3. El spline de capa delgada

$$\Phi(\mathbf{x}) = (-1)^{k+1} \|\mathbf{x}\|^{2k} \log \|\mathbf{x}\|, \quad k \in \mathbb{N}$$

es estrictamente condicional definido positivo orden $m \geq k + 1$ y es radial en \mathbb{R}^d para toda d . Para ver esto observamos que

$$2\Phi(\mathbf{x}) = (-1)^{k+1} \|\mathbf{x}\|^{2k} \log \|\mathbf{x}\|^2, \quad k \in \mathbb{N}$$

sea entonces:

$$\phi(r) = (-1)^{k+1} r^k \log r, \quad k \in \mathbb{N}$$

y así

$$\phi^{(l)}(r) = (-1)^{k+1} k(k-1) \cdots (k-l+1) r^{k-l} \log r + p_l(r), \quad 1 \leq l \leq k$$

con p_l un polinomio de grado $k-l$. Así,

$$\phi^{(k)}(r) = (-1)^{k+1} k! \log r + C$$

y

$$\phi^{(k+1)}(r) = (-1)^{k+1} \frac{k!}{r}$$

son completamente monótonas en $(0, \infty)$.

Para las FBR que son condicionalmente positivas definidas como el multicuadrado

$$\phi(r) = (r + c^2)^{1/2} + a_1 \tag{2.13}$$

con parámetro c y término constante a y que es de orden 1, Micchelli demuestra que la interpolación con una función de este tipo es posible sin tomar en cuenta el término constante. Enunciamos el teorema.

Teorema 9 *Sea ϕ una función estrictamente condicional positiva definida de orden 1 y que $\phi(0) \leq 0$. Para cualquier conjunto de puntos distintos $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N \in \mathbb{R}^d$ la matriz \mathbf{A} con entradas $A_{i,j} = \phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$ tiene $N - 1$ valores propios positivos y 1 negativo, y entonces \mathbf{A} es no singular.*

Hemos incluido en las tablas 2.1 y 2.2 las FBR de soporte compacto. A continuación abordamos este tipo de funciones radiales. Específicamente nos enfocamos a estudiar qué condiciones se deben cumplir para que sean de soporte compacto, estrictamente definidas positivas y radiales en \mathbb{R}^d para una d fija. Hay diferentes tipos de FBRs de soporte compacto, ver por ejemplo [54, 67], en particular expondremos las de tipo Wendland. Estas funciones están definidas en el intervalo $[0, 1]$ y fuera de éste toma el valor cero. Con el siguiente teorema, tenemos las condiciones para construir estas funciones.

Teorema 10 *Las funciones $\phi_{d,k}$ son estrictamente definidas positivas y radiales en \mathbb{R}^d y son de la forma*

$$\phi_{d,k} = \begin{cases} p_{d,k}(r), & 0 \leq r \leq 1 \\ 0, & r > 1, \end{cases}$$

con un polinomio univariado $p_{d,k}$ de grado $\lfloor d/2 \rfloor + 3k + 1$. Además, $\phi_{d,k} \in C^{2k}(\mathbb{R})$ es única con excepción de un factor constante, y el grado del polinomio es mínimo para un espacio de dimensión d dado y con diferenciabilidad $2k$.

Estas funciones de Wendland se pueden escribir de una manera simple como

$$\Phi_{d,k} = (1 - r)_+^\ell p(r), \quad k \geq 0$$

donde $\ell = \lfloor d/2 \rfloor + k + 1$ es la exponenciación, $(\cdot)_+$ es la función de truncada determinada por

$$(x)_+ = \begin{cases} x, & x > 0 \\ 0, & x \leq 0 \end{cases}$$

$p(r)$ es un polinomio, $2k$ el orden de diferenciabilidad de la función

$$r = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|, \mathbf{x}, \mathbf{x}_j \in \mathbb{R}^d$$

En la tabla 2.3 tenemos las posibles selecciones de $\phi_{d,k}$ para una dimensión fija d (impar). El símbolo \doteq denota la igualdad hasta por un factor positivo.

El interpolante $S(\mathbf{x})$ con estas funciones de soporte compacto toma la forma

$$S(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \lambda_j \phi_{d,k}(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|)$$

Dimensión d	FBR	Diferenciabilidad $2k$
$d = 1$	$\phi_{1,0} = (1 - r)_+$	C^0
	$\phi_{1,1} \doteq (1 - r)_+^3 (3r + 1)$	C^2
	$\phi_{1,2} \doteq (1 - r)_+^5 (8r^2 + 5r + 1)$	C^4
$d \leq 3$	$\phi_{3,0} = (1 - r)_+^2$	C^0
	$\phi_{3,1} \doteq (1 - r)_+^4 (4r + 1)$	C^2
	$\phi_{3,2} \doteq (1 - r)_+^6 (35r^2 + 18r + 3)$	C^4
	$\phi_{3,3} \doteq (1 - r)_+^8 (32r^3 + 25r^2 + 8r + 1)$	C^6
$d \leq 5$	$\phi_{5,0} = (1 - r)_+^3$	C^0
	$\phi_{5,1} \doteq (1 - r)_+^5 (5r + 1)$	C^2
	$\phi_{5,2} \doteq (1 - r)_+^7 (16r^2 + 7r + 1)$	C^4

Tabla 2.3: FBRs de Wendland de soporte compacto.

2.3. Enfoque Hilbertiano

Con el objetivo discutir la estimación del error del interpolante mediante FBRs es necesaria su interpretación en un espacio de Hilbert. Comenzamos definiendo lo que es un núcleo reproductor para un espacio de Hilbert. Las funciones FBR definidas positivas son vistas como núcleo reproductor y los espacios generados por estos núcleos se llaman espacios nativos.

Un espacio de Hilbert real es un espacio vectorial, con un producto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle$ que es una una forma bilineal que cumple con las siguientes condiciones

$$\begin{aligned}
 \langle x + y, z \rangle &= \langle x, z \rangle + \langle y, z \rangle \\
 \langle \alpha x, y \rangle &= \alpha \langle x, y \rangle \\
 \langle x, y \rangle &= \langle y, x \rangle \\
 \langle x, x \rangle &\geq 0 \\
 \langle x, x \rangle = 0 &\Rightarrow x = 0
 \end{aligned}$$

Este producto interno induce una norma $\|\cdot\|$ vía $\|x\| = \langle x, x \rangle^{1/2}$. Esta norma induce una métrica $d(x, y) = \|x - y\|$ con la cual el espacio es completo. Es decir, toda sucesión de Cauchy converge a un elemento del espacio. Algunos ejemplos de espacios de Hilbert son

- $\mathbb{R}^n: \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \mathbf{x}^T \mathbf{y}$
- $L_2: \langle x, y \rangle = \int x(t)y(t)dt$
- $l_2: \langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} x_i y_i$

Ahora bien, el espacio de Hilbert L_2 es demasiado “grande”, contiene por ejemplo

muchas funciones que no son suaves lo que implica que no tiene un núcleo reproductor asociado. Un enfoque para obtener un espacio de funciones “suaves” es el de construir un espacio de Hilbert a partir del núcleo reproductor.

Definición 8 Sea \mathcal{H} un espacio de Hilbert real de funciones $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$. Una función $K : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ se llama núcleo reproductor de \mathcal{H} si

- $K(\mathbf{x}, \cdot) \in \mathcal{H}$ para toda $\mathbf{x} \in \Omega$
- $f(\mathbf{x}) = \langle f, K(\cdot, \mathbf{x}) \rangle_{\mathcal{H}}$ para toda $f \in \mathcal{H}$ y toda $\mathbf{x} \in \Omega$

donde $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}}$ es el producto interno del espacio de Hilbert \mathcal{H} .

Como observaciones principales tenemos que el núcleo reproductor es único y que existe una fuerte conexión entre la funcional de evaluación puntual y el núcleo reproductor.

Definición 9 Una funcional $\delta_{\mathbf{x}} : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{R}$ se llama funcional de evaluación puntual para $\mathbf{x} \in \Omega$ sobre \mathcal{H} si $\delta_{\mathbf{x}}(f) = f(\mathbf{x})$ para todo $\mathbf{x} \in \mathcal{H}$.

Para espacios de Hilbert y funciones $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, los siguientes enunciados son equivalentes

1. $\delta_{\mathbf{x}} \in \mathcal{H}^*$, $\mathbf{x} \in \Omega$, o sea, las evaluaciones son lineales y continuas.
2. \mathcal{H} tiene un núcleo reproductor.

La definición 8 nos muestra que \mathcal{H} consta de todas las funciones de la forma

$$f = \sum_{j=1}^N c_j K(\mathbf{x}_j, \cdot) \tag{2.14}$$

dato un $\mathbf{x}_j \in \Omega$.

Sea $f \in \mathcal{H}$, entonces el producto interior está dado por

$$\langle f, f \rangle_{\mathcal{H}} = \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N c_j c_k K(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k)$$

Lo que pretendemos hacer es que dado un espacio de Hilbert, construir el núcleo reproductor K asociado a \mathcal{H} . Entonces definimos a

$$H_K(\Omega) = \text{gen}\{K(\cdot, \mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \Omega\}$$

con la siguiente forma bilineal asociada

$$\left\langle \sum_{j=1}^N c_j K(\cdot, \mathbf{x}_j), \sum_{k=1}^N d_k K(\cdot, \mathbf{y}_k) \right\rangle = \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N c_j d_k K(\mathbf{x}_j, \mathbf{y}_k)$$

Definición 10 *Un espacio preHilbertiano H es un espacio lineal de dimensión infinita no completo, es decir, en el que no toda sucesión de Cauchy converge a un elemento del espacio H .*

Teorema 11 *Si $K : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathcal{R}$ es un núcleo simétrico estrictamente definido positivo, entonces la forma bilineal $\langle \cdot, \cdot \rangle_K$ define un producto interior en $H_K(\Omega)$. Más aún, $H_K(\Omega)$ es un espacio preHilbertiano con núcleo reproductor K .*

A continuación definimos el espacio nativo $\mathcal{N}_K(\Omega)$ de K , o espacio Hilbertiano definido a partir de K , como la completéz de $H_K(\Omega)$ con respecto a la K -norma $\|\cdot\|_K$ por lo que $\|f\|_K = \|f\|_{\mathcal{N}_K(\Omega)}$ para toda $f \in H_K(\Omega)$.

El siguiente teorema relaciona el concepto de espacios de Hilbert vía núcleo reproductor, identificando a los núcleos reproductores como funciones definidas positivas.

Teorema 12 *Sea \mathcal{N}_K el espacio nativo definido por el núcleo reproductor $K : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, entonces K es semi-definida positiva. K es definida positiva si y sólo si los funcionales de evaluación puntual son linealmente independientes en \mathcal{N}_K^* .*

Para el caso especial de las funciones estrictamente definidas positivas de la forma $\phi(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = K(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ y $\Omega = \mathbb{R}^d$ podemos dar una caracterización de los espacios nativos en términos de la transformada de Fourier generalizada .

Teorema 13 *Sea $\Phi \in C(\mathbb{R}^d) \cap L_1(\mathbb{R}^d)$ una función de valor real estrictamente definida positiva. Definimos*

$$\mathcal{H}_\Phi(\mathbb{R}^d) = \left\{ f \in L_2(\mathbb{R}^d) \cap C(\mathbb{R}^d) : \frac{\hat{f}}{\sqrt{\hat{\Phi}}} \in L_2(\mathbb{R}^d) \right\}$$

y este espacio tiene la siguiente forma bilineal

$$\langle f, g \rangle_{\mathcal{H}_\Phi(\mathbb{R}^d)} = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d}} \left\langle \frac{\hat{f}}{\sqrt{\hat{\Phi}}}, \frac{\hat{g}}{\sqrt{\hat{\Phi}}} \right\rangle_{L_2(\mathbb{R}^d)} = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d}} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\hat{f}(\omega) \overline{\hat{g}(\omega)}}{\hat{\Phi}(\omega)} d\omega$$

Entonces $\mathcal{H}_\Phi(\mathbb{R}^d)$ es un espacio de Hilbert real con producto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}_\Phi(\mathbb{R}^d)}$ y núcleo reproductor $\Phi(\cdot - \cdot)$. Así, $\mathcal{H}_\Phi(\mathbb{R}^d)$ es el espacio nativo de Φ en \mathbb{R}^d , es decir, $\mathcal{H}_\Phi(\mathbb{R}^d) = \mathcal{N}_\Phi(\mathbb{R}^d)$ y ambos productos interiores coinciden.

Otra caracterización del espacio nativo se puede formular en términos de las funciones propias de un operador lineal asociado con el núcleo reproductor. Este operador, $T_\Phi : L_2(\Omega) \rightarrow L_2(\Omega)$, está dado por

$$T_\Phi(v)(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{y})v(\mathbf{y})d\mathbf{y}, \quad v \in L_2(\Omega), \quad \mathbf{x} \in \Omega$$

Para los valores propios λ_k , $k = 1, 2, \dots$ y funciones propias ϕ_k de este operador el teorema de Mercer establece

Teorema 14 *Sea $\Phi(\cdot, \cdot)$ un núcleo continuo definido positivo que satisface*

$$\int_{\Omega} \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{y})v(\mathbf{x})v(\mathbf{y})d\mathbf{x}d\mathbf{y} \geq 0, \text{ para todo } v \in L_2(\Omega), \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Omega \quad (2.15)$$

Entonces Φ puede representarse por

$$\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \phi_k(\mathbf{x})\phi_k(\mathbf{y}), \quad (2.16)$$

donde λ_k son los valores propios no negativos y ϕ_k son las funciones propias de T_Φ (L_2 -ortonormal). Además esta representación es absoluta y uniformemente convergente.

Se puede interpretar la condición dada en (2.15) como un tipo de integral definida positiva. Como es usual, los valores propios y funciones propias satisfacen $T_\Phi \phi_k = \lambda_k \phi_k$ o

$$\int_{\Omega} \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{y})\phi_k(\mathbf{y})d\mathbf{y} = \lambda_k \phi_k(\mathbf{x}), \quad k = 1, 2, \dots$$

En general, el teorema de Mercer nos permite construir un núcleo reproductor de un espacio de Hilbert \mathcal{H} vía representando las funciones en \mathcal{H} como una combinación lineal infinita de las funciones propias, i.e.,

$$\mathcal{H} = \left\{ f : f = \sum_{k=1}^{\infty} c_k \phi_k \right\}.$$

Es claro que el núcleo Φ está contenido en \mathcal{H} pues tiene una expansión de funciones propias (2.16). El producto interno para \mathcal{H} está dado por

$$\langle f, g \rangle_{\mathcal{H}} = \left\langle \sum_{j=1}^{\infty} c_j \phi_j, \sum_{k=1}^{\infty} d_k \phi_k \right\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{c_k d_k}{\lambda_k}$$

donde hemos usado la \mathcal{H} -ortogonalidad

$$\langle \phi_j, \phi_k \rangle_{\mathcal{H}} = \frac{\delta_{jk}}{\sqrt{\lambda_j} \sqrt{\lambda_k}}$$

de las funciones propias.

Podemos notar que Φ es de hecho el núcleo reproductor de \mathcal{H} pues la expansión de funciones propias (2.16) de Φ y la ortogonalidad de las funciones propias implican

$$\begin{aligned} \langle f, \Phi(\cdot, \mathbf{x}) \rangle_{\mathcal{H}} &= \left\langle \sum_{j=1}^{\infty} c_j \phi_j, \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \phi_k \phi_k(\mathbf{x}) \right\rangle_{\mathcal{H}} \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{c_k \lambda_k \phi_k(\mathbf{x})}{\lambda_k} \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} c_k \phi_k(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

Finalmente, se tiene que el espacio nativo $\mathcal{N}_{\Phi}(\Omega)$ está dado por

$$\mathcal{N}_{\Phi}(\Omega) = \left\{ f \in L_2(\Omega) : \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_k} |\langle f, \phi_k \rangle_{L_2(\Omega)}|^2 < \infty \right\}$$

y el producto interno de este espacio puede escribirse como

$$\langle f, g \rangle_{\mathcal{N}_{\Phi}} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_k} \langle f, \phi_k \rangle_{L_2(\Omega)} \langle g, \phi_k \rangle_{L_2(\Omega)}, \quad f, g \in \mathcal{N}_{\Phi}(\Omega).$$

Como $\mathcal{N}_{\Phi}(\Omega)$ es un subespacio de $L_2(\Omega)$ esto corresponde con los elementos $c_k = \langle f, \phi_k \rangle_{L_2(\Omega)}$ de los coeficientes de la transformada de Fourier generalizada que se discute en los siguientes párrafos.

Esta caracterización de los espacios nativos para funciones definidas positivas se puede extender para FBRs condicionalmente definidas positivas. A continuación, ilustraremos de dónde viene el teorema 13 y de qué forma se puede extender para FBRs condicionalmente definidas positivas.

Primero enunciemos el Teorema clásico de Bochner :

Teorema 15 *Una función Φ es definida positiva si y sólo si, existe una función no decreciente acotada $\omega \in L^1(\mathbb{R}^d)$, tal que Φ es la transformada de Fourier de ω , i.e.*

$$\Phi = \hat{\omega}(\boldsymbol{\xi})$$

donde

$$\hat{\omega}(\boldsymbol{\xi}) = \int_{\mathbb{R}^d} \omega(\mathbf{x}) e^{-2\pi i \langle \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi} \rangle} d\mathbf{x}$$

y $\langle \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi} \rangle$, $\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^d$ es el producto interior en \mathbb{R}^d .

El teorema de Bochner podría caracterizar al espacio nativo de una función condicionalmente definida positiva, pero esto no es posible por las siguientes razones:

- Requiere que la FBR tenga transformada clásica de Fourier, cosa que no es cierto para la mayoría de las FBR.
- Sólo es válido para funciones estrictamente definidas positivas.

Esto nos conduce a trabajar con la transformada de Fourier generalizada. Sea

$$B = \{\Phi \in C(\mathbb{R}^d) : |\Phi(\mathbf{x})| \leq |p(\mathbf{x})| \text{ para algún } p \in \mathbb{P}^T\}$$

donde \mathbb{P}^T es el espacio de polinomios sobre \mathbb{R}^d . Ahora podemos definir la transformada generalizada

Definición 11 *La Transformada de Fourier generalizada de $\Phi \in B$, es una funcional lineal del espacio de funciones de prueba de descenso rápido dado por:*

$$S = \{\varphi \in C^\infty(\mathbb{R}^d) \mid \lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty} \mathbf{x}^\mu D^\mu \varphi(\mathbf{x}) = 0 \quad \mu, \nu \in \mathbb{N}_+^d\} \quad (2.17)$$

Cualquier funcional acotada de S es llamada **distribución temperada**.

Ahora bien, la transformada clásica de Fourier de φ está dada por:

$$\hat{\varphi}(\boldsymbol{\xi}) = \int_{\mathbb{R}^d} \varphi(\mathbf{x}) e^{-2\pi i \langle \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi} \rangle} d\mathbf{x}$$

con inversa:

$$\check{\varphi}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi} \int \varphi(\boldsymbol{\xi}) e^{2\pi i \langle \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi} \rangle} d\boldsymbol{\xi}$$

Usando esta notación, podemos reescribir la transformada de Fourier generalizada como:

Definición 12 Dada $\Phi \in B$. Entonces la transformada de Fourier generalizada $\hat{\Phi}$ de Φ es la funcional lineal de B dada por:

$$\hat{\Phi}(\phi) = \int_{\mathbb{R}^d} \Phi(\mathbf{x}) \hat{\varphi}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (2.18)$$

donde $\varphi \in S$.

Definición 13 Sea $\Phi \in B$. Entonces su m -ésima transformada de Fourier generalizada esta definida por:

$$(\hat{\Phi})_m(\phi) = \int_{\mathbb{R}^d} \Phi(\mathbf{x}) \hat{\varphi}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (2.19)$$

donde $\varphi \in S_m$ y

$$S_m = \{\varphi \in S \mid \int_{\mathbb{R}^d} q(\mathbf{x}) \hat{\varphi}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 0, \quad q \in \mathbb{P}^{m-1}\}$$

A partir de aquí usamos un importante teorema debido a Madych y Nelson [63].

Teorema 16 Sea $\Phi \in B$ tal que:

$$\Phi = (\hat{\omega})_{2m} \quad (2.20)$$

donde ω es una función no negativa en \mathbb{R}^d que cumple:

$$\int_{|\xi| \leq 1} |\xi|^{2m} \omega(\xi) d\xi < \infty \quad y \quad \int_{|\xi| \geq 1} \omega(\xi) d\xi < \infty \quad (2.21)$$

Entonces para N puntos arbitrarios $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N$ en \mathbb{R}^d , Φ es condicionalmente definida positiva de orden m

A continuación tenemos las siguientes definiciones.

Definición 14 Un semi-producto interior es una forma bilineal que posee todas las características de un producto interior, excepto que no es definida positiva. Esto último significa que el espacio nulo de la forma bilineal no es el cero.

Definición 15 Un semi espacio de Hilbert H es un espacio de Hilbert equipado con un semi-producto interior.

Definición 16 Un semi-núcleo es un núcleo reproductor asociado a un semi producto interior.

En relación a la definición 16, si el espacio de Hilbert se descompone en la suma directa del espacio nulo de la semi norma más su complemento ortogonal, entonces el semi-núcleo reproductor es un núcleo reproductor en el complemento ortogonal.

Entonces puede probarse, que si ω satisface las condiciones del teorema 16, el espacio dado por:

$$H_{\omega,m} = \{u | (\hat{u})_m \in L^2(\omega^{-1})\}$$

con el semi-producto interior:

$$(v, u)_{\omega,m} = \int_{\mathbb{R}^d} (\hat{u})_m (\overline{\hat{v}})_m$$

es un semi espacio de Hilbert. Notemos que:

$$v \in H_{\omega,m}, \quad (v, u)_{\omega,m} = 0 \quad \text{si y sólo si } v \in \mathbb{P}^{m-1}$$

Para resolver el problema variacional en $H_{\omega,m}$, es necesario garantizar la existencia de un semi-núcleo reproductor. Este resultado esta dado por el siguiente Teorema:

Teorema 17 *Sea $\Phi \in C(\mathbb{R}^d)$ una función radial tal que se cumplen (2.20) y (2.21). Entonces Φ es condicionalmente positiva definida de orden m en \mathbb{R}^d . Además, la función $h : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, definida por $h(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \Phi(\mathbf{x} - \mathbf{y})$, es el semi-núcleo reproductor de $H_{\omega,m}$.*

Para caracterizar el núcleo reproductor $K_{\omega,m}$ de $H_{\omega,m}$, note que si definimos el espacio

$$H_{\omega,m}^0 = \{u \in H_{\omega,m} : |u|_{\omega,m} = 0\},$$

entonces $H_{\omega,m} = H_{\omega,m}^0 \oplus \mathbb{P}^{m-1}$. Si denotamos como K^p al núcleo reproductor de \mathbb{P}^{m-1} entonces tenemos que $K_{\omega,m} = h + K^p$. Dado que el núcleo reproductor de la suma directa de dos espacios es la suma de los núcleos reproductores correspondientes.

Ahora podemos enunciar el siguiente teorema que nos da la caracterización del espacio nativo para las funciones condicionalmente definidas positivas.

Teorema 18 *Sea $\Phi \in C(\mathbb{R}^d)$ un función par condicionalmente definida positiva de orden $m \in \mathbb{N}_0$. Suponer además que Φ tiene transformada de Fourier generalizada $\hat{\Phi}$ de orden m que es continua en $\mathbb{R}^d \setminus 0$. Sea \mathcal{G} el espacio vectorial real que consiste de todas la funciones $f \in C(\mathbb{R}^d)$ que crecen lentamente y que tienen una transformada*

de Fourier generalizada \hat{f} de orden $m/2$ que satisface $\hat{f}/\sqrt{\hat{\Phi}} \in L_2(\mathbb{R}^d)$. Dotamos \mathcal{G} con la forma bilineal simétrica

$$(f, g)_{\mathcal{G}} = (2\pi)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\hat{f}(\omega) \overline{\hat{g}(\omega)}}{\hat{\Phi}(\omega)}$$

Entonces \mathcal{G} es el espacio nativo de Φ , i.e. $\mathcal{G} = \mathcal{N}_{\Phi}(\mathbb{R}^d)$, y el producto semi-interior $(\cdot, \cdot)_{\mathcal{N}_{\Phi}(\mathbb{R}^d)}$ coincide con el producto semi-interior $(\cdot, \cdot)_{\mathcal{G}}$. Más aún, cada $f \in \mathcal{N}_{\Phi}(\Omega)$ tiene la representación

$$f(\mathbf{x}) = \Pi_{\mathcal{P}} f(\mathbf{x}) + (2\pi)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} \hat{f}(\omega) \left(e^{i\mathbf{x}^T \omega} - \sum_{k=1}^Q p_k(\mathbf{x}) e^{i\boldsymbol{\xi}_k^T \omega} \right) d\omega$$

Finalmente y para completar lo referente a funciones definidas positivas, además de la caracterización mediante funciones propias, el teorema 13 se puede generalizar para un conjunto compacto mediante el siguiente teorema:

Teorema 19 *Sea Φ un núcleo simétrico definido positivo sobre un conjunto compacto $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$. Entonces su espacio nativo está dado por*

$$\mathcal{N}_{\Phi}(\Omega) = \left\{ f \in L_2(\Omega) : \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\rho_n} |(f, \varphi_n)_{L_2(\Omega)}|^2 < \infty \right\}$$

y el producto interno tiene la representación

$$(f, g)_{\mathcal{N}_{\Phi}} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\rho_n} (f, \varphi_n)_{L_2(\Omega)} (g, \varphi_n)_{L_2(\Omega)}, \quad f, g \in \mathcal{N}_{\Phi}(\Omega)$$

A continuación abordaremos la convergencia del interpolante. Será conveniente trabajar con la representación de Lagrange para el interpolante S . Esta idea fue propuesta por Wu and Schaback [72]. Ya hemos comentado que para Φ estrictamente definida positiva, el sistema lineal

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{y}$$

con $A_{ij} = \Phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$, $i, j = 1, \dots, N$, $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \dots, \lambda_N)^T$ y $\mathbf{y} = (f(\mathbf{x}_1), \dots, f(\mathbf{x}_N))$ tiene solución única. Ahora consideraremos algo más general, $A_{ij} = \Phi(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$.

A fin de obtener las funciones cardinales base u_j^* , $j = 1, \dots, N$ con la propiedad

$$u_j^*(\mathbf{x}_i) = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

para $i, j = 1, \dots, N$ y con la condición $S(\mathbf{x}_i) = y_i$, sea el sistema lineal

$$\mathbf{A}\mathbf{u}^*(\mathbf{x}) = \mathbf{b}(\mathbf{x})$$

donde $A_{ij} = \Phi(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$, $\mathbf{u}^* = (u_1^*, \dots, u_N^*)^T$ y $\mathbf{b} = (\Phi(\cdot, \mathbf{x}_1), \dots, \Phi(\cdot, \mathbf{x}_N))^T$.

Para poder estimar una cota del error entre el interpolante y los datos, necesitamos la función potencia. Sea $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$. Entonces dada $\Phi \in C(\Omega \times \Omega)$ y cualquier conjunto de puntos distintos $X = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\} \subseteq \Omega$ y cualquier vector $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^N$ definimos la forma cuadrática

$$Q(\mathbf{u}) = \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{x}) - 2 \sum_{j=1}^N u_j \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j) + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N u_i u_j \Phi(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j);$$

con esto podemos definir

Definición 17 Sea $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ y $\Phi \in C(\Omega \times \Omega)$ una función estrictamente definida positiva en \mathbb{R}^d . Para cualesquiera puntos distintos $X = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\} \subseteq \Omega$ la función potencia se define por

$$[P_{\Phi, X}(\mathbf{x})]^2 = Q(\mathbf{u}^*(\mathbf{x}))$$

donde \mathbf{u}^* es el vector de funciones cardinales dadas anteriormente.

Con lo anterior, podemos dar una cota genérica estimada del error

Teorema 20 Sea $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ un conjunto abierto, y supongamos $\Phi \in C^{2k}(\Omega \times \Omega)$ una función condicionalmente definida positiva en Ω de orden m con espacio nativo \mathcal{N}_{Φ} . Supongamos además que X es m -unisolvante. Denotemos al interpolante para $f \in \mathcal{N}_{\Phi}(\Omega)$ en X por S entonces para cada $\mathbf{x} \in \Omega$

$$|f(\mathbf{x}) - S(\mathbf{x})| \leq P_{\Phi, X}(\mathbf{x}) \|f\|_{\mathcal{N}_{\Phi}(\Omega)}$$

Por otro lado, si queremos expresar esta estimación en términos de la densidad de nodos para nodos con distribución no uniforme X , requerimos de una distancia

conocida como “fill distance” la cual se define como

$$h = h_{X,\Omega} = \sup_{\mathbf{x} \in \Omega} \min_{\mathbf{x}_i \in X} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|_2$$

Esta medida puede verse como el disco más grande centrado en un nodo de X que no contiene ningún otro punto de X . Entonces como el interpolante radial tiene la característica de que los nodos pueden ser aleatorios, es conveniente estimar la cota del error en términos de esta distancia. Para dar un teorema que relacione esta distancia primero definimos lo siguiente.

Definición 18 *Un conjunto $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ se dice que satisface la condición de cono interior si existe un ángulo $\theta \in (0, \pi/2)$ y un radio $r > 0$ tal que para cada $\mathbf{x} \in \Omega$ existe un vector unitario $\xi(\mathbf{x})$ tal que el cono*

$$C(\mathbf{x}, \xi(\mathbf{x}), \theta, r) = \{\mathbf{x} + \lambda \mathbf{y} : \mathbf{y} \in \mathbb{R}^d, \|\mathbf{y}\|_2 = 1, \mathbf{y}^T \xi(\mathbf{x}) \geq \cos \theta, \lambda \in [0, r]\}$$

está contenido en Ω .

Teorema 21 *Sea $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ abierto y acotado que satisface la condición de cono interior. Sea $\Phi \in C^{2k}(\Omega \times \Omega)$ simétrica y estrictamente condicionalmente definida positiva de orden m en \mathbb{R}^d . Denotemos al interpolante de $f \in \mathcal{N}_\Phi(\Omega)$ en X $(m-1)$ -unisolvante por S . Fijar $\alpha \in \mathbb{N}_0^d$ con $|\alpha| \leq k$. Entonces existen constantes positivas h_0 y C independientes de \mathbf{x} , f y Φ tal que*

$$|D^\alpha f(\mathbf{x}) - D^\alpha S(\mathbf{x})| \leq CC_\Phi(\mathbf{x})^{1/2} h_{X,\Omega}^{k-|\alpha|} |f|_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)}$$

con $h_{X,\Omega} \leq h_0$.

En el teorema anterior la cota del error está en términos de C_Φ . Se puede refinar esta cota con el objetivo de no tener esa dependencia. Concretamente tenemos que para cada $\ell \in \mathbb{N}$ y $|\alpha| < \ell$ se tiene

$$|D^\alpha f(\mathbf{x}) - D^\alpha S(\mathbf{x})| \leq C_\ell h^{\ell-|\alpha|} |f|_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)}$$

siempre que $f \in \mathcal{N}_\Phi(\Omega)$. Una cantidad considerable de trabajo se ha hecho en la investigación de la dependencia de C_ℓ sobre ℓ , ver por ejemplo [57].

Por otro lado, ver [64, 58], es posible derivar cotas más precisas para Gaussianas y multicuádricos inversos cuya velocidad de convergencia es exponencial. Para esto tenemos el siguiente teorema.

Teorema 22 Sea Ω un cubo en \mathbb{R}^d . Sea $\Phi = \phi(\|\cdot\|)$ un función radial estricta condicionalmente definida positiva tal que $\psi = \phi(\sqrt{\cdot})$ satisface $|\psi^{(\ell)}(r)| \leq \ell!M^\ell$ para todo entero $\ell \geq \ell_0$ y todo $r \geq 0$, donde M es una constante positiva fija. Entonces existe una constante c tal que para cualquier $f \in \mathcal{N}_\Phi(\Omega)$

$$\|f - S\|_{L_\infty(\Omega)} \leq e^{\frac{-c}{h_{\mathcal{X},\Omega}}} \|f\|_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)}$$

para todo conjunto de datos \mathcal{X} con una “fill distance” $h_{\mathcal{X},\Omega}$ suficientemente chica.

Además, si ψ aún satisface $|\psi^{(\ell)}(r)| \leq M^\ell$, entonces

$$\|f - S\|_{L_\infty(\Omega)} \leq e^{\frac{-c|\log h_{\mathcal{X},\Omega}|}{h_{\mathcal{X},\Omega}}} \|f\|_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)}$$

para $h_{\mathcal{X},\Omega}$ suficientemente chica.

En la tabla 2.4 mostramos algunas tasas de convergencia para distintas FBRs donde $\alpha > 0$ e independiente de h .

Nombre	FBR	Tasa de Convergencia
Gaussiana	$\phi(r) = e^{-cr^2}$	$e^{-\alpha/h}$
Multicuadrado	$\phi(r) = \sqrt{r^2 + c^2}$	$e^{-\alpha/h}$
Multicuadrado Inv.	$\phi(r) = (\sqrt{r^2 + c^2})^{-1/2}$	$e^{-\alpha/h}$
Potencia	$\phi(r) = r^\beta$	h^β
Placa delgada	$\phi(r) = r^{2d} \log r$	h^d

Tabla 2.4: Tasas de convergencia para algunas FBR.

Es importante hacer notar que la FBR placa delgada, la cual usamos en esta tesis, converge algebraicamente.

Hemos expuesto la base teórica de la interpolación con FBRs. Para relacionar todo esto con la solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales están los trabajos de Kansa [33, 34], donde por primera vez se propone la solución numérica de EPDs elípticas, parabólicas e hiperbólicas mediante aproximación vía funciones radiales. Esto consiste en aproximar la solución u de la EDP por (2.1), en donde las derivadas parciales son aplicadas a la función radial y el problema original se transforma en resolver un sistema de ecuaciones lineales del tipo (2.2). En específico utilizó FBRs multicuadrado en dos dimensiones tanto en malla regular como datos aleatorios, obteniendo excepcional precisión. Este enfoque es conocido como método de colocación asimétrico y que elegimos implementar debido a la buena evidencia numérica que ha reportado, ver [24]. El detalle de este enfoque junto con el enfoque simétrico se trabajan en el siguiente capítulo.

Solución numérica de EDPs usando colocación

En este capítulo expondremos los métodos de colocación asimétrica y simétrica para problemas estacionarios y un problema dependiente del tiempo.

3.1. Problema estacionario

3.1.1. Colocación asimétrica

Consideremos la ecuación constitutiva del problema estacionario

$$\begin{aligned}Lu(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}), \forall \mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^d \\ Bu(\mathbf{x}) &= g(\mathbf{x}), \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega \subset \mathbb{R}^d\end{aligned}\tag{3.1}$$

donde L es el operador diferencial, B es el operador de frontera, $f(\mathbf{x})$ y $g(\mathbf{x})$ son funciones conocidas.

La idea central radica en suponer que la solución $u(\mathbf{x})$ es aproximada por una combinación lineal de FBRs

$$u(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \lambda_j \phi_j(\|\mathbf{x} - \mathbf{c}_j\|) + p(\mathbf{x})\tag{3.2}$$

donde $\phi_j(\|\mathbf{x} - \mathbf{c}_j\|) : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ es una FBR con centros $\mathbf{c}_j \in \mathbb{R}^d$. $\lambda_j, j = 1, \dots, N$ son los coeficientes de las FBR desconocidas y $p(\mathbf{x})$ es un polinomio de grado m .

Para resolver la ecuación (3.1) definimos los conjuntos de nodos

$$\begin{aligned} C_1 &= \{(\mathbf{c}_i) |_{i,\dots,n_d} \in \Omega\} \\ C_2 &= \{(\mathbf{c}_i) |_{n_d+1,\dots,n_d+n_b} \in \partial\Omega\} \\ C &= C_1 \cup C_2 \end{aligned} \quad (3.3)$$

donde n_d son puntos interiores y n_b son puntos frontera y total de nodos $N = n_d + n_b$.

Ahora sustituimos la ecuación (3.2) en la ecuación constitutiva (3.1) para obtener

$$Lp(\mathbf{x}_i) + \sum_{j=1}^N \lambda_j L^x \phi_j(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|) = f_i, \quad i = 1, \dots, n_d \quad (3.4)$$

$$Bp(\mathbf{x}_i) + \sum_{j=1}^N \lambda_j B^x \phi_j(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|) = g_i, \quad i = n_d + 1, \dots, n_d + n_b \quad (3.5)$$

donde $L^x \phi_j(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|)$ y $B^x \phi_j(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|)$ denotan la aplicación a los operadores diferencial y de frontera sobre la FBR ϕ como una función del primer argumento y evaluada en \mathbf{x}_i . Junto con las condiciones

$$\sum_{j=1}^N \lambda_j q(x_j) = 0, \quad \text{para todo } q \in \mathbb{P}^m$$

las ecuaciones (3.4) y (3.5) las podemos escribir en forma matricial como

$$\begin{bmatrix} \mathbf{M}_{L^x} & \mathbf{P}_L \\ \mathbf{M}_{B^x} & \mathbf{P}_B \\ \mathbf{P}^T & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\lambda} \\ \mathbf{a} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

donde

$$\begin{aligned} (\mathbf{M}_{L^x})_{ij} &= L^x \phi_j(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|), & \mathbf{x}_i \in C_1, \mathbf{c}_j \in C \\ (\mathbf{M}_{B^x})_{i-n_d,j} &= B^x \phi_j(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|) & \mathbf{x}_i \in C_2, \mathbf{c}_j \in C \\ (\mathbf{P}_L)_{ij} &= Lp_j(x_i) & \mathbf{x}_i \in C_1 \\ (\mathbf{P}_B)_{i-n_b,j} &= p_j(x_i) & \mathbf{x}_i \in C_2 \end{aligned}$$

y p_j denota el j -th término del polinomio p , y \mathbf{a} son coeficientes relacionados con la base $\{p_1, p_2, \dots, p_{\dim \mathbb{P}^m}\}$. Las dimensiones de cada submatriz las detallamos a continuación para el caso especial en donde el polinomio es de grado dos bidimensional.

$\mathbf{M}_{L^x} \in \mathbb{R}^{n_d \times N}$, $\mathbf{P}_L \in \mathbb{R}^{n_d \times 6}$, $\mathbf{M}_{B^x} \in \mathbb{R}^{n_b \times N}$, $\mathbf{P}_B \in \mathbb{R}^{n_b \times 6}$, $\mathbf{P}^T \in \mathbb{R}^{6 \times N}$ y $\mathbf{0} \in \mathbb{R}^{6 \times 6}$.

Cabe resaltar que para este esquema de colocación aún no está demostrada la invertibilidad de la matriz de coeficientes, siendo este un problema abierto.

3.1.2. Colocación simétrica

Ahora formularemos la colocación simétrica para el problema (3.1). En este esquema la función $u(\mathbf{x})$ es aproximada por

$$u(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n_d} \lambda_j L^c \phi_j(\|\mathbf{x} - \mathbf{c}_j\|) + \sum_{j=n_d+1}^{n_d+n_b} \lambda_j B^c \phi_j(\|\mathbf{x} - \mathbf{c}_j\|) + p(\mathbf{x}) \quad (3.6)$$

donde L^c y B^c son operadores aplicados a la FBR como una función en el segundo argumento y p un polinomio de grado m .

Ahora sustituimos la ecuación (3.6) en (3.1) y usando los nodos definidos en (3.3), obtenemos

$$\begin{aligned} Lp(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^{n_d} \lambda_j L^x L^c \phi_j(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{c}_j\|) \\ + \sum_{j=n_d+1}^{n_d+n_b} \lambda_j L^x B^c \phi_j(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|) = f_i, \quad i = 1, \dots, n_d, \end{aligned} \quad (3.7)$$

$$\begin{aligned} Bp(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^{n_d} \lambda_j B^x L^c \phi_j(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|) \\ + \sum_{j=n_d+1}^{n_d+n_b} \lambda_j B^x B^c \phi_j(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|) = g_i, \quad i = n_d + 1, \dots, n_d + n_b. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Tomando en cuenta que $L^c \phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$ y $L^x \phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$ son iguales en valor absoluto, en términos de matrices y en forma simétrica, las ecuaciones (3.7) y (3.8) se escriben como,

$$\begin{bmatrix} \mathbf{M}_{L^x L^c} & \mathbf{M}_{L^x} & \mathbf{P}_L \\ \mathbf{M}_{L^c}^T & \mathbf{M}_B & \mathbf{P}_B \\ \mathbf{P}_L^T & \mathbf{P}_B^T & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\lambda} \\ \mathbf{a} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

donde

$$\begin{aligned}
 (\mathbf{M}_{L^x L^c})_{ij} &= L^x L^c \phi_j (\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|), & \mathbf{x}_i, \mathbf{c}_j &\in C_1 \\
 (\mathbf{M}_{L^x})_{i,j-n_d} &= L^x \phi_j (\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|), & \mathbf{x}_i &\in C_1, \mathbf{c}_j \in C_2 \\
 (\mathbf{M}_{L^c})_{i,j-n_d} &= L^c \phi_j (\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|), & \mathbf{x}_i &\in C_1, \mathbf{c}_j \in C_2 \\
 (\mathbf{M}_B)_{i-n_d,j-n_d} &= \phi_j (\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|), & \mathbf{x}_i, \mathbf{c}_j &\in C_2
 \end{aligned}$$

y \mathbf{P}_L y \mathbf{P}_B como en la sección asimétrica.

En este esquema la matriz de coeficientes del sistema lineal de ecuaciones es invertible; pero en contraste, es menos usado que el esquema asimétrico debido a que se requiere más diferenciabilidad en la FBR y en problemas no lineales se incrementa su complejidad.

3.2. Problema no estacionario

Aquí presentamos la formulación de los esquemas de colocación asimétrico y simétrico para un problema dependiente del tiempo, específicamente para la ecuación de convección-difusión.

3.2.1. Colocación asimétrica

Consideremos la ecuación constitutiva del problema no estacionario

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial u(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + Lu(\mathbf{x}, t) &= f(\mathbf{x}, t), \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^d, \quad t > 0 \\
 Bu(\mathbf{x}, t) &= g(\mathbf{x}, t) \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega \subset \mathbb{R}^d, \quad t > 0
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

donde L es el operador diferencial de convección-difusión y B es el operador de frontera. La ecuación (3.9) requiere de la condición inicial de la forma

$$u(\mathbf{x}, t) = u_0(\mathbf{x}), \quad t = 0 \tag{3.10}$$

donde $f(\mathbf{x}, t)$, $g(\mathbf{x}, t)$ y $u_0(\mathbf{x})$ son funciones conocidas.

De nuevo suponemos que la solución $u(\mathbf{x}, t)$ es aproximada por una combinación lineal de FBRs

$$u(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^N \lambda_j(t) \phi_j(\|\mathbf{x} - \mathbf{c}_j\|) \tag{3.11}$$

donde $\lambda_j(t), j = 1, \dots, N$ son los coeficientes de las FBR desconocidas y dependientes del tiempo. Aquí por claridad en la notación omitimos utilizar polinomio como en el caso estacionario.

Para resolver la ecuación (3.9) usamos el conjunto de nodos C definidos en (3.3). Ahora sustituimos la ecuación (3.11) en la ecuación constitutiva (3.9) para obtener

$$\sum_{j=1}^N \frac{d\lambda_j}{dt} \phi_j(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|) = f_i(t) - \sum_{j=1}^N \lambda_j L^x \phi_j(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|), \quad i = 1, \dots, n_d \quad (3.12)$$

$$\sum_{j=1}^N B^x \phi_j(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|) = g_i(t), \quad i = n_d + 1, \dots, n_d + n_b \quad (3.13)$$

donde $L^x \phi_j(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|)$ y $B^x \phi_j(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|)$ denotan la aplicación a los operadores convección difusión y de frontera sobre la FBR ϕ como una función del primer argumento y evaluada en \mathbf{x}_i .

Las ecuaciones (3.12) y (3.13) las podemos escribir en forma matricial como

$$\Phi_d \frac{d\boldsymbol{\lambda}}{dt} = \mathbf{f} - L^x \Phi_d \boldsymbol{\lambda} \quad (3.14)$$

$$B^x \Phi_b \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{g} \quad (3.15)$$

donde $\Phi_d, L^x \Phi_d \in \mathbb{R}^{n_d \times N}$, $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^N$, $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^{n_d}$, $B^x \Phi_b \in \mathbb{R}^{n_b \times N}$ y $\mathbf{g} \in \mathbb{R}^{n_b}$.

Ahora discretizaremos el tiempo de la ecuación (3.14). Una posibilidad es el método RBF theta. Así, usando la notación $\boldsymbol{\lambda}^{n+1} = \boldsymbol{\lambda}(t^{n+1})$, donde $t^{n+1} = t^n + \delta t$ e introduciendo θ -ponderación ($0 \leq \theta \leq 1$), obtenemos

$$\Phi_d \left\{ \frac{\boldsymbol{\lambda}^{n+1} - \boldsymbol{\lambda}^n}{\delta t} \right\} = \mathbf{f}^{n+1} - \{\theta L^x \Phi_d \boldsymbol{\lambda}^{n+1} + (1 - \theta) L^x \Phi_d \boldsymbol{\lambda}^n\} \quad (3.16)$$

$$B^x \Phi_b \boldsymbol{\lambda}^{n+1} = \mathbf{g}^{n+1} \quad (3.17)$$

Si combinamos las ecuaciones (3.16) y (3.17) entonces

$$\begin{bmatrix} \Phi_d + \theta \delta t L^x \Phi_d \\ B^x \Phi_b \end{bmatrix} \boldsymbol{\lambda}^{n+1} = \begin{bmatrix} \Phi_d - (1 - \theta) \delta t L^x \Phi_d \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \boldsymbol{\lambda}^n + \begin{bmatrix} \delta t \mathbf{f}^{n+1} \\ \mathbf{g}^{n+1} \end{bmatrix} \quad (3.18)$$

donde $\mathbf{0} \in \mathbb{R}^{n_b \times N}$.

La ecuación (3.18) la podemos escribir como

$$\boldsymbol{\lambda}^{n+1} = \mathbf{H}_+^{-1} \mathbf{H}_- \boldsymbol{\lambda}^n + \mathbf{H}_+^{-1} \mathbf{F}^{n+1} \quad (3.19)$$

donde

$$\mathbf{H}_+ = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Phi}_d + \theta \delta t L^x \boldsymbol{\Phi}_d \\ B^x \boldsymbol{\Phi}_b \end{bmatrix}, \quad \mathbf{H}_- = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Phi}_d - (1 - \theta) \delta t L^x \boldsymbol{\Phi}_d \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

y

$$\mathbf{F}^{n+1} = \begin{bmatrix} \delta t \mathbf{f}^{n+1} \\ \mathbf{g}^{n+1} \end{bmatrix}$$

La ecuación (3.11) se puede escribir como

$$\mathbf{u} = \mathbf{A} \boldsymbol{\lambda} \quad (3.20)$$

donde

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Phi}_d \\ \boldsymbol{\Phi}_b \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times N}$$

denota la matriz de Gram.

Finalmente, sustituyendo la ecuación (3.20) en (3.19) obtenemos en su forma iterativa

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{A} \mathbf{H}_+^{-1} \mathbf{H}_- \mathbf{A}^{-1} \mathbf{u}^n + \mathbf{A} \mathbf{H}_+^{-1} \mathbf{F}^{n+1} \quad (3.21)$$

Observemos que para el valor $\theta = \frac{1}{2}$, el método es incondicionalmente estable. Por otro lado para la matriz \mathbf{H}_+ no hay prueba de que sea invertible si $\theta > 0$ [24], así este esquema no es bien planteado en este caso. Si $\theta = 0$, solo la matriz de Gram \mathbf{A} requiere ser invertible. Como los puntos de colocación son distintos, la invertibilidad de \mathbf{A} se garantiza por un resultado importante debido a Micchelli [41].

3.2.2. Colocación simétrica

Ahora formularemos la colocación simétrica para el mismo problema. En este esquema la función $u(\mathbf{x}, t)$ es aproximada por

$$u(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^{n_d} \lambda_j(t) L^c \phi_j(\|\mathbf{x} - \mathbf{c}_j\|) + \sum_{j=n_d+1}^{n_d+n_b} \lambda_j(t) B^c \phi_j(\|\mathbf{x} - \mathbf{c}_j\|) \quad (3.22)$$

donde L^c y B^c son operadores aplicados a la FBR como una función en el segundo argumento.

Sustituimos la ecuación (3.22) en (3.9) y usando los nodos C dados en (3.3) obtenemos

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{n_d} \frac{d\lambda_j}{dt} L^c \phi_j(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|) + \sum_{j=n_d+1}^{n_d+n_b} \frac{d\lambda_j}{dt} B^c \phi_j(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|) - \sum_{j=1}^{n_d} \lambda_j L^x L^c \phi_j(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{c}_j\|) \\ - \sum_{j=n_d+1}^{n_d+n_b} \lambda_j L^x B^c \phi_j(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|) = f_i(t), \quad i = 1, \dots, n_d, \end{aligned} \quad (3.23)$$

$$\sum_{j=1}^{n_d} \lambda_j B^x L^c \phi_j(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|) + \sum_{j=n_d+1}^{n_d+n_b} \lambda_j B^x B^c \phi_j(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|) = g_i(t), \quad i = n_d+1, \dots, n_d+n_b. \quad (3.24)$$

En su forma matricial las ecuaciones (3.23), (3.24) y con la aplicación de la θ -ponderación ($0 \leq \theta \leq 1$) tenemos

$$\begin{aligned} [L^c \Phi_d + B^c \Phi_d + \delta t \theta (L^x L^c \Phi_d + L^x L^c \Phi_d)] \boldsymbol{\lambda}^{n+1} \\ = \delta t \mathbf{f}^{n+1} + [L^c \Phi_d + B^c \Phi_d - \delta t (1 - \theta) (L^x L^c \Phi_d + L^x B^c \Phi_d)] \boldsymbol{\lambda}^n \end{aligned} \quad (3.25)$$

$$[B^x L^c \Phi_b + B^x B^c \Phi_b] \boldsymbol{\lambda}^n = \mathbf{g}^{n+1} \quad (3.26)$$

Sea $\widehat{\Phi}_d = L^c \Phi_d + B^c \Phi_d$ y $\widehat{\Phi}_b = L^c \Phi_b + B^c \Phi_b$. Así el sistema anterior lo escribimos como

$$\begin{bmatrix} \widehat{\Phi}_d + \theta \delta t L^x \widehat{\Phi}_d \\ B^x \widehat{\Phi}_b \end{bmatrix} \boldsymbol{\lambda}^{n+1} = \begin{bmatrix} \widehat{\Phi}_d - (1 - \theta) \delta t L^x \widehat{\Phi}_d \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \boldsymbol{\lambda}^n + \begin{bmatrix} \delta t \mathbf{f}^{n+1} \\ \mathbf{g}^{n+1} \end{bmatrix} \quad (3.27)$$

La ecuación (3.27) la podemos escribir como

$$\boldsymbol{\lambda}^{n+1} = \widehat{\mathbf{H}}_+^{-1} \widehat{\mathbf{H}}_- \boldsymbol{\lambda}^n + \widehat{\mathbf{H}}_+^{-1} \widehat{\mathbf{F}}^{n+1} \quad (3.28)$$

donde

$$\widehat{\mathbf{H}}_+ = \begin{bmatrix} \widehat{\boldsymbol{\Phi}}_d + \theta \delta t L^x \widehat{\boldsymbol{\Phi}}_d \\ B^x \widehat{\boldsymbol{\Phi}}_b \end{bmatrix}, \quad \widehat{\mathbf{H}}_- = \begin{bmatrix} \widehat{\boldsymbol{\Phi}}_d - (1 - \theta) \delta t L^x \widehat{\boldsymbol{\Phi}}_d \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

y

$$\widehat{\mathbf{F}}^{n+1} = \begin{bmatrix} \delta t \mathbf{f}^{n+1} \\ \mathbf{g}^{n+1} \end{bmatrix}$$

La ecuación (3.22) se puede escribir como

$$\mathbf{u} = \widehat{\mathbf{A}} \boldsymbol{\lambda} \quad (3.29)$$

donde

$$\widehat{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} \widehat{\boldsymbol{\Phi}}_d \\ \widehat{\boldsymbol{\Phi}}_b \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times N}.$$

Usando la ecuación (3.29), (3.28) puede escribirse como

$$\mathbf{u}^{n+1} = \widehat{\mathbf{A}} \widehat{\mathbf{H}}_+^{-1} \widehat{\mathbf{H}}_- \widehat{\mathbf{A}}^{-1} \mathbf{u}^n + \widehat{\mathbf{A}} \widehat{\mathbf{H}}_+^{-1} \widehat{\mathbf{F}}^{n+1} \quad (3.30)$$

Para este esquema, debido a [71], la matriz $\widehat{\mathbf{H}}_+$ es invertible para cualquier valor de θ , y es garantizado por que los puntos de colocación se asumen distintos.

CAPÍTULO 4

Descomposición de dominio

En este capítulo exponemos las ideas básicas de las técnicas de descomposición de dominio con y sin traslape así como los algoritmos de Schwarz en su forma aditiva y multiplicativa. También exponemos los análisis de Fourier Clásico para la ecuación de Laplace y Helmholtz. Al final del capítulo formulamos el algoritmo 1 de la versión aditiva de Schwarz. Cabe señalar que en este trabajo nos enfocamos a la descomposición de dominio con traslape.

4.1. Introducción

Cuando tratamos con simulaciones numéricas de problemas a gran escala, es común usar el método de descomposición de dominio, de tal manera que el dominio original es dividido en subregiones, y en cada uno de ellos las ecuaciones constitutivas son impuestas. El enfoque de descomposición de dominio es en sí mismo un poderoso y popular esquema en análisis numérico y su popularidad ha crecido recientemente debido a su uso en algoritmos de cálculo en paralelo. El principal objetivo de la técnica de descomposición de dominio es descomponer el problema global en pequeños subproblemas. En la implementación de la descomposición de dominio existen dos alternativas a utilizar: esquemas con traslape y sin traslape.

A continuación damos una breve descripción de ambos enfoques y posteriormente los abordamos en su forma continua.

En el enfoque con traslape, el dominio Ω es dividido en n subdominios sin traslape, y cada uno de ellos es extendido a una región más grande Ω_i con traslape δ_{ij} entre regiones vecinas. Denotamos con Ω_i al subdominio extendido, $\partial\Omega_i$ su frontera natural y Γ_i la frontera artificial traslapada con otros subdominios vecinos. El

problema inicial entonces es descompuesto en una serie de problemas en los subdominios construidos y el proceso de transmisión de información entre los subdominios se lleva a cabo iterativamente a través de las regiones de traslape. En específico en las fronteras artificiales. Estos métodos se conocen como métodos de Schwarz. Es importante notar que dadas las condiciones de frontera, cada subproblema es únicamente dependiente de las condiciones artificiales de frontera de los subdominios vecinos.

En la técnica sin traslape, el dominio se divide en subdominios disjuntos con superficies como interfases comunes. En cada subdominio el esquema numérico original es implementado. Debido a la falta de condiciones de frontera en la interfase entre subdominios vecinos, el número de incógnitas es mayor al número de ecuaciones de modo que el sistema resultante es indeterminado. Sin embargo, y mediante el uso de los operadores de Steklov-Poincaré y extensión armónica es posible obtener un problema bien planteado. No hay un criterio de cómo se forman los subconjuntos de puntos de colocación por subdominio. Sin embargo una manera conveniente de resolver este problema consiste en asignar a cada subconjunto aproximadamente el mismo número de puntos dato. Esto produce un balance en cada subregión lo que produce una eficiente implementación del cálculo en paralelo.

En el enfoque con traslape, el problema se puede resolver con un método iterativo, es decir, se puede obtener la solución recursivamente en cada subdominio. La principal diferencia entre los métodos con y sin traslape, es que en el caso con traslape el uso de métodos iterativos para trabajar las interfases de los subdominios es obligatorio.

Es importante notar que el enfoque de descomposición de dominio sin traslape, es naturalmente ajustable para la solución numérica de problemas multi-zona, donde las ecuaciones constitutivas tienen diferentes valores de los parámetros del problema en diferentes regiones del dominio global.

Ahora vamos a describir para ambas técnicas de descomposición de dominio. Por simplicidad nos limitaremos a dos subdominios y a la ecuación diferencial parcial

$$Lu(\mathbf{x}) = \frac{\partial}{\partial x_1} \left[a(\mathbf{x}) \frac{\partial u}{\partial x_1} \right] + \frac{\partial}{\partial x_2} \left[b(\mathbf{x}) \frac{\partial u}{\partial x_2} \right] = f(\mathbf{x}) \quad (4.1)$$

4.1.1. Métodos con traslape

Hagamos una partición de Ω en dos subdominios Ω_1 y Ω_2 , donde $\Omega_1 \cap \Omega_2 \neq \emptyset$, ver figura 4.1. Las fronteras artificiales Γ_i son la parte de la frontera de Ω_i que

es interior de Ω , las restantes fronteras (naturales) se denotan $\partial\Omega_i \setminus \Gamma_i$. Podemos resolver el problema en Ω por medio del algoritmo clásico de Schwarz aditivo que puede escribirse como

$$\begin{aligned} L\phi_1^n(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Omega_1 \\ B\phi_1^n(\mathbf{x}) &= g(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \partial\Omega_1 \setminus \Gamma_1 \\ \phi_1^n(\mathbf{x}) &= \phi_2^{n-1}(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Gamma_1 \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} L\phi_2^n(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Omega_2 \\ B\phi_2^n(\mathbf{x}) &= g(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \partial\Omega_2 \setminus \Gamma_2 \\ \phi_2^n(\mathbf{x}) &= \phi_1^{n-1}(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Gamma_2 \end{aligned}$$

donde en cada subdominio, el esquema numérico es realizado mediante algún método de colocación.

La versión multiplicativa de Schwarz puede escribirse como

$$\begin{aligned} L\phi_1^n(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Omega_1 \\ B\phi_1^n(\mathbf{x}) &= g(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \partial\Omega_1 \setminus \Gamma_1 \\ \phi_1^n(\mathbf{x}) &= \phi_2^{n-1}(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Gamma_1 \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} L\phi_2^n(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Omega_2 \\ B\phi_2^n(\mathbf{x}) &= g(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \partial\Omega_2 \setminus \Gamma_2 \\ \phi_2^n(\mathbf{x}) &= \phi_1^n(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Gamma_2 \end{aligned}$$

donde en el subdominio 2 se usa la solución obtenida en el subdominio 1 como condición de frontera artificial.

4.1.2. Métodos sin traslape

El dominio Ω se divide en dos subdominios Ω_1 y Ω_2 , donde $\Omega_1 \cap \Omega_2 = \emptyset$. La interfase de subdominios $\Gamma = \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_2$, ver figura 4.2.

El algoritmo iterativo sin traslape (también llamado método iterativo subestruc-

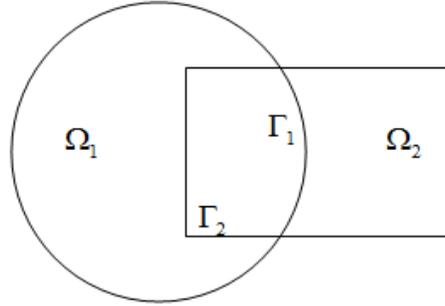


Figura 4.1: Descomposición en dos dominios con traslape.

turado) se escribe como

$$\begin{aligned} L\phi_1^n(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Omega_1 \\ B\phi_1^n(\mathbf{x}) &= g(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \partial\Omega_1 \setminus \Gamma \\ \phi_1^n(\mathbf{x}) &= \zeta_2^{n-1}(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Gamma \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} L\phi_2^n(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Omega_2 \\ B\phi_2^n(\mathbf{x}) &= g(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \partial\Omega_2 \setminus \Gamma \\ \frac{\partial\phi_2^n(\mathbf{x})}{\partial n_L} &= \frac{\phi_1^{n-1}(\mathbf{x})}{\partial n_L} & \mathbf{x} \in \Gamma \end{aligned}$$

donde

$$\zeta^n|_{\Gamma} = \theta\zeta^{n-1}|_{\Gamma} + (1 - \theta)\phi_2^n|_{\Gamma}, \quad 0 < \theta < 1.$$

y cuya derivada normal $\frac{\partial w}{\partial n_L}$ se define como $\frac{\partial w}{\partial n_L} = aw_{x_1}n_{x_1} + bw_{x_2}n_{x_2}$.

4.2. Escalabilidad

Una característica deseable e importante de los métodos de descomposición de dominio es la escalabilidad. Vamos a describir en qué consiste y al final daremos una definición.

Se pueden distinguir dos facetas de escalabilidad: escalabilidad algorítmica (tam-

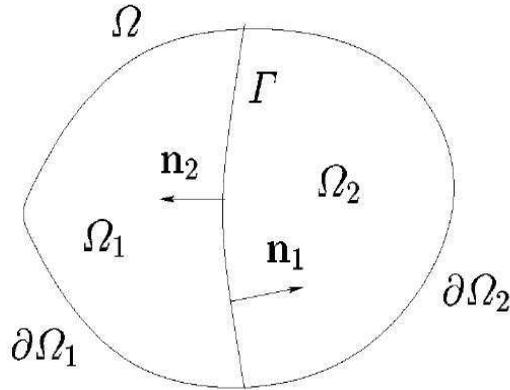


Figura 4.2: Descomposición en dos dominios sin traslape.

bién llamada escalabilidad numérica) y escalabilidad de implementación (también llamada escalabilidad paralela).

Escalabilidad algorítmica se refiere a la relación entre el trabajo W realizado por una ejecución del algoritmo (el parámetro de salida, que incluye el cálculo y la comunicación) y el número de subproblemas o subdominios (el parámetro entrada) en el que el problema es dividido. Para un algoritmo algorítmicamente escalable, el trabajo incrementa sólo muy lentamente con el número de subdominios.

La escalabilidad de implementación de un programa en paralelo se refiere a la relación entre el número de procesadores p y el trabajo útil por unidad de tiempo, $R_p = W/T_p$, donde T_p es el tiempo de ejecución en p procesadores. Sea $r_p = R_p/p$ la razón de ejecución efectiva por procesador, i.e., la razón de ejecución del trabajo útil. Una implementación escalable ideal tiene r_p constante cuando p se incrementa. En la práctica, una implementación escalable tiene un r_p que decae lentamente con p .

Cabe aclarar, que en este trabajo no usamos cálculo en paralelo. Sin embargo la escalabilidad algorítmica sí la consideramos en cierto sentido, pues el algoritmo desarrollado en esta tesis fue implementado de manera central. En nuestro caso, el trabajo W realizado se interpreta como el número de iteraciones necesarias para obtener convergencia, cuando el problema es dividido en p subdominios. A continuación damos una definición de escalabilidad dada en [52].

Definición 19 *Un método de descomposición de dominio iterativo para resolver un sistema lineal de ecuaciones se llama escalable si su razón de convergencia no se deteriora cuando el número de subdominios crece. Esto típicamente significa que la*

convergencia no se deteriora cuando H , el tamaño de los subdominios, disminuye.

Esta definición, se ajusta bien a nuestro enfoque. Esto es porque nuestro método es iterativo y ciertamente resolvemos sistemas de ecuaciones que surgen de aplicar el método de colocación asimétrica. En relación a la razón de convergencia que menciona la definición, nosotros nos basamos en el número de iteraciones y que son parámetros equivalentes.

4.3. DD para más de 2 subdominios

Si consideramos ahora más de 2 subdominios digamos K , y la EDP

$$\begin{aligned} Lu(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}), \forall \mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^d \\ Bu(\mathbf{x}) &= g(\mathbf{x}), \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega \subset \mathbb{R}^d \end{aligned} \quad (4.2)$$

donde L es un operador diferencial elíptico, resultan los siguientes subproblemas

$$\begin{aligned} Lu(\mathbf{x}) &= f_i(\mathbf{x}), \text{ en } \Omega_i \\ Bu(\mathbf{x}) &= g_i(\mathbf{x}), \text{ sobre } \partial\Omega_i \\ Su(\mathbf{x}) &= \gamma_i(\mathbf{x}), \text{ sobre } \Gamma_i. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Como se ha visto, para dos subdominios, la transmisión de información entre ellos se lleva a cabo iterativamente a través de las regiones con traslape, es decir, a través de las fronteras artificiales.

El sistema de ecuaciones lineales, también puede escribirse, utilizando la notación usada en colocación, como

$$\begin{bmatrix} L_{\Omega_i}^x \Phi_d \\ B_{\partial\Omega_i}^x \Phi_b \\ S_{\Gamma_i}^x \Phi_b \end{bmatrix} \boldsymbol{\lambda}_i = \begin{bmatrix} f_i(\mathbf{x}) \\ g_i(\mathbf{x}) \\ \gamma_i(\mathbf{x}) \end{bmatrix}.$$

Si definimos A_i como

$$\mathbf{A}_i = \begin{bmatrix} L_{\Omega_i}^x \Phi_d \\ B_{\partial\Omega_i}^x \Phi_b \\ S_{\Gamma_i}^x \Phi_b \end{bmatrix}$$

para subdominios suficientemente pequeños, podríamos resolver directamente

$$\boldsymbol{\lambda}_i = \mathbf{A}_i^{-1} \mathbf{F}_i. \quad (4.4)$$

Un elemento importante de las \mathbf{F}_i , las cuales incluyen las condiciones de frontera artificiales, es que cambian con los resultados actualizados de sus subdominios vecinos. En cada paso iterativo $(n + 1)$ la solución de la ecuación (4.4) en $\bar{\Omega}_i$ se puede reescribir como

$$\boldsymbol{\lambda}_i^{n+1} = \boldsymbol{\lambda}_i^n + \mathbf{A}_i^{-1} (\mathbf{F}_i - \mathbf{A}_i \boldsymbol{\lambda}_i^n) \quad (4.5)$$

Posteriormente escribimos (4.5) en términos de la solución u de la EDP (4.2).

A continuación comentamos algunos trabajos que han desarrollado el tema de descomposición de dominio mediante FBRs.

1. Dubal [8], utiliza descomposición de dominio con FBRs multicuádricas para resolver EDPs en una dimensión. Su aporte consiste en que al trabajar con ecuaciones elípticas y nodos adaptivos se obtiene una notable eficiencia.
2. En el trabajo de Wu y Hon [68], se trabajan los métodos de Schwarz mediante funciones de soporte compacto dando así el sustento teórico para este tipo de funciones.
3. Un análisis bastante completo en relación a los métodos de Schwarz tanto aditivo como multiplicativo, lo podemos encontrar en Zhou et al. [76]. Lo más destacado es que el número de iteraciones del método multiplicativo es alrededor de la mitad de lo necesario para el método aditivo y que la razón de convergencia disminuye al incrementarse el número de subdominios.
4. En el trabajo de Kansa y Carlson [35], se concluye que una de las técnicas más eficientes cuando se resuelve un sistema denso de ecuaciones lineales es usar preconditionamiento y técnicas de descomposición de dominios.

4.4. Schwarz aditivo

El método funciona de la siguiente manera: los valores calculados en las fronteras artificiales para cada subdominio en el paso $(k + 1)$, se actualizan a partir de los

resultados del paso k , y así la ecuación (4.4) la escribimos como

$$\boldsymbol{\lambda}_i^{n+1} = \boldsymbol{\lambda}_i^n + \mathbf{A}_i^{-1}(\mathbf{F}_i^n - \mathbf{A}_i \boldsymbol{\lambda}_i^n) \quad (4.6)$$

El término $\mathbf{F}_i^n - \mathbf{A}_i \boldsymbol{\lambda}_i^n$ de (4.6) que representa el residuo en $\bar{\Omega}_i$ en el paso n , lo denotamos por

$$\mathbf{R}_i^n = \mathbf{F}_i^n - \mathbf{A}_i \boldsymbol{\lambda}_i^n \quad (4.7)$$

entonces la ecuación (4.6) queda

$$\boldsymbol{\lambda}_i^{n+1} = \boldsymbol{\lambda}_i^n + \mathbf{A}_i^{-1} \mathbf{R}_i^n \quad (4.8)$$

Con el objeto de presentar el método en una forma global, necesitamos transferirlo a un índice global. De manera local tenemos

$$\mathbf{u}_i(\mathbf{x}) = \mathbf{M}_i \boldsymbol{\lambda}_i \quad (4.9)$$

donde

$$\mathbf{M}_i = \begin{bmatrix} \phi_1(\|x_1 - c_1\|) & \phi_1(\|x_2 - c_1\|) & \cdots & \phi_1(\|x_{N_i} - c_1\|) \\ \phi_2(\|x_1 - c_2\|) & \phi_2(\|x_2 - c_2\|) & \cdots & \phi_2(\|x_{N_i} - c_2\|) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{N_i}(\|x_1 - c_{N_i}\|) & \phi_{N_i}(\|x_2 - c_{N_i}\|) & \cdots & \phi_{N_i}(\|x_{N_i} - c_{N_i}\|) \end{bmatrix} \quad (4.10)$$

y N_i es el número total de puntos de colocación en el subdominio $\bar{\Omega}_i$. \mathbf{u}_i es la matriz que consiste de los valores aproximados de la función desconocida en los N_i nodos en $\bar{\Omega}_i$ que puede extenderse a todo el dominio Ω . Entonces la ecuación (4.8) se transfiere a

$$\mathbf{u}_i^{n+1} = \mathbf{u}_i^n + \tilde{\mathbf{A}}_i^{-1} \mathbf{R}_i^n \quad (4.11)$$

donde

$$\tilde{\mathbf{A}}_i = \mathbf{A}_i \mathbf{M}_i^{-1} \quad (4.12)$$

entonces \mathbf{R}_i^n se puede expresar en términos de $\tilde{\mathbf{A}}_i$ y \mathbf{u}_i como

$$\mathbf{R}_i^n = \mathbf{F}_i^n - \tilde{\mathbf{A}}_i \mathbf{u}_i^n \quad (4.13)$$

Ahora definimos el operador de prolongación \mathbf{P}_i de $\bar{\Omega}_i$ a $\bar{\Omega}$ tal que $\mathbf{P}_i \mathbf{x}_i$ toma una variable $\mathbf{x}_i \in \bar{\Omega}_i$ y la extiende a su variable equivalente en $\bar{\Omega}$. La traspuesta \mathbf{P}_i^T de esta matriz es el operador restricción: $\mathbf{P}_i^T \mathbf{x}$ guarda solamente las componentes de un vector arbitrario $\mathbf{x} \in \bar{\Omega}$ que también están en $\bar{\Omega}_i$. \mathbf{P}_i se representa por una matriz de $N \times N_i$ de ceros y unos. En otras palabras tenemos

$$\mathbf{R}_i^n = \mathbf{P}_i^T \mathbf{R}^n \quad (4.14)$$

donde \mathbf{R}^n es el residual global definido por

$$\mathbf{R}^n = \sum_{i=1}^K \mathbf{P}_i \mathbf{R}_i^n \quad (4.15)$$

y

$$\mathbf{u}_i^n = \mathbf{P}_i^T \mathbf{u}^n \quad (4.16)$$

donde \mathbf{u}^n es un vector compuesto de los valores aproximados de todos los nodos de colocación en el dominio global como

$$\mathbf{u}^n = \sum_{i=1}^K \mathbf{P}_i \mathbf{u}_i^n \quad (4.17)$$

donde K es el número total de subdominios. Multiplicando por \mathbf{P}_i cada lado de la ecuación (4.17) y usando (4.14), la ecuación (4.11) se convierte en

$$\mathbf{P}_i \mathbf{u}_i^{n+1} = \mathbf{P}_i \mathbf{u}_i^n + (\mathbf{P}_i \tilde{\mathbf{A}}_i^{-1} \mathbf{P}_i^T) \mathbf{R}^n \quad (4.18)$$

Combinando todas las ecuaciones de los subdominios y usando la ecuación (4.17) obtenemos

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \left(\sum_{i=1}^K \mathbf{P}_i \tilde{\mathbf{A}}_i^{-1} \mathbf{P}_i^T \right) \mathbf{R}^n \quad (4.19)$$

donde los valores en los nodos duplicados de las regiones traslapadas se toman como el promedio. Además, si definimos

$$\tilde{\mathbf{A}} = \sum_{i=1}^K \mathbf{P}_i \tilde{\mathbf{A}}_i \mathbf{P}_i^T \quad (4.20)$$

$$\mathbf{F} = \sum_{i=1}^K \mathbf{P}_i \mathbf{F}_i \quad (4.21)$$

y

$$\mathbf{B} = \sum_{i=1}^K \mathbf{P}_i \tilde{\mathbf{A}}_i^{-1} \mathbf{P}_i^T \quad (4.22)$$

entonces la ecuación (4.19) queda

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \mathbf{B}(\mathbf{F}^n - \tilde{\mathbf{A}}\mathbf{u}^n) \quad (4.23)$$

Este algoritmo es conocido como método aditivo de Schwarz con traslape.

4.5. Schwarz multiplicativo

Para esta versión de Schwarz multiplicativo, los valores de la frontera artificial en cada subdominio se actualizan a partir de los valores más recientes que se obtienen de los subdominios vecinos. Una característica de este método es que requiere aproximadamente la mitad de iteraciones para converger en comparación con el método aditivo de Schwarz. Aún cuando esta versión tiene poco potencial de paralelismo, usando la técnica de los colores, podemos reducir el número de pasos y aumentar la convergencia total. Utilizando por ejemplo cuatro colores (ver figura 4.3), vemos que, dado un dominio, los subdominios vecinos tienen distinto color, y así los subdominios que tengan el mismo color pueden resolverse en paralelo. Sea q el número total de colores. Una iteración del método multiplicativo es partido en q pasos secuenciales como

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^{n+1/q} &= \mathbf{u}^n + \mathbf{B}_1(\mathbf{F}^n - \tilde{\mathbf{A}}\mathbf{u}^n) + \mathbf{B}_1\mathbf{R}^n \\ \mathbf{u}^{n+2/q} &= \mathbf{u}^{n+1/q} + \mathbf{B}_2(\mathbf{F}^{n+1/q} - \tilde{\mathbf{A}}\mathbf{u}^{n+1/q}) = \mathbf{u}^{n+1/q} + \mathbf{B}_2\mathbf{R}^{n+1/q} \\ &\vdots \end{aligned} \quad (4.24)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^{n+1} &= \mathbf{u}^{n+(1-q)/q} + \mathbf{B}_q(\mathbf{F}^{n+(1-q)/q} - \tilde{\mathbf{A}}\mathbf{u}^{n+(1-q)/q}) \\ &= \mathbf{u}^{n+(1-q)/q} + \mathbf{B}_q\mathbf{R}^{n+(1-q)/q} \end{aligned} \quad (4.25)$$

donde

$$\mathbf{B}_i = \sum_{j \in \text{Color}_i} \mathbf{P}_j \tilde{\mathbf{A}}_i^{-1} \mathbf{P}_j^T. \quad (4.26)$$

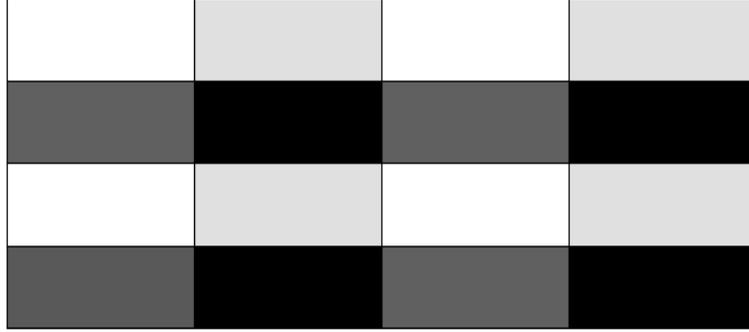


Figura 4.3: Coloreado de subdominios con cuatro colores.

4.6. Schwarz aditivo y multiplicativo no estacionario

Abordemos ahora Schwarz aditivo y multiplicativo no estacionario. Para ello apliquemos el método theta a la ecuación (3.9) en cada subdominio cerrado $\bar{\Omega}_k = \Omega_k \cup \partial\Omega_k \cup \Gamma_k$ y tenemos

$$\begin{aligned}
 u_k(\mathbf{x}, t^{n+1}) + \delta t \theta L u_k(\mathbf{x}, t^{n+1}) &= u_k(\mathbf{x}, t^n) \\
 &\quad - \delta t (1 - \theta) L u_k(\mathbf{x}, t^n) \delta t f_k(\mathbf{x}, t^{n+1}) \quad \mathbf{x} \in \Omega_k \\
 B u_k(\mathbf{x}, t^{n+1}) &= g_k(\mathbf{x}, t^{n+1}) \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega_k \\
 S u_k(\mathbf{x}, t^{n+1}) &= \gamma_k(\mathbf{x}, t^{n+1}) \quad \mathbf{x} \in \Gamma_k
 \end{aligned} \tag{4.27}$$

donde B y S son las condiciones de frontera. Aquí la idea básica de los esquemas de Schwarz con traslape es resolver (4.27) de una manera iterativa.

Para cada iteración i , la ecuación (4.27) puede escribirse en forma matricial como

$$\mathbf{H}_k^+ \boldsymbol{\lambda}_{i,k}^{n+1} = \mathbf{H}_k^- \boldsymbol{\lambda}_k^n + \mathbf{F}_k^{n+1} + \mathbf{S}_{i-1,k}^{n+1} \tag{4.28}$$

donde

$$\mathbf{H}_k^+ = \begin{bmatrix} \Phi_{d,k} + \delta t \theta L \Phi_{d,k} \\ B \Phi_{b,k} \\ S \Phi_{s,k} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{H}_k^- = \begin{bmatrix} \Phi_{d,k} - \delta t (1 - \theta) L \Phi_{d,k} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

y

$$\mathbf{F}_k^{n+1} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{g}_k^{n+1} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S}_{i-1,k}^{n+1} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \gamma_{i-1}^{n+1} \end{bmatrix}.$$

Como podemos notar en (4.28), solamente \mathbf{S}_{i-1}^{n+1} cambia a través de las iteraciones en el lado derecho de la ecuación, para un tiempo particular $t = t^{n+1}$. Además \mathbf{H}_k^+ para cada subdominio no cambia con las iteraciones y puede descomponerse sólo una vez. A partir de estos elementos, los métodos de Schwarz aditivo y multiplicativo se definen de una manera completamente similar a el caso estacionario.

Para el algoritmo de Schwarz aditivo, los valores en las fronteras artificiales son actualizadas después de resolver el operador en todos los subdominios. En las fronteras comunes, los valores se toman como el promedio de los valores obtenidos de resolver de manera individual en cada subdominio. Esta elección garantiza la continuidad a través de todo el dominio.

Para el caso multiplicativo los valores se actualizan de una manera secuencial. Primero se resuelve la ecuación (4.28) en el primer subdominio. Entonces los valores en la frontera se actualizan. A continuación resolvemos la ecuación (4.28) para el siguiente subdominio. Continuamos en esta forma hasta obtener convergencia.

En los siguientes párrafos abordamos el análisis de Fourier clásico para la ecuación de Laplace así como el análisis de Fourier para una ecuación del tipo Helmholtz. Esto último debido a que tenemos una ecuación de este tipo en el capítulo de resultados y es importante notar que para este caso no obtuvimos convergencia debido a que se necesita un tratamiento especial en las fronteras artificiales.

4.7. Análisis clásico de Fourier

A continuación damos el análisis clásico de Fourier para el método de Schwarz. Consideremos la ecuación de Laplace sobre \mathbb{R}^2 ,

$$\Delta u = f(x, y) \quad x, y \in \Omega, \quad u \text{ acotada} \quad (4.29)$$

Ahora descomponemos el dominio en dos medios planos traslapados, es decir, $\Omega_1 = (-\infty, L] \times \mathbb{R}$ y $\Omega_2 = [0, \infty) \times \mathbb{R}$ con $L > 0$ como parámetro de traslape. En el método clásico de Schwarz para resolver (4.29) de manera iterativa resuelve en Ω_1

y Ω_2 y a través del intercambio de información de las interfaces en 0 y L ,

$$\begin{aligned}\Delta u_1^{n+1} &= f(x, y) & x, y \in \Omega_1 \\ u_1^{n+1}(L, y) &= u_2^n(L, y) \\ \Delta u_2^{n+1} &= f(x, y) & x, y \in \Omega_2 \\ u_2^{n+1}(L, y) &= u_1^n(L, y)\end{aligned}\tag{4.30}$$

Entonces para analizar la convergencia, es suficiente considerar el problema homogéneo, o sea, $f(x, y) = 0$ en (4.30) y checar la convergencia en 0. Sea $\hat{f}(k)$ la transformada de Fourier de $f(x) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ dada por,

$$\hat{f}(k) = \mathcal{F}_x(f)(k) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} f(x) dx$$

así como su transformada inversa de Fourier por

$$f(x) = \mathcal{F}_x^{-1}(\hat{f})(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \hat{f}(k) dk$$

Aplicando la transformada de Fourier en y de (4.30) para $f(x, y) = 0$ se tiene

$$\begin{aligned}\hat{u}_{1,xx}(x, k) - k^2 \hat{u}_1^{n+1}(x, k) &= 0 & x \in (-\infty, L), k \in \mathbb{R} \\ \hat{u}_1^{n+1}(L, k) &= u_2^n(L, k)\end{aligned}\tag{4.31}$$

$$\begin{aligned}\hat{u}_{2,xx}(x, k) - k^2 \hat{u}_2^{n+1}(x, k) &= 0 & x \in (0, \infty), k \in \mathbb{R} \\ \hat{u}_2^{n+1}(0, k) &= \hat{u}_1^n(0, k)\end{aligned}\tag{4.32}$$

donde el subíndice x denota la derivada parcial con respecto a x . Resolviendo (4.32) usando las condiciones de frontera en el infinito y colocando este resultado en (4.31) encontramos que la solución de (4.31) en $x = 0$ es

$$\hat{u}_1^{n+1}(0, k) = e^{-2|k|L} \hat{u}_1^{n-1}(0, k)$$

Similarmente obtenemos la solución de (4.32) en $x = L$

$$\hat{u}_2^{n+1}(L, k) = e^{-2|k|L} \hat{u}_2^{n-1}(L, k)$$

Ahora definimos la razón de convergencia

$$\rho(k, L) = e^{-2|k|L} \quad (4.33)$$

de la cual deducimos que el método de Schwarz converge para toda $k \neq 0$ si hay traslape. La razón de convergencia es lineal y depende del tamaño del traslape así como la frecuencia k . Para componentes de alta frecuencia, la convergencia es rápida, mientras que para frecuencias bajas, es convergencia lenta.

4.8. Análisis clásico de Fourier (Helmholtz)

Sea la ecuación de Helmholtz

$$(\Delta + \omega^2)(u) = f(x, y) \quad x, y \in \Omega \quad (4.34)$$

con condiciones de radiación Sommerfeld en el ∞ . Descompongamos Ω en dos planos traslapados $\Omega_1 = (-\infty, L) \times \mathbb{R}$ y $\Omega_2 = [0, \infty) \times \mathbb{R}$ siendo $L > 0$ el parámetro de traslape. El método clásico de Schwarz para (4.34) está dado por

$$\begin{aligned} (\Delta + \omega^2)(u_1^{n+1}) &= f(x, y) & x, y \in \Omega_1 \\ u_1^{n+1}(L, y) &= u_2^n(L, y) \\ (\Delta + \omega^2)(u_2^{n+1}) &= f(x, y) & x, y \in \Omega_2 \\ u_2^{n+1}(L, y) &= u_1^n(L, y) \end{aligned} \quad (4.35)$$

Para analizar si el método clásico de Schwarz converge para la ecuación de Helmholtz, igualmente bastará si consideramos el caso $f(x, y) = 0$ en (4.35) y analizamos la convergencia en 0.

Calculemos la transformada de Fourier para y en (4.35) con $f(x, y) = 0$ para obtener

$$\hat{u}_{1,xx}^{n+1} + (\omega^2 - k^2)\hat{u}_1^{n+1}(x, k) = 0 \quad x \in (-\infty, L), k \in \mathbb{R} \quad (4.36)$$

$$\hat{u}_1^{n+1}(L, k) = \hat{u}_2^n(L, k)$$

$$\hat{u}_{2,xx}^{n+1} + (\omega^2 - k^2)\hat{u}_2^{n+1}(x, k) = 0 \quad x \in (0, \infty), k \in \mathbb{R} \quad (4.37)$$

$$\hat{u}_2^{n+1}(0, k) = \hat{u}_1^n(0, k)$$

Resolviendo la ecuación (4.37) usando las condiciones de radiación en el infinito

y colocando el resultado en (4.36) obtenemos la solución de (4.36) en $x = 0$, es decir,

$$\hat{u}_1^{n+1}(0, k) = e^{-2\sqrt{k^2 - \omega^2}L} \hat{u}_1^{n-1}(0, k)$$

Similarmente para (4.37)

$$\hat{u}_2^{n+1}(L, k) = e^{-2\sqrt{k^2 - \omega^2}L} \hat{u}_2^{n-1}(L, k)$$

Definiendo la razón de convergencia como

$$\rho(k, \omega, L) = e^{-2\sqrt{k^2 - \omega^2}L}$$

de aquí tenemos dos casos, si $k^2 > \omega^2$ entonces $|\rho(k, \omega, L)| < 1$ y el algoritmo converge. Por el contrario si $k^2 < \omega^2$ entonces $|\rho(k, \omega, L)| = |e^{-2i\sqrt{\omega^2 - k^2}L}| = 1$, y por lo tanto no hay convergencia en general.

Como mencionamos antes, el algoritmo de Schwarz aditivo para la ecuación de Helmholtz, misma que usaremos para la sección de resultados numéricos, presenta oscilaciones en la zona de traslape. Esto se debe a el análisis de Fourier que hemos presentado. La solución a este problema depende de modificar las condiciones de transmisión entre las fronteras artificiales. Esta formulación, que se denomina condiciones de transmisión mejoradas, están fuera del alcance de este trabajo.

Para finalizar este capítulo, damos el algoritmo 1. Se trata del caso aditivo de Schwarz con traslape. Sólo damos esta versión puesto que es la que desarrollamos posteriormente para el caso de dos niveles.

4.9. Algoritmo 1

Algoritmo 1 Método Aditivo de Schwarz con traslape

1: Dado el dominio Ω , y el problema

$$\begin{aligned} Lu(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}) && \text{en } \Omega \\ Bu(\mathbf{x}) &= g(\mathbf{x}) && \text{sobre } \partial\Omega \end{aligned} \quad (4.38)$$

realizar la descomposición de Ω en K subdominios sin traslape.

2: Realizar una partición de Ω de tamaño de malla h .

3: Cada subdominio se extiende a una región más grande Ω_i con traslape δ_{ij} entre regiones vecinas Ω_i y Ω_j .

4: Para $i = 1, \dots, K$

$$\begin{aligned} Lu(\mathbf{x}) &= f_i(\mathbf{x}) && \text{en } \Omega_i \\ Bu(\mathbf{x}) &= g_i(\mathbf{x}) && \text{sobre } \partial\Omega_i \\ Su(\mathbf{x}) &= \gamma_i(\mathbf{x}) && \text{sobre } \Gamma_i \end{aligned} \quad (4.39)$$

donde Ω_i , $\partial\Omega_i$ y Γ_i son el subdominio extendido, su frontera natural y su frontera artificial traslapada con otros subdominios vecinos, respectivamente.

5: Para $j = 1$ hasta convergencia

u^1 . Para $i = 1, \dots, K$ se resuelve (4.39) con condición de frontera artificial $\gamma_i = 0$, y g_i con valor según sea el caso si tiene frontera natural.

u^2 . Las γ_i se actualizan de los valores calculados de las γ_i en la iteración 1, y se resuelven nuevamente los subproblemas (4.39).

u^j . Las γ_i se actualizan de los valores calculados de las γ_i en la iteración $j-1$, y se resuelven nuevamente los subproblemas (4.39).

nota: Para los nodos repetidos en cada iteración, se toma el promedio.

Condición de paro.

Dada la tolerancia TOL, si

$$\|u^{j+1} - u^j\| < \text{TOL}$$

el algoritmo converge.

Donde $\|\cdot\|$ es la norma máxima y se calcula sobre las dos últimas iteraciones solamente sobre la frontera artificial.

CAPÍTULO 5

Algoritmo de dos niveles

En este capítulo justificamos el algoritmo de dos niveles. Por otra parte abordamos los temas de preconditionadores y proyecciones que son claves en el desarrollo de los métodos del tipo dos niveles aditivo y multiplicativo. También damos los algoritmos 2 y 3.

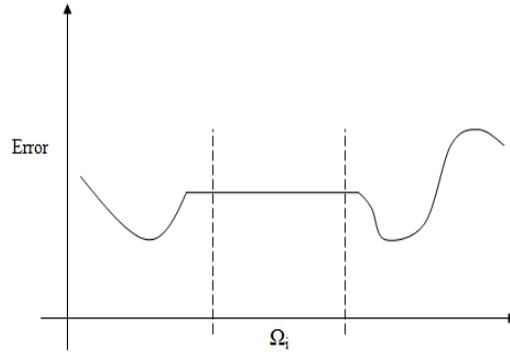
5.1. ¿Por qué un algoritmo de dos niveles?

Vamos a explicar por qué la simple descomposición de dominios no es suficiente para una convergencia rápida. Asumamos que tenemos un error suave en un subdominio pequeño. Se entiende por error suave, aquel que o es constante o tiene oscilaciones pequeñas, (ver figura 5.1). El error entonces, puede escribirse como $\epsilon = \bar{\epsilon} + \epsilon_{\text{pequeño}}$, donde $\bar{\epsilon}$ es el promedio de ϵ en el subdominio. Ahora bien, para cualquier esquema estándar de segundo orden de diferencias finitas, se tiene que $\sum_i A_{ij} = 0$ lejos de la frontera y esto es por que \mathbf{A} corresponde a un operador diferencial sin término de orden cero. Entonces en la iteración n , como ϵ^n es constante en el subdominio extendido $\hat{\Omega}_i$, el vector $\mathbf{A}\epsilon^n$ es cero en Ω_i , y así la corrección local es

$$\mathbf{B}_i(\mathbf{f} - \mathbf{A}\mathbf{u}^n) = \mathbf{B}_i\mathbf{A}(\bar{\epsilon}^n + \epsilon_{\text{pequeño}}^n) = \mathbf{B}_i\mathbf{A}\epsilon_{\text{pequeño}}^n \quad (5.1)$$

entonces, la corrección local es efectiva sólo cerca de la frontera. Por lo que necesitamos otro método para corregir errores pequeños.

Para EDPs elípticas la solución en cualquier punto depende del término fuente

Figura 5.1: Error constante en Ω_i .

y de las condiciones de frontera de todo el dominio. Consideremos el problema

$$\begin{aligned} Lu &= f \text{ en } \Omega \\ u &= 0 \text{ sobre } \partial\Omega \end{aligned} \tag{5.2}$$

La solución explícita se puede escribir como

$$u(x) = \int G(x, y) f(y) dy \tag{5.3}$$

donde G es una función de Green. Para un x_0 fijo, esta función tiene un pico en $y = x_0$ y decae rápidamente fuera él. Entonces vemos que la solución depende fuertemente de $f(y)$ para y cerca de x_0 (ver figura 5.2). Esta característica es para todas las EDPs elípticas.

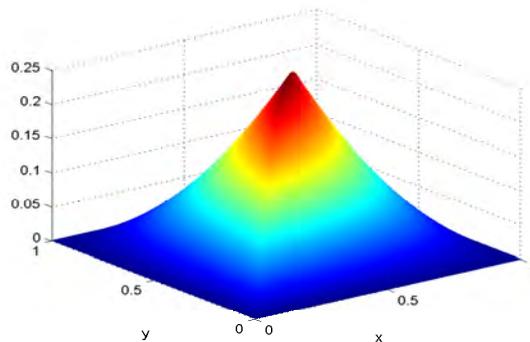


Figura 5.2: Función de Green.

5.2. Precondicionamiento

Sea la EDP

$$\begin{aligned} Lu(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}) \quad \text{en } \Omega \\ Bu(\mathbf{x}) &= g(\mathbf{x}) \quad \text{sobre } \partial\Omega \end{aligned} \tag{5.4}$$

Supongamos que ya la hemos discretizado, por ejemplo por el método de colocación asimétrica, el sistema asociado es $\mathbf{A}\mathbf{u} = \mathbf{f}$. Si definimos $\mathbf{e} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{r}$, entonces $\mathbf{u} = \mathbf{u}^{\text{anterior}} + \mathbf{e}$. Sin embargo este procedimiento es igual de difícil que resolver el sistema original. No obstante, es posible mejorar el algoritmo si podemos encontrar una matriz \mathbf{B} simétrica y positiva definida, donde $\mathbf{B} \simeq \mathbf{A}^{-1}$. De esta manera,

$$\mathbf{u}^{\text{nueva}} = \mathbf{u}^{\text{anterior}} + \mathbf{B}\mathbf{r} \tag{5.5}$$

será una mejor aproximación a la verdadera solución \mathbf{u} . Llamamos a \mathbf{B} el *precondicionador* de \mathbf{A} . Lo que es equivalente a resolver el siguiente sistema lineal de ecuaciones precondicionado

$$\mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{u} = \mathbf{B}\mathbf{f} \tag{5.6}$$

A continuación, algunos requisitos de \mathbf{B}

1. $\mathbf{y} = \mathbf{B}\mathbf{w}$ menos costo de evaluación.
2. \mathbf{B} es espectralmente equivalente a \mathbf{A}^{-1} .

5.3. Proyecciones

Supongamos que tenemos un espacio vectorial V con un producto interno $a(\cdot, \cdot)$. Por ejemplo V puede ser el espacio Euclidiano \mathbb{R}^n y $a(u, v) = u^T \mathbf{A}v$, donde \mathbf{A} es una matriz simétrica positiva definida. Asociado con el producto interno $a(\cdot, \cdot)$ se define la norma por $\|\mathbf{u}\|_a = \sqrt{a(\mathbf{u}, \mathbf{u})}$. La norma $\|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|$ mide la distancia entre los vectores \mathbf{u} y \mathbf{v} . Para el espacio Euclidiano estándar la norma es $\|u\|_2 = \sqrt{u^T u} = \sqrt{\sum_{i=1}^n u_i^2}$. Para la descomposición de dominios y los métodos multinivel, el espacio vectorial es un espacio de Sobolev: $H_0^1(\Omega)$. Sea V_1 un subespacio de V , i.e., $V_1 \subset V$. Sea $\mathbf{e} \in V$ cualquier elemento de V . Una situación natural es encontrar un elemento de V_1 más

cercano a \mathbf{e} . Es decir ¿Qué elemento $\mathbf{e}_1 \in V_1$ minimiza la distancia entre \mathbf{e} y \mathbf{e}_1 ? La definición formal de *proyección* de \mathbf{e} sobre el subespacio V_1 en el producto interno $a(\cdot, \cdot)$ es

$$\mathbf{e}_1 = P\mathbf{e} = \arg \inf_{\mathbf{v} \in V_1} \|\mathbf{e} - \mathbf{v}\|_a \quad (5.7)$$

Una manera equivalente para $\mathbf{e}_1 = P\mathbf{e}$ es

$$a(\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}, \mathbf{v}) = 0 \quad \forall \mathbf{v} \in V_1 \quad (5.8)$$

Mostraremos ahora que la solución a 5.8 es el minimizador de 5.7

$$\begin{aligned} \|\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}\|_a^2 &= a(\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}, \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}), \\ &= a(\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}, \mathbf{v} - \mathbf{e}) \quad \forall \mathbf{v} \in V_1 \\ &\leq \|\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}\|_a \|\mathbf{v} - \mathbf{e}\|_a \quad \forall \mathbf{v} \in V_1 \end{aligned}$$

si dividimos por $\|\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}\|_a$ obtenemos

$$\|\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}\|_a \leq \|\mathbf{v} - \mathbf{e}\|_a \quad \forall \mathbf{v} \in V_1$$

Cuando $V = \mathbb{R}^n$ y V_1 es el espacio generado por las columnas de \mathbf{R}^T entonces la proyección puede escribirse como la matriz

$$\mathbf{P} = \mathbf{R}^T(\mathbf{R}\mathbf{R}^T)^{-1}\mathbf{R}\mathbf{A}$$

Para ver esto, note que cualquier elemento de V_1 es combinación lineal de \mathbf{R}^T , $\mathbf{e}_1 = \mathbf{R}^T\tilde{\mathbf{e}}_1$. Igualmente, $\mathbf{v} = \mathbf{R}^T\tilde{\mathbf{v}}$. Escribiendo esto en (5.8) obtenemos

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{v}}^T \mathbf{R}\mathbf{A}\mathbf{R}^T \tilde{\mathbf{e}}_1 &= a(\mathbf{e}_1, \mathbf{v}) \\ &= a(\mathbf{e}, \mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in \text{gen}\{\mathbf{R}^T\} \\ &= \tilde{\mathbf{v}}^T \mathbf{R}\mathbf{A}\mathbf{e} \quad \forall \tilde{\mathbf{v}} \end{aligned}$$

entonces

$$(\mathbf{R}\mathbf{A}\mathbf{R}^T)\tilde{\mathbf{e}}_1 = \mathbf{R}\mathbf{A}\mathbf{e} \Rightarrow \tilde{\mathbf{e}}_1 = (\mathbf{R}\mathbf{A}\mathbf{R}^T)^{-1}\mathbf{R}\mathbf{A}\mathbf{e}$$

finalmente

$$\mathbf{P}\mathbf{e} = \mathbf{e}_1 = \mathbf{R}^T \tilde{\mathbf{e}}_1 = \mathbf{R}^T (\mathbf{R}\mathbf{A}\mathbf{R}^T)^{-1} \mathbf{R}\mathbf{A}\mathbf{e}$$

5.4. Métodos de dos niveles aditivo y multiplicativo

El problema de los métodos de un nivel, es que la información del lado derecho de la EDP en un punto es transmitida a través de otro punto solamente pasando por todos los subdominios intermedios. Entonces lo que se necesita es un mecanismo para la comunicación global de la información en cada iteración.

Consideremos una malla anidada de dos niveles (ver figura 5.3). También suponemos que ya se ha discretizado la EDP lineal en este dominio, usando la malla fina, entonces

$$\mathbf{A}_F \mathbf{u}_F = \mathbf{f} \tag{5.9}$$

Si conociéramos el error en la malla gruesa, entonces podríamos interpolar linealmente para la malla fina usando éste como una corrección. De hecho el error ϵ_C en la malla gruesa es desconocido, pero podemos calcularlo de $\mathbf{A}_C \epsilon_C = \mathbf{r}_C$ si el residual en la malla gruesa fuese conocido. El residuo en la malla fina es conocido, y por lo tanto podemos usarlo para aproximar el residuo en la malla gruesa.

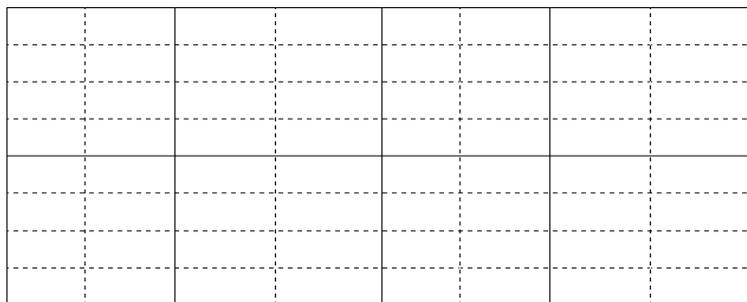


Figura 5.3: Malla de dos niveles.

Ahora definamos dos operadores matriciales, \mathbf{R} que llamaremos restricción de la malla fina a la malla gruesa y \mathbf{R}^T interpolación de la malla gruesa a la malla fina, y sea \mathbf{A}_C la forma discreta del operador en la malla gruesa. Entonces una corrección

simple en esta malla es

$$\mathbf{u}_F \leftarrow \mathbf{u}_F + \mathbf{R}^T \mathbf{A}_C^{-1} \mathbf{R} (\mathbf{f} - \mathbf{A}_F \mathbf{u}_F) \quad (5.10)$$

es decir, hemos calculado el residuo en la malla fina, restringido a la malla gruesa, resolver el problema de la malla gruesa e interpolar la solución de la malla gruesa a la malla fina.

Para poder iterar, no basta con usar $\mathbf{R}^T \mathbf{A}_C^{-1} \mathbf{R}$ como preconditionador, pues éste tiene un espacio nulo grande, debido a que su rango es igual a la dimensión de \mathbf{A}_C , que a su vez es más chico que la dimensión de \mathbf{A}_F . Además cualquier componente de $\mathbf{f} - \mathbf{A}_F \mathbf{u}_F$ que esté en el espacio nulo de $\mathbf{R}^T \mathbf{A}_C^{-1} \mathbf{R}$ podría no corregirse, es decir, componentes del error de alta frecuencia. Entonces decimos que $\mathbf{B}_C = \mathbf{R}^T \mathbf{A}_C^{-1} \mathbf{R}$ es parte del preconditionador de la malla gruesa. Para completar esto, tomamos \mathbf{B}_F preconditionador de \mathbf{A}_F de rango completo, y así introducimos un algoritmo de dos niveles

$$\mathbf{u}_F^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{u}_F^n + \mathbf{B}_C (\mathbf{f} - \mathbf{A}_F \mathbf{u}_F^n) \quad (5.11)$$

$$\mathbf{u}_F^{n+1} = \mathbf{u}_F^{n+\frac{1}{2}} + \mathbf{B}_F (\mathbf{f} - \mathbf{A}_F \mathbf{u}_F^{n+\frac{1}{2}}) \quad (5.12)$$

o escrito de un paso

$$\mathbf{u}_F^{n+1} = \mathbf{u}_F^n + (\mathbf{B}_C + \mathbf{B}_F - \mathbf{B}_F \mathbf{A}_F \mathbf{B}_C) (\mathbf{f} - \mathbf{A}_F \mathbf{u}_F^n) \quad (5.13)$$

Podemos concluir que los errores de baja frecuencia o suaves ($\bar{\epsilon}$) son corregidos por \mathbf{B}_C y los de alta frecuencia ($\epsilon_{\text{pequeño}}$) por \mathbf{B}_F . Esta es la versión multiplicativa de Schwarz.

Veamos ahora la versión aditiva. Introducimos un concepto conocido como *suavizador*, que va relacionado con el preconditionador \mathbf{B}_F , y para este caso el suavizador es

$$\mathbf{u} \leftarrow \sum_i \mathbf{R}_i^T \mathbf{A}_{\Omega_i}^{-1} \mathbf{R}_i \mathbf{r} \quad (5.14)$$

de esta manera si tomamos $\mathbf{B}_0 = \mathbf{B}_C$ tenemos el método aditivo de dos niveles de

Schwarz

$$\mathbf{u} \leftarrow \left(\mathbf{R}^T \mathbf{A}_C^{-1} \mathbf{R} + \sum_{i=1}^p \mathbf{R}_i^T \mathbf{A}_{\Omega_i}^{-1} \mathbf{R}_i \right) \mathbf{r} = \sum_{i=0}^p \mathbf{B}_i \mathbf{r} \quad (5.15)$$

A continuación damos 2 algoritmos del tipo dos niveles. El algoritmo 2 es el que implementaremos para nuestras pruebas numéricas.

5.5. Algoritmo 2

Algoritmo 2 Método Aditivo de Schwarz - Dos niveles.

Para $k = 0$ hasta convergencia

- 1: Resolver el problema de Poisson, con el Método Aditivo de Schwarz con traslape.

Entrada: Γ_i^k .

Salida : $\lambda_{i,F}, \mathbf{u}_F$.

- 2: Seleccionar de \mathbf{u}_F los correspondientes nodos de malla gruesa, esto es, $\tilde{\mathbf{u}}_C$.
- 3: Interpolarse sobre $\tilde{\mathbf{u}}_C$

$$\tilde{\mathbf{u}}_C(\bar{\mathbf{x}}_j) = \sum \lambda_j^I \phi_i(\bar{\mathbf{x}}_j) + p_1(\bar{\mathbf{x}}_j)$$

- 4: Calcular

$$\Delta \tilde{\mathbf{u}}_C(\bar{\mathbf{x}}_j) = \sum \lambda_j^I \Delta \phi_i(\bar{\mathbf{x}}_j) + \Delta p_1(\bar{\mathbf{x}}_j) = \tilde{\mathbf{f}}_C$$

- 5: Resolver el problema de Poisson en la malla gruesa.

$$\begin{bmatrix} \mathbf{M}_{L^x,C} & \mathbf{P}_{L,C} \\ \mathbf{M}_{B^x,C} & \mathbf{P}_{B,C} \\ \mathbf{P}_C^T & \mathbf{0}_C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_C \\ \mathbf{a}_C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{f}}_C \\ \mathbf{g}_C \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

- 6: Se tiene entonces

$$\mathbf{u}_C(\bar{\mathbf{x}}_j) = \sum \lambda_{i,C} \phi_i(\bar{\mathbf{x}}_j) + p_2(\bar{\mathbf{x}}_j)$$

- 7: Usar el paso 6 para interpolar en las fronteras artificiales con malla fina
- 8: Retornar al paso 1.

Condición de paro.

Dada la tolerancia TOL, si

$$\|\mathbf{u}_C^{k+1} - \mathbf{u}_C^k\| < \text{TOL}$$

el algoritmo converge.

Donde $\|\cdot\|$ es la norma máxima y se calcula sobre las dos últimas iteraciones solamente sobre la frontera artificial.

5.6. Algoritmo 3

Algoritmo 3 Método Aditivo de Schwarz-Dos niveles con residuales.

Para $k = 0$ hasta convergencia

- 1: Resolver el problema de Poisson, con el Método Aditivo de Schwarz con traslape.

Entrada: Γ_i^k .

Salida : $\lambda_{i,F}, \mathbf{u}_F$

- 2: Seleccionar de \mathbf{u}_F los correspondientes nodos de malla gruesa, esto es, $\tilde{\mathbf{u}}_C$.

- 3: Interpolar sobre $\tilde{\mathbf{u}}_C$

$$\tilde{\mathbf{u}}_C(\bar{\mathbf{x}}_j) = \sum \lambda_j^I \phi_i(\bar{\mathbf{x}}_j) + p_1(\bar{\mathbf{x}}_j)$$

- 4: Calcular

$$\Delta \tilde{\mathbf{u}}_C(\bar{\mathbf{x}}_j) = \sum \lambda_j^I \Delta \phi_i(\bar{\mathbf{x}}_j) + \Delta p_1(\bar{\mathbf{x}}_j) = \tilde{\mathbf{f}}_C$$

- 5: Calcular $\mathbf{r}_C \leftarrow (f_C - \tilde{\mathbf{f}}_C)$

- 6: Resolver $\lambda_C = \mathbf{A}_C^{-1} \mathbf{r}_C$.

- 7: Calcular $\mathbf{e}_C = \sum \lambda_{j,C} \phi_i(\bar{\mathbf{x}}_j)$

- 8: Interpolar a la malla fina: $\mathbf{e}_F \leftarrow \mathbf{R}^T \mathbf{e}_C$.

- 9: Corregir la solución de la malla fina: $\mathbf{u} \leftarrow \mathbf{u}_F + \mathbf{e}_F$.

- 10: A partir de \mathbf{u} reasignar los valores correspondientes a Γ_i^{k+1} .

Retornar al paso 1.

Criterio de paro: Si $\|u^{k+1} - u^k\|_\infty \leq \text{TOL}$, calculada sobre los nodos correspondientes a las fronteras artificiales.

CAPÍTULO 6

Resultados

En este capítulo compararemos numéricamente el esquema de un nivel en relación al esquema de dos niveles. Para ello usamos tres ecuaciones diferenciales parciales estacionarias. En todos los ejemplos aplicamos el algoritmo 2 y lo comparamos con el algoritmo 1.

6.1. Ejemplo 1

Analicemos a continuación la ecuación diferencial elíptica

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} &= f(x, y) && \text{en } \Omega = (0, 1)^2 \\ u(x, y) &= g(x, y) && \text{sobre } \partial\Omega \end{aligned}$$

donde

$$f(x, y) = \frac{2 \left(\frac{5}{4} + \cos(5.4y) \right) (108x - 36)^2}{(6 + 6(3x - 1)^2)^3} - \frac{108 \left(\frac{5}{4} + \cos(5.4y) \right)}{(6 + 6(3x - 1)^2)^2} - \frac{29.16 \cos(5.4y)}{6 + 6(3x - 1)^2}$$

con condiciones de frontera

$$g(0, y) = \frac{5}{48} + \frac{1}{12} \cos(5.4y)$$

$$g(1, y) = \frac{1}{24} + \frac{1}{30} \cos(5.4y)$$

$$g(x, 0) = \frac{2.25}{6 + 6(3x - 1)^2}$$

$$g(x, 1) = \frac{1.884692}{6 + 6(3x - 1)^2}$$

Resolvemos esta ecuación por medio de descomposición de dominio con traslape y el *Método Aditivo de Schwarz* (le llamamos método de un nivel), así como mediante el método de Schwarz de dos niveles que usa una malla gruesa, y que pretende disminuir el número de iteraciones y mejorar la precisión que resulta de utilizar el método de un nivel. Usamos colocación asimétrica y el núcleo placa delgada con su respectivo polinomio bivariado de grado 2, i.e. $\phi(r) = r^4 \log r$.

En la tabla 6.1 mostramos los resultados de resolver la ecuación usando sólo el método de un nivel (Algoritmo 1), para diferentes tamaño de traslape. Donde $n \times n$ es la dimensión de la malla fina, $k \times k$ el número de subdominios y d el traslape. El error es de tipo global y es calculado sobre todo el dominio utilizando la norma máxima entre la solución analítica y la solución numérica. Observamos que a mayor traslape se obtiene una disminución en el error global así como en el número de iteraciones. Este resultado es consistente con lo reportado en la literatura [76]. Cabe señalar que esto sólo lo haremos para este ejemplo.

$n \times n$	$k \times k$	d	Error	Iteraciones
7×7	2×2	2	0.00740	17
		4	0.00412	16
13×13	2×2	2	0.00853	22
		4	0.00416	17
		6	0.00291	16
		8	0.00281	15
19×19	2×2	10	0.00255	15
		2	0.01118	26
		4	0.00590	19
		6	0.00375	17
		8	0.00308	16
		10	0.00245	16
25×25	2×2	12	0.00283	15
		14	0.00250	15
		16	0.00299	14
		8	0.00357	17

Tabla 6.1: Resultados numéricos al variar el tamaño de traslape.

Ahora lo que nos interesa es fijar el traslape y aumentar el número de subdominios, para determinar qué pasa con el método de un nivel. Aplicamos el algoritmo 1 y en la tabla 6.2 mostramos los resultados. Se observa el incremento de iteraciones y que el error global se deteriora con el aumento del número de subdominios. Un comportamiento similar de este resultado está reportado en [76].

$n \times n$	$k \times k$	d	Error	Iteraciones
49×49	2×2	2	0.02899	34
	3×3	2	0.03078	55
	4×4	2	0.04334	59
	8×8	2	0.07520	77
	12×12	2	0.09810	91
	16×16	2	0.12203	102

Tabla 6.2: Resultados numéricos al aumentar el número de subdominios.

Para la tabla 6.2, hacemos una gráfica (ver figura 6.1), donde se muestran de manera puntual el error global contra el número de subdominios así como la recta de regresión lineal, la cual proyecta dicho error de manera creciente, es decir, no hay convergencia cuando usamos sólo la malla fina y la descomposición de dominios con traslape con Schwarz aditivo.

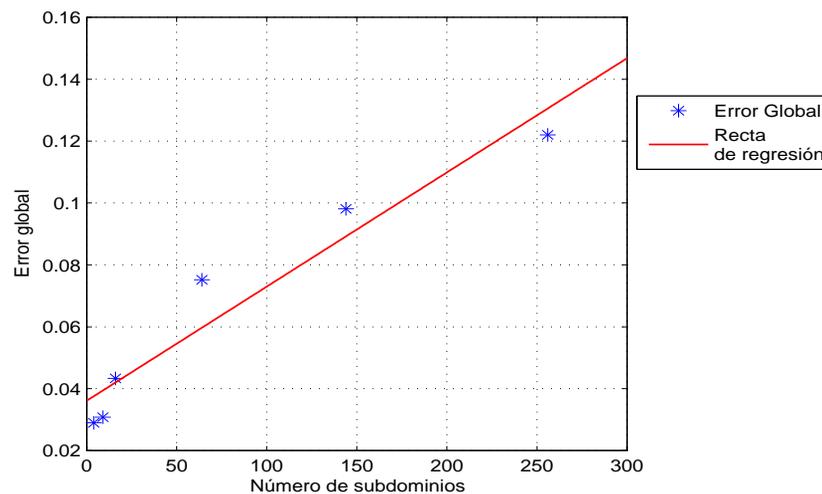


Figura 6.1: Gráfica del error de la tabla 6.2.

Después de revisar por separado los comportamientos anteriores, es decir, variar el traslape y variar el número de subdominios, en la tabla 6.3 mostramos la comparación entre el método de un nivel y el método de dos niveles basándonos sólo en el aumento del número de subdominios. Donde el error global se obtiene de la siguiente manera: una vez que en el método de dos niveles las fronteras artificiales ya no tengan cambio entre dos iteraciones consecutivas, tomamos el error global que se genera y éste lo usamos como condición de paro para el método de un nivel. En la tabla también se muestran los tiempos de CPU de ambos métodos, siendo este meramente un dato computacional, pues la implementación del método de dos niveles en cuanto a código, está incluida la implementación del método de un nivel, en otras palabras, el número de operaciones en cada método no son ajenos.

M. Fina	M. Gruesa	Subdominios	d	Iter 1N	Iter 2N	CPU 1N	CPU 2N	Error
49×49	25×25	2×2	2	47	26	9m 56s	7m 15s	0.01862
	25×25	3×3	2	70	36	4m 31s	4m 45s	0.01963
	13×13	4×4	2	104	20	3m 28s	48s	0.01772
	25×25	8×8	2	246	30	2m 52s	2m 36s	0.01465
	13×13	12×12	2	175	35	1m 30s	44s	0.05719
	17×17	16×16	2	262	31	2m 16s	1m 04s	0.05874

Tabla 6.3: Resultados numéricos al variar el número de subdominios con la incorporación de una malla gruesa, ejemplo 1.

Podemos apreciar cómo la incorporación de la malla gruesa genera un menor número de iteraciones y una mejor precisión. Compare esto último con los resultados de la tabla 6.2. También hay que notar que el tamaño de malla gruesa varía, lo cual se debe propiamente a la naturaleza de la ecuación así como del algoritmo mismo (Algoritmo 2).

Para visualizar mejor los resultados de la tabla 6.3, generamos la tabla 6.4, la cual muestra los porcentajes del número de iteraciones necesarias en el método de dos niveles respecto del número de iteraciones del método de un nivel.

M. Fina	M. Gruesa	dominios	d	Iter 1N	Iter 2N	% Iter. Necesarias 2N
49×49	25×25	2×2	2	47	26	55.32%
	25×25	3×3	2	70	36	51.43%
	13×13	4×4	2	104	20	19.23%
	25×25	8×8	2	246	30	12.20%
	13×13	12×12	2	175	35	20.00%
	17×17	16×16	2	262	31	11.83%

Tabla 6.4: Comparativo en porcentaje entre iteraciones de ambos métodos del ejemplo 1.

En las figuras 6.2 y 6.3, mostramos la comparación entre el número de iteraciones del método de un nivel y el del método de dos niveles; así como los porcentajes de disminución respectivamente.

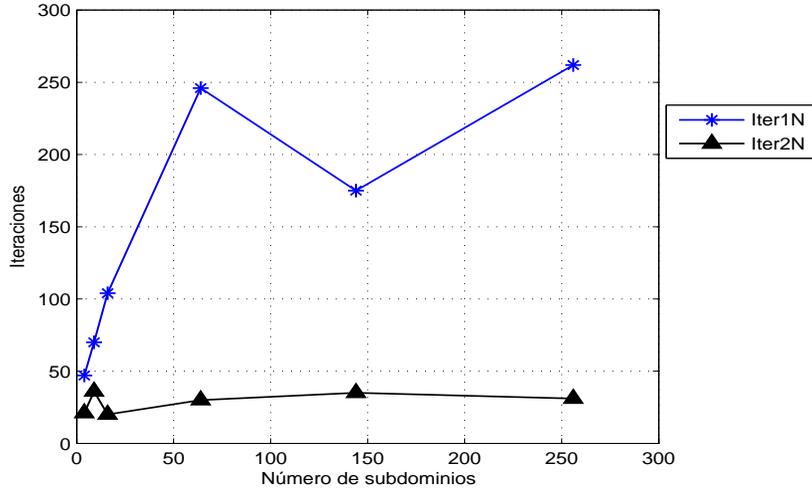


Figura 6.2: Comparación de iteraciones de la tabla 6.4.

En la gráfica de la figura 6.2 se nota cómo las iteraciones en el método de un nivel crecen, mientras que las iteraciones del método de dos niveles se mantienen relativamente constantes. Y para la gráfica de la figura 6.3, tenemos cómo disminuye el porcentaje de iteraciones necesarias del método de dos niveles respecto del método de un nivel, siendo esto una de las ventajas más notorias.

6.2. Ejemplo 2

Consideremos ahora la siguiente ecuación

$$\frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} - u(x, y) = 0 \quad \text{en } \Omega = (0, 1)^2$$

$$u(x, y) = g(x, y) = xe^y \quad \text{sobre } \partial\Omega$$

con condiciones de frontera

$$g(0, y) = 0$$

$$g(1, y) = e^y$$

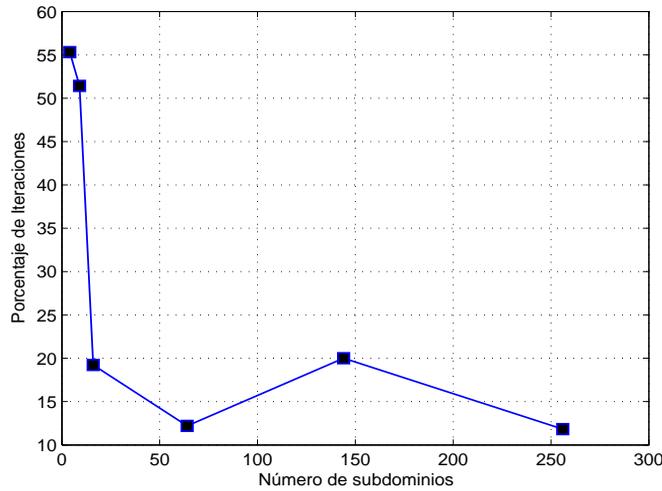


Figura 6.3: Porcentaje de disminución de iteraciones del método de dos niveles de la tabla 6.4.

$$g(x, 0) = x$$

$$g(x, 1) = xe^1 = 2.718281x$$

En esta ocasión sólo haremos la comparación directa entre el método de un nivel y el de dos niveles. Para ello fijamos la zona de traslape, la malla fina y variamos el número de subdominios y la malla gruesa. Los resultados se muestran en la tabla 6.5.

M. Fina	M. Gruesa	Dominios	d	Iter 1N	Iter 2N	CPU 1N	CPU 2N	Error
49×49	25×25	2×2	2	121	63	23m 40s	17m 38s	0.01319
	25×25	3×3	2	146	74	9m 14s	9m 20s	0.01779
	13×13	4×4	2	209	51	6m 58s	1m 49s	0.01485
	25×25	8×8	2	358	99	4m 05s	7m 45s	0.03671
	13×13	12×12	2	504	40	4m 03s	48s	0.06275
	17×17	16×16	2	683	66	4m 54s	2m 07s	0.08931

Tabla 6.5: Resultados numéricos al variar el número de subdominios del ejemplo 2.

Podemos observar, que el método de dos niveles genera un número mucho menor de iteraciones que el método de un nivel, a pesar del aumento de subdominios.

Para desplegar mejor estos resultados, tenemos la tabla 6.6 donde se muestra el porcentaje de iteraciones necesarias del método de dos niveles, así como las figuras 6.4 y 6.5 que muestran en la primera, cómo aumenta el número de iteraciones del método de un nivel mientras que las iteraciones del método de dos niveles se

mantienen con poca variación. En la segunda, el porcentaje de disminución de la iteraciones necesarias del método de dos niveles.

M. Fina	M. Gruesa	dominios	d	Iter 1N	Iter 2N	Porcentaje de Iteraciones
49×49	25×25	2×2	2	121	63	52.07%
	25×25	3×3	2	146	74	50.68%
	13×13	4×4	2	209	51	24.40%
	25×25	8×8	2	358	99	27.65%
	13×13	12×12	2	504	40	7.94%
	17×17	16×16	2	683	66	9.66%

Tabla 6.6: Comparativo en porcentaje entre iteraciones de ambos métodos del ejemplo 2.

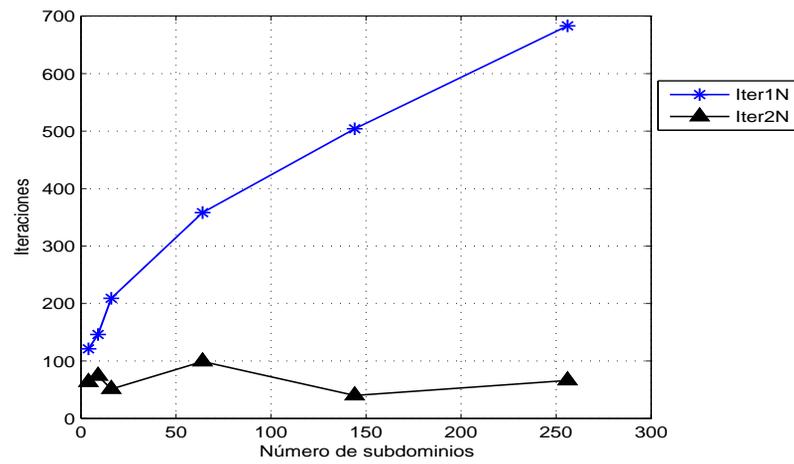


Figura 6.4: Comparativo de iteraciones de la tabla 6.6.

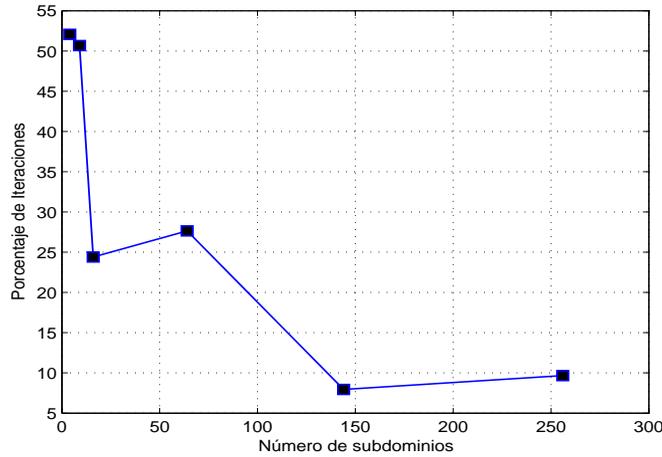


Figura 6.5: Porcentaje de disminución de iteraciones del método de dos niveles de la tabla 6.6.

Hasta aquí hemos visto dos ventajas del método de dos niveles sobre el método de un nivel. Primero que las iteraciones disminuyen y segundo que el error global es mejor, es decir, hay mejor precisión. Pero ¿Qué hay sobre la convergencia del método de dos niveles? Aquí vamos a explicar qué es lo que está pasando. Se define la convergencia de un método iterativo como

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|u - u^k\| = 0$$

donde h es el parámetro de malla fina, u la solución analítica y u^k es la solución numérica obtenida por el método iterativo que se esté usando. En este sentido, lo que hemos estado variando es solamente la malla gruesa, es decir, H ; así como el número de subdominios. En nuestro procedimiento, fijamos el error y obtenemos que el número de iteraciones es insensible de h y H . Así nos faltaría variar h para ver los efectos en la convergencia. En un primer paso, en esta tesis sólo obtenemos las dos ventajas ya mencionadas del método de dos niveles en relación al método de un nivel.

6.3. Ejemplo 3

Por último consideremos la ecuación singular perturbada

$$-\varepsilon^2 \left(\frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} \right) + 2u(x, y) = f(x, y, \varepsilon) \quad \text{en } \Omega = (0, 1)^2$$

$$u(x, y) = 0 \quad \text{sobre } \partial\Omega$$

Por la complejidad de $f(x, y, \varepsilon)$ sólo ponemos la solución para la cual f se verifica, es decir,

$$u(x, y, \varepsilon) = \left(1 - \frac{e\left(-\frac{x}{\varepsilon}\right) + e\left(\frac{x-1}{\varepsilon}\right)}{1 + e\left(-\frac{1}{\varepsilon}\right)} \right) \left(1 - \frac{e\left(-\frac{y}{\varepsilon}\right) + e\left(\frac{y-1}{\varepsilon}\right)}{1 + e\left(-\frac{1}{\varepsilon}\right)} \right) + x(1-x)y(1-y)$$

Elijamos un valor de $\varepsilon=0.5$, el cual no genera altos gradientes en las fronteras. Esto lo podemos apreciar en la figura 6.8.

En la tabla 6.7 podemos observar la disminución de iteraciones del método de dos niveles, más no tan notable como en los ejemplos 1 y 2.

M. Fina	M. Gruesa	Dominios	d	Iter 1N	Iter 2N	CPU 1N	CPU 2N	Error
49×49	25×25	2×2	2	53	35	10m 08s	8m 45s	0.02098
	25×25	3×3	2	54	36	3m 27s	4m 31s	0.02595
	25×25	4×4	2	63	45	2m 06s	4m 22s	0.03614
	25×25	8×8	2	112	55	1m 16s	4m 25s	0.04545

Tabla 6.7: Resultados numéricos al variar el número de subdominios y una $\varepsilon=0.5$.

En la gráfica de la figura 6.6 mostramos el comportamiento de las iteraciones del método de dos niveles al compararlo con el método de un nivel, y en la figura 6.7 la gráfica de la solución aproximada.

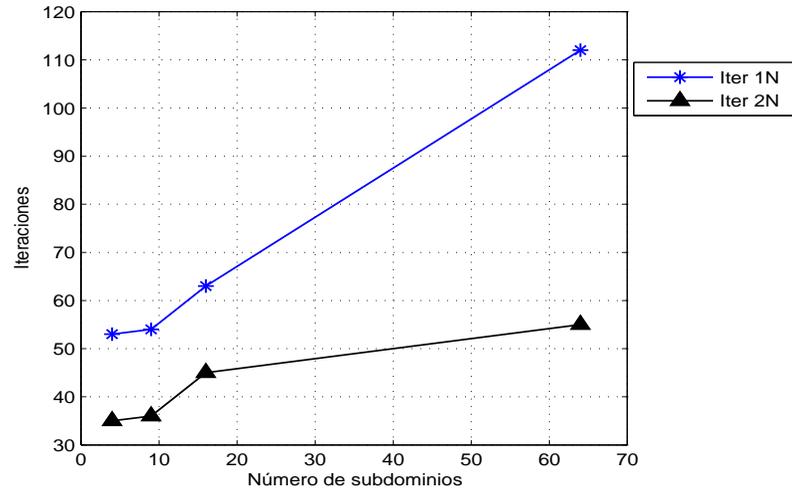


Figura 6.6: Resultados de la tabla 6.7.

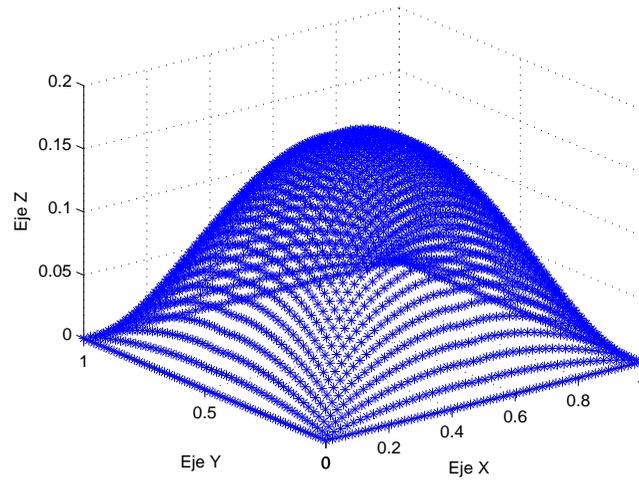


Figura 6.7: Gráfica de la solución aproximada para $\varepsilon = 0.5$.

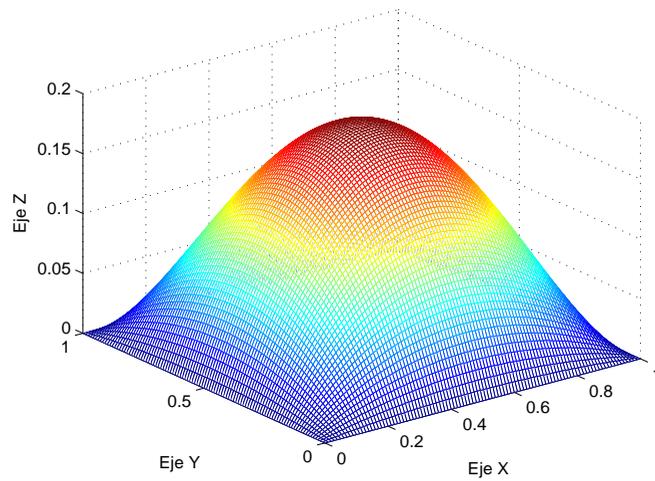


Figura 6.8: Gráfica de la solución analítica para $\varepsilon=0.5$.

Ahora elegimos el valor de $\varepsilon=0.01$, para el cual la solución tiene altos gradientes en la frontera y en la tabla 6.8 mostramos los resultados.

M. Fina	M. Gruesa	Dominios	d	Iter 1N	Iter 2N	CPU 1N	CPU 2N	Error
49×49	25×25	2×2	2	7	5	1m 30s	1m 30s	0.13834
	25×25	3×3	2	6	5	27s	44s	0.13913
	25×25	4×4	2	6	5	14s	35s	0.14023
	25×25	8×8	2	6	5	5s	28s	0.15154

Tabla 6.8: Resultados numéricos al variar el número de subdominios y una $\varepsilon=0.01$.

Debido a los altos gradientes que genera $\varepsilon=0.01$, el método de dos niveles es ineficiente solamente para los puntos extremos de la frontera artificial, generando un error grande en esos puntos solamente. En la gráfica de la figura 6.9 mostramos este efecto y en la figura 6.10 la gráfica de la solución analítica.

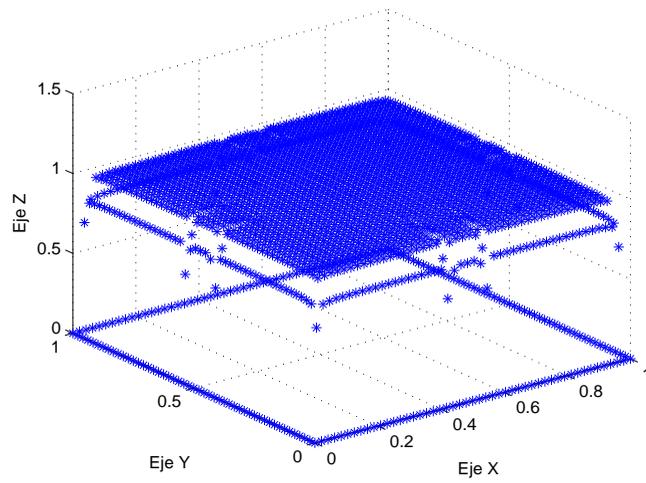


Figura 6.9: Gráfica de la solución aproximada para $\varepsilon = 0.01$.

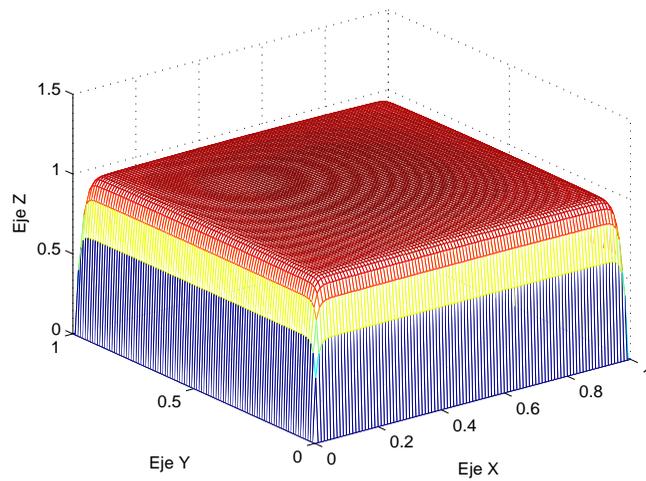


Figura 6.10: Gráfica de la solución analítica para $\varepsilon = 0.01$.

Conclusiones

La importancia de las funciones de base radial en cuanto a la solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales, radica en que a diferencia de los métodos clásicos, éstas no requieren de la construcción de mallas. Por otro lado los métodos con este tipo de funciones son algorítmicamente más simples debido que se pueden aplicar en problemas de altas dimensiones así como para fronteras más complicadas, y además que se puede alcanzar convergencia exponencial [3]. En los últimos años éstas funciones han tenido un impacto tanto en ingeniería como las matemáticas. En este sentido han surgido diversos métodos; algunos son, métodos de colocación [33, 34], cuadratura diferencial [49] y esquema de Galerkin [55]. Así mismo en diversas áreas los métodos anteriores han sido aplicados. Por mencionar algunas tenemos: matemáticas financieras [22, 29], modelación de aguas de poca profundidad [38, 25, 61], geofísica [1] y dinámica de fluidos [15].

Cuando se aplican los métodos de colocación, una de las dificultades más significativas se presenta cuando abordamos problemas complejos de gran escala, y es el mal condicionamiento de la matriz de discretización correspondiente al sistema de ecuaciones lineales, cuando el número de nodos aumenta [43]. Para enfrentar esta problemática se han utilizado las técnicas de descomposición de dominios y de preconditionamiento. Para descomposición de dominio se han presentado varios resultados en los últimos años, en particular para Schwarz aditivo y multiplicativo ver [68, 36, 39, 37, 42, 60, 6]. Sin embargo aún no se ha ni formulado ni estudiado numéricamente la escalabilidad de estos algoritmos. La escalabilidad se entiende como la propiedad de la técnica de descomposición de dominio, en cuanto a que debe haber una comunicación global de información a fin de garantizar que el número de iteraciones del algoritmo no se incremente si el número de subdominios aumenta.

En esta tesis hemos introducido por primera vez un algoritmo de dos niveles, tipo Schwarz aditivo con traslape, para funciones de base radial que resuelven este problema. Esta es la contribución más significativa de este trabajo.

En nuestros resultados, de manera exitosa se alcanzó el objetivo de disminuir el número de iteraciones así como mejorar la precisión de la solución numérica, cuando aumentamos el número de subdominios, en dos de los tres ejemplos presentados.

Cuando comparamos los métodos de un nivel y dos niveles, para la primera ecuación diferencial parcial (ejemplo 1) en donde tenemos la ecuación de Laplace con una solución analítica suave, nuestras pruebas numéricas muestran con claridad la escalabilidad del algoritmo 2, pues se mantiene estacionario el número de iteraciones cuando aumentamos el número de subdominios. Para la segunda ecuación diferencial, en donde tenemos el Laplaciano menos un término lineal (ejemplo 2), las pruebas numéricas en relación al número de iteraciones mostraron una relativa estabilidad, pues hubo un poco más de variación para los diferentes números de subdominios, sin embargo las iteraciones para el método de un nivel fue siempre creciente (ver tabla 6.5).

Para el último ejemplo, debido a los altos gradientes en la fronteras, el algoritmo 2 no mostró eficiencia junto con el hecho de que la ecuación de este ejemplo es del tipo Helmholtz, cuyas frecuencias altas no son fáciles de capturar. Debido a que el problema radica en cómo se da la transmisión de información en la fronteras artificiales, debemos optimizar las condiciones de transmisión en las zonas de traslape, esto se conoce como condiciones de transmisión mejorada, situación que en la actualidad el método de dos niveles no ha sido estudiado teóricamente ni siquiera para los métodos clásicos en este contexto.

Finalmente cabe señalar, que aún quedan temas pendientes para trabajos futuros, estos son: la convergencia del método de dos niveles, dar un tratamiento optimizado para las condiciones de transmisión entre subdominios y formular el método de dos niveles utilizando nodos aleatorios.

APÉNDICE A

Método FBR theta

Consideremos la ecuación lineal dependiente del tiempo de la forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + Lu(\mathbf{x}, t) &= f(\mathbf{x}, t); & \mathbf{x} \in \Omega \in \mathbb{R}^d \\ Bu(\mathbf{x}, t) &= g(\mathbf{x}, t); & \mathbf{x} \in \partial\Omega \in \mathbb{R}^d \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

donde Ω denota el dominio físico cerrado sobre el cual la EDP es resuelta y $\partial\Omega$ denota su frontera. L es un operador diferencial lineal y B es un operador que impone las condiciones de frontera. $u(\mathbf{x}, t)$ es la solución deseada con $f(\mathbf{x}, t)$ y $g(\mathbf{x}, t)$ como datos.

Aplicando discretización hacia adelante para el tiempo y representando el término espacial por el método theta, la ecuación (A.1) puede escribirse como

$$\begin{aligned} u(\mathbf{x}, t^{n+1}) - u(\mathbf{x}, t^n) &= \delta t f(\mathbf{x}, t^n) - \delta t[\theta Lu(\mathbf{x}, t^{n+1}) + \\ &\quad (1 - \theta)Lu(\mathbf{x}, t^n)]; & \mathbf{x} \in \Omega \in \mathbb{R}^d \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

$$Bu(\mathbf{x}, t^{n+1}) = g(\mathbf{x}, t^{n+1}); \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega \in \mathbb{R}^d \quad (\text{A.3})$$

donde δt es el paso del tiempo y $u(\mathbf{x}, t^n)$ denota la solución en el tiempo $t = t^n$ y $0 \leq \theta \leq 1$.

Consideremos el conjunto

$$C = \{(\mathbf{x}_i)|_{i=1, n_d} \in \Omega, (\mathbf{x}_i)|_{i=n_d+1, n_b} \in \partial\Omega\}$$

donde n_d y n_b denota el número de puntos de colocación en el dominio y en la frontera respectivamente. De esta manera denotaremos a todos los puntos de colocación como

N , es decir, $N = n_d + n_b$.

La función desconocida $u(\mathbf{x}, t)$ es aproximada como una combinación lineal de RBFs $\phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|)$ con centros en cada uno de los puntos de colocación. Así

$$\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^N \lambda_j(t) \phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|) \quad (\text{A.4})$$

Sustituyendo la ecuación (A.4) en la ecuación (A.2) y haciendo corresponder el interior y las condiciones de frontera en cada punto de colocación de C nos da el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{bmatrix} \Phi_d + \theta \delta t L \Phi_d \\ B^x \Phi_b \end{bmatrix} \boldsymbol{\lambda}^{n+1} = \begin{bmatrix} \Phi_d - (1 - \theta) \delta t L \Phi_d \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \boldsymbol{\lambda}^n + \begin{bmatrix} \delta t \mathbf{f}^{n+1} \\ \mathbf{g}^{n+1} \end{bmatrix} \quad (\text{A.5})$$

Aquí $\Phi_d \in \mathbb{R}^{n_d \times N}$ denota la porción de la matriz de Gram $\mathbf{A} = [\Phi_d - \Phi_b]^T \in \mathbb{R}^{N \times N}$ (donde el ij -ésimo elemento de \mathbf{A} está dado por $A_{ij} = \phi(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|)$). $L \Phi_d \in \mathbb{R}^{n_d \times N}$ representa el operador diferencial aplicado en cada uno de los puntos interiores de C , $B \Phi_b \in \mathbb{R}^{n_b \times N}$ representa el operador de frontera aplicado a cada punto de la frontera de C y $\mathbf{0} \in \mathbb{R}^{n_b \times N}$ representa una matriz de ceros. $\boldsymbol{\lambda}^{n+1} \in \mathbb{R}^N$ es un vector desconocido con los coeficientes RBF en el tiempo $t^n + \delta t$, y $\boldsymbol{\lambda}^n \in \mathbb{R}^N$, $\mathbf{f}^{n+1} \in \mathbb{R}^{n_d}$ y $\mathbf{g}^{n+1} \in \mathbb{R}^{n_b}$ son vectores conocidos en el tiempo t^n . La ecuación (A.5) puede escribirse como

$$\boldsymbol{\lambda}^{n+1} = \mathbf{H}_+^{-1} \mathbf{H}_- \boldsymbol{\lambda}^n + \mathbf{H}_+^{-1} \mathbf{F}^{n+1} \quad (\text{A.6})$$

donde

$$\mathbf{H}_+ = \begin{bmatrix} \Phi_d + \theta \delta t L \Phi_d \\ B \Phi_b \end{bmatrix}, \quad \mathbf{H}_- = \begin{bmatrix} \Phi_d - (1 - \theta) \delta t L \Phi_d \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

y

$$\mathbf{F}^{n+1} = \begin{bmatrix} \delta t \mathbf{f}^{n+1} \\ \mathbf{g}^{n+1} \end{bmatrix}$$

La ecuación (A.6) puede escribirse en términos de la función \mathbf{u} desconocida como

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{A} \mathbf{H}_+^{-1} \mathbf{H}_- \mathbf{A}^{-1} \mathbf{u}^n + \mathbf{A} \mathbf{H}_+^{-1} \mathbf{F}^{n+1} \quad (\text{A.7})$$

APÉNDICE B

Simbología

Algoritmo 2.

Símbolo	Descripción
f	Lado derecho de la ecuación diferencial parcial.
Γ_i^k	Frontera artificial del subdominio extendido i en el paso k .
$\lambda_{i,F}, \mathbf{u}_F$	Salida de malla fina.
\mathbf{u}_F	Solución final de resolver el problema de Poisson usando solamente Schwarz 1 nivel.
$\tilde{\mathbf{u}}_C$	Estimación de \mathbf{u}_C en malla gruesa.
$\tilde{\mathbf{f}}_C$	Estimación de f en interior de malla gruesa.
λ_j^I	Coefficientes de resolver un problema de interpolación
$\mathbf{M}_{L^x,C}$	Componentes de la matriz de Gram de malla gruesa.
$\mathbf{P}_{L,C}$	
$\mathbf{M}_{B^x,C}$	
$\mathbf{P}_{B,C}$	
\mathbf{P}_C^T	
$\mathbf{0}_C$	

$\boldsymbol{\lambda}_C, \mathbf{a}_C$	Solución del problema de Poisson usando colocación asimétrica en malla gruesa.
\mathbf{g}_C	Condiciones de frontera en malla gruesa.
$\lambda_{i,C}$	Elementos del vector $\boldsymbol{\lambda}_C$.
\mathbf{u}_C	Solución final después de incorporar la información de malla gruesa.

Algoritmo 3.

Símbolo	Descripción
f_C	Lado derecho de la ecuación diferencial parcial evaluado en malla gruesa.
Γ_i^k	Frontera artificial del subdominio extendido i en el paso k .
$\boldsymbol{\lambda}_{i,F}, \mathbf{u}_F$	Salida de malla fina.
\mathbf{u}_F	Solución final de resolver el problema de Poisson usando solamente Schwarz 1 nivel.
$\tilde{\mathbf{u}}_C$	Estimación de \mathbf{u}_C en malla gruesa.
$\tilde{\mathbf{f}}_C$	Estimación de f en interior de malla gruesa.
λ_j^I	Coefficientes de resolver un problema de interpolación
$\lambda_{i,C}$	Elementos del vector $\boldsymbol{\lambda}_C$.
\mathbf{A}_C^{-1}	Matriz de discretización asimétrica en malla gruesa.
\mathbf{r}_C	Residuo en malla gruesa.
\mathbf{R}^T	Operador restricción.
\mathbf{e}_C	Error en malla gruesa.
\mathbf{e}_F	Error en malla fina.
\mathbf{u}	Solución final después de incorporar la información de malla gruesa.

Referencias

- [1] M.D. Buhmann. *Radial basis functions*. Cambridge University Press, Cambridge, 2003.
- [2] T.F. Chan and T.P. Mathew. *Domain Decomposition Algorithms*. Acta Numerica, pp. 61-143, 1994.
- [3] A.H.D. Cheng, M.A. Golberg, E.J. Kansa, and G. Zammito. Exponential convergence and h-c multiquadric collocation method for partial differential equations. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 19:571–594, 2003.
- [4] E.W. Cheney and W.A. Light. *A course in approximation theory*. Books/Cole (Pacific Grove, CA), 1999.
- [5] P.P. Chinchapatnam, K. Djidjeli, and P.B. Nair. Unsymmetric and symmetric meshless schemes for the unsteady convection-diffusion equation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195:2432–2453, 2006.
- [6] P.P. Chinchapatnam, K. Djidjeli, and Prasanth B. Nair. Domain decomposition for time-dependent problems using radial based meshless methods. *Numerical Methods Partial Differential Equations*, 23:38–59, 2007.
- [7] James W. Demmel. *Applied Numerical Linear Algebra*. SIAM, 1997.
- [8] M.R. Dubal. Domain decomposition and local refinement for multiquadric approximations. I: Second-order equations in one-dimension. *Journal of Applied Science and Computation*, 1:146–171, 1994.
- [9] J. Duchon. Interpolation des fonctions de deux variables suivant le principe de la flexion des plaques minces. *R.A.I.R.O. Analyse Numeriques*, 10:5–12, 1976.
- [10] J. Duchon. *Splines minimizing rotation-invariant semi-norms in sobolev spaces*. Constructive theory of functions of several variables, (W. Schempp, K. Zeller, eds.), Springer-Verlag, pages 85-100, 1977.

- [11] J. Duchon. Sur l'erreur d'interpolation des fonctions de plusieurs variables par les d^m -splines. *R.A.I.R.O. Analyse Numeriques*, 12:325–334, 1978.
- [12] N. Dyn. *Interpolation of scattered data by radial basis function, in topics in multivariate approximation*. C.K. Chui, L.L. Schumaker and F.I. Utreras (Eds.), Academic Press, New York, 1987, pp 47-61, 1987.
- [13] G.E. Fasshauer. *Solving differential equations by collocation with radial basis functions*. A. Le Mehaute, C. Rabut, L. Schumaker, editors, Surface Fitting Multiresolution Methods, Vanderbilt University, Nashville, Tennessee, United States, 1997.
- [14] G.E. Fasshauer. *Meshfree methods*. Handbook of theoretical and computational nanotechnology. Valencia, CA: American Scientific Publishers, 2005.
- [15] G.E. Fasshauer. *Meshfree approximation methods with Matlab*. World Scientific Publishers, Singapore, 2007.
- [16] W. Feller. *An introduction to probability theory and its applications*. Vol 2, Wiley and Sons, New York, 1966.
- [17] R. Franke. Scattered data interpolation: test of some methods. *Mathematics of Computation*, 38:181–200, 1982.
- [18] M.A. Golberg and C.S. Chen. The theory of radial basis functions applied to the bem for inhomogeneous partial differential equations. *Boundary Elements Communications*, 5:57–61, 1994.
- [19] M.A. Golberg and C.S. Chen. *Boundary Integral Methods - Numerical and Mathematical Aspects, chapter The method of fundamental solutions for potential, Helmholtz and diffusion problems*. WIT Press, pp. 103-176, 1998.
- [20] R.L. Hardy. Multiquadric equations of topography and other irregular surfaces. *Journal of Geophysical Research*, 76:1905–1915, 1971.
- [21] F.J. Hickernell and Y.C. Hon. Radial basis function approximation of the surface wind field from scattered data. *International Journal of Applied Science and Computations*, 4:221–247, 1998.
- [22] Y.C. Hon. A quasi-radial basis functions method for american options pricing. *Computers and Mathematics with Applications*, 43:513–524, 2002.

- [23] Y.C. Hon, M.W. Lu, W.M. Xue, and X. Zhou. Numerical algorithm for triphasic model of charged and hydrated soft tissues. *Computational Mechanics*, 29:1–15, 2002.
- [24] Y.C. Hon and R. Schaback. On unsymmetric collocation by radial basis functions. *Applied Mathematics and Computation*, 119:177–186, 2001.
- [25] Yiu-Chung Hon, Kwok Fai Cheung, Xian-Zhong Mao, and E.J. Kansa. Multiquadric solution for shallow water equations. *Journal of Hydraulic Engineering*, 125:524–533, 1999.
- [26] Yiu-Chung Hon, M.W. Lu, W.M. Xue, and Y.M. Zhu. Multiquadric method for the numerical solution of a biphasic mixture model. *Applied Mathematics and Computation*, 88:153–175, 1997.
- [27] Yiu-Chung Hon and X.Z. Mao. A multiquadric interpolation method for solving initial value problems. *Journal of Scientific Computing*, 12:51–55, 1997.
- [28] Yiu-Chung Hon and X.Z. Mao. An efficient numerical scheme for Burger’s equation. *Applied Mathematics and Computation*, 95:37–50, 1998.
- [29] Yiu-Chung Hon and X.Z. Mao. A radial basis function method for solving options pricing models. *Financial Engineering*, 8:31–49, 1999.
- [30] Yiu-Chung Hon and X.Z. Mao. An analysis of the linear advection-diffusion equation using mesh-free and mesh-dependent methods. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 26:889–895, 2002.
- [31] A. Iske. *Charakterisierung bedingt positiv definiter funktionen für multivariate interpolationsmethoden mit radialen basisfunktionen*, Dissertation. Universität Göttingen, 1994.
- [32] A. Iske. *Characterization of function spaces associated with conditionally positive definite functions*. (English summary) *Mathematical methods for curves and surfaces* (Ulvik, 1994), 265–270, Vanderbilt Univ. Press, Nashville, TN, 1995.
- [33] E.J. Kansa. Multiquadrics - a scattered data approximation scheme with applications to computational fluid dynamics - I: Surface approximations and partial derivative estimates. *Computers and Mathematics with Applications*, 19:127–145, 1990.

- [34] E.J. Kansa. Multiquadrics - a scattered data approximation scheme with applications to computational fluid dynamics - II: Solutions to parabolic, hyperbolic and elliptic partial differential equations. *Computers and Mathematics with Applications*, 19:147–161, 1990.
- [35] E.J. Kansa and Carlson. Improved accuracy of multiquadric interpolation using variable shape parameters. *Computers and mathematics with application*, 24:99–120, 1992.
- [36] J. Li and C.S. Chen. Some observations on unsymmetric radial basis function collocation methods for convection-diffusion problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 57:1085–1094, 2003.
- [37] J. Li and Y.C. Hon. Domain decomposition for radial basis meshless methods. *Numerical Methods Partial Differential Equations*, 20:450–462, 2004.
- [38] Jichun Li, C.S. Chen, Darrel Pepper, and Yitung Chen. Mesh-free method for groundwater modeling. *Boundary Elements XXIV*, pp 115-124, 2002.
- [39] L. Ling and E.J. Kansa. Preconditioning for radial basis functions with domain decomposition methods. *Mathematical and Computer Modelling*, 40:1413–1427, 2004.
- [40] M. Mathias. Über positive fourier-integrale. *Mathematische Zeitschrift*, 16:103–125, 1923.
- [41] C.A. Micchelli. Interpolation of scattered data: distance matrices and conditionally positive definite functions. *Constructive Approximation*, 2:11–22, 1986.
- [42] J.A. Muñoz-Gómez, P. González-Casanova, and G. Rodríguez-Gómez. *Domain decomposition by radial basis functions for time dependent partial differential equations*. S. Sahni, editor, Proceedings of the 2nd IASTED International Conference on Advances in Computer Science and Technology, Puerto Vallarta, Mexico, ACTA Press, pp. 105-109, 2006.
- [43] R. Schaback. Error estimates and condition numbers for radial basis function interpolation. *Advances in Computational Mathematics*, 3:251–264, 1995.
- [44] R. Schaback. Native hilbert spaces for radial basis functions I. *International Series of Numerical Mathematics*, Birkhauser Verlag, 132:255–282, 1999.

- [45] R. Schaback. A unified theory of radial basis functions. native hilbert spaces for radial basis functions II. *Journal of computational applied mathematics*, 121:165–177, 2000.
- [46] I.J. Schoenberg. Metric spaces and completely monotone functions. *Annals of Mathematics*, 39:811–841, 1938.
- [47] H.A. Schwarz. Ueber einen grenzübergang durch alternirendes verfahren. *Vierteljahrsschrift der naturforschenden gesellschaft in Zürich*, 1870.
- [48] M. Sharan, E.J. Kansa, and S. Gupta. Applications of the multiquadric method for numerical solutions of elliptic partial differential equations. *Applied Mathematics and Computation*, 84:275–302, 1997.
- [49] C. Shu. *Differential quadrature and its application in engineering*. Springer-Verlag. London, 2000.
- [50] B.F. Smith and P.E. Bjørstad. *Domain Decomposition: Parallel Multilevel Methods for Elliptic Partial Differential Equations*. Cambridge University Press, 1996.
- [51] J. Stewart. Positive definite functions and generalizations, an historical survey. *The Rocky Mountain Journal of Mathematics*, 6:409–434, 1976.
- [52] A. Toselli and O. Widlund. *DomainDecomposition Methods, Algorithms and Theory*. Springer, 2005.
- [53] R.S. Tuminaro, C.H. Tong, J.N. Shadid, K.D. Devine, and D.M. Day. On a multilevel preconditioning module for unstructured mesh Krylov solvers: two-level Schwarz. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, 18:383–389, 2002.
- [54] H. Wendland. Piecewise polynomial, positive definite and compactly supported radial functions of minimal degree. *Advances in Computational Mathematics*, 4:389–396, 1995.
- [55] H. Wendland. Meshless Galerkin methods using radial basis functions. *Mathematics of Computation*, 68:1521–1531, 1999.
- [56] H. Wendland. *Gaussian interpolation revisited*. K. Kopotun, T. Lyche and M. Neamtu, editors, Trends in approximation theory, Vandelbilt University Press, pp. 1-10, 2001.

- [57] H. Wendland. *Gaussian interpolation revisited*. Trends in Approximation Theory, K. Kopotun, T. Lyche and M. Neamtu (eds), Vanderbilt University Press, pages 417-426, 2001.
- [58] H. Wendland. *Scattered Data Approximation*. Cambridge University Press, 2005.
- [59] D.V. Widder. *The Laplace transform*. Princenton University Press, 1941.
- [60] A.S.M. Wong, Y.C. Hon, T.S. Li, S.L. Chung, and E.J. Kansa. Multizone decomposition for simulation of time-dependent problems using the multiquadric scheme. *Numerical Methods Partial Differential Equations*, 37:23–43, 1999.
- [61] S.M. Wong, Y.C. Hon, and M.A. Golberg. Compactly supported radial basis functions for shallow water equations. *Applied Mathematics and Computation*, 127:79–101, 2002.
- [62] Madych W.R. Miscellaneous error bounds for multiquadric and related interpolators. *Computers and Mathematics with Applications*, 24:121–138, 1992.
- [63] Madych W.R. and Nelson S.A. Multivariate interpolation: a variational theory. *Preprint*, 1983.
- [64] Madych W.R. and Nelson S.A. Multivariate interpolation and conditionally positive definite functions i. *Approximation Theory and its Applications*, 4:77–89, 1988.
- [65] Madych W.R. and Nelson S.A. Multivariate interpolation and conditionally positive definite functions ii. *Mathematics of Computation*, 54:211–230, 1990.
- [66] Madych W.R. and Nelson S.A. Bounds on multivariate polynomials and exponential error estimates for multiquadric interpolation. *Journal of Approximation Theory*, 70:94–114, 1992.
- [67] Z. Wu. Multivariate compactly supported positive definite radial functions. *Advances in Computational Mathematics*, 4:283–292, 1995.
- [68] Z. Wu and Y.C. Hon. Additive Schwarz domain decomposition with radial basis approximation. *International Journal of Applied Mathematics*, 4:81–98, 2000.
- [69] T. Yamada and L.C. Wrobel. Properties of gaussian radial basis functions in the dual reciprocity boundary element method. *Zeitschrift fr Angewandte Mathematik und Physik*, 44:1054–1067, 1993.

- [70] D.L. Young, S.C. Jane, C.Y. Lin, C.L. Chiu, and K.C. Chen. Solution of 2d and 3d stokes laws using multiquadric mehtod. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 28:1223–1243, 2004.
- [71] Wu Z. *Solving PDE with radial basis function and the error estimation*, in: Z. Chen, Y. Li, C.A. Micchelli, Y. Xu (Eds.). *Advances in Computational Mathematics*, Lecture Notes on Pure and Applied Mathematics, vol. 202, Guang Zhou, 1998.
- [72] Wu Z. and Shaback R. Local error estimates for radial basis function interpolation of scattered data. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 13:13–27, 1993.
- [73] M. Zerroukat, K. Djidjeli, and A. Charafi. Explicit and implicit meshless methods for linear advection-diffusion-type partial differential equations. *International Journal of Numerical Methods in Engineering*, 48:19–35, 2000.
- [74] M. Zerroukat, K. Djidjeli, and A. Charafi. Explicit and implicit meshless methods for linear advection-diffusion-type partial differential equations. *International Journal of Numerical Methods in Engineering*, 48:19–35, 2000.
- [75] Y. Zhang and Y. Tan. Convergence of general meshless Schwarz method using radial basis functions. *Applied Numerical Mathematics*, 56:916–936, 2007.
- [76] X. Zhou, Y.C. Hon, and Jichun Li. Overlapping domain decomposition method by radial basis functions. *Applied numerical mathematics*, 44:241–255, 2003.